

Dirceu Noriler

***Modelagem Matemática Multifásica e Simulação
Tridimensional e Transiente para Sistemas
Gás-Líquido: o Caso do Escoamento
Líquido-Vapor em Colunas de Destilação.***

Campinas - São Paulo

Julho, 2007

Dirceu Noriler

***Modelagem Matemática Multifásica e Simulação
Tridimensional e Transiente para Sistemas
Gás-Líquido: o Caso do Escoamento
Líquido-Vapor em Colunas de Destilação.***

Tese de doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de doutor em Engenharia Química.

Orientadora:

Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel

Co-Orientadores:

Prof. Dr. Henry França Meier
Prof. Dr. Antônio André Chivanga Barros

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Campinas - São Paulo

Julho, 2007

Ficha Catalográfica

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA – BAE – UNICAMP

N774m Noriler, Dirceu
Modelagem matemática multifásica e simulação tridimensional e transiente para sistemas gás-líquido: o caso do escoamento líquido-vapor em colunas de destilação. / Dirceu Noriler. – Campinas, SP: [s.n.], 2007.

Orientadores: Maria Regina Wolf Maciel, Henry França Meier, Antônio André Chivanga Barros.

Tese (Doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Modelamento matematico. 2. Escoamento Multifasico. 3. Destilação. 4. Metodo dos volumes finitos. I. Maciel, Maria Regina Wolf. II. Meier, Henry França III. Barros, Antônio André Chivanga IV. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. V. Título.

Título em Inglês: Mathematical modeling and numerical simulation for gas-liquid systems: the case of the liquid-vapor flows in distillation columns.

Palavras-chave em Inglês: Mathematical modeling, Multiphase flow, Liquid-vapor flow, Distillation, Volume finite method, Distillation trays.

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos.

Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca Examinadora: Paulo Laranjeira da Cunha Lage, Edelberto Luiz Reinehr, Romis Ribeiro de Faissol Attux e Marcos Akira D'Avila.

Data da defesa: 27/07/2007

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

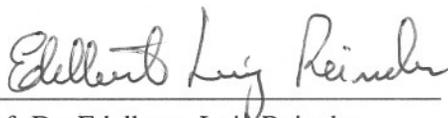
Tese de doutorado sob o Título “*Modelagem Matemática Multifásica e Simulação Tridimensional e Transiente para Sistemas Gás-Líquido: o Caso do Escoamento Líquido-Vapor em Colunas de Destilação*”, defendida por Dirceu Noriler e aprovada em 27 de julho de 2007, em Campinas, pela banca examinadora constituída pelos doutores:



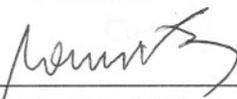
Prof. Dra. Maria Regina Wolf Maciel
Orientadora



Prof. Dr. Paulo Laranjeira da Cunha Lage



Prof. Dr. Edelberto Luiz Reinehr



Prof. Dr. Romis Ribeiro de Faissol Attux



Prof. Dr. Marcos Aquira D'Avila

171012002

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia Química.

AGRADECIMENTOS

A Prof^a Maria Regina Wolf Maciel por acreditar em meu potencial e por sua orientação serena e sincera no transcorrer deste trabalho.

Aos professores Antônio André Chivanga Barros e Henry França Meier pela orientação e pela paciência quando eu não conseguia entender os conceitos.

Aos colegas Vinicyus e Rodrigo do FURB pelo companheirismo e apoio nos momentos difíceis.

Aos colegas Leonardo, Jaci e demais colegas do LMSPQ/PEQ/UNICAMP pelo apoio, discussões e pelos vários momentos de trabalho em equipe.

Aos professores Laércio, Antônio e outros do LMSQ/PEQ/UNICAMP pelas discussões e ensinamentos.

Aos colegas Marcos e Batiel pelo apoio e incentivo no exame de qualificação de doutorado.

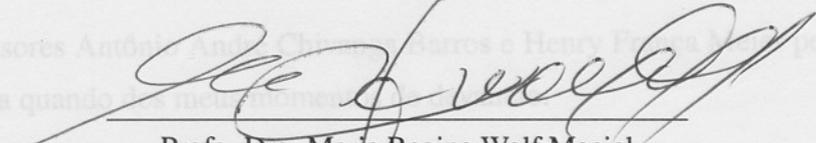
Ao Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação da UNICAMP e ao Laboratório de Fluidodinâmica Computacional da FURB pela infraestrutura disponibilizada para o desenvolvimento do trabalho.

Aos integrantes do departamento de engenharia química da FURB pela receptividade e pela completa integração.

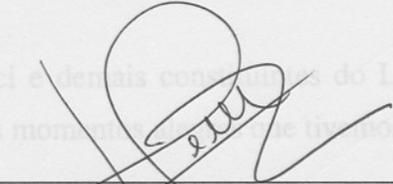
A minha família pela compreensão e por estar sempre ao meu lado.

A minha esposa Ida por sua paciência, apoio e eterno companheirismo, incondicionais.

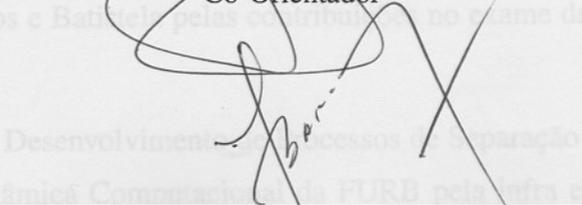
A Capes pelo apoio financeiro e pelo reconhecimento da importância do trabalho aqui desenvolvido.



Prof. Dra. Maria Regina Wolf Maciel
Orientadora



Prof. Dr. Henry França Meier
Co-Orientador



Prof. Dr. Antônio André Chivanga Barros
Co-Orientador

Dedico este trabalho a toda minha família e em especial a minha esposa Ida.

AGRADECIMENTOS

A Prof^a Maria Regina Wolf Maciel por acreditar em meu potencial e por sua orientação serena e sincera no transcorrer deste trabalho.

Aos professores Antônio André Chivanga Barros e Henry França Meier pela orientação e pela paciência quando dos meus momentos de devaneio.

Aos colegas Vinicyus e Rodrigo do LFC/DEQ/FURB pelo companheirismo e apoio nos momentos difíceis.

Aos colegas Leonardo, Jaci e demais constituintes do LMSPQ/FEQ/UNICAMP pelo apoio, discussões e pelos vários momentos alegres que tivemos juntos.

Aos professores Laercio, Atilano, Pablo e Edelberto pelas discussões e ensinamentos.

Aos colegas Marcos e Batistela pelas contribuições no exame de qualificação de doutorado.

Ao Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação da UNICAMP e ao Laboratório de Fluidodinâmica Computacional da FURB pela infra estrutura disponibilizada para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos integrantes do departamento de engenharia química da FURB pela receptividade e pela completa integração.

A minha família pela compreensão e por estar sempre ao meu lado.

A minha esposa Ida por sua paciência, apoio e eterno companheirismo, incondicionais.

A Capes pelo apoio financeiro e pelo reconhecimento da importância do trabalho aqui desenvolvido.

*“A atividade da engenharia, enquanto permanecer atividade,
pode levar a criatividade do homem a seu grau máximo;
mas, assim que o construtor pára de construir e se entrincheira
nas coisas que fez, as energias criativas se congelam,
e o palácio se transforma em tumba.”*

Marshall Berman

RESUMO

Os mecanismos fenomenológicos que ocorrem em equipamentos industriais são muito importantes para o projeto e otimização de equipamentos e processos. Neste caminho, a destilação, a mais importante técnica de separação, é foco de diversos estudos que tem como objetivo compreender a fenomenologia deste sistema. Os modelos atuais para a representação de colunas de destilação baseiam-se no conceito de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio que consideram a mistura perfeita em cada fase, onde não existem variações espaciais das propriedades conserváveis, somente variações temporais. No entanto, é conhecido que o padrão de escoamento tem uma grande importância sobre a eficiência de transferência de massa e energia. Neste sentido, houve muitas contribuições na aplicação das técnicas de CFD ao estudo dos padrões de escoamento em sistemas gás-sólido, como em leitos fluidizados, e em sistemas gás-líquido, como em coluna de bolhas. Assim, o principal objetivo deste trabalho é aplicar um modelo microscópico multifásico baseado na conservação de quantidade de movimento, calor e massa, num referencial euleriano-euleriano tridimensional e transiente, sob condições de turbulência, que possibilite a predição dos perfis de velocidade, fração volumétrica, pressão, temperatura e concentração em um prato perfurado de uma coluna de destilação. Um código comercial de CFD foi utilizado para a execução dos experimentos numéricos, com a construção de malhas numéricas e implementação de equações de fechamento obtidas na literatura através de sub-rotinas escritas em linguagem FORTRAN. O método numérico utilizado foi o método dos volumes finitos com malha co-localizada em um sistema de coordenadas generalizadas. Os principais resultados mostram os perfis de fração volumétrica, velocidade, temperatura e de concentração em função do tempo e da posição no prato e quando comparados com dados da literatura e com dados obtidos experimentalmente confirmam a capacidade do modelo prever os principais aspectos fenomenológicos em pratos perfurados de destilação. A metodologia proposta neste trabalho mostrou-se adequada para reproduzir o comportamento fluidodinâmico em pratos perfurados de destilação e pode ser aplicada para projeto e otimização destes equipamentos.

ABSTRACT

A better understanding of the mechanisms that occur in large scale industrial processes is important in order to improve equipment design and process development. In this way, distillation is one of the most important separation techniques. Conventional models for distillation columns are based on equilibrium and non-equilibrium stage concepts. Despite the relevant results obtained with equilibrium and nonequilibrium stage models, they neglect the fluid dynamic phenomena assuming perfect mixing of each phase in the plate. However, it has been recognized that the flow pattern on a distillation tray is of large importance on the mass and energy transfer efficiency, and this influence can only be analyzed by making a fluid dynamics study. Recent advances show that CFD techniques have allowed the study of fluid dynamic in processes and equipments. Contributions have been made in modeling and simulation of gas-solid flow, as for example in fluidized beds, and gas-liquid flow, as for example in bubble columns. The main objective of this work is to apply a CFD model under Eulerian-Eulerian framework for gas-liquid flows, capable to predict the momentum, mass and thermal phenomena of the multiphase flows. A three-dimensional and transient model with chemical species, energy and momentum conservation balances have been applied for predictions of volume fractions, velocities, pressure, temperature and concentrations fields, of two-phase flows on distillation sieve tray. The mathematical model was implemented in a CFD commercial code for numerical studies, with the construction of a particular numerical grid and using own sub-routines in FORTRAN language for the closures equations obtained from literature. The model was solved using the finite-volume method with collocated variables in a generalized co-ordinate system. The results show the volume fractions, velocities, temperature and concentrations profiles as a function of the time and the position in the distillation sieve tray. These were compared with literature data and our experimental data to confirm that the model is suitable to predict gas-liquid flows on a distillation sieve tray. The CFD tools presented and discussed in this work make possible to know better the turbulent gas-liquid flow in a sieve plate of distillation columns and they can be used to optimize design and the operating conditions of such processes.

SUMÁRIO

Lista de Figuras	p. xix
Lista de Tabelas	p. xxv
Nomenclatura	p. xxvii
1 Introdução	p. 1
1.1 Objetivo Geral desta Tese de Doutorado	p. 4
1.1.1 Objetivos Específicos	p. 5
1.2 Motivação pelo Tema	p. 6
1.3 Organização da Tese de Doutorado	p. 6
2 Revisão da Literatura	p. 9
2.1 Um breve relato sobre destilação	p. 9
2.2 Modelagem de Estágios de Equilíbrio	p. 10
2.3 Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio	p. 13
2.4 Técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD)	p. 16
2.5 Fluidodinâmica Computacional (CFD) Aplicada a Sistemas Multifásicos .	p. 18
2.6 Fluidodinâmica Computacional (CFD) Aplicada a Sistemas Gás-Líquidos	p. 20
2.7 Fluidodinâmica Computacional (CFD) Aplicada a Sistemas Gás-Líquidos e Transferência de Calor e Massa	p. 27
2.8 Análises Experimentais da Fluidodinâmica em Pratos de Destilação . . .	p. 30

2.9	Aspectos de investigação	p. 39
2.10	Conclusões do Capítulo II	p. 40
3	Modelagem Fenomenológica	p. 43
3.1	Introdução à Modelagem Fenomenológica	p. 43
3.2	Hipóteses Simplificadoras	p. 45
3.3	Definições	p. 45
3.4	Equação Geral de Conservação	p. 46
3.5	Equações de Conservação para Sistemas Multifásicos	p. 47
3.6	Equações Constitutivas para o Fechamento do Modelo	p. 51
3.6.1	Equações constitutivas para transferência de quantidade de movimento entre as fases	p. 51
3.6.2	Equações constitutivas para transferência de calor entre fases	p. 56
3.6.3	Equações constitutivas para transferência de massa entre fases	p. 57
3.6.4	Equações constitutivas para transferência de espécies químicas entre fases	p. 58
3.6.5	Equações constitutivas para os tensores de Reynolds - Turbulência	p. 64
3.7	Modelo Euleriano-Euleriano Heterogêneo Aplicado a Pratos Perfurados de Destilação	p. 66
3.8	Simplificação do Modelo Matemático (Modelo Homogêneo)	p. 69
3.9	Síntese da Modelagem Matemática para Destilação	p. 70
3.10	Conclusões do Capítulo III	p. 76
4	Métodos Numéricos	p. 79
4.1	Base Teórica	p. 79
4.2	Método dos Volumes finitos	p. 81
4.3	Conclusões do Capítulo IV	p. 86

5	Escoamento Isotérmico - Experimentação Numérica	p. 87
5.1	Escoamento gás-líquido isotérmico	p. 87
5.1.1	Condições geométricas e operacionais	p. 88
5.1.2	Metodologia Numérica	p. 89
5.1.3	Condições iniciais e de contorno	p. 90
5.2	Resultados e discussões	p. 91
5.2.1	Análise do volume de borbulhamento	p. 99
5.2.2	Análise dos modelos de coeficiente de arraste	p. 100
5.2.3	Análise do efeito geométrico na entrada de gás	p. 102
5.2.4	Alteração das condições geométricas do prato	p. 108
5.3	Conclusões do Capítulo V	p. 114
6	Escoamento Isotérmico - Experimentação Física	p. 115
6.1	Aparato experimental	p. 116
6.1.1	Sistema de aquisição de dados	p. 118
6.2	Procedimento experimental	p. 124
6.3	Determinação das constantes a e c_v	p. 125
6.4	Determinação experimental da altura de líquido claro	p. 129
6.5	Determinação numérica da altura de líquido claro	p. 138
6.6	Comparação entre os dados numéricos e experimentais	p. 141
6.7	Conclusões do capítulo VI	p. 143
7	Escoamento com Transferência Simultânea de Calor e Massa - Experimentação Numérica	p. 145
7.1	Escoamento gás-líquido não-isotérmico	p. 145
7.2	Transferência Simultânea de Calor, Massa e Quantidade de Movimento	p. 150

7.2.1	Condições de contorno e condições iniciais	p. 151
7.2.2	Metodologia numérica	p. 151
7.2.3	Resultados e discussões	p. 153
7.3	Conclusões do capítulo VIII	p. 166
8	Conclusões e Sugestões	p. 167
8.1	Conclusões	p. 167
8.2	Sugestões para trabalhos futuros	p. 172
	Referências Bibliográficas	p. 175
	Apêndice	p. 183
	Apêndice A - Dados Experimentais	p. 183

LISTA DE FIGURAS

1.1	Esquema de um prato de destilação.	p. 3
2.1	Esquema representativo um estágio de destilação.	p. 11
2.2	Representação da interface.	p. 13
2.3	Característica do modelo de estágios de não equilíbrio.	p. 14
3.1	Esquema da transferência de massa multicomponente entre fases.	p. 62
4.1	Representação de um volume de controle genérico	p. 82
5.1	a) Condições geométricas do prato; b) Esquema de dimensionamento.	p. 88
5.2	Planos da malha numérica empregada para a solução do escoamento gás-líquido isotérmico	p. 90
5.3	Monitoramento da altura de líquido claro em função do tempo após a injeção de gás ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m ³ /ms).	p. 92
5.4	Comparação entre altura de líquido claro obtido por CFD e predito pela correlação de Bennett <i>et al.</i> (1983). ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m ³ /ms).	p. 93
5.5	Fração volumétrica média de líquido no plano x-y como função da altura ao longo da dispersão ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m ³ /ms).	p. 95
5.6	Campos de fração volumétrica de líquido em um plano x-z central desde a entrada de líquido, à esquerda, até a represa, a direita, a cada 0,2 segundos em um período de estado “quasi-estacionário”($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m ³ /ms).	p. 96
5.7	Isocurva de fração volumétrica de líquido em um tempo t no estado “quasi-estacionário” ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m ³ /ms).	p. 97

5.8	Campos vetoriais da velocidade de líquido para: a) plano central y-z; b) plano central x-z; c) plano x-y a 10 mm da base do prato no instante de tempo t.	p. 98
5.9	Campo de pressão em um plano x-y a 10 mm da base do prato em um instante de tempo t ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m ³ /ms).	p. 99
5.10	Limite do volume de borbulhamento. Isocurvas de fração de volume do líquido igual a 0,05 ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m ³ /ms).	p. 100
5.11	Comparação da altura de líquido claro em função do modelo de coeficiente de arraste.	p. 102
5.12	Variações da condição de entrada de gás.	p. 103
5.13	Comparação da altura de líquido claro em função da condição de contorno da entrada do vapor.	p. 104
5.14	Fração volumétrica média no plano x-y como função da altura ao longo da dispersão.	p. 105
5.15	Perfil de velocidade axial do vapor em uma linha central de furos, desde a entrada de líquido até a represa como função do tempo.	p. 106
5.16	Perfil de velocidade axial do vapor em uma linha central de furos na direção paralela à represa como função do tempo.	p. 107
5.17	Mapas vetoriais para a geometria base e para geometria estendida	p. 107
5.18	Modelo físico adotado para a geometria modificada.	p. 108
5.19	Esquema dimensional da alteração geométrica sugerida.	p. 109
5.20	Altura de líquido claro como uma função das regiões do prato modificado comparado com a altura média do prato e a prevista por Bennett <i>et al.</i> (1983).p. 110	
5.21	Campo vetorial da fase líquida em um plano central x-z no tempo t na condição de quasi-estacionário	p. 111
5.22	Campo de fração volumétrica de líquido num plano x-z central desde a entrada de líquido até a represa num tempo t no estado de quasi-estacionário.p. 112	

5.23	Isocurva de fração volumétrica de líquido igual a 0,5 em um instante de tempo t no estado de quasi-estacionário.	p. 113
6.1	Esquema do aparato experimental.	p. 116
6.2	Foto do aparato experimental.	p. 117
6.3	Esquema dos sensores de leitura das vazões e perda de carga.	p. 119
6.4	Fotos: (a) pontos de medida de pressão; (b) manômetros diferenciais; (c) medidor de vazão de líquido; (d) medidor de vazão de gás.	p. 120
6.5	Esquema de instalação da instrumentação.	p. 121
6.6	Fotos: (a) indicador integrador totalizador DMY-2030; (a) CLP CP1000.	p. 122
6.7	Foto do painel de controle.	p. 122
6.8	Tela principal do software de interface usuário/sistema.	p. 123
6.9	Amostragem do experimento 17.	p. 127
6.10	Regressão numérica dos dados de perda de carga devido à passagem do gás pelas perfurações.	p. 128
6.11	Tratamento estatístico dos dados de altura de líquido claro para Q_L/W igual a $2,4 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e V_s igual a $0,193 \text{ m/s}$	p. 129
6.12	Perda de carga total, perda de carga devido a passagem do gás pelas perfurações e perda de carga devido a tensão superficial como função da velocidade superficial do gás e da vazão de líquido por comprimento de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$	p. 130
6.13	Altura de líquido claro global e local como função da vazão de líquido por unidade de comprimento de represa para velocidade superficial do gás igual a $0,348 \text{ m/s}$	p. 131
6.14	Diferença entre a altura de líquido claro global e local como função da vazão de líquido por unidade de comprimento de represa para uma velocidade superficial do gás de $0,348 \text{ m/s}$	p. 132

- 6.15 Altura de líquido claro global e local como função da velocidade superficial do gás para uma vazão de líquido por unidade de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ p. 133
- 6.16 Diferença entre a altura de líquido claro global e local como uma função da velocidade superficial do gás para uma vazão de líquido por unidade de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ p. 134
- 6.17 Altura de líquido claro como uma função da velocidade superficial do gás e da vazão de líquido por unidade de comprimento de represa. p. 135
- 6.18 Comparação da altura de líquido claro predita por Bennett *et al.* (1983) e medida como função da vazão de gás e da vazão de líquido. p. 136
- 6.19 Relação entre os dados de altura de líquido claro medidos e calculados pela correlação Bennett *et al.* (1983) para os 56 ensaios experimentais executados neste trabalhos. p. 138
- 6.20 Dinâmica do escoamento em um plano central, desde a entrada de líquido até a represa, para 1 s de tempo real a Q_L/W igual a $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e V_s igual a 0,340 m/s. p. 139
- 6.21 Fração volumétrica média de líquido na dispersão ao longo do tempo. . . p. 140
- 6.22 Comparação de altura da região de líquido contínuo entre os dados simulados e os obtidos na bancada experimental como função da velocidade superficial do gás para Q_L/W igual a $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ p. 142
- 6.23 Comparação da altura de líquido claro experimental e numérica em função da vazão de gás e vazão de líquido por comprimento de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ p. 143
- 6.24 Relação entre os dados de altura de líquido claro numéricos e experimentais. p. 144
- 7.1 Monitoramento da temperatura “bulk” para o gás e líquido após o início da injeção de gásr quente: $T_{inL} = 25 \text{ }^\circ\text{C}$; $T_{inG} = 45 \text{ }^\circ\text{C}$ p. 147
- 7.2 Comparação da altura de líquido claro como função do tempo entre o modelo isotérmico e o não isotérmico para $V_s = 0,7 \text{ m/s}$, $Q_L/W = 1,2 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $T_{inL} = 25 \text{ }^\circ\text{C}$; $T_{inG} = 45 \text{ }^\circ\text{C}$ p. 148

- 7.3 Comparação da altura de líquido claro obtidos por CFD não isotérmico, isotérmico e o predito pela correlação de Bennett *et al.* (1983). $V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms; $T_{inL} = 25$ °C; $T_{inG} = 45$ °C. p. 148
- 7.4 Campos de temperatura de líquido em um plano x-z central desde a entrada de líquido, à esquerda, até a represa, a direita, a partir do início da injeção de gás quente até 20 s. $V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms; $T_{inL}=25$ °C; $T_{inG}=45$ °C. p. 149
- 7.5 Isocurvas de temperatura de líquido em um instante t na condição de quasi - estacionário: a) regiões de menor temperatura ($T = 27,2$ °C); b) regiões de maior temperatura ($T = 28,2$ °C); $V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms; $T_{inL} = 25$ °C; $T_{inG} = 45$ °C. p. 150
- 7.6 Altura de Líquido claro ao longo do tempo. p. 154
- 7.7 Temperatura *bulk* do líquido como função do tempo. p. 154
- 7.8 Evolução da fração mássica média de etanol no líquido como função do tempo. p. 154
- 7.9 Altura de líquido claro para cada etapa da solução, comparada com a correlação de Bennett *et al.* (1983). p. 155
- 7.10 Perfil da fração volumétrica média de líquido em função da altura ao longo da dispersão. p. 156
- 7.11 Dinâmica do escoamento em um plano central, desde a entrada de líquido até a represa, para 1 s de tempo real para o modelo completo. p. 157
- 7.12 Perfil de temperatura médio do líquido desde a entrada até à represa, para o modelo completo. p. 158
- 7.13 Isocurvas de temperatura de líquido em um tempo t no estado quasi - estacionário para o modelo completo. p. 159
- 7.14 Variação do campo de fração mássica de etanol no líquido para 1 s de tempo real no estado de quasi-estacionário desde a entrada de líquido até a represa. p. 160

-
- 7.15 Mapas de fração de volume do líquido, temperatura do líquido, fração mássica de etanol no vapor e no líquido em um plano central desde a entrada de líquido até a represa em um tempo t no regime de quasi-estacionário. . . p. 161
- 7.16 Perfil médio da fração mássica de etanol no vapor, na saída do prato, como função do tempo, no regime quasi-estacionário. p. 162
- 7.17 Perfil médio da fração mássica de etanol no líquido, na saída do prato, como função do tempo, no regime quasi-estacionário. p. 162
- 7.18 Variação da fração mássica de etanol no vapor, no líquido e no vapor que estaria em equilíbrio com o líquido como função da posição (ponto). . . . p. 163
- 7.19 Perfil da eficiência de ponto no prato. p. 164
- 7.20 Campos vetoriais e linhas de corrente: a) da fase vapor em um plano central desde a entrada de líquido até a represa; b) da fase líquida em um plano central desde a entrada de líquido até a represa; c) da fase líquida em um plano paralelo à superfície do prato, a 0,01 m acima do prato. p. 165

LISTA DE TABELAS

2.1	Condições experimentais de referência para constituição de correlações para altura de líquido claro	p. 32
2.2	Condições experimentais de referência para constituição de correlações para a fração volumétrica média de líquido.	p. 33
2.3	Erros associados às correlações de altura de líquido claro.	p. 34
2.4	Erros associados as correlações de fração volumétrica média de líquido.	p. 35
3.1	Características dos diferentes níveis de observação dos fenômenos da natureza	p. 44
3.2	Síntese do Modelo de Estágios de Equilíbrio.	p. 71
3.3	Síntese do Modelo de Estágios de Não Equilíbrio.	p. 72
3.4	Síntese do Modelo Homogêneo.	p. 73
3.5	Síntese do Modelo Heterogêneo	p. 75
5.1	Condições de contorno.	p. 91
6.1	Dados experimentais de perda de carga devido à passagem do gás pelos furos.	p. 126
6.2	Dados numéricos de altura de líquido claro para uma vazão de líquido por unidade de comprimento de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$	p. 140
7.1	Condições operacionais	p. 152
7.2	Propriedades físicas	p. 152

NOMENCLATURA

Letras Latinas

A	área [m^2];
A_{kj}	área interfacial, [m^2/m^3];
A_P	área da partícula, [m^2];
A_B	área efetiva de borbulhamento, [m^2];
A_H	área total dos furos, [m^2];
A_{hB}	fração de área perfurada em relação a área de borbulhamento;
a	coeficiente do sistema de equações algébricas não lineares obtido pela discretização das equações diferenciais parciais;
a, c_v	coeficientes da equação para determinação da perda de carga em pratos perfurados pela passagem do gás pelas perfurações;
C	parâmetro da equação de Bennett <i>et al.</i> (1983);
C_{Ak}	concentração molar do componente A na fase k, [mol/m^3];
C_k	concentração molar total na fase k, [mol/m^3];
C_μ, C_1, C_2	constantes do Modelo de turbulência;
C_D	coeficiente de arraste;
C_d	parâmetro da equação de Colwell (1979);
$C_{\alpha\beta}^h$	coeficiente global volumétrico de transferência de calor entre fases, [$J/m^3 sK$];
$C_{\alpha\beta}^m$	coeficiente global volumétrico de transferência de massa entre fases, [$kg/m^3 s$];

C_p	capacidade calorífica, $[J/kgK]$;
D	diâmetro da coluna, $[m]$, difusividade de A na fase, $[m/s]$;
d	diâmetro dos furos, $[mm]$, diâmetro das bolhas, $[mm]$;
E_o	número de Eötvos;
F_ϕ	coeficiente de difusão;
F_{kj}	taxa volumétrica de transferência de quantidade de movimento entre as fases, $[N/m^3]$;
$F_{\alpha\beta}^D$	força de interface devido ao arraste, $[N/m^3]$;
F_s	força interfacial de tensão superficial, $[N/m^3]$;
Fr	número de Froude;
$F_{\phi_x}, F_{\phi_y}, F_{\phi_z}$	componentes do coeficiente de difusão nas direções x, y e z;
f	fração volumétrica;
g	vetor aceleração da gravidade, $[m/s^2]$;
H	altura do prato, $[m]$, constante de Henry;
H_i	altura da seção de entrada do prato, $[m]$;
h	coeficiente de transferência de calor $[J/sm^2K]$, entalpia, $[J/kg]$;
h_{cl}	altura de líquido claro, $[m]$;
h_{cf}	altura da crista, $[m]$;
h_H	perda de carga devido a passagem do gás pelas perfurações, $[mmc.a.]$;
h_{lcl}	altura de líquido claro no seio da região de borbulhamento, $[m]$;
h_F	altura da região de borbulhamento, $[m]$;
$h_{\alpha_s}, h_{\beta_s}$	entalpias de vaporização e consensação, $[J/kg]$;
h_σ	perda de carga devido aos efeitos de tensão superficial, $[mmc.a.]$;

h_w	altura da represa, [m];
I	intensidade de turbulência;
k	energia cinética turbulenta, [m^2/s^2];
k_{kj}	coeficiente de transferência de massa, [m/s];
K^c	coeficiente angular da relação de concentrações;
L_p	comprimento do prato desde a entrada até a represa, [m];
L_s	comprimento de escala (diâmetro hidráulico), [m];
\dot{m}	taxa de transferência de massa entre as fases por area interfacial, [kg/m^2s];
m_{Aks}	taxa de transferência de massa entre as fases, [kg/s];
M_{kj}	taxa de tranferência de massa entre as fases por unidade de volume, [kg/m^3s];
n	fluxo molar [mol/s];
\mathbf{n}	vetor normal;
n_c	número de componentes;
n_f	número de fases;
\mathbf{n}_p	número de partículas por unidade de volume, [$1/m^3$];
N_t	número de estágios teóricos;
N_R	número de estágios reais;
Nu	número de Nusselt;
$\mathbf{P}_k, \mathbf{P}_{kk}$	produção de energia cinética turbulenta, [J/m^3s];
P	pressão, [Pa];
P'	pressão, [Pa];
Pr	número de Prandtl;
Pre^t	Prandtl turbulento da equação de energia;

Prm^f	Prandtl turbulento da equação de espécie química;
PM	peso molecular, $[kg/kgmol]$;
Q	vazão volumétrica, $[m^3/s]$;
Q_{kj}	taxa volumétrica de transferência de energia entre as fases $[J/m^3 s]$;
Re	número de Reynolds;
S_k, S_{vk}, S_{Ek}	são os termos fontes da equações de conservação;
$S_{Ak}, S_{\phi k}$	são os termos fontes da equações de conservação;
Sh	número de Sherwood;
\mathbf{T}_k	tensor tensão na fase k, $[N/m^2]$;
T	temperatura, $[^\circ C]$;
$T_{kj}^{(k)}$	taxa de transferência de energia cinética turbulenta entre fases por unidade de volume, $[J/m^3 s]$;
$T_{kj}^{(\varepsilon)}$	taxa de transferência de taxa de dissipação de energia cinética turbulenta entre fases por unidade de volume, $[J/m^3 s^2]$;
t	tempo, $[s]$
v_x, v_y, v_z	componentes de velocidade na direção x, y e z $[m/s]$;
\mathbf{v}	vetor velocidade, $[m/s]$;
V	volume, $[m^3]$;
V_H	velocidade gás/vapor nas perfurações, $[m/s]$;
V_s	velocidade superficial do gás/vapor, $[m/s]$;
\mathbf{x}	coordenada, $[m]$;
x_{Ak}	fração molar do componente A na fase k;
Y_{kj}^A	taxa volumétrica de transferência de espécies químicas entre as fases $[kg/m^3 s]$;

y	coordenada, [m];
y_{Ak}	fração mássica do componente A na fase k;
W	comprimento da represa, [m];
z	coordenada, [m];

Letras Gregas

α, β	coeficientes do esquema de interpolação do método numérico;
$\beta_{\alpha\beta}$	coeficiente volumétrico de transferência de quantidade de movimento devido ao arraste, [kg/s/m ³];
γ	coeficiente de atividade;
ε	taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, [m ² /s ³];
ϕ	propriedades fluidodinâmicas(v_x, v_y, v_z, h, y, k e ε), coeficiente de fugacidade;
Γ_ϕ	coeficiente de difusão da propriedade ϕ ;
κ	raio de curvatura
λ	condutividade térmica, [J/smK];
μ	viscosidade, [kg/ms];
ρ	massa específica, [kg/m ³];
ρ_{Ak}	concentração mássica do componente A na fase k [kg/m ³];
η	direção normal ao contorno;
η_V^n	eficiência do vapor no prato n;
η_L^n	eficiência do líquido no prato n;
σ	tensão superficial, [N/m];
$\sigma_\varepsilon, \sigma_k$	constantes do modelo de turbulência;
ξ	direção ortogonal à parede;

Subscritos

<i>A</i>	refere-se ao componente A;
<i>B</i>	refere-se ao ponto da base;
<i>b</i>	refere-se a face da base;
<i>E</i>	refere-se ao ponto leste;
<i>e</i>	refere-se a face leste;
<i>g</i>	refere-se a fase gás;
<i>in</i>	refere-se a região de entrada/alimentação;
<i>k</i>	refere-se a k-ésima fase;
<i>l</i>	refere-se fase líquida;
<i>mix</i>	refere-se a propriedade da mistura;
<i>N</i>	refere-se ao ponto norte;
<i>n</i>	refere-se a face norte;
<i>out</i>	refere-se a região de saída/retirada;
<i>P</i>	refere-se a partícula e ao ponto
<i>S</i>	refere-se ao ponto sul;
<i>s</i>	refere-se a interface entre as fases e a face sul
<i>T</i>	refere-se ao ponto do topo;
<i>t</i>	refere-se a face do topo;
<i>tot</i>	refere-se a entalpia total;
<i>x</i>	coordenada x;
<i>y</i>	coordenada y;

W	refere-se ao ponto oeste;
w	refere-se a face oeste;
$wall$	refere-se a parede
z	coordenada z ;
α	refere-se a fase contínua (líquido);
β	refere-se a fase discreta (vapor/gás);
ϕ	refere-se a propriedade fluidodinâmica;

Sobrescritos

eff	refere-se a propriedade efetiva;
L	refere-se a força interfacial “ <i>lift</i> ”;
LUB	refere-se a força interfacial “ <i>wall lubrication force</i> ”;
$médio$	refere-se a média da propriedade;
n	refere-se ao estágio genérico;
OLD	refere-se ao valor da propriedade no tempo anterior;
sat	refere-se a condição de saturação da propriedade;
TD	refere-se a força interfacial dissipação turbulenta;
T	refere-se ao vetor transposto;
t	refere-se a propriedade turbulenta;
VM	refere-se a força interfacial “ <i>virtual mass force</i> ”;
vap	refere-se a pressão de vapor;
$+$	refere-se a direção positiva do fenômeno;
$*$	refere-se a condição de equilíbrio;
$'$	refere-se a flutuação da propriedade;

1 INTRODUÇÃO

Com a chegada da revolução industrial em meados do século XIX, surge a demanda pelo aprimoramento das técnicas de produção, que antes eram essencialmente artesanais. A descoberta da máquina a vapor promoveu a mecanização da produção, criando rotinas de produção realizada por máquinas, restando às pessoas os trabalhos de refinamento dos produtos. A criação e a elaboração de processos industriais, cada vez mais complexos e eficientes, proporcionaram o fortalecimento dos centros de desenvolvimento de produtos e processos, que, por sua vez, tinham o dever de transformar o conhecimento científico fundamental em conhecimento tecnológico, transportando o conhecimento abstrato em práticas tecnológicas.

Foi desta forma que a engenharia química se fortaleceu, pois esta tem a perfeita sincronia entre a ciência fundamental e a ciência tecnológica. A engenharia química relaciona-se com a transformação de materiais através de processos eficientes que possibilitam o atendimento das demandas do mercado. Estas transformações requerem uso de energia em maior ou menor quantidade, e o engenheiro químico deve fazer uso desta energia, tanto do ponto de vista de viabilizar os processos, quanto de como otimizá-los. Assim, pode-se definir como “Problemas de Engenharia Química” a criação e elaboração de processos industriais que envolvam transformações físicas, químicas ou físico-químicas de insumos em produtos.

Nestes processos, os escoamentos monofásicos de líquido ou de gás são raros. A maioria ocorre na presença de partículas, gotículas ou bolhas de gás e em regime turbulento, devido à complexidade da geometria por onde as fases fluidas escoam. O conhecimento e a predição destes fenômenos é de fundamental importância para estudos de projeto, simulação e otimização, pois possibilitam a identificação das principais características fenomenológicas que influenciam, decisivamente, no desempenho destes processos e equipamentos. Dentre estes processos, destacam-se os petroquímicos e os químicos, que nos últimos anos, vêm ganhando muita importância no cenário mundial, pois estão relacionados diretamente ao fornecimento

e preservação de energia no planeta.

A indústria petroquímica, especificamente, passa por um período de transição, pois a utilização de combustíveis fósseis como fonte energética para os diversos setores industriais em todo o planeta é finita, porém sem limite de tempo conhecido. No entanto, o enfoque científico de pesquisa básica e tecnológica, tanto na exploração quanto no refino do petróleo, deve ser considerado prioritário no início do terceiro milênio, para o uso sustentável de cada barril de combustível fóssil.

Como a indústria de refino de petróleo é fornecedora de matéria-prima e energia para todos os demais setores industriais e possui uma tradição secular, seus processos estão em constante evolução. Em vários momentos históricos, tem servido como berço para o desenvolvimento de tecnologia e, nessa direção, cabe salientar o grande avanço nas estratégias de controle avançado e nos simuladores de processos, ocorrida na década de 80, na indústria de refino de petróleo, e a sua migração para os demais setores industriais na década de 90.

Um problema muito comum na engenharia química, que é a base das indústrias petroquímicas e químicas, é o processo de separação, que atua, geralmente, no final da linha de produção e é responsável, na maioria dos casos, por um alto custo energético. Especialmente nas indústrias químicas e petroquímicas, há um grande interesse no estudo no conseqüente aprimoramento dos processos de separação, pois cerca de 40 a 50% dos equipamentos utilizados são relacionados à separação e 70% do consumo de energia é creditada à separação.

Os processos de separação podem ser classificados como mecânicos ou difusionais. Nos processos de separação mecânicos a alimentação é sempre heterogênea onde o objetivo é somente separar as fases. Na maioria das situações há a presença de uma fase sólida. Na separação difusional, a alimentação é homogênea e envolve separação por transferência difusional de matéria a partir de uma corrente de alimentação para uma corrente de produto, motivada pelo gradiente de potencial químico. A destilação, embora apresente duas fases, líquida e vapor, é considerada um processo de separação difusional pois em cada fase há uma mistura homogênea a ser separada. Nestes termos, a destilação apresenta-se como uma das operações mais estudadas, pois seu agente de separação é a energia, o que torna o custo de separação muito elevado. Por outro lado, o uso da destilação proporciona um considerável aumento no valor agregado dos produtos, além de possibilitar o cumprimento das exigências, cada vez mais restritas do mercado, quer seja em termos econômicos, quer seja na minimização da geração de poluentes. Isto fomenta as buscas por novas tecnologias mais eficientes e

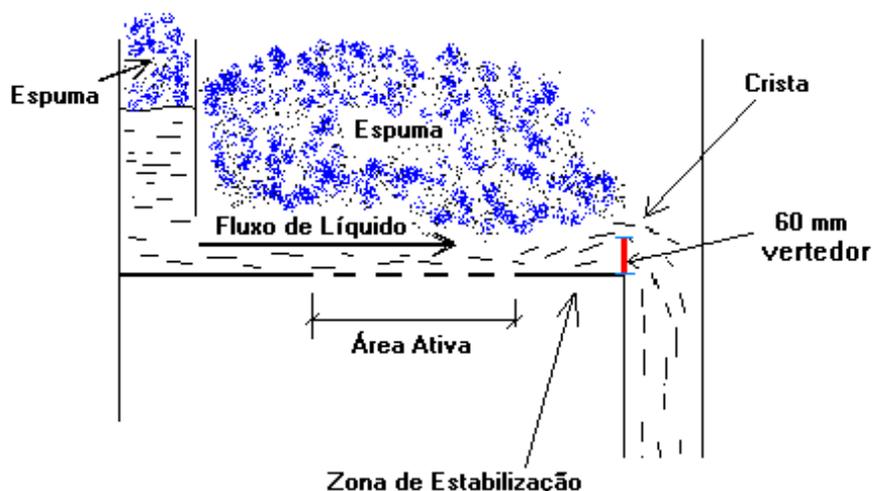


Figura 1.1: Esquema de um prato de destilação.

flexíveis.

O processo de destilação tem como agente de separação a energia e é baseado na diferença das volatilidades dos componentes da mistura. Este processo é realizado em colunas de destilação constituídas internamente por pratos ou recheios. As colunas de pratos proporcionam uma forte interação entre as fases líquida e vapor e podem ser perfurados, valvulados ou de campânulas.

A Figura 1.1 apresenta um esquema básico de um prato de destilação do tipo perfurado. Consiste em um prato perfurado, onde o líquido entra no estágio através da área de entrada do vertedor, percorre a superfície do prato, principalmente a área de borbulhamento, a qual é perfurada, e sai do prato através da área de saída do vertedor. Já o vapor, entra pelas perfurações do prato e mantém contato com o líquido possibilitando a troca de calor e de massa. Os escoamentos são multifásicos com transferência turbulenta de calor e massa. Neste contexto, o conhecimento e a predição destes fenômenos é de fundamental importância para estudos de projeto, simulação e otimização. No entanto, atualmente, estes processos são desenvolvidos a partir de estudos experimentais (de alto custo) e por predições, utilizando simuladores de processos¹, que não permitem a total compreensão dos fenômenos inerentes aos processos de destilação.

¹Os simuladores de processos em geral não consideram em seus modelos variações espaciais das propriedades conserváveis, somente variações temporais.

Em meados da década de 90, iniciou-se a aplicação de modelos que consideram tanto as variações temporais como as variações espaciais (campos) das propriedades conserváveis, para subsidiar e incrementar a análise e otimização dos processos de refino, dando-se início à era dos códigos de Fluidodinâmica Computacional (CFD). Esses códigos incorporam aos modelos de conservação de massa e de energia as equações do movimento dos fluidos, trazendo informações antes negligenciadas pela maioria dos simuladores de processo. No Brasil, por exemplo, a PETROBRAS já vem aplicando, desde 1995, modelos de CFD às unidades de craqueamento catalítico de petróleo (FCC), com diversos projetos orientados à análise da fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em CICLONES de FCC (Meier, 1998), RISER de FCC (Rosa, 2002) e REGENERADOR de FCC entre outros.

Nos processos de fracionamento de petróleo (destilação fracionada), são poucas as tentativas de uso de modelos que levam em consideração as variações espaciais e a influência do movimento dos fluidos na avaliação da eficiência dos processos de transferência de calor e massa. Isto se deve, principalmente, ao complexo comportamento do escoamento líquido-vapor e às dificuldades de obtenção de informações experimentais de campos das propriedades para corroborar os modelos teóricos. Entretanto, face ao atual desenvolvimento tecnológico dos processos de fracionamento, as ferramentas atuais (modelos de estágios de equilíbrio e de não-equilíbrio) pouco podem auxiliar no estudo avançado de incremento da performance dos processos, a menos que a elas sejam incorporadas informações de campos sobre o comportamento do escoamento líquido-vapor.

1.1 Objetivo Geral desta Tese de Doutorado

Este trabalho de tese de doutorado consiste no acoplamento de duas linhas de pesquisa, Desenvolvimento de Processos de Separação e Fluidodinâmica Computacional, na tentativa de associar um estudo de Fluidodinâmica Computacional aos estudos tradicionais de transferência de calor e massa em colunas de destilação. Pretende-se sistematizar e aplicar numericamente um modelo matemático baseado na conservação de quantidade de movimento, calor e massa, num referencial euleriano-euleriano, sob condições de turbulência, que possibilite a predição dos perfis de velocidade, temperatura e concentração. Aliado a estes estudos numéricos, realizar ensaios físicos em bancada experimental para fornecer dados de validação dos modelos numéricos. Este estudo permite identificar padrões de escoamento das fases fluidas e as regiões de maior transferência de calor e massa, úteis para o desenvolvimento de projetos

e otimização de equipamentos.

1.1.1 Objetivos Específicos

- Completo levantamento bibliográfico que trata dos sistemas de destilação em colunas de pratos perfurados e da utilização das técnicas de fluidodinâmica computacional para sistemas multifásicos.
- Sistematizar e organizar um modelo matemático com características multifásica, turbulenta, tridimensional e transiente, e aplicar métodos numéricos de solução para simulação do escoamento líquido/vapor em pratos perfurados de destilação.
- Realizar trabalhos de verificação de *software* através do desenvolvimento de metodologias de experimentação numérica sustentadas por estratégias segregadas de solução, com malhas estruturadas, entre outras particularidades, capaz de garantir a reprodutibilidade dos resultados numéricos e o mínimo de contaminação numérica na solução.
- Desenvolver uma estratégia de coleta de dados capazes de validar o modelo matemático proposto.
- Realizar estudos de experimentação física em bancada experimental baseadas na estratégia definida, tabular e tratar os dados de forma que possam ser utilizados para validação do modelo.
- Validação do modelo através do confronto entre os dados experimentais e os dados numéricos obtidos.
- Aplicar o modelo visando a predição das principais características fenomenológicas do escoamento líquido/vapor em pratos perfurados de colunas de destilação, com a intenção de subsidiar estudos de melhoria de performance como parte de uma metodologia para o aperfeiçoamento do projeto de processos e equipamentos.
- Analisar os fenômenos de transferência de quantidade de movimento sobre a eficiência da transferência de calor e massa.
- Possibilitar desenvolvimento tecnológico em destilação e a formação de conhecimentos para a equipe além da disseminação deste conhecimento.

1.2 Motivação pelo Tema

Nas últimas décadas, diversos estudos têm sido realizados no intuito de se desenvolver projetos viáveis de colunas de destilação, todos fundamentados por modelos de conservação da massa e energia que não consideram campos com uma quantidade considerável de equações constitutivas sem uma forte fundamentação teórica. Destaca-se, neste sentido, principalmente, os estudos experimentais de colunas de destilação na tentativa de identificar os efeitos do escoamento de líquido sobre o prato, da intensidade de borbulhamento e da influência do tempo de contato líquido-vapor, sobre a eficiência de transferência de massa e calor nos pratos de destilação. Isto tem levado à elaboração de uma grande quantidade de correlações empíricas com aplicação bastante restrita às faixas de operação nas quais foram ajustadas matematicamente. Portanto, com pouca generalidade.

Por sua vez, as técnicas de CFD apresentam muitas incertezas quanto ao comportamento obtido através dos modelos não-lineares que podem apresentar multiplicidade de soluções, hipersensibilidade às condições iniciais e outras características que conferem um comportamento caótico aos fenômenos de transferência de massa e energia em decorrência do escoamento multifásico e turbulento em geometrias complexas, como ocorre nos pratos de destilação. A disponibilidade dos centros de processamento de alto desempenho, com velocidade e memória de gerenciamento de grandes conjuntos de informações numéricas, pode viabilizar estudos desta natureza. Com as tecnologias atuais dos chamados “clusters” computacionais para processamento paralelo, a manipulação de grandes quantidades de informação numérica torna-se uma realidade.

Diante destas características, há potencial de pesquisa nesta área, com qualidade científica e aplicabilidade tecnológica a médio e curto prazo.

Todos os aspectos apresentados anteriormente justificam a importância estratégica do desenvolvimento de atividades desta natureza para o incremento científico e tecnológico para o país.

1.3 Organização da Tese de Doutorado

Os principais temas constituintes deste trabalho consistem:

- Revisão bibliográfica relativa aos processos de separação por destilação, aplicações das técnicas de CFD e simulação da fluidodinâmica em colunas de destilação e apresentada no **Capítulo II**.
- A modelagem matemática é apresentada no **Capítulo III**. O modelo matemático contempla um sistema tridimensional, transiente, multifásico com transferência de calor e massa, além da apresentação das equações de fechamento do modelo associadas aos fenômenos de turbulência, de transporte entre fases, entre outros.
- Encontra-se no **Capítulo IV** uma breve introdução aos métodos numéricos e algumas de suas particularidades.
- Apresentação, no **Capítulo V**, dos resultados obtidos por experimentação numérica para o escoamento sem transferência de calor e massa.
- O **Capítulo VI** apresenta os estudos teóricos e práticos de experimentação física, realizados neste trabalho, cujo intuito é validar o modelo.
- A incorporação dos efeitos térmicos às características do escoamento através da implementação da conservação da energia ao modelo e a análise da performance de um prato perfurado de uma coluna de destilação para o sistema etanol/água é apresentado no **Capítulo VII**. Neste ponto, são acoplados, ao modelo, os efeitos de transferência de calor, massa e quantidade de movimento entre as fases, pela incorporação da conservação da energia, da espécie química e da quantidade de movimento.
- E por fim no **Capítulo VIII** são apresentadas as principais conclusões obtidas neste trabalho de tese de doutorado e as sugestões para trabalhos futuros, de acordo com as atividades apresentadas nos itens anteriores.

2 REVISÃO DA LITERATURA

Este capítulo tem por objetivo discorrer sobre destilação e fluidodinâmica computacional, além de apresentar o estado da arte em CFD para colunas de destilação.

2.1 Um breve relato sobre destilação

Os processos de separação por destilação vêm sendo aplicados, há muitos anos, como técnicas laboratoriais de separação. Sua aplicação industrial, em larga escala, data do início do século passado, quando se buscava tecnologia para remoção de hidrocarbonetos aromáticos do querosene. Desde então, estes processos tiveram grande desenvolvimento na indústria, abrangendo os mais diversos setores.

Para a utilização destes processos, são aplicadas colunas de destilação cuja estrutura interna é constituída por pratos individuais conectados entre si, de forma que o sistema interveniente passe através de cada um deles, aumentando a concentração dos constituintes mais voláteis, mediante vaporização e condensação parciais. Os pratos de destilação usados proporcionam, neste processo, o aumento da área efetiva de contato líquido-vapor, fator que eleva o grau de separação mediante fortes interações entre si. Sua classificação é de acordo com o modo de escoamento na estrutura interna da coluna, podendo ser a escoamento cruzado ou a contracorrente, diferenciados entre si pelo uso do vertedor de descarga. Os pratos com escoamento cruzado apresentam maior faixa de operação e maior transferência de massa e calor (Barros *et al.*, 1994). A maioria dos modelos de pratos em corrente cruzada emprega perfurações para dispersar o vapor no líquido sobre o prato, no qual, os orifícios podem ser redondos ou podem conter válvulas móveis com formatos não circulares. Estes pratos são, respectivamente, os perfurados e os valvulados. Nos primeiros pratos referenciados, o líquido é impedido de escoar através das perfurações pela ação do fluxo de vapor. Por isto, quando o fluxo é pequeno, é possível que parte do líquido escoe pelos orifícios causando o fenô-

meno de gotejamento, que por sua vez, diminui a área de contato entre o vapor e o líquido, tendo como consequência a diminuição do desempenho do processo. Enquanto isto, os pratos valvulados são projetados para minimizar esta drenagem, pois as válvulas tendem a fechar quando o fluxo do vapor é pequeno. Para estes pratos, a área total do orifício modifica-se de forma a manter uma pressão dinâmica equilibrada através do prato (Barros *et al.*, 1996).

O cálculo das características dos equipamentos para as operações de destilação envolve a determinação do número e do tipo de prato que proporciona maior eficiência do processo, parâmetro dependente da taxa de transferência de massa, do tempo de contato, da área de contato e da intensidade de mistura, funções da geometria do prato e das taxas de escoamento das fases (Barros e Wolf Maciel, 1996).

Diante das características fenomenológicas descritas, percebe-se o alto grau de complexidade dos fenômenos de transferência que ocorrem no interior de uma coluna de destilação. Os modelos atuais aplicados para o projeto, consideram somente a transferência de calor e massa através da incorporação de equações empíricas e semi-empíricas utilizadas para o cálculo da eficiência de transferência de massa, concebidas a partir do estabelecimento do princípio de equilíbrio entre as correntes que abandonam o estágio ideal.

2.2 Modelagem de Estágios de Equilíbrio

Para a modelagem de estágio de equilíbrio, é necessária a introdução do conceito de eficiência para corrigir os desvios oriundos da consideração do equilíbrio, pois, na prática, dificilmente as correntes que abandonam os estágios alcançam o equilíbrio entre as fases (Pescarini, 1996). Para descrever o modelo matemático, é necessário estabelecer as equações de equilíbrio (E), dos balanços de massa (M) e energia (H), do número de estágios de equilíbrio, da posição de alimentação e suas composições (Soares, 2000). Neste modelo, é feita a suposição de que as correntes que deixam o estágio estão em equilíbrio termodinâmico entre si. A solução das equações denominadas MESH (“Mass, Equilibrium, Sum (Restrição) and Heat”), através de algoritmos específicos, permitem obter os fluxos de líquido e vapor e os perfis discretos de temperatura e composição ao longo da coluna (Krishnamurthy e Taylor, 1985a).

A literatura propõe diversas equações para o cálculo da eficiência baseado nos conceitos de idealidade de um processo de separação por destilação. A primeira equação constitutiva

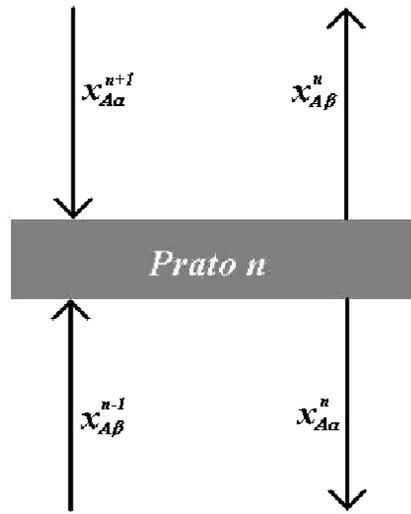


Figura 2.1: Esquema representativo um estágio de destilação.

foi proposta em 1922 por Lewis, onde a eficiência global das colunas de destilação, η_{oc} , é relacionada com o número de estágios teóricos, N_t , e o número de estágios reais, N_r , para uma determinada separação:

$$\eta_{oc} = \frac{N_t}{N_r} \quad (2.1)$$

No entanto, esta equação apresenta limitações matemáticas na sua aplicação prática por não incorporar, no modelo, os fenômenos de transferência de massa e calor.

Em 1925, Murphree propôs uma equação que relaciona o comportamento de um prato real com um prato ideal mediante o grau de contato entre as fases, admitindo-se que as fases líquidas e vapor estejam completamente misturadas sobre o prato. A eficiência pode ser definida para as fases vapor², η_V^n , e líquida, η_L^n como ilustrado na Figura 2.1 e Equações 2.2 e 2.3, respectivamente.

$$\eta_V^n = \frac{x_{A\beta}^n - x_{A\beta}^{n-1}}{x_{A\beta}^{n*} - x_{A\beta}^{n-1}} \quad (2.2)$$

e,

$$\eta_L^n = \frac{x_{A\alpha}^{n+1} - x_{A\alpha}^n}{x_{A\alpha}^{n+1} - x_{A\alpha}^{n*}} \quad (2.3)$$

onde,

$x_{A\beta}^{n*} \equiv$ é a concentração do componente na fase vapor em equilíbrio com a corrente de

²Considera-se o subscrito β representando a fase vapor e o subscrito α indicando a fase líquida

líquido que deixa o prato;

$x_{A\alpha}^n$ \equiv é a concentração do componente na fase líquida em equilíbrio com a corrente de vapor que deixa o prato;

As equações propostas apresentam limitações oriundas, principalmente, nas diferenças nos valores numéricos da eficiência das duas fases. Para ampliar a abrangência da equação de Murphree, West *et al.* (1952), propôs a eficiência no ponto, servindo como base para minimizar as limitações da equação de Murphree.

Depois destas definições surgiram novas equações para eficiência, como a de vaporização (Holland e McMhaon, 1970), eficiência de Colburn (1936), eficiência de Hausen (1953), eficiência de Standart (1965), mas foram as correlações de eficiência que tiveram maior repercussões científicas e tecnológicas, depois da eficiência de Murphree.

As correlações de eficiência foram desenvolvidas para correlacionar dados reais no cálculo da eficiência de colunas e de pratos de destilação. A correlação de maior amplitude foi a desenvolvida no AIChE em 1958, que incorpora os parâmetros de transferência de massa no cálculo da eficiência. Pode-se destacar, também, as correlações de Drickamer e Bradford (1943), O'Connell (1946), Chu *et al.* (1951), Chaiyavech e Van Winkle (1961), Macfarle (1972) e English e Van Winkle (1983). Todas estas correlações tentam incorporar parâmetros reais e práticos de transferência de massa mensuráveis e de grande relevância para o cálculo da eficiência nas colunas de destilação.

Barros e Wolf (1997) propuseram uma correlação para o cálculo da eficiência que incorpora, além dos parâmetros de transferência de massa, os parâmetros de transferência de calor:

$$\eta_{oc} = 38,5309 \left[\frac{\bar{\lambda} \bar{\rho} D_{AB} \bar{P}M}{\bar{C}_p \bar{\mu}^2} \right]^{-0,04516} \quad (2.4)$$

onde,

$\bar{\lambda} \equiv$ é a condutividade térmica média da mistura;

$\bar{\rho} \equiv$ é a massa específica média da mistura;

$D_{AB} \equiv$ é a difusividade do componente A em B;

$\bar{P}M \equiv$ é o peso molecular média da mistura;

$\bar{C}_p \equiv$ é a capacidade calorífica média da mistura;

$\bar{\mu}$ \equiv é a viscosidade média da mistura.

Como se pode observar, a Equação 2.4 incorpora parâmetros como a difusividade, a massa específica, a viscosidade, a condutividade térmica, a capacidade calorífica e a massa molar, que podem ser calculados quando as propriedades intensivas e macroscópicas do sistema são conhecidas.

A correlação proposta foi testada para mais de vinte sistemas binários e multicomponentes ideais e não ideais, tendo os resultados sido comparados com dados experimentais e com aqueles oriundos do modelo de estágio de não equilíbrio, mostrando-se muito satisfatória, com desvios menores que os observados quando a comparação é feita utilizando as correlações comumente adotadas nos projetos e processos industriais, como aquele proposto por O'Connell (1956) e em AIChE (1948).

2.3 Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio

Para eliminar o uso da eficiência nos cálculos dos processos de separação por destilação foi proposto em 1985 por Krishnamurthy e Taylor a modelagem de estágios de não equilíbrio, que foi implementado no Brasil pelo Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas por Barros (1997). O modelo de não equilíbrio possibilita entender, com maior abrangência, os fenômenos de transferência de massa e calor envolvidos nos processos de destilação, visto que os processos de transferência na interface são considerados explicitamente no modelo, eliminando as incertezas resultantes do uso das eficiências. O princípio básico do modelo é a consideração da não existência de equilíbrio entre as duas correntes que abandonam um dado prato de destilação, assumindo-se o equilíbrio termodinâmico somente na interface líquido-vapor, conforme Figura 2.2.

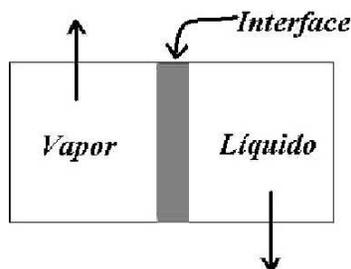


Figura 2.2: Representação da interface.

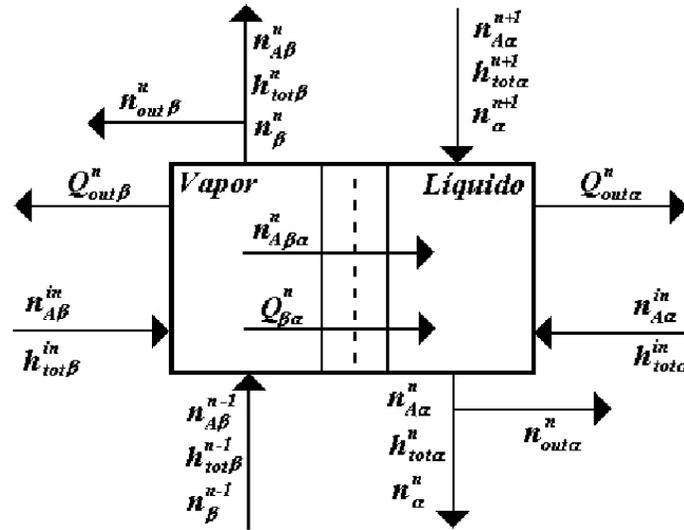


Figura 2.3: Característica do modelo de estágios de não equilíbrio.

Além do mais, as equações de conservação de calor e massa são escritas independentemente para cada fase e resolvidas juntamente com as equações de transporte que descrevem os fenômenos de transferência de massa e calor simultâneos, em misturas multicomponentes.

Considere um estágio n , Figura 2.3, de uma coluna de destilação com escoamento em contracorrente e multicomponente, apresentando duas fases, líquido e vapor, que não estão em equilíbrio. Há, portanto, transferência de massa e energia através da interface.

O estágio está em equilíbrio mecânico, ou seja, pressão constante ($P_i^V = P_i^L = P_i^I$). Isto implica que a variação da quantidade de movimento pode ser negligenciada e, portanto, não há a necessidade de uma equação de conservação para a quantidade de movimento. Sem uma equação de conservação para quantidade de movimento, são perdidas informações das variações espaciais no prato. No entanto, são consideradas as saídas e alimentações laterais de vapor e líquido e a adição ou a remoção de energia em cada estágio. Considerando o estado estacionário, as equações que descrevem a modelagem de estágio de não equilíbrio são apresentadas a seguir³ (Barros, 1997).

Equações de conservação:

- Conservação de massa na fase líquida:

$$\left(1 + \frac{n_{out\alpha}^n}{n_{\alpha}^n}\right) n_{A\alpha}^n - n_{A\alpha}^{n+1} - n_{A\alpha}^{in} - n_{A\beta\alpha}^n = 0 \quad (2.5)$$

³Define-se a taxa positiva de transferência de calor e massa entre as fases na interface na direção do vapor para o líquido, ou seja, $\beta \rightarrow \alpha$.

- Conservação de massa na fase vapor:

$$\left(1 + \frac{n_{out\beta}^n}{n_{\beta}^n}\right) n_{A\beta}^n - n_{A\beta}^{n-1} - n_{A\beta}^{in} + n_{A\beta\alpha}^n = 0 \quad (2.6)$$

- Conservação de energia na fase líquida:

$$\left(1 + \frac{n_{out\alpha}^n}{n_{\alpha}^n}\right) h_{\alpha}^n - n_{\alpha}^{in} h_{\alpha}^{in} - n_{\alpha}^{n+1} h_{\alpha}^{n+1} + Q_{out\alpha}^n - Q_{\beta\alpha}^n = 0 \quad (2.7)$$

- Conservação de energia na fase vapor:

$$\left(1 + \frac{n_{out\beta}^n}{n_{\beta}^n}\right) h_{\beta}^n - n_{\beta}^{in} h_{\beta}^{in} - n_{\beta}^{n-1} h_{\beta}^{n-1} + Q_{out\beta}^n + Q_{\beta\alpha}^n = 0 \quad (2.8)$$

- Conservação de massa na interface:

$$n_{A\beta\alpha}^n + n_{A\alpha\beta}^n = 0 \quad (2.9)$$

- Conservação de energia na interface:

$$Q_{\beta\alpha}^n + Q_{\alpha\beta}^n = 0 \quad (2.10)$$

Equações constitutivas:

- Relações de equilíbrio na interface:

$$\left(K^C\right)^n x_{A\alpha}^n - x_{A\beta}^n = 0 \quad (2.11)$$

onde,

$$\left(K^C\right)^n = f\left(x_{A\alpha}^n, x_{A\beta}^n, T_{\alpha}^n, T_{\beta}^n, P\right)$$

- Equação de soma (restrição):

$$\sum_{A=1}^{NC} x_{A\alpha}^n - 1 = 0 \quad (2.12)$$

$$\sum_{A=1}^{NC} x_{A\beta}^n - 1 = 0$$

Os efeitos da resistência à transferência de massa e à transferência de calor são incorporados ao modelo de estágios de não equilíbrio no cálculo dos fluxos de transferência de

massa e calor na interface, através de equações constitutivas para os coeficientes globais de transferência de massa e calor e das relações de equilíbrio termodinâmico na interface.

Os resultados obtidos por Barros e Wolf (1998) mostram que, com base em comparações numéricas, as colunas de destilação operam com eficiência média de 50 % e, é a fase vapor que controla a transferência de massa e calor, pois a resistência na fase líquida é negligenciável. Com o uso deste modelo, a abrangência da avaliação do processo de destilação é mais acentuada, possibilitando conhecer o comportamento das taxas de transferência de massa e calor e sua relevância no desenvolvimento de projetos industriais com melhor performance.

2.4 Técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD)

Estudos de fluidodinâmica através da solução numérica das equações do movimento acopladas com as equações de conservação de massa e de energia são denominados de estudos de fluidodinâmica computacional ou estudo de CFD (“Computational Fluid Dynamics”) (Maliska, 1995). Eles compreendem os estudos de modelagem matemática, geração de malhas numéricas em geometrias complexas, métodos numéricos e métodos de visualização científica. Aplicações industriais desta técnica de análise e simulação de processos iniciaram-se a partir de 1995 (Hamill, 1996) em situações denominadas de “gargalos” de processo, principalmente na indústria petroquímica. Nestes casos, uma parte do processo, um equipamento ou um acessório, é analisado individualmente, com a finalidade de se obter informações sobre os padrões de escoamento que possam subsidiar um estudo de incremento de desempenho. Como essa técnica permite o cálculo dos campos espaciais-temporais das propriedades conserváveis, é possível identificar e quantificar a performance do processo. Além disso, torna possível a solução de problemas com alta complexidade geométrica e de condições de contorno. Joshi e Ranade (2003) afirmam que a fluidodinâmica computacional é uma tecnologia essencial a engenheiros para prever e manipular a dinâmica dos fluidos nos processos e equipamentos, a fim de minimizar custos de construção e operação através de um menor consumo energético e de matéria-prima, além da capacidade cada vez menor da geração de resíduos e contaminação ambiental.

A partir da segunda metade do século passado, a fluidodinâmica computacional, CFD, começou a ser utilizada como uma ferramenta efetiva para muitos pesquisadores, que antes apenas poderiam contar com experimentos para compreender os fenômenos associados aos

escoamentos de fluidos, no sentido de concluir seus trabalhos mais rapidamente e com menor custo (Orszag e Staroselsky, 2000). Os autores também creditam a larga aplicação da ferramenta de CFD ao imenso avanço no setor computacional, que nos últimos cinquenta anos se desenvolveu a uma taxa de 2 vezes a cada 1,5 a 2,0 anos. Neste sentido, Orszag e Staroselsky (2000) afirmam que o desenvolvimento de tecnologias numéricas e matemáticas para solução de problemas surgiu na mesma velocidade e projetam um desenvolvimento ainda maior dos modelos e métodos computacionais.

Algumas das principais vantagens da aplicação das técnicas de CFD são:

- A facilidade de mudança das configurações do problema sem grandes investimentos. Conseqüentemente, o investimento é menor quando comparado com experimentos laboratoriais, dando maior flexibilidade a engenheiros e cientistas no estudo dos fenômenos associados ao problema.
- Maior rapidez na aquisição de dados, proporcionando uma maior quantidade de análises.
- A possibilidade da análise dos campos espaciais-temporais de fluxo são ferramentas importantes de orientação dos pesquisadores para solução dos problemas.
- Aquisição de dados em regiões de difícil ou de impossível obtenção de dados a partir de experimentos.

Na atualidade, existem alguns “softwares” comerciais, tais como o CFX da Ansys, o FLUENT, o PHOENICS, entre outros, destinados a resolver problemas de CFD. Embora, inicialmente, o método numérico mais aplicado para resolução das equações de conservação se baseasse em elementos finitos, os códigos atuais baseiam-se no método dos volumes finitos e no método dos volumes finitos baseados em elementos.

Os códigos de CFD estão estruturados com algoritmos numéricos para a solução de problemas que envolvem o escoamento de fluidos. Para possibilitar o acesso ao seu poder de resolução, todos os pacotes comerciais de CFD incluem sofisticadas interfaces com o usuário quanto à caracterização do problema e à análise dos resultados. Portanto, todos os códigos contêm três elementos principais: um pré-processador, um processador ou “solver” e um pós-processador.

2.5 Fluidodinâmica Computacional (CFD) Aplicada a Sistemas Multifásicos

A modelagem multifásica onde as propriedades conserváveis variam no tempo e no espaço mas ainda no contínuo, é desenvolvida sob dois pontos de vistas: o enfoque Euleriano e o enfoque Lagrangeano. No primeiro caso, as propriedades conserváveis da fase possuem campos espaciais que variam ao longo do tempo enquanto que no segundo cada porção de fluido, ou cada partícula, tem a sua trajetória acompanhada ao longo do tempo. Por tanto, neste enfoque são conhecidas as propriedades conserváveis de cada porção de fluido ou partícula em cada posição assumida por ela ao longo do tempo. Para fluidos contínuos, líquidos e gases, o enfoque euleriano é o mais utilizado enquanto que para sólidos é muito utilizado o tratamento lagrangeano. No entanto, para sistemas muito concentrados são necessárias muitas equações, uma equação de cada propriedade para cada partícula, tornando a solução computacionalmente inviável. Neste caso, define-se a fase sólida como um fluido hipotético, onde este assume as características de um fluido contínuo. Assim, o tratamento euleriano pode também ser aplicado as fases sólidas para viabilizar a solução de sistemas concentrados, pois desta forma haverá uma equação para cada propriedade da fase.

A literatura apresenta um número considerável de trabalhos relacionados aos escoamentos com transferência de quantidade de movimento, calor e massa em escoamentos multifásicos para sistemas gás-sólido, como Meier(1998), Meier e Mori (1999), Meier *et al.* (2002a, b), Peres (2002), Decker (2003), Ropelato (2004), e para sistemas gás-liquido, como Jakobsen *et al.* (1997), Delnoij *et al.* (1997, 1999), Krishna *et al.* (1999), Sokolichin e Eigenberger (1999), Cockx *et al.* (1999). Pan *et al.* (1999), Sanyal *et al.* (1999), van Baten e Krishna (2000, 2001), Pflieger e Becker (2001), Spicka *et al.* (2001), Michele e Hempel (2002), Sokolichin *et al.* (2004), entre outros.

Em princípio, pode-se recorrer aos modelos multi-fluido em sistemas gás-sólido, no sentido de melhor conhecer os coeficientes de transferência de quantidade de movimento entre as fases, amplamente estudado para este tipo de sistemas. No entanto, deve ficar claro, que as interações partículas sólidas-fluido e partículas fluidas-fluido são distintas e apresentam comportamento diferenciado.

Meier *et al.* (2002a, b) e Peres (2002) apresentam uma modelagem multifásica, não isotérmica e transiente em regime de turbulência para o escoamento em ciclones de porte in-

dustrial. Os autores utilizam o enfoque Euleriano-Euleriano⁴ para descrever ambas as fases. Foi utilizado o método dos volumes finitos para solução das equações diferenciais parciais, utilizando códigos próprios e comerciais. Os resultados mostram campos das propriedades conserváveis que são corroborados com dados experimentais. A principal conclusão refere-se à aplicabilidade dos modelos matemáticos multifásicos, tridimensionais e transientes na predição de escoamentos para projeto e otimização de processos e equipamentos de engenharia química.

Decker (2003) descreveu um modelo gás-sólido tridimensional e transiente na solução de problema de transporte pneumático de partículas que utiliza a abordagem Euleriana-Euleriana, considerando a fase sólida como não viscosa⁵. As equações são resolvidas utilizando o método dos volumes finitos com o auxílio do código comercial CFX 4.4 da AEA Technology. São estudados vários aspectos geométricos de tubulações e acessórios a fim de prever as características fenomenológicas de cada componente presente em um transporte pneumático. Os resultados mostram campos de pressão, velocidade e frações volumétricas que são corroborados com dados experimentais extraídos da literatura. Como conclusão, o autor afirma que o modelo proposto é capaz de descrever os padrões fenomenológicos presentes em transportes pneumáticos gás-sólido para perfis totalmente desenvolvidos de velocidade e fração volumétrica. Uma das suas principais conclusões refere-se à necessidade da solução tridimensional para obter resultados realísticos, sem ajustes de parâmetros.

Ropelato (2004) e Ropelato *et al.* (2005) utilizaram um modelo matemático multifásico (gás-sólido) tridimensional e transiente como uma aproximação da dinâmica do escoamento em reatores *downer* de FCC, realizando a corroboração ou validação do modelo com dados experimentais da literatura. O trabalho analisou a influência de diferentes configurações na entrada do reator. Os autores mostraram que determinadas configurações de entrada representam com maior precisão os dados experimentais que outras e que, em função dos dados coletados na literatura não conter as características geométricas da entrada, era difícil fazer a validação do modelo. A principal conclusão do trabalho afirma que a consideração de um domínio tridimensional na análise de escoamentos multifásicos, em detrimento de parâmetros empíricos adicionados aos modelos em duas dimensões, mostra-se fundamental, pois assim são preservadas as características teóricas do modelo.

⁴Quando ambas as fases são tratadas do ponto de vista Euleriano, ou seja, Euleriano (Fase α) - Euleriano (Fase β).

⁵Quando o fluido hipotético, fase sólida, não apresenta viscosidade, tendo como consequência a anulação do termo difusivo na equação de conservação.

Outros trabalhos desenvolvidos seguem os princípios metodológicos dos acima citados, no sentido de evidenciar a importância da modelagem multifásica, tridimensional e transiente, para projeto e otimização de processos e equipamentos de engenharia química. Esta análise possibilita o entendimento dos fenômenos associados a problemas de geometria e condições de contorno complexas, antes feitos apenas por análises bidimensionais e estacionárias.

2.6 Fluidodinâmica Computacional (CFD) Aplicada a Sistemas Gás-Líquidos

A literatura apresenta uma considerável quantidade de material bibliográfico que trata dos escoamentos gás-líquido⁶ principalmente em colunas de bolhas. As características fenomenológicas presentes em colunas de bolhas se assemelham, em muito, às presentes em pratos perfurados de coluna de destilação. Sendo assim, a seguir, faz-se uma ampla revisão do estado da arte no que tange a escoamentos gás-líquido em colunas de bolhas, mais freqüentemente estudadas, e em pratos de destilação.

Boisson e Malin (1996) apresentam um trabalho em que aplicam técnicas de CFD em colunas de bolhas. Um modelo bidimensional baseado nas equações de conservação para a mistura gás-líquido, com a hipótese do escoamento heterogêneo, foi usado como base teórica do trabalho. Além das equações de conservação, foram adicionadas ao modelo as equações constitutivas para a força interfacial de arraste, para as forças de aceleração de massa aparente na fronteira da fase contínua nas imediações da fase dispersa (“Virtual Mass Force”), para as forças interfaciais de sustentação (“Saffman Lift Force”) e para as forças interfaciais de pressão. O modelo de turbulência utilizado foi o $k-\epsilon$ padrão. O método numérico empregado foi o método dos volumes finitos implementado no código comercial PHOENICS. Os resultados apresentados referem-se à comparação de dados experimentais para validação do modelo e incorporam mapas de vetores e de fração volumétrica. Os autores concluem que as forças adicionadas permitem a comprovação do modelo, por comparação, com os dados experimentais.

A modelagem de escoamentos de bolhas em situações de movimento ascendente caracterizados por baixas velocidades superficiais de líquido e velocidades superficiais de gás

⁶Nos sistemas gás-líquido, considera-se incorporado o sistema líquido/vapor, pois a modelagem define as fases; o vapor nada mais é que uma fase gasosa onde a temperatura do sistema é inferior a temperatura crítica do gás

moderadamente altas foi apresentado por Jakobsen *et al.* (1997). Os autores apresentam uma extensa revisão dos modelos e métodos aplicados a estes problemas, que inclui as abordagens Euleriana-Euleriana e Euleriana-Lagrangeana⁷, e dão ênfase aos mecanismos de geração de movimento na direção radial. Os modelos apresentam as várias forças que atuam sobre as bolhas, neste tipo de regime, tais como: gravidade, empuxo, forças centrífugas, força de Magnus, forças de Saffman e de forma, além das forças de arraste, de massa virtual e de dispersão turbulenta. Os resultados reproduzem alguns campos instantâneos de velocidade e posição das bolhas, para o enfoque Euleriano-Lagrangeano, além de fazer comparações da velocidade do líquido e fração de volume com dados experimentais. A necessidade de ampliar a previsão dos modelos e a melhora da estabilidade numérica e seus algoritmos são salientados em suas conclusões.

Delnoij *et al.* (1997) apresentam uma modelagem Euleriana-Lagrangeana para descrever a fluidodinâmica de colunas de bolhas. As equações de continuidade e do movimento, com equações constitutivas para as forças de arraste, de ascensão, de massa virtual e de interações bolha-bolha, caracterizam o modelo bidimensional e bifásico. Delnoij *et al.* (1999) estenderam seu trabalho a um modelo semelhante mas, agora, considerando as três dimensões para melhor identificar os efeitos tridimensionais da dispersão gás-líquido. Em ambos os casos, os autores observam a presença de vórtices na fase líquida acima de determinada vazão de gás. No entanto, para o modelo em três dimensões, as características das estruturas vorticiais foram consideravelmente mais complexas. Estes vórtices também foram observados nos estudos experimentais, validando assim o modelo apresentado.

Skolichin e Eigenberger (1999) fizeram a comparação entre os modelos laminar bidimensional, turbulento bidimensional e turbulento tridimensional com equações de conservação da continuidade para cada fase e um conjunto de equações de conservação da continuidade para a mistura, associados a equações de regra de mistura para o fechamento do modelo. Os efeitos de turbulência foram incorporados ao modelo pela equações de conservação da energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação para a mistura através do modelo k- ϵ padrão e de um termo fonte associados aos efeitos dispersivo na fase gás devido as flutuações de velocidade das bolhas. O método dos volumes finitos foi aplicado para resolução das equações, com um esquema de interpolação de alta ordem para evitar a difusão numérica. Os resultados apresentados dão ênfase à predição de mapas de vetores, isocurvas de fração volumétrica

⁷Quando uma fase é tratada do ponto de vista Euleriano e a outra do ponto de vista Lagrangeano, ou seja, Euleriano (Fase α) - Lagrangeano (Fase β)

e velocidade. Os autores observaram que o modelo tridimensional com a turbulência, representa qualitativamente os dados experimentais. No entanto, a representação quantitativa apresentou resultados apenas razoáveis.

Sanyal *et al.* (1999) avaliaram a fenomenologia do escoamento em um reator na forma de coluna de bolhas por comparação de dados experimentais, coletados pelos próprios autores, com um modelo Euleriano-Euleriano e um modelo algébrico de mistura (*Algebraic Slip Mixture Model*)⁸. A turbulência é avaliada em ambos os modelos pelo equacionamento k- ϵ padrão aplicada a equação da mistura. Os modelos foram resolvidos por estratégias diferentes, sendo o primeiro discretizado em um domínio estruturado, onde a solução é obtida de forma segregada e iterativa. Já o modelo de mistura foi discretizado em um domínio não-estruturado. Os autores apresentam campos vetoriais de velocidade para o modelo de dois fluidos, bem como os perfis de propriedades conserváveis para os dados experimentais, para diversas condições operacionais. Os autores concluem que ambos os modelos proporcionam grandes avanços na compreensão da fenomenologia do escoamento em colunas de bolhas.

Pan *et al.* (1999) apresentaram um estudo de colunas de bolhas por solução numérica tendo aplicado um modelo Euler-Euler em duas dimensões. A transferência de quantidade de movimento entre as fases é tratada por duas forças principais; a força de arraste e a força de massa virtual. A viscosidade efetiva é calculada por uma expressão para dispersão diluída. O tensor de Reynolds é avaliado utilizando a hipótese da viscosidade turbulenta. São apresentados os campos de velocidades e frações volumétricas, além dos perfis de velocidade ao longo da coluna, e são comparados com dados experimentais adquiridos na literatura. As principais conclusões sugerem que o modelo utilizado é capaz de descrever as características do escoamento em colunas de bolhas com boa qualidade.

Pfleger e Becker (2001) apresentam estudo experimental e experimental-numérico onde utiliza um modelo bifásico numa abordagem Euleriana-Euleriana para descrever o escoamento numa coluna de bolhas. A turbulência foi descrita pelo equacionamento k- ϵ padrão e foram negligenciados os termos de coalescência e quebra das bolhas. Os estudos numéricos possibilitaram avaliar a influência da turbulência adicional gerada pela presença da fase dispersa, além da validação do modelo teórico com dados experimentais. Mapas de vetores e frações volumétricas são apresentados nos resultados. Concluiu-se que a adição ao modelo

⁸O modelo algébrico de mistura diferencia-se do modelo de Euler-Euler por tratar o problema como sendo uma fase misturada, onde há uma equação de continuidade para mistura, um conjunto de equações do movimento para a mistura, uma equação adicional para determinar as frações volumétricas da fase dispersa e uma equação algébrica para a velocidade da fase dispersa.

da turbulência gerada pela interação gás-líquido, proporciona a melhora dos resultados de simulação dos perfis axial e radial de velocidade e prediz o comportamento das frações locais do gás e do líquido com bastante precisão.

Michele e Hempel (2002) desenvolveram um estudo experimental e experimental numérico do escoamento em colunas de bolhas operando com três fases, muito utilizadas como reatores biotecnológicos. O modelo utilizado baseia-se nas equações de conservação de massa e de quantidade de movimento num enfoque Euleriano-Euleriano-Euleriano em três fases. Os autores tratam a turbulência somente nas fases líquida e gás, com equacionamento $k-\epsilon$ padrão, e a viscosidade da fase sólida é considerada constante. A transferência de quantidade de movimento é função única das forças de arraste, onde para ambas as fases dispersas, gás e sólido, as partículas são consideradas esféricas e não deformáveis. Os autores apresentam os resultados na forma de mapas e perfis de velocidade e frações de volume e concluíram que o modelo utilizado pode descrever, qualitativamente, o comportamento real do processo.

Spicka *et al.* (2002) realizaram um extenso trabalho experimental para o escoamento gás-líquido em uma coluna de bolhas retangular. No entanto, o tratamento numérico foi realizado utilizando-se um modelo Euler-Euler bidimensional. A transferência de movimento entre as fases é avaliada pelas forças de arraste e pela força de sustentação. O coeficiente de arraste utilizado é baseado em uma correlação derivada da velocidade de ascensão oriunda dos dados experimentais. A turbulência foi descrita com o uso de uma equação adicional para turbulência induzida pelas bolhas, incluindo os efeitos anisotrópicos observados experimentalmente e, também, pelo tratamento típico utilizando o equacionamento $k-\epsilon$ padrão. Foram feitas comparações entre os dados experimentais e os dados oriundos dos modelos com diferentes enfoques na turbulência. Os resultados sugerem que o modelo com a turbulência anisotrópica possibilita uma melhor representação do comportamento do processo quando comparado com o modelo com a turbulência isotrópica (equacionamento $k-\epsilon$ padrão).

Por fim, Sokolichin *et al.* (2004) fizeram uma ampla revisão bibliográfica sobre escoamentos em colunas de bolhas, e apresentaram os principais modelos e métodos utilizados, além de estabelecer as principais simplificações que podem ser assumidas para este tipo de escoamento. Os principais efeitos físicos presentes nestes escoamentos foram discutidos e descreveram os principais modelos utilizados para representá-los. Além disso, definiram os principais pontos de investigação para garantir a perfeita representação matemática deste tipo de escoamento.

A revisão descrita até aqui mostra modelos que tratam os problemas do escoamento gás-líquido em colunas de bolhas, considerando a distribuição uniforme do tamanho das bolhas caracterizada pela homogeneidade do fluxo cujo diâmetro das bolhas varia entre 1-7 mm. Este comportamento é verificado até determinada velocidade superficial do gás, velocidade de transição, prevista por correlações empíricas (Krishna e van Baten (2003)). Acima desta velocidade superficial, as interações bolha/bolha passam a ter maior importância e a coalescência e quebra das bolhas não podem ser ignoradas.

Uma forte corrente que surgia na Europa tratou deste problema inserindo uma terceira fase, a de bolhas grandes. Krishna *et al.* (1999, 2001) fizeram uma análise do escoamento combinado entre o regime homogêneo e o regime heterogêneo para um estudo de comparação de dados experimentais com dados numéricos em colunas de bolhas e para o projeto e a mudança de escala de um processo em um reator para síntese Fischer-Tropsch. Embora a finalidade destes trabalhos tenha sido diferente, a fenomenologia e o problema da modelagem são idênticos. Os autores tentaram reproduzir os efeitos de interação bolha/bolha inserindo uma terceira fase que represente as bolhas maiores que, por sua vez, tendem a agir com maior vigor sobre a fase contínua. O cálculo da diferença entre a velocidade superficial do gás e a velocidade superficial de transição subsidia a determinação da proporção de bolhas grandes e bolhas pequenas que adentram o sistema. A transferência de quantidade de movimento é assumida somente da fase dispersa para a fase contínua, ou seja, é negligenciada a influência direta das bolhas grandes nas bolhas pequenas, e vice versa, nos componentes de velocidades. O coeficiente de arraste está relacionado com a velocidade de ascensão, e é correlacionado por diferentes equações para determinadas faixas de tamanho de bolhas. São apresentadas comparações entre dados experimentais e numéricos e concluiu-se que o tratamento de três fases adotado nos trabalhos tem um ótimo desempenho na previsão de parâmetros como campos de frações de volume e velocidades que, por sua vez, são importantes em projetos e mudança de escala de processos.

Krishna *et al.* (2000) utilizaram a mesma técnica para analisar estratégias de mudança de escala de processo para reatores em colunas de bolhas. As principais conclusões enfatizaram a grande influência da hidrodinâmica em mudanças de escala de processos e que os modelos e métodos utilizados são adequados para esta análise.

Observa-se com esta análise que existem exaustivos trabalhos na literatura que tratam o problema do escoamento gás-líquido utilizando, como objeto de estudo colunas de bolhas.

Para pratos de destilação, a fenomenologia é muito parecida, porém o escoamento se divide em dois regimes principais, que Zuiderweg (1982) afirma existir na dinâmica de pratos perfurados de destilação. Em ambos os regimes, regime *spray* e regime de emulsão, existe uma região sobre o prato onde o gás e o líquido se misturam, formando uma dispersão gás-líquido vigorosa. Sendo assim, inicia-se a descrição do estado da arte relacionado aos avanços na análise numérica em pratos de destilação por técnicas de CFD.

As predições do escoamento turbulento do líquido em um prato de destilação foram, inicialmente, apresentadas por Liu *et al.* (2000). Um modelo com enfoque Euleriano, bidimensional e monofásico é proposto. A força resistiva gerada pelo borbulhamento do gás no líquido é considerada através de uma correlação empírica. A turbulência é descrita pelo equacionamento $k-\epsilon$ padrão para fase líquida, incrementado por um termo de geração de turbulência proveniente do borbulhamento. Outras correlações empíricas são utilizadas para prever a altura de líquido sobre o prato, perda de carga, etc. Nesta modelagem, aparece uma constante que o autor chama de coeficiente de transferência, responsável pela geração de energia cinética turbulenta proveniente do efeito do borbulhamento do gás no líquido. O método numérico utilizado foi o método dos volumes finitos com algoritmo SIMPLE para o acoplamento pressão-velocidade. A técnica de anemometria de fio quente possibilitou aos autores a obtenção dos dados experimentais que foram usados nos estudos de validação. Os resultados mostraram a comparação entre os dados experimentais e numéricos, além de mapas do vetor velocidade. Concluiu-se que os resultados do modelo monofásico e bidimensional, acrescido das forças resistivas e do termo adicional nas equações de turbulência, quando comparados com os dados experimentais, são muito representativos para o escoamento do líquido em um prato de destilação, especialmente, em casos com zonas de recirculação. Entretanto, esta modelagem é muito dependente de equações e parâmetros empíricos que limitam a sua utilização.

van Baten e Krishna (2000) propuseram uma modelagem tridimensional e multifásica para representar a fluidodinâmica de um prato perfurado de destilação. O enfoque utilizado foi o Euleriano-Euleriano e as equações de conservação multifásicas serviram como base da modelagem. A transferência de momento entre as fases segue o modelo do coeficiente de arraste. A resolução das equações baseia-se no método dos volumes finitos, acoplados no código comercial CFX da AEA technology. O acoplamento pressão-velocidade é obtido com o algoritmo SIMPLEC e o esquema de interpolação utilizado foi o híbrido para todas as equações. O domínio numérico consiste de um estágio da coluna com 180 furos de seções

quadrada. Segundo os autores, a suposição de furos de seção quadrada não traz impacto nos resultados, pois o enfoque foi Euleriano para ambas as fases. Os resultados apresentados mostram campos de velocidade e fração volumétrica. O modelo foi corroborado com dados de altura de líquido no prato em vários casos. É importante ressaltar que os autores trabalharam com o modelo heterogêneo que implica em equações de conservação do movimento para ambas as fases e, por conseguinte, um alto tempo computacional. A principal conclusão dos autores faz referência à alta confiabilidade do modelo na predição da fluidodinâmica de um prato de destilação.

Gesit *et al.* (2003) apresentaram um trabalho de comparação de dados experimentais e numéricos gerados por duas versões de pacotes comerciais de CFD. O modelo apresentado é focado no ponto de vista Euleriano-Euleriano, tridimensional e transiente de um prato perfurado de destilação em escala industrial, incluindo no domínio a região do *Downcomer*. No entanto, os autores consideram a condição de simetria no centro do prato. Esta simplificação pode ser adotada somente com baixos valores da velocidade superficial do gás. Os autores concluíram que as predições realizadas pelo modelo mostram uma boa concordância com os dados experimentais e que as técnicas de CFD são uma importante ferramenta para engenheiros e cientistas compreenderem melhor os fenômenos envolvidos no escoamento presente em pratos de destilação.

Noriler (2003) descreveu um estudo de modelos e métodos para solução de problemas em pratos perfurados de destilação utilizando a ferramenta de CFD. O autor discorre sobre a modelagem multi-fluido no sentido de simplificar tal abordagem, pois, até então, os modelos multi-fluidos apresentados na literatura consideravam o modelo completo. O modelo apresentado tem como principal inovação a consideração de um mesmo campo de velocidade para ambas as fases, contínua e dispersa, contrabalançada pelas frações volumétricas. As demais equações foram consideradas para ambas as fases. Isto implica em considerar a transferência de quantidade de movimento entre as fases muito alta, ou seja, o coeficiente de arraste infinito. Este modelo, chamado de modelo homogêneo, tem sido largamente utilizado em situações de escoamento com superfícies livres. As vantagens desta abordagem, segundo o autor, é manter a característica teórica do modelo, sem correlações para transferência das propriedades entre as fases, que dificultam os estudos de projeto e otimização dos equipamentos e processos industriais, via ferramenta de CFD. Além disso, como as duas fases compartilham o mesmo campo de velocidade, o conjunto de equações é reduzido consideravelmente, conseqüentemente, o custo computacional segue o mesmo caminho. O autor

fez as comparações entre os modelos presentes na literatura e o proposto e concluiu que o modelo homogêneo tem sua aplicabilidade e representa, qualitativamente, o comportamento do escoamento de bolhas cruzando um líquido. No entanto, afirmou que os estudos devem continuar para garantir o aprimoramento desta abordagem, neste tipo de problema.

Soares *et al.* (2001, 2002) apresentaram estudos iniciais de comparação entre os modelos homogêneo e heterogêneo aplicados aos estudos de escoamento gás-líquido para problemas com superfícies livres e para colunas de bolhas. Os autores tiveram bons resultados com a aplicação do modelo homogêneo.

Noriler *et al.* (2004) apresentaram estudos de experimentação numérica entre o modelo homogêneo, onde as fases compartilham o mesmo campo de velocidades, e o modelo heterogêneo, onde as fases têm campos de velocidades distintas, em pratos perfurados de destilação. São mostrados campos de fração volumétrica e comparações de altura de líquido claro entre os modelos e a correlação de Bennett *et al.* (1983). Os autores concluíram que o modelo homogêneo é capaz de representar, qualitativamente, os escoamentos líquido/vapor presentes em pratos de destilação com um custo computacional bem inferior quando comparado com o modelo heterogêneo.

2.7 Fluidodinâmica Computacional (CFD) Aplicada a Sistemas Gás-Líquidos e Transferência de Calor e Massa

Os trabalhos citados anteriormente mostram a solução de problemas com escoamento gás-líquido, sem transferência de calor e massa. Os modelos com transferência de calor, massa e quantidade de movimento acoplados, em escoamentos gás-líquido, estão em fase incipiente de estudos e destes destacam-se os de Krishna e van Baten (2003), Wiemann *et al.* (2002), Cockx *et al.* (1999), Lehr *et al.* (2002), Wang *et al.* (2004) e Sun *et al.* (2005).

Cockx *et al.* (1999) apresentaram estudos de modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos, caracterizados por bolhas cruzando um líquido em torres de ozonização. Estes equipamentos são utilizados como alternativa para o tratamento de água para consumo. Consistem em um reator horizontal, onde o líquido é forçado a mudar de direção diversas vezes em função da presença de chicanas ao longo do reator. O gás, ozônio, é injetado na parte inferior do reator e, em virtude da presença das chicanas, hora está em contra-corrente com o líquido, hora está concorrente. Os autores apresentaram modelagem focada na visão

Euleriana-Euleriana, com uma equação da continuidade para cada fase, um conjunto de equações de quantidade de movimento para cada fase e uma equação de concentração de ozônio para cada fase. Na transferência de quantidade de movimento entre as fases é considerada somente a força de arraste e é tratada de forma clássica, onde o diâmetro de bolha é fixo e o coeficiente de arraste é calculado em função de um fator de esfericidade. A transferência de massa de ozônio da fase gás para a fase líquida foi considerada uma função da área de transferência, calculada através das frações de volume do gás e do diâmetro das bolhas (constantes), do coeficiente de transferência de massa na fase líquida⁹, calculado em função da difusividade do ozônio no líquido, da velocidade relativa entre as fases, do diâmetro das bolhas e, finalmente, pela diferença de concentração de ozônio da interface até o seio da fase líquida. A turbulência é tratada pelo equacionamento k- ϵ padrão para fase líquida, que assume a hipótese da viscosidade turbulenta. O modelo foi resolvido no código de CFD ASTRID (Simonin e Viollet (1988) *apud* Cockx *et. al.* (1999)). Os resultados mostraram mapas das frações de volume das fases, concentração do ozônio na fase líquida, distribuição do tempo de residência e, em função das análises realizadas no projeto padrão, desenvolveram-se propostas de alteração no projeto de uma torre de ozonização. Os autores concluíram que os resultados obtidos numericamente representaram com boa qualidade os resultados obtidos em um reator de ozonização em escala real e, além disso, a ferramenta de CFD é muito eficiente para estimar a transferência de massa, e pode ser muito útil nos estudos de projeto e otimização de torre de ozonização.

Lehr *et al.* (2002) e Wiemann *et al.* (2002) fizeram trabalhos semelhantes no tratamento do escoamento em colunas de bolhas. A principal diferença é que o segundo considera a transferência de massa e sua influência sobre a hidrodinâmica no escoamento. Estes trabalhos se diferenciam dos referenciados até aqui, no tratamento da fase dispersa, especialmente no cálculo das frações de volume das fases dispersas, bolhas grandes e bolhas pequenas, e na distribuição do diâmetro das bolhas. Os autores inseriram no modelo equações de balanço populacional das bolhas e adicionaram as interações bolha/bolha através de modelos de quebra e coalescência. Além disso, foram consideradas as variações de densidade das bolhas e, também, a transferência de massa, embora Lehr *et. al.* (2002) considere este termo nulo. Sendo assim, o modelo é contemplado como uma equação de continuidade para a fase líquida e uma de balanço populacional para cada fase dispersa, bolhas pequenas e bolhas grandes, e um conjunto de equações de quantidade de movimento para cada fase e uma equação para o

⁹Como o ozônio é injetado puro na torre, a resistência à transferência de massa na fase gasosa é nula.

volume médio das bolhas, para cada fase dispersa.

Na contra mão da complexidade do modelo para prever as frações de volume de cada fase e seus diâmetros médios, a transferência de quantidade de movimento, que por muitos é considerada ponto chave na predição do escoamento gás-líquido, é feita pelo método clássico onde somente a força de arraste é considerada e depende do coeficiente de arraste e do diâmetro das bolhas. Embora o diâmetro das bolhas possa ser calculado através das equações de conservação do volume médio das bolhas, muitas relações empíricas são adicionadas ao modelo para determinar o coeficiente de arraste, tais como correlações para o diâmetro de Sauter médio das bolhas, em função do volume das bolhas onde são apresentadas duas correlações, uma para cada fase dispersa. A turbulência é descrita pelo equacionamento $k-\epsilon$ padrão para fase líquida. O modelo foi implementado e resolvido usando código comercial de CFD. Lehr *et al.* (2002) concluíram que as equações de balanço populacional que incluem a iteração bolha/bolha, além dos efeitos da variação da densidade do gás fornecem excelentes resultados da hidrodinâmica do escoamento gás-líquido presente em colunas de bolhas, caracterizados por zonas de recirculação de grande escala. As frações de volume do gás e do líquido são muito heterogêneas e são fortemente dependentes do tempo. Os dados das frações de volume, velocidade e tamanho de bolhas são comparados com dados experimentais existentes e mostram boa concordância. Wiemann *et al.* (2002) utilizaram o mesmo modelo, mas considerando a transferência de massa da fase gás para a fase líquida em um sistema CO_2 -água. A transferência de massa entre as fases é função do coeficiente de transferência de massa global e da diferença entre a concentração do componente na interface entre as fases e no seio da fase contínua. Embora os autores considerem toda a complexidade para o cálculo da área interfacial, o coeficiente de transferência global de massa, ou seja, a resistência à transferência de massa é considerada constante e função de dados experimentais. Os autores concluíram que a transferência de massa não deve ser negligenciada nas equações de movimento, pois trazem grande influência no padrão hidrodinâmico do escoamento.

Krishna e van Baten (2003) utilizaram o mesmo princípio apresentado por Krishna *et al.* (1999, 2001) e Krishna *et al.* (2000) onde são consideradas, a partir da velocidade superficial de transição, três fases: uma contínua para o líquido e duas dispersas, uma para bolhas grandes e outra para bolhas pequenas. A diferença, agora, é uma equação de conservação para a concentração do traçador para cada fase. A transferência de massa ocorre somente entre as fases dispersas e a fase líquida e é função da área de transferência (a área é função da fração de volume e do diâmetro médio das bolhas), do coeficiente de transferência de

massa na fase líquida (a resistência na fase gás é considerada nula) e pela diferença entre a concentração do traçador na interface entre as fases, e no fase contínua. Como o trabalho tem caráter exploratório, os dados de difusividades do traçador, no gás e no líquido, o coeficiente de transferência de massa e a constante de Henry foram fixados e determinados por ordem de grandeza, ou seja, valores na ordem de grandeza daqueles esperados para cada variável. A turbulência foi inserida ao modelo pelo equacionamento k- ϵ padrão para fase líquida. O modelo foi implementado e resolvido usando um código comercial de CFD. Os autores assumiram uma estratégia de solução no sentido de, primeiramente, estabelecer o estado estacionário ou quase-estacionário da dinâmica do escoamento, sem a transferência de massa e após o estabelecimento do regime, iniciar-se, então, o processo de transferência de massa. Isto é possível porque os autores não consideram a influência da transferência de massa nas equações de movimento porque a quantidade de massa que passa de uma fase a outra é muito pequena. No entanto, para grandes massas cruzando a interface, é necessário considerar este efeito. Os autores concluíram, em função da análise dos resultados que, para o regime homogêneo, cujas as bolhas são pequenas e distribuídas uniformemente, o modelo apresentou bons resultados. No entanto, para o regime acima da velocidade superficial de transição, a coalescência e a quebra das bolhas influenciam demasiadamente na área de transferência, dificultando a previsão das concentrações do traçador.

Wang *et al* (2004) e Sun *et al.* (2005) propõem um modelo para descrever a difusividade turbulenta de massa acoplada ao modelo proposto por Liu *et al.* (2000) com resultados satisfatórios para os perfis de velocidade e concentração, quando comparados com dados experimentais.

2.8 Análises Experimentais da Fluidodinâmica em Pratos de Destilação

A experimentação física em pratos perfurados de colunas de destilação é foco de muitas das pesquisas em processos de separação, e têm como objetivo compreender o comportamento das colunas de destilação. Destes trabalhos desenvolveram-se diversas expressões empíricas que correlacionam os principais parâmetros do escoamento aos sistemas químicos e às condições operacionais da coluna. É possível, assim, descrever com razoável concordância as características fenomenológicas em colunas de destilação. Nesta linha, procuram-se desenvolver trabalhos direcionados ao comportamento termodinâmico das misturas, como

equações e parâmetros que descrevem o equilíbrio e a compreensão do comportamento térmico, para obter dados dos coeficientes de transferência de calor e massa, e do desempenho da transferência de massa, culminando nas correlações de eficiência de colunas, de pratos e de componentes. Associadas a estes estudos surgiram, também, inúmeras equações que descrevem a área interfacial de transferência de calor e massa e a perda de carga nos estágios. E é neste último tema, perda de carga em pratos, que se dirige a atenção, visto que a perda de carga e suas propriedades associadas apresentam-se como importantes parâmetros de validação dos modelos aplicados. Pode-se, além do mais, destacar o fato de que esta análise permite aproximar o processo de destilação real através do estudo do sistema ar-água o que, por sua vez, torna possível a utilização de materiais que permitam ampla visualização dos fenômenos oriundos do escoamento líquido/vapor na construção da bancada experimental, além de permitir a utilização de sensores com custo relativamente baixo, pois o sistema ar-água não afeta química e mecanicamente os componentes do sistema de aquisição de dados.

Assim, a base para o desenvolvimento desta etapa do trabalho foram os trabalhos clássicos da literatura, que nortearam as ações da estruturação da metodologia para o alcance dos objetivos propostos nesta análise. Neste sentido, Bennett *et al.* (1983) e Colwell (1979) apresentaram um rigoroso estudo de experimentação e regressão de parâmetros para obtenção de correlações à que descrevem a altura de líquido claro, associada à perda de carga, e altura da dispersão. Colwell (1979) demonstrou que as principais correlações são sustentadas por pequenas variações da equação proposta por Francis, com base teórica, ou correlações estritamente empíricas, sem qualquer aporte teórico. Desta forma, propõem-se nesta etapa a análise experimental do escoamento gás-líquido em um prato perfurado de destilação, associando-a aos dados apresentados na literatura de perda de carga e de fração volumétrica média de líquido na dispersão (densidade de *froth*). As Tabelas 2.1 e 2.2 apresentam as principais condições experimentais de referência utilizados por Colwell (1979) que desenvolveu seus experimentos em um prato perfurado com diâmetro de 1,22 m, altura de represa de 51 mm, fração de área perfurada de 0,094 e diâmetro dos furos de 13 mm. Dois sistemas foram utilizados pelo autor: ar/água e ar/óleo Isopar-M. Os dados experimentais obtidos foram incorporados aos da literatura (Tabelas 2.1 e 2.2), para o desenvolver e avaliar as equações semi-empíricas baseadas na equação de Francis para o cálculo da altura de líquido claro e da fração volumétrica média de líquido. O autor executou testes de verificação das equações com os dados de referência e concluiu que os erros absolutos da equação de altura de líquido claro para pratos de seção retangular eram de 7 % e para fração volumétrica de 8%.

Tabela 2.1: Condições experimentais de referência para constituição de correlações para altura de líquido claro

Referência	Sistema	Velocidade superficial do vapor [m/s]	Massa específica do vapor [Kg/m ³]	Vazão Líquido x 10 ⁻³ [m ³ /ms]	Dimensão do prato [m]	Fração de área perfurada A _H /A _B	Altura da represa [mm]	Diâmetro do furo [mm]	Número de exp.
Foss and Gerster (1956)	ar/água	0,52 a 2,00	1,2	6,2 a 14,5	0,457 x 0,241	0,08, 0,106 0,0416	25, 51, 102	4,8	102
Brambilla (1969)	ar/água	0,39 a 0,96	1,2	1,5 a 7,5	0,914 x 0,241	0,10, 0,12	40	3, 4, 5	59
Gilbert (1959)	ar/água	0,58 a 1,16	1,2	2,1 a 4,3	0,15 x 0,186	0,0468	25, 51	4,8	6
Harada (1964)	ar/água	0,51 a 0,84	1,2	0,16 a 1,5	0,775 x 0,292	0,0538	30 a 100	2,5	47
Harris and Roper (1962)	ar/água	0,67 a 1,69	1,2	0,84 a 3,73	0,6 x 0,1	0,059	13 a 102	4,8	43
Nutter (1971)	ar/água	0,42 a 1,62	1,15	3,6, 7,3	0,305 diâmetro.	0,079	51	13	12
Colwell (1979)	ar/água	0,61 a 3,54	1,15	3,3 a 24	1,22 diâmetro	0,094	51	13	48
Thomas and Campbell (1967)	ar/ 55 %p glicerol em água	1,0 a 2,1	1,15	1,0 a 9,0	0,61 x 0,305	0,0971	76	3,2	-
Bernard and Sargent (1966)	i-pentano/ n-pentano	0,45 a 1,35	3,2	0,79 a 2,4	0,406 diâmetro	0,101	40, 80, 120	1,6	9
Rush and Stirba (1957)	vapor/ água	0,88 a 4,3	0,59	0,7 a 2,0	0,457 diâmetro	0,106	14	3,2	13

Fonte: adaptado de Colwell (1979)

Tabela 2.2: Condições experimentais de referência para constituição de correlações para a fração volumétrica média de líquido.

Referência	Sistema	Velocidade superficial do vapor [m/s]	Massa específica do vapor [Kg/m ³]	Vazão líquido x 10 ⁻³ [m ³ /ms]	Dimensão do prato [m]	Fração de área perfurada A_H/A_B	Altura da represa [mm]	Diâmetro do furo [mm]	Numero de exp.
Kuehler and Van Winkle (1969)	Metil-etil-cetona/tolueno	0,24 a 0,74	3,4	0,13 a 0,41	0,152 diâmetro	0,096	38, 76, 114	4	4
Nutter (1971)	ar/água	0,59 a 1,62	1,15	3, 6, 7,3	1,22 diâmetro	0,079	51	13	8
Bernard and Sargent (1966)	i-pentano/n-pentano	0,45 a 1,35	3,2	0,79 a 2,4	0,406 diâmetro	0,101	40, 80, 120	1,6	13
Harris and Roper (1962)	ar/água	0,67 a 1,69	1,2	0,84 a 3,73	0,305 diâmetro	0,059	13 a 102	4,8	43
Foss and Gerster (1956)	ar/água	0,52 a 2,00	1,2	6,2 a 14,5	0,914 x 0,241 0,457 x 0,241	0,0416, 0,08, 0,106	25, 51, 102	4,8	102
Gilbert (1959)	ar/água	0,58 a 1,16	1,2	2,1 a 4,3	0,775 x 0,292	0,0468	25, 51	4,8	6
Miller (1959)	ar/água	0,31 a 1,56	1,2	2,7 a 10,2	0,305 x 0,187	0,061	51, 89	22	71

Fonte: adaptado de Colwell (1979)

No entanto, as equações não apresentam bons resultados para pratos perfurados de seção cilíndrica em função, segundo o autor, da contração do comprimento da represa em relação a largura do prato e seus efeitos no perfil de velocidade, na entrada de líquido que, por sua vez, promove aumento na altura de líquido claro. No entanto, estes efeitos diminuem com o aumento do diâmetro do prato. Também são apresentadas correções das equações para os pratos com internos, com represas de entrada, regiões perfuradas obstruídas, chicanas de saída (*Splash Baffles*), etc.

As Tabelas 2.3 e 2.4 descrevem a comparação das correlações para altura de líquido

Tabela 2.3: Erros associados às correlações de altura de líquido claro.

Referência	Correlação	Módulo do erro relativo médio %
Equação de Francis	$h_{cl} = h_w + 6,65 \left(\frac{Q_L}{W} \right)^{\frac{2}{3}}$	97
Hutchinson apud Fair (1963)	$h_{cl} = C \left[h_w + 6,65 \left(\frac{Q_L}{W} \right)^{\frac{2}{3}} \right]$	32
Gerster apud Fair (1963)	$h_{cl} = 6,1 + 0,725h_w - 0,24h_w V_s (\rho_\beta)^{0,5} + 1,23 \left(\frac{Q_L}{W} \right)$	37
Hofhuis and Zuiderweg (1979)	$h_{cl} = 600,0 \left(\frac{Q_L}{W V_s} \left[\frac{\rho_\alpha}{\rho_\beta} \right]^{0,5} \right)^{\frac{1}{4}} (h_w)^{\frac{1}{2}} (d)^{\frac{1}{4}}$	16
Colwell (1979)	$h_{cl} = f_\alpha^{medio} h_w + 7,8 \left((f_\alpha^{medio})^{\frac{1}{2}} \frac{Q_L}{C_d W} \right)^{\frac{2}{3}}$ $C_d = 0,61 + 0,08 \frac{h_{cf}}{h_w} \quad \text{se} \quad \frac{h_{cf}}{h_w} \leq 8,135$ $C_d = 1,06 \left(1 + \frac{h_{cf}}{h_w} \right)^{1,5} \quad \text{se} \quad \frac{h_{cf}}{h_w} > 8,135$	7
Bennett et al. (1983)	$h_{cl} = f_\alpha^{medio} \left[h_w + C \left(\frac{Q_L}{W f_\alpha^{medio}} \right)^{0,67} \right]$ $C = 0,50 + 0,438 e^{-137,8 h_w}$	6

Onde: C é um fator de aeração; d é o diâmetro dos furos; C_d é o coeficiente de represa; h_{cf} é a altura da dispersão acima da represa.

Fonte: adaptado de Colwell (1979)

Tabela 2.4: Erros associados as correlações de fração volumétrica média de líquido.

Referência	A fração volumétrica média de líquido é definida como: $f_{\alpha}^{media} = \frac{1}{1+\eta}$	Módulo do erro relativo médio %
Azbel (1963)	$\eta = (Fr')^{\frac{1}{2}}$	42
Takahashi (1973)	$\eta = (1,3446Fr')^{\frac{1}{2}}$	47
Kawagoe (1976)	$\eta = 1,6(Fr')^{\frac{1}{3}} + 0,22Fr'$	15
Kim (1966)	$R = 1 + \left(\frac{Fr'}{6}\right) +$ $0,5 \left[\frac{Fr'}{2} + \frac{(Fr')^2}{6} + \frac{(Fr')^3}{108} + \left(\frac{(Fr')^2}{4} + \frac{(Fr')^3}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \right] -$ $0,5 \left[\frac{Fr'}{2} + \frac{(Fr')^2}{6} + \frac{(Fr')^3}{108} - \left(\frac{(Fr')^2}{4} + \frac{(Fr')^3}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \right]$ $\eta = \left[R \left(\frac{Fr'}{2}\right) \right]^{\frac{1}{3}}$	23
Hofhuis e Zuiderweg (1979)	$\eta = 10,6Fr^{0,27}$	11
Colwell (1979)	$\eta = 12,6Fr^{0,4} \left(\frac{A_H}{A_B}\right)^{-0,25}$	8
Bennett et al. (1983)	$f_{\alpha}^{medio} = e^{-12,55 \left(V_s \sqrt{\frac{\rho_{\beta}}{\rho_{\alpha} - \rho_{\beta}}} \right)^{0,91}}$	7

Fr é o número de Froude, definido como $Fr = \frac{\rho_{\beta} V_s^2}{(\rho_{\alpha} - \rho_{\beta}) g h_{cl}}$

Fr' é o número de Froude, modificado definido como $Fr' = \frac{V_s^2}{g h_{cl}}$

Fonte: adaptado de Colwell (1979)

claro e fração volumétrica média de líquido, respectivamente, testadas por Colwell (1979) em função do erro absoluto para um grupo de condições experimentais de referência.

Os módulos dos erros relativos médios, apresentado nas Tabelas 2.3 e 2.4, são calculados fazendo-se o inverso do número total de corridas experimentais vezes a somatória sobre as corridas experimentais, do módulo da diferença entre o valor predito e o valor real dividido pelo valor real. Verifica-se nas Tabelas 2.3 e 2.4, que a correlações propostas por Colwell (1979) apresentam erros absolutos inferiores às equações tradicionais e são as equações que

melhor representam a altura de líquido claro e a fração volumétrica média de líquido na dispersão. É importante observar nas equações de Colwell (1979), que a presença dos parâmetros geométricos (altura da represa, largura da represa e razão entre a área perfurada e a área de borbulhamento) possibilita identificar o impacto destes parâmetros sobre o comportamento do prato. A incorporação destes parâmetros é fundamental para a determinação da velocidade superficial de transição de regime que, por sua vez, tem influência sobre a fração volumétrica média de líquido (através do número de Froude). Desta forma, justifica-se que, além de número de dados experimentais e rigor no processo de regressão matemática, os parâmetros geométricos contribuem, de forma decisiva, para melhorar a capacidade das equações de Colwell (1979) de predizerem com maior precisão, as condições de perda de carga e fração volumétrica média de líquido na dispersão em pratos perfurados de destilação.

Outro trabalho que sustenta a proposta metodológica deste trabalho foi realizado por Bennett *et al.* (1983). Os autores destacam a não inclusão da tensão superficial sobre a perda de carga nas correlações desenvolvidas até então, pois não existiam dados com altura de represa inferiores a 25 mm, além de considerarem perfurações com grande diâmetro. No entanto, a perda de carga devido aos efeitos de tensão superficial, nestas situações, é relevante e deve ser considerada. Foram realizados testes da sensibilidade do sistema de aquisição de dados utilizando uma bancada experimental que consistia em um prato perfurado com perfurações de 1 e 3 mm de diâmetro, sem vertedor para que não houvesse entrada ou saída de líquido. Desta forma, pôde-se conhecer a altura de líquido claro sobre o prato por inspeção do volume de líquido adicionado ao sistema no início de cada experimento. Foram coletados dados de perda de carga total (devido a altura de líquido, devido as perfurações e devido a tensão superficial) além da medida pontual de perda de carga no seio da região de borbulhamento. A altura de líquido depende do local de medida e pode ser inferior a altura de líquido claro, pois a determinação da altura de líquido claro é baseada no volume total de líquido sobre o prato. Nas regiões próximas as paredes e em regiões sem perfurações, o líquido acumula-se o que implica em valores de perda de carga, no seio da região de borbulhamento, inferiores a perda de carga média do prato. Foram realizadas corridas experimentais com dois sistemas: ar/água e ar/solução aquosa de etileno glicol 80%p.

Os autores verificaram que a perda de carga, devido à tensão superficial, é independente da velocidade nos furos, como sugere a equação de Sterbacek¹⁰ e levemente dependente da altura de líquido claro. Os resultados também mostraram que para o Sistema 2, ar/ solução

¹⁰Sterbacek *et al.* (1967) apud Bennett *et al.* (1983), $h_{\sigma} = \frac{4\sigma}{g\rho a d}$

aquosa de etileno glicol 80%p., a perda de carga devido a tensão superficial é menor, o que era esperado, visto que a tensão superficial do Sistema 2 é inferior ao do Sistema 1, porém com valores significativamente inferiores ao predito na equação de Sterbacek. Outro importante parâmetro refere-se a dependência da equação de Sterbacek com a perda de carga por efeitos de tensão superficial ser proporcional ao inverso do diâmetro dos furos. Os resultados mostraram uma dependência inversamente proporcional a aproximadamente $d^{0,3}$, ou seja, muito pequena. Também, os autores verificaram que a perda de carga devido à coluna de líquido no seio da região de borbulhamento é inferior a altura de líquido claro, e tal diferença é linear e fortemente dependente da velocidade superficial do gás e da altura de líquido claro. No entanto, Sargent *et al.* (1964) apud Bennett *et al.* (1983), através de um balanço de quantidade de movimento, recomenda uma equação¹¹ para tal diferença. Esta equação, no entanto, apresenta uma dependência com o quadrado da velocidade superficial, não verificado pelos experimentos de Bennett *et al.* (1983) e, além disso, três vezes menor que o verificado experimentalmente. Desta forma, os autores sugerem que a altura de líquido claro deva ser estimada a partir da perda de carga total, da perda de carga pela passagem do vapor pelos furos e da perda de carga devido aos efeitos de tensão superficial.

A partir da análise rigorosa das aquisições e da avaliação de parâmetros do escoamento em pratos com diâmetro pequeno de furos, os autores desenvolvem uma bancada experimental com um prato perfurado de seção quadrada (0,152 x 0,61 m²) e observaram evidências fenomenológicas de perda de carga como função da altura de líquido claro sobre o pratos sem represas e com represas de até 25 mm e com perfurações de 1 e 3 mm. Foram variadas, além da altura da represa e do diâmetro dos furos a vazão de líquido e a velocidade superficial do vapor.

Foram incorporados aos dados experimentais obtidos um grupo de aproximadamente 300 conjuntos de dados de diversas fontes, com o intuito de desenvolver uma correlação que incorporasse todos os efeitos presentes em prato perfurado de destilação, ou seja, que leve em consideração os efeitos de coluna de líquido, de passagem do vapor pelas perfurações e da tensão superficial sobre a perda de carga do prato.

Os autores diferenciam seu trabalho em relação aos demais pelo fato da equação proposta não demandar medidas experimentais de altura de dispersão, que são realizadas através de inspeção visual e, assim, não introduzir na correlação os erros experimentais que, por ser ob-

¹¹Sargent *et al.* (1964) apud Bennett *et al.* (1983), $(h_{cl} - h_{lcl}) = \frac{\rho_B V_s}{\rho_{\alpha g}} (V_H - V_s)$

tidos por inspeção visual, eram grandes. Desta forma, o autor definiu uma altura de dispersão efetiva e, como consequência, a fração volumétrica média de líquido na dispersão efetiva. É então definida a fração volumétrica média de líquido na dispersão como uma função de grupos adimensionais que levam em consideração as condições operacionais e geométricas, além das propriedades físicas do sistema. Foram realizadas diversas análises de regressão de parâmetros em funções com grupos adimensionais e concluiu-se que a fração volumétrica média de líquido tem uma forte dependência com a massa específica da fase líquida e vapor e da velocidade superficial do vapor. Assim, diferente de Colwell (1979), os autores não levam em consideração as condições geométricas do prato na correlação de fração volumétrica média de líquido, pois os dados experimentais foram bem ajustados quando estes fatores foram excluídos da correlação.

A equação proposta para a altura de líquido claro é, assim como a equação de Colwell (1979), baseada na equação de Francis e é dependente da fração volumétrica média de líquido, da altura da represa, da raiz cúbica do quadrado da vazão de líquido e do coeficiente de represa. Este último parâmetro é função da altura da represa e tende a valores constantes para grande altura de represa. Assim, os autores concluíram que a correlação proposta, por não incorporar os erros experimentais devido a medidas observacionais, descreve a perda de carga em um prato perfurado de destilação com maior eficácia quando comparados com a correlação de Colwell (1979), com erros absolutos duas vezes menores do que aqueles observados pela correlação de Colwell (1979).

Outra conclusão de Bennett *et al.* (1983) relaciona-se a forma de obtenção dos dados de altura de líquido claro diretamente. Os experimentos realizados no prato sem fluxo de líquido, tendo, assim, a altura de líquido claro conhecida, mostraram a incapacidade de se realizar medidas de altura de líquido claro diretamente. Para superar este problema, os autores sugeriram que esta medida deva ser realizada por inferência da perda de carga total do prato, calculada utilizando a Equação 2.13.

$$h_T = h_{cl} + h_H + h_\sigma \quad (2.13)$$

onde h_{cl} é a perda de carga devido a coluna de líquido, h_H é a perda de carga devido a passagem do vapor pelas perfurações e h_σ é a perda de carga devido as forças de tensão superficial.

Bennett *et al.* (1983) sugeriram equações para os dois últimos termos da Equação 2.13,

$$h_H = \frac{a \rho_\beta V_H^2}{c_v^2 \rho_\alpha g} \quad (2.14)$$

onde a e c_v são constantes obtidas experimentalmente e V_H é a velocidade do gás nos furos,

$$h_\sigma = \frac{6\sigma^{\frac{2}{3}}}{1,27g^{\frac{2}{3}}\rho_\alpha \left(\frac{d}{\rho_\alpha - \rho_\beta}\right)^{\frac{1}{3}}} \quad (2.15)$$

onde σ é a tensão superficial e d é o diâmetro dos furos.

Esta última equação corrobora com as observação experimentais realizadas por Bennett *et al.* (1983) que afirmam que a perda de carga é função das tensões superficiais e é inversamente proporcional a raiz cúbica do diâmetro dos furos.

Mais recentemente Krishna *et al.* (1999) e van Baten e Krishna (2000) desenvolveram estudos experimentais para determinação da altura de líquido claro em uma coluna de seção quadrada de forma a verificar a dependência deste parâmetro com a velocidade superficial de gás, vazão de líquido e altura da represa, e compará-los com dados reconstituídos de campos de fração volumétrica obtidos pela solução de modelos de CFD. Os autores concluíram que os modelos de CFD apresentam boa concordância com a correlação de Bennett *et al.* (1983) mas apresentam valores acima daqueles oriundos da bancada experimental. Os autores concluíram que esta diferença é função da perda de carga devido à tensão superficial que, nas simulações é considerado o valor para o sistema ar/água puro enquanto que a unidade experimental pode incorporar erros devido à dificuldade em manter o sistema puro causando, assim, alterações no valor da tensão superficial.

2.9 Aspectos de investigação

Com base no levantamento bibliográfico e nos estudos realizados até então, é possível identificar alguns aspectos importantes para nortear os próximos passos deste trabalho de investigação científica:

- Diversos modelos de coeficiente de arraste são tratados na literatura, mas não há uma análise mais rigorosa para se determinar qual modelo representa melhor o arraste em pratos de destilação. As demais forças de interface são, em geral, desprezadas em

função do escoamento em pratos perfurados de destilação ser vigoroso e com isto o arraste se sobrepõe às demais forças interfaciais.

- Muitos trabalhos que tratam de sistemas multifluido sugerem um modelo tridimensional com o domínio físico conservado em sua totalidade, sem simplificações do tipo simetria ou perfil normal e uniforme na entrada. A sugestão é estender a geometria para que os efeitos geométricos sejam considerados em sua totalidade.
- Em geral existem poucos dados experimentais que possam ser utilizados na validação dos modelos matemáticos que assumem variações espaciais. Assim, necessita-se de estudos experimentais que forneçam dados capazes de serem utilizados na validação destes modelos.
- Os efeitos de transferência de calor sobre a transferência de massa foram pouco estudados e tornam-se um dos focos deste trabalho de investigação científica.
- A transferência de massa é muito trabalhada em sistemas cujos componentes são transferidos de um gás puro para um líquido, ou seja, sistemas de diluição infinita. Nestas situações é possível simplificar os modelos termodinâmicos de equilíbrio na interface utilizando-se a lei de Henry. No entanto, em sistemas concentrados não é possível admitir estas simplificações e, portanto, um modelo mais completo para a concentração na interface deve ser aplicado.
- Os sistemas multicomponentes, onde há transferência de um ou mais componentes da fase líquida para a fase vapor, e de um ou mais componentes da fase vapor para a fase líquida, simultaneamente, são complexos e pouco estudados.
- Analisar o comportamento do sistema líquido/vapor de um prato perfurado de destilação, com base no desempenho de separação, por técnicas de CFD.

2.10 Conclusões do Capítulo II

O estado da arte em modelagem e simulação aplicadas a sistemas multifásicos e, em especial, a sistemas gás-líquido apresentada neste Capítulo, fornece os subsídios necessários para o desenvolvimento deste trabalho de tese de doutorado. É possível verificar que a implementação das técnicas de CFD a sistemas líquido/vapor de colunas de destilação estão

em fase incipiente mas, no entanto, as perspectivas da aplicação da técnica para destilação mostram-se muito interessantes, pois este processo representa grande incorporação de valor aos produtos e, em geral, apresenta altos custos. Desta forma, qualquer avanço no sentido de minimizar o consumo de energia representa grande retorno.

Como contribuição desta tese de doutorado pode-se destacar o desenvolvimento de uma metodologia experimental e numérica que suporte estudos de projeto e otimização de pratos perfurados de destilação e, ainda, agregar dados experimentais aos já existentes, afim de verificar e validar os modelos e métodos. Ampliar a compreensão da fenomenologia dos escoamentos multifásicos com transferência de calor e massa simultâneos em regime de turbulência presentes em pratos de destilação e demonstrar através de estudos de casos que a técnica de CFD é uma importante ferramenta na concepção, projeto e otimização de processos e equipamentos industriais. Estas contribuições são derivadas da identificação dos pontos de investigação que delinearão o progresso deste trabalho de investigação científica.

3 *MODELAGEM FENOMENOLÓGICA*

Este capítulo tem como principal objetivo sistematizar e organizar um modelo matemático para estudos de CFD, capaz de prever a dinâmica de escoamentos multifásicos e multicomponentes em ocasiões que ocorram transferência simultânea de quantidade de movimento, calor e massa, com ênfase para o escoamento gás-líquido como aqueles que ocorrem em colunas de bolhas, colunas de destilação e demais sistemas de contato gás-líquido. Neste sentido, foi realizada uma revisão detalhada dos balanços de conservação das propriedades conserváveis do sistema multifásico e multicomponente, e das principais equações constitutivas necessárias para o fechamento do modelo.

3.1 *Introdução à Modelagem Fenomenológica*

O avanço na modelagem matemática segue uma ordem cronológica e de complexidade, onde os efeitos fenomenológicos mais complexos vão sendo incorporados aos modelos, de acordo com o paradigma cartesiano que estabelece uma maior aproximação da realidade com a redução da escala de espaço-tempo. Neste sentido, pode-se citar três principais abordagens, onde considera-se:

- a)* O sistema é contínuo e as variações das suas propriedades conserváveis são observáveis somente no domínio do tempo;
- b)* O sistema é contínuo e as variações das suas propriedades conserváveis são observáveis no domínio do espaço-tempo;
- c)* O sistema é discreto (descontínuo) com variações no domínio do espaço-tempo.

A hipótese do contínuo, caracterizada pela substituição da estrutura molecular real por um meio hipotético contínuo (Slattery (1972), Bird *et al.* (1960)), é assumida nos itens *a* e *b*. Já a modelagem molecular desconsidera esta hipótese, avaliando todas as interações moleculares envolvidas em cada fenômeno.

Os modelos que não assumem variações no espaço, somente o tempo aparece como uma variável independente dos balanços gerais, têm a solução matemática com características bastante conhecidas e difundidas, e levam, também, a perda de características importantes do sistema. A recuperação destas informações é promovida por informações de natureza empírica ou as chamadas equações constitutivas, necessárias para o fechamento dos modelos.

A modelagem que considera as variações espaciais e temporais das propriedades conserváveis, por sua vez, tem suas equações baseadas na conservação de massa, energia e quantidade de movimento no domínio do espaço-tempo. Esta modelagem abrange quase todos os efeitos fenomenológicos requerendo poucas equações constitutivas mas, em contrapartida, reflete em um aumento na complexidade matemática das equações.

Já os modelos moleculares desconsideram a hipótese da continuidade da matéria e suas equações são baseadas nas interações moleculares existentes no mundo subatômico. A Tabela 3.1 apresenta a comparação entre as três abordagens com respeito as suas características matemáticas.

A fluidodinâmica computacional (CFD), por sua vez, faz uso da abordagem onde as propriedades variam no espaço e no tempo em seus modelos e tem um grande potencial para caracterizar os fenômenos impossíveis ou de difícil medição e prever variáveis macroscó-

Tabela 3.1: Características dos diferentes níveis de observação dos fenômenos da natureza

Nível de observação (Abordagem)	Matéria	Base científica	Característica matemática
Variações temporais	Contínua	Empírica	Equações algébricas e equações diferenciais ordinárias de primeira ordem
Variações espaciais e temporais	Contínua	Teóricas e empíricas	Equações diferenciais ordinárias e parciais
Molecular	Discreta	Teórica	Equações integro-diferenciais

picas que podem ser inferidas por reconstituição dos dados de campo. As variáveis mensuráveis, tais como a perda de carga, temperatura da fase propriamente dita, eficiência global dos sistemas, podem ser parâmetros calculados a partir das informações obtidas pela solução dos modelos de CFD. A reconstituição de variáveis macroscópicas tem, também, papel importante nas inferências dos modelos e métodos adotados.

3.2 Hipóteses Simplificadoras

Para se descrever as equações de conservação para escoamentos multifásicos e multi-componentes em nível microscópico é necessário que duas hipóteses simplificadoras sejam estabelecidas: a hipótese do contínuo e a da interpenetrabilidade das fases.

- Hipótese do contínuo: no domínio do contínuo, todas as fases são consideradas como matéria contínua, negligenciando-se todas as características moleculares da matéria.
- Hipótese da interpenetrabilidade das fases: esta hipótese completa a anterior, pois a análise é feita em uma escala longe da macroscópica, porém, ainda no nível do contínuo, onde as fases ocupam o mesmo volume no espaço e, ao mesmo tempo, através da interpenetração. Desta forma, as propriedades conserváveis de uma fase coexistem com suas análogas de outras fases em um mesmo ponto do espaço-tempo.

3.3 Definições

Para a descrição da modelagem matemática, algumas definições são necessárias para a compreensão das características matemáticas e físicas do modelo. Sendo assim, apresentam-se abaixo definições relevantes e intrínsecas a modelagem:

- Fluidos Reais: são aqueles que possuem comportamento fluidodinâmico natural, como os líquidos e gases.
- Fluidos Hipotéticos: aqueles que adquirem comportamento fluidodinâmico devido às interações físico-químicas com os fluidos reais. Por exemplo, partículas sólidas presentes numa corrente de gás.

- Fração Volumétrica: representa a fração do volume ocupado por uma determinada fase genérica em relação ao volume total.
- Modelo Multifásico: contém fluidos reais e hipotéticos que estabelecem entre si transferência de massa, quantidade de movimento e calor, bem como admitem sua interpenetrabilidade.
- Enfoque Euleriano: considera-se que as variações numa porção de fluido sejam observadas por um observador fixo no espaço.
- Enfoque Lagrangiano: considera-se que o observador se move com a mesma velocidade de uma porção contínua de fluido.

Estas definições serão aplicadas ao longo da descrição do modelo.

3.4 Equação Geral de Conservação

Definidos os conceitos e assumidas as hipóteses do contínuo e da interpenetrabilidade das fases, pode-se, desde já, apresentar-se a equação geral de conservação através do princípio geral da conservação descrita por Bird *et al.* (1960):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + S_\phi \quad (3.1)$$

onde,

$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) \equiv$ representa o acúmulo da propriedade ϕ no volume de controle;

$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) \equiv$ representa o transporte convectivo da propriedade ϕ que atravessa o volume de controle;

$\nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) \equiv$ representa o transporte difusivo da propriedade ϕ que atravessa o volume de controle;

$S_\phi \equiv$ representa a transformação/geração da propriedade ϕ no volume de controle;

De forma análoga, pode-se, agora, descrever as equações de conservação das propriedades conserváveis para sistemas multifásicos, multicomponente com transferência simultânea de calor, massa e quantidade de movimento.

3.5 Equações de Conservação para Sistemas Multifásicos

Particularizando a equação geral de conservação para o escoamento multifásico e multicomponente, tendo em vista a conservação da massa total, da quantidade de movimento, da energia e das espécies químicas, pode-se estabelecer o modelo matemático a ser empregado neste trabalho. Assim, apresenta-se a seguir a descrição matemática das equações de conservação para a k ésima fase:

- Conservação da massa total para a k ésima fase:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k) + \nabla \cdot (f_k \rho_k \mathbf{v}_k) = S_k + \sum_{k \neq j}^{n_f} M_{kj} \quad (3.2)$$

onde:

$f_k \equiv$ é a fração volumétrica da k ésima fase;

$\rho_k \equiv$ é a massa específica da k ésima fase;

$\mathbf{v}_k \equiv$ é o vetor velocidade da k ésima fase;

$S_k \equiv$ representa uma fonte de massa da k ésima fase;

$M_{kj} \equiv$ é a taxa de transferência de massa entre as fases k e j por unidade de volume do sistema.

- Conservação de Quantidade de Movimento para a k ésima fase:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k \mathbf{v}_k) + \nabla \cdot (f_k \rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) = & -f_k \nabla P_k + \nabla \cdot (f_k \mathbf{T}_k) + \\ & \sum_{k \neq j}^{n_f} (M_{kj}^+ \mathbf{v}_j - M_{jk}^+ \mathbf{v}_k) + \mathbf{S}_{vk} + \sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{F}_{kj} + f_k \rho_k \mathbf{g} \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde:

$\mathbf{T}_k \equiv$ é o tensor tensão da k ésima fase;

$P_k \equiv$ é a pressão na k ésima fase;

$\mathbf{S}_{vk} \equiv$ representa a fonte de quantidade de movimento da k ésima fase;

$\sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{F}_{kj} \equiv$ representa a transferência de quantidade de movimento entre as fases;

$(M_{kj}^+ \mathbf{v}_j - M_{jk}^+ \mathbf{v}_k) \equiv$ representa a transferência de quantidade de movimento induzida pela transferência de massa entre as fases;

$\mathbf{g} \equiv$ é o campo gravitacional.

Para um fluido Newtoniano com ρ_k e μ_k , o tensor tensão pode ser escrito como:

$$\mathbf{T}_k = \mu_k \left[\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_k)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}_k) \boldsymbol{\delta} \right]$$

com μ_k sendo a viscosidade molecular da k ésima fase;

- Conservação do componente A para a k ésima fase:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k y_{Ak}) + \nabla \cdot (f_k \rho_k \mathbf{v}_k y_{Ak}) = \nabla \cdot (f_k \rho_k D_{Ak} \nabla y_{Ak}) + S_{Ak} + \sum_{k \neq j}^{n_f} Y_{kj}^A + \sum_{k \neq j}^{n_f} (M_{kj}^+ y_{Aj} - M_{jk}^+ y_{Ak}) \quad (3.4)$$

onde,

$y_{Ak} \equiv$ é a fração mássica do componente A na k ésima fase;

$D_{Ak} \equiv$ é a difusividade efetiva do componente a na k ésima fase;

$S_{A\alpha} \equiv$ representa a fonte do componente A na k ésima fase;

$\sum_{k \neq j}^{n_f} Y_{kj}^A \equiv$ é a transferência das espécies químicas entre as fases;

$(M_{kj}^+ y_{Aj} - M_{jk}^+ y_{Ak}) \equiv$ representa a quantidade transferida do componente A da fase k para fase j pelos efeitos de transferência de massa total.

Os dois últimos termos representam a transferência de massa entre as fases, o primeiro devido a diferença de potencial químicos entre as fases e o segundo devido a quantidade líquida de massa total transferida da fase k para fase j . Para o caso onde a quantidade de massa total que sai da fase k para fase j é igual a quantidade de massa total que sai da fase j para fase k , o segundo termo se anula. No entanto ainda há transferência de espécie química entre as fases devido a diferencia de potencial químico.

- Conservação de energia para a k ésima fase:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k h_k) + \nabla \cdot (f_k \rho_k \mathbf{v}_k h_k) = \nabla \cdot (f_k \lambda_k \nabla T_k) + \sum_{k \neq j}^{n_f} (M_{kj}^+ h_{js} - M_{jk}^+ h_{ks}) + \sum_{k \neq j}^{n_f} Q_{kj} + S_{Ek} \quad (3.5)$$

onde,

$h_k \equiv$ é a entalpia total da k ésima fase;

$T_k \equiv$ é a temperatura da k ésima fase;

$\lambda_k \equiv$ é a condutividade térmica efetiva da k ésima fase;

$S_{Ek} \equiv$ representa fontes externas de calor sobre a k ésima fase;

$\sum_{k \neq j}^{n_f} Q_{kj} \equiv$ é a transferência de calor entre as fases;

$(M_{kj}^+ h_{ks} - M_{jk}^+ h_{js}) \equiv$ representa a transferência de calor induzida pela transferência de massa entre as fases;

h_{ks} e $h_{js} \equiv$ são as entalpias das fases k e j na condição da interface, respectivamente.

- Equações de restrição

- Restrição de volume

$$\sum_{k=1}^{n_f} f_k = 1. \quad (3.6)$$

- Restrição de pressão

Normalmente, todas as fases compartilham o mesmo campo de pressão, ou seja:

$$P_k = P \quad \text{para todo} \quad k = 1, \dots, n_f. \quad (3.7)$$

- Restrição de massa

$$\sum_{A=1}^{n_c} y_{Ak} = 1 \quad (3.8)$$

onde n_c é o número de componentes.

Em princípio, as equações descritas acima descrevem qualquer tipo de escoamento multifásico e multicomponente. No entanto, são consideradas equações instantâneas e, sabendo que para escoamentos com alto número de Reynolds, existem flutuações no campo de velocidades que, em geral, ocorrem em diversas escalas de tempo e espaço e que estas escalas são muito menores que o menor volume finito utilizado nas análises numéricas, há a necessidade de tratar estatisticamente as equações instantâneas e transformá-las em equações médias. Neste caso, por exemplo, a propriedade conservável pode ser dividida em dois componentes; uma média e um componente flutuante.

$$\phi_k = \overline{\phi_k} + \phi'_k \quad (3.9)$$

onde o componente médio é dado por,

$$\overline{\phi_k} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi_k dt \quad (3.10)$$

Assim, é necessário modificar as equações instantâneas de transporte, introduzindo os componentes médios e suas flutuações. Substituindo-se a propriedade instantânea, ϕ_k , por seus componentes $\overline{\phi_k}$ e ϕ'_k na Equação 3.1 descrita para escoamentos multifásicos e rearranjando tem-se a Equação 3.11¹²:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k \phi_k) + \nabla \cdot (f_k \rho_k \mathbf{v}_k \phi_k) = \nabla \cdot \left[f_k \left(\Gamma_k \nabla \phi_k - \rho_k \overline{\mathbf{v}'_k \phi'_k} \right) \right] + S_{\phi_k}. \quad (3.11)$$

Nota-se a presença de um termo adicional que representa o fluxo da propriedade conservável, ϕ_k , devido a sua flutuação. Este termo é também chamado de fluxo de Reynolds. É fácil perceber que a equação da continuidade não apresenta termo adicional algum, pois não são possíveis flutuações de massa no nível da hipótese do contínuo, adotada para o balanço das propriedades sobre um elemento de volume ΔV . Já nas equações de movimento aparece o termo denominado de Tensor de Reynolds,

$$\rho_k \overline{\mathbf{v}'_k \mathbf{v}'_k} \quad (3.12)$$

Para a equação de conservação de energia, o termo devido às flutuações é dado por:

$$\rho_k \overline{\mathbf{v}'_k h'_k} \quad (3.13)$$

Além do termo acima, a propriedade média conservável no balanço de energia (entalpia total) é dada por:

$$h_{tot,k} = h_k + \frac{1}{2} \mathbf{v}_k^2 + k_k \quad (3.14)$$

onde k_k é a energia cinética turbulenta. Assim, a energia total agrupa uma contribuição de energia cinética turbulenta associada às flutuações de velocidade dado por:

$$k_k = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{v}'_k^2} \quad (3.15)$$

¹²Na equação 3.11 substitui-se a indicação de propriedade média, $\overline{\phi}$, simplesmente por ϕ

Para a equação de conservação de espécie química, o termo devido às flutuações é dado por:

$$\overline{\rho_k \mathbf{v}'_k y'_{Ak}} \quad (3.16)$$

Os demais termos adicionais que aparecem quando se aplica a média temporal às equações de conservação foram negligenciados pois são pouco representativos frente aos fluxos de Reynolds. Desta forma, como se pode perceber, serão necessárias equações adicionais para os tensores e os fluxos de Reynolds.

3.6 Equações Constitutivas para o Fechamento do Modelo

Para o fechamento do modelo, que possibilita uma solução numérica, é necessário definir alguns termos apresentados no modelo geral por equações constitutivas. Estes termos estão diretamente relacionados às transferências de massa, de quantidade de movimento, de calor e espécies químicas entre as fases e também aos termos adicionais que aparecem no modelo pela aplicação da média temporal. Desta forma, apresenta-se a seguir as equações constitutivas para cada um destes termos.

3.6.1 Equações constitutivas para transferência de quantidade de movimento entre as fases

São muitos os efeitos sobre a transferência de quantidade de movimento entre as fases, alguns com maior intensidade e outros com menor. Pode-se dizer, então, que a força total exercida na interface da fase k devido à presença da fase j , e considerando um sistema bifásico onde a fase α é a fase contínua e a fase β é a fase dispersa, pode ser escrita como:

$$\sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{F}_{kj} = \mathbf{F}_{\alpha\beta} \quad \text{e} \quad \mathbf{F}_{\alpha\beta} = -\mathbf{F}_{\beta\alpha}, \quad (3.17)$$

e com alguns dos efeitos físicos que podem criar uma força de interface tem-se:

$$\mathbf{F}_{\alpha\beta} = \mathbf{F}_{\alpha\beta}^D + \mathbf{F}_{\alpha\beta}^L + \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{LUB} + \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{VM} + \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{TD} + \dots \quad (3.18)$$

onde,

$\mathbf{F}_{\alpha\beta}^D \equiv$ força de interface devido ao arraste;

$\mathbf{F}_{\alpha\beta}^L \equiv$ força de sustentação;

$\mathbf{F}_{\alpha\beta}^{LUB} \equiv$ força de lubrificação;

$\mathbf{F}_{\alpha\beta}^{VM} \equiv$ força de massa virtual;

$\mathbf{F}_{\alpha\beta}^{TD} \equiv$ força de dispersão turbulenta;

As expressões acima são forças que atuam na interface das fases. No entanto, é discutido aqui somente a força de arraste, pois esta destaca-se por possuir maior importância para os fenômenos associados ao escoamento líquido/vapor em pratos perfurados de destilação, esquematizado na Figura 1.1, foco deste trabalho de tese de doutorado.

Força de Arraste A força de arraste é a força exercida pelo fluido sobre um corpo imerso ou pelo corpo imerso sobre um fluido.

A força de arraste total pode ser escrita como:

$$\mathbf{F}_{\alpha\beta}^D = \beta_{\alpha\beta} (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha) \quad (3.19)$$

com $\beta_{\alpha\alpha} = 0$ e $\beta_{\alpha\beta} = \beta_{\beta\alpha}$.

Para partículas esféricas, o coeficiente $\beta_{\alpha\beta}$ pode ser determinado analiticamente. A área projetada por uma única partícula, na direção do escoamento, A_p , e o volume da partícula, V_p , são calculados conforme segue:

$$A_p = \pi \frac{d^2}{4} \quad ; \quad V_p = \pi \frac{d^3}{6} \quad (3.20)$$

onde, d é o diâmetro da partícula. O número de partículas por unidade de volume, n_p , é dado por:

$$n_p = \frac{f_\beta}{V_p} = \frac{6f_\beta}{\pi d^3}. \quad (3.21)$$

Como demonstrado em trabalhos anteriores (Bird *et al.* (1960)), o arraste sofrido por uma partícula escoando em uma fase contínua é dado por:

$$\mathbf{F}_p = -\frac{1}{2} C_D \rho_\alpha A_p |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha). \quad (3.22)$$

Então, a força total de arraste por unidade de volume é avaliada como:

$$\mathbf{F}_{\alpha\beta}^D = -n_p \mathbf{F}_p = -\frac{3}{4} \frac{f_\beta \rho_\alpha}{d} C_D |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha). \quad (3.23)$$

Comparando-se as Equações 3.19 e 3.23, tem-se:

$$\beta_{\alpha\beta} = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d} f_\beta \rho_\alpha |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| \quad (3.24)$$

onde, C_D é o coeficiente de arraste na interface.

O coeficiente de arraste, C_D , depende do regime de escoamento e é função da intensidade do contato entre as fases α e β . O coeficiente de arraste como função do número de Reynolds baseado na velocidade relativa é conhecido por curva de arrasto e depende da fase discreta ser deformável ou não.

- Fase discreta não deformável

Segundo tratamento convencional, o coeficiente de arraste para partículas esféricas não deformáveis, em sistemas diluídos, pode ser calculado pelas expressões:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Região Viscosa} \\ \text{Para } Re_{\alpha\beta} \ll 1 \Rightarrow C_{D(Esfera)} = \frac{24}{Re_{\alpha\beta}} \\ \\ \text{Região de Transição – Schiller Naumann(1933)} \\ \text{Para } 0,1 < Re_{\alpha\beta} < 1000 \Rightarrow C_{D(Esfera)} = \frac{24}{Re_{\alpha\beta}} (1 + 0,15 Re_{\alpha\beta}^{0,687}) \\ \\ \text{Região inercial} \\ \text{Para } 1000 < Re_{\alpha\beta} < 1,0 - 2,0 \times 10^5 \Rightarrow C_{D(Esfera)} = 0,44 \end{array} \right. \quad (3.25)$$

onde,

$$Re_{\alpha\beta} = \frac{\rho_\alpha |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| d_\beta}{\mu_\alpha} \quad (3.26)$$

- Fase discreta deformável

Para se obter o coeficiente de arraste de bolhas escoando em um fluido contínuo é necessário conhecer os fenômenos envolvidos em tais escoamentos. Ao se liberar uma bolha

(ar por exemplo) em um fluido contínuo (água), os primeiros momentos descrevem a partícula como uma esfera perfeita, ou quase. Na medida em que a bolha ascende, dependendo do seu tamanho a bolha deforma para a forma de um elipsóide e, posteriormente, na forma de chapéu, “CAP”. Este comportamento tem como consequência a mudança no coeficiente de arraste, pois a área projetada na direção do fluxo é diferenciada. Desta forma, é possível concluir que o $Re_{\alpha\beta}$ não deva ser o único parâmetro para se definir o regime de escoamento das bolhas em um fluido contínuo.

Para o regime “CAP” o coeficiente de arraste pode ser aproximado utilizando-se a Equação 3.27 (CFX-4.4 User Guide (2001)).

$$C_{D(CAP)} = \frac{8}{3}. \quad (3.27)$$

Para o regime elipsóide, o coeficiente de arraste é praticamente constante, independente do $Re_{\alpha\beta}$, mas dependente da forma da partícula. Um parâmetro adimensional que mede a razão entre as forças gravitacionais e as forças de tensão superficial é descrito na Equação 3.28.

$$E_o = \frac{\mathbf{g}(\rho_\alpha - \rho_\beta) d^2}{\sigma_{\alpha\beta}} \quad (3.28)$$

onde, E_o é o número de Eötvös, \mathbf{g} é a aceleração gravitacional, $\sigma_{\alpha\beta}$ é a tensão superficial entre as fases.

A equação de Ishii e Zuber (1979) para o cálculo do coeficiente de arraste é função de número de Eötvös e é dada por:

$$C_{D(Elipse)} = \frac{2}{3} E_o^{1/2}. \quad (3.29)$$

Normalmente, faz-se a análise de valores de C_D do regime “CAP”, do regime elipsóide e da partícula não deformável para identificar o regime do escoamento (Lehr *et al.*, 2002), ou seja,

$$C_D = \max \left\{ C_{D(Esfera)}, \min \left[C_{D(Elipse)}, C_{D(CAP)} \right] \right\} \quad (3.30)$$

No entanto, esta metodologia para o cálculo do coeficiente de arraste é baseada em uma única bolha escoando através de um líquido, o que pode causar erros na predição de escoamentos com intenso borbulhamento. Além disso, autores como Decker (2003) e Ropelato (2004) destacam a descontinuidade na curva de arraste gerada por equações particulares,

para cada regime. Isso, segundo os autores, pode levar a problemas de natureza numérica, tais como instabilidade da solução e atraso na dinâmica do escoamento.

Krishna *et al.* (1999a) propuseram uma correlação para o coeficiente de arraste para regimes de escoamento com intenso borbulhamento, como o caso específico de pratos perfurados de destilação. A Equação 3.31 apresenta esta definição:

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{\rho_\alpha - \rho_\beta}{\rho_\alpha} g d_p \frac{1}{|\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha|^2} \quad (3.31)$$

onde g é a aceleração da gravidade, $|\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha|$ é a velocidade relativa entre as fases e pode ser estimada como função da velocidade superficial do gás, V_S , e a fração de volume média do gás na região de borbulhamento, ou seja,

$$|\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| = \frac{V_S}{f_\beta^{medio}}$$

com,

$$V_S = \frac{Q_\beta}{A_B}$$

onde Q_β é a vazão de vapor nas condições de operação e A_B é a área de borbulhamento.

Para a o cálculo da fração de volume médio do gás, pode-se recorrer à correlação de Bennett *et al.* (1983), que a expressa como função das propriedades físicas das fases e da velocidade superficial do vapor,

$$f_\beta^{medio} = 1 - \exp \left[-12,55 \left(V_S \sqrt{\frac{\rho_\beta}{\rho_\alpha - \rho_\beta}} \right)^{0,91} \right] \quad (3.32)$$

A estratégia acima foi apresentada por van Baten e Krishna em 2000. Aliado a estratégia de Baten e Krishna (2000), pode-se calcular a fração volumétrica média de líquido pela equação proposta por Colwell (1979), que incorpora além das propriedades físicas e da velocidade superficial do gás, os efeitos geométricos e operacionais através da relação entre área total dos furos e a área de borbulhamento,

$$f_\beta^{medio} = 1 - \frac{1}{1 + 12,6 \left[\left(\frac{\rho_\beta}{\rho_\alpha - \rho_\beta} \right) \frac{V_S^2}{g h_{cl}} \right]^{0,4} \left(\frac{A_H}{A_B} \right)^{-0,25}} \quad (3.33)$$

onde A_H é a área total dos furos e h_{cl} é a altura de líquido claro calculado a cada passo de integração.

Lehr *et al.* (2002), Spicka *et al.* (2001), Delnoij *et al.* (1997, 1999), Krishna e van Baten (2001), entre outros, apresentaram diversas equações constitutivas para o cálculo do coeficiente de arraste para partículas deformáveis e não deformáveis. Em geral, essas relações foram geradas e testadas para escoamentos particulares e com faixas de validade bem restritas que ainda não foram testadas para o escoamento em pratos de destilação.

3.6.2 Equações constitutivas para transferência de calor entre fases

De forma análoga a transferência de quantidade de movimento, o termo de transferência de energia entre fases, Q_{kj} , pode ser definido como:

$$\sum_{k \neq j}^{n_f} Q_{kj} = \sum_{k \neq j}^{n_f} h_{kj} A_{kj} (T_j - T_k) \quad (3.34)$$

onde h_{kj} é o coeficiente global de transferência de calor, A_{kj} é a área interfacial e T_k, T_j são as temperaturas das fases k e j respectivamente. Para um sistema bifásico com a fase α sendo a fase contínua e a fase β a fase discreta têm-se:

$$\sum_{k \neq j}^{n_f} Q_{kj} = Q_{\alpha\beta} \quad \text{com} \quad Q_{\alpha\beta} = -Q_{\beta\alpha} \quad (3.35)$$

Define-se, ainda, o coeficiente global volumétrico de transferência de calor como:

$$C_{\alpha\beta}^h = h_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} \quad (3.36)$$

Equações constitutivas para coeficiente global de transferência de calor Para uma partícula esférica, a área interfacial por unidade de volume entre uma fase contínua (α) e uma discreta (β) é expressa pela seguinte relação:

$$A_{\alpha\beta} = \frac{6f_\beta}{d}. \quad (3.37)$$

Pode-se definir o grupo adimensional, número de Nusselt, para a interface entre as fases α e β como (Bird *et al.* (1960)):

$$Nu_{\alpha\beta} = \frac{h_{\alpha\beta} d}{\lambda_\alpha} \quad (3.38)$$

onde $Nu_{\alpha\beta}$ é o número de Nusselt, λ_α é a condutividade térmica da fase contínua e d é o diâmetro médio das partículas.

Generalizando-se a expressão acima para qualquer interface, o tratamento da transferência de calor entre uma fase contínua e uma fase dispersa pode ser escrita como uma função do número de Nusselt na interface, que pode ser calculado como (Bird *et al.* (1960)):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Regime laminar,} \\ Nu_{\alpha\beta} = 2,0; \\ \\ \text{Regime turbulento (Ranz – Marshan (1952)),} \\ Nu_{\alpha\beta} = 2,0 + 0,6Re_{\alpha\beta}^{0,5} Pr_{\alpha\beta}^{0,3} \quad \text{para } 0 \leq Re_{\alpha\beta} \leq 200 \quad \text{e } 0 \leq Pr_{\alpha} \leq 250 \end{array} \right. \quad (3.39)$$

com,

$$Pr_{\alpha} = \frac{\mu_{\alpha} C_{p\alpha}}{\lambda_{\alpha}} \quad (3.40)$$

onde $C_{p\alpha}$ é a capacidade calorífica da fase contínua e λ_{α} é a condutividade térmica.

3.6.3 Equações constitutivas para transferência de massa entre fases

Como visto anteriormente, a taxa líquida de massa por unidade de volume que se desloca da fase k para a fase j para um sistema bifásico com uma fase contínua, α , e uma fase discreta, β , pode ser escrita como:

$$\sum_{k \neq j}^{n_f} M_{kj} = M_{\alpha\beta} \quad (3.41)$$

onde, $M_{\alpha\beta}$ é a taxa de transferência de massa por unidade de volume que passa da fase β para fase α , com

$$M_{\alpha\beta} = -M_{\beta\alpha}. \quad (3.42)$$

Para reconhecer a direção do fenômeno de transferência de massa é conveniente expressar $M_{\alpha\beta}$ como,

$$M_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}^+ - M_{\beta\alpha}^+ \quad (3.43)$$

sendo $M_{\alpha\beta}^+ > 0$ e $M_{\beta\alpha}^+ > 0$. Estes termos representam a taxa mássica positiva por unidade de volume da transferência de massa da fase β para a fase α e da fase α para a fase β , respectivamente.

Para o fenômeno de transferência de massa é conveniente expressar $M_{\alpha\beta}$ em termos da taxa de transferência de massa, ou seja:

$$M_{\alpha\beta} = \dot{m}_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} \quad (3.44)$$

onde, $\dot{m}_{\alpha\beta}$ é a taxa mássica por unidade de área interfacial que cruza a interface a partir da fase β para fase α .

É possível afirmar que a transferência de massa entre as fases acarretará em quantidades adicionais de transferência das propriedades conserváveis entre as fases ($\mathbf{v}_k, h_k, y_{Ak}$, etc). Isto implica que o fluxo da propriedade conservável, ϕ_k , de uma fase k para uma fase j pode ser definido como:

$$S_k = \sum_{k \neq j}^{n_c} \left(M_{kj}^+ \phi_j - M_{jk}^+ \phi_k \right). \quad (3.45)$$

Este termo é descrito nas equações de conservação detalhadas anteriormente. A taxa mássica por unidade de volume por unidade de área interfacial, $\dot{m}_{\alpha\beta}$, poderá ser fixado ou determinado por equações constitutivas.

Note que para o processo de transferência de massa entre as fases em pratos de destilação, a taxa mássica líquida que atravessa a interface pode ser assumido como zero, ou seja, os fenômenos de condensação e vaporização se equilibram. No entanto, a taxa líquida das propriedades devido a vaporização e condensação não é zero pois, como por exemplo, a entalpia de vaporização e condensação não são as mesmas. Isto implica em uma taxa líquida de transferência de energia entre as fases, devido a transferência de massa, diferente de zero. De qualquer forma, toma-se como hipótese simplificadora deste trabalho, pequena a influência do movimento de massa total entre as fases sobre a conservação das propriedades e, portanto, negligencia-se o termo de transferência de massa total entre as fases nas equações de conservação, assumindo-os zero. Sabe-se que esta condição não é verdadeira, como sugere o exemplo acima, mas torna-se uma hipótese válida quando os gradientes de temperatura e fração mássica dos componentes nas fases são pequenos, caso em um prato de destilação.

3.6.4 Equações constitutivas para transferência de espécies químicas entre fases

Assim como o tratamento da transferência de quantidade de movimento e energia o termo de transferência de espécies químicas as entre fases, Y_{kj} pode ser definido como:

$$\sum_{k \neq j}^{n_f} Y_{kj}^A = - \sum_{k \neq j}^{n_f} k_k^c A_{kj} \rho_k (y_{Aks} - y_{Ak}) \quad (3.46)$$

onde k_k^c é o coeficiente de transferência de espécies químicas na fase k , A_{kj} é a área interfacial e y_{Aks} , y_{Ak} são as frações mássicas do componente A na interface com a fase j e no seio da fase k , respectivamente. Para um sistema bifásico com a fase α sendo a fase contínua e a fase β a fase discreta têm-se:

$$\sum_{k \neq j}^{n_f} Y_{kj}^A = Y_{\alpha\beta}^A \quad \text{com} \quad Y_{\alpha\beta}^A = -Y_{\beta\alpha}^A. \quad (3.47)$$

Sabendo que um componente A presente na fase k e na fase j cruza a interface se e somente se houver o desequilíbrio químico. A tendência é que os potenciais químicos do componente A em ambas as fases se igualem. Sendo assim, é necessário definir a taxa de transferência de massa do componente A que cruza a interface em função do equilíbrio químico do componente A na fase k e na fase j .

Como o potencial químico pode ser relacionado diretamente com a concentração do componente em cada fase (Prausnitz *et al.* (1980)), é necessário conhecer a concentração do componente A em ambas as fases.

A concentração do componente A em uma mistura pode ser representada de várias maneiras:

$C_{Ak} \equiv$ concentração molar do componente A na fase k ;

$\rho_{Ak} \equiv$ concentração mássica do componente A na fase k ;

$x_{Ak} \equiv$ fração molar do componente A na fase k ;

$y_{Ak} \equiv$ fração mássica do componente A na fase k ;

as quais estão relacionadas entre si como:

$$\rho_{Ak} = PM_A C_{Ak} \quad , \quad x_{Ak} = \frac{C_{Ak}}{C_k} \quad , \quad y_{Ak} = \frac{\rho_{Ak}}{\rho_k}. \quad (3.48)$$

onde PM_A é o peso molecular do componente A e C_k é a concentração molar total da k ésima fase.

A transferência do componente A da fase k para a fase j , ou vice versa, pode ser tratado de duas formas distintas. A primeira é assumir a hipótese que a camada limite de massa seja tão pequena que não exerça nenhuma resistência à chegada do componente A do seio da fase até a interface, por exemplo, um gás puro escoando em um líquido que contenha o A absorvido. Se esta hipótese for adotada, para ambos os lados da interface, então, somente o

equilíbrio de potenciais químicos atuará no processo de transferência de massa. A este tipo de análise diz-se “modelo de equilíbrio”.

A outra análise, conhecida como “modelo de duas resistências”, consiste em considerar a resistência à transferência de massa na camada limite de massa em um ou em ambos os lados da interface, ou seja, o componente A sofre uma resistência para chegar à interface, causada pela camada limite. Além disso, o equilíbrio de potenciais químicos na interface deve ser assumido para que as equações de transferência de massa tenham continuidade do lado da fase k com o lado da fase j . Descrevem-se, a seguir, o tratamento para descrever o equilíbrio de potenciais e a resistência à transferência de espécies entre as fases.

Equilíbrio de potenciais químicos Um sistema bifásico líquido/vapor, cuja fase contínua é indicada pelo subscrito α e a fase discreta pelo subscrito β , que contenham um componente A e considerando-se a situação em que o componente A está em equilíbrio entre as fases, então é possível relacionar a concentração do componente A em cada fase através da curva de equilíbrio, ou seja,

$$x_{A\beta} = f(x_{A\alpha}). \quad (3.49)$$

Existem diversas formas para calcular a concentração de um componente A na fase β em função da concentração do componente A na fase α . Como é mais comum a transferência de massa em sistemas líquido/vapor, a abordagem gamma-phi ($\gamma - \phi$), para o cálculo de $x_{A\beta}$ como função de $x_{A\alpha}$, será apresentada.

O procedimento $\gamma - \phi$ é representado pela Equação 3.50 (Prausnitz *et. al.* (1980), Smith (1963)),

$$\phi_{A\beta} x_{A\beta} P = \gamma_{A\alpha} x_{A\alpha} P_A^{vap} \phi_A^{sat} P_{O_A} \quad (3.50)$$

onde,

$\phi_{A\alpha}$ e ϕ_A^{sat} \equiv são os coeficientes de fugacidade do componente A no vapor na mistura e na saturação, respectivamente;

P \equiv é a pressão do sistema;

P_A^{vap} \equiv é a pressão de vapor do componente A na temperatura do sistema;

$\gamma_{A\alpha}$ \equiv é o coeficiente de atividade do componente A no líquido;

P_{O_A} \equiv é o fator de Poynting;

$x_{A\alpha}$ e $x_{A\beta} \equiv$ são as frações molares do componente A na fase α e β , respectivamente.

Para sistemas em baixa pressão (< 5 atmosferas), pode-se considerar que:

$$P_{oA} = 1.$$

A Razão $\phi_{A\alpha}/\phi_{A\alpha}^{sat}$ pode ser calculada, por exemplo, pela equação do virial.

O coeficiente de atividade, $\gamma_{A\beta}$, pode ser calculado por modelos e/ou métodos como UNIQUAC, UNIFAC, NRTL, entre outros.

A pressão de vapor, P_A^{vap} , depende da temperatura e pode ser calculada por equações como a de ANTOINE.

As equações e modelos citados acima são amplamente discutidos na literatura (Barros (1995), Prausnitz *et. al.* (1980), Smith (1963), etc).

Com base na Equação 3.50, algumas simplificações podem ser aplicadas:

1. Considerando a fase vapor como sendo uma mistura ideal, então,

$$\phi_{A\alpha} = \phi_{A\alpha}^{sat} = 1; \quad (3.51)$$

2. Se a fase líquida se comportar como uma mistura líquida ideal, pode-se dizer que:

$$\gamma_{A\beta} = 1; \quad (3.52)$$

Nesta situação, o modelo $\gamma - \phi$ nos leva à Lei de Raoult,

$$x_{A\beta} = \frac{P_A^{vap}}{P} x_{A\alpha}. \quad (3.53)$$

Percebe-se que esta é uma expressão linear de $x_{A\beta}$ como função de $x_{A\alpha}$, pois a pressão de saturação depende somente da temperatura, e não da concentração do componente A na fase α . Mas, como se sabe, a curva de equilíbrio não é linear. Porém, em situações nas quais um líquido puro de componente A, está em contato com um gás/vapor que contém o componente A, a Lei de Raoult pode ser aplicada.

Já na situação limite contrária, onde um gás/vapor puro de componente A está em contato com um líquido contendo o componente A, pode-se combinar a Lei de Dalton com a Lei de

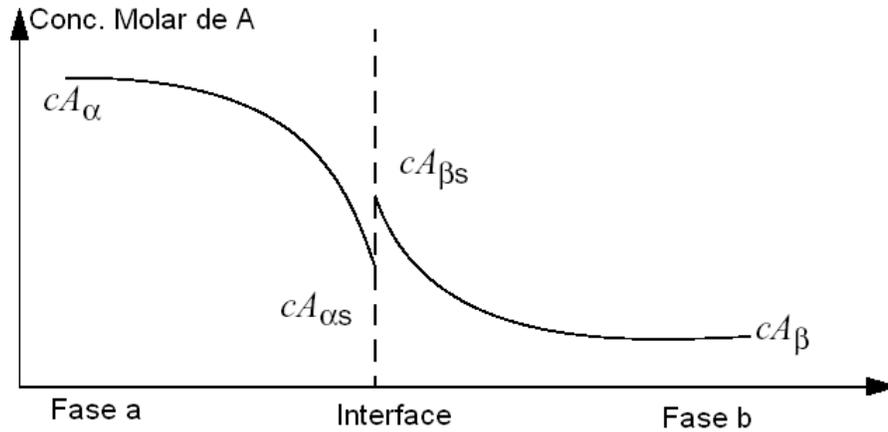


Figura 3.1: Esquema da transferência de massa multicomponente entre fases.

Henry, resultando na Equação 3.54,

$$x_{A\beta} = \frac{H_{A\alpha}^x}{P} x_{A\alpha} \quad (3.54)$$

onde $H_{A\alpha}^x$ é a constante de Henry para o componente A no líquido.

Modelo de duas resistências Devido à descontinuidade da concentração no equilíbrio de fases (Figura 3.1), não é possível tratar a transferência de massa multicomponente usando os coeficientes globais de transferência de massa. É necessário, então, considerar um modelo de duas resistências.

Pode-se tratar a transferência de massa usando os coeficientes de transferência de massa, k_α^c e k_β^c (Bird *et al.* (1960)), similar ao modelo de duas resistências à transferência de calor, ou seja,

$$n_{A\alpha} = k_\alpha^c (C_{A\alpha s} - C_{A\alpha}) \quad (3.55)$$

$$n_{\beta\alpha} = k_\beta^c (C_{A\beta s} - C_{A\beta})$$

onde $n_{A\alpha}$ é a taxa molar do componente A do seio da fase α até a interface, $n_{\beta\alpha}$ é a taxa molar do componente A do seio da fase β até a interface, $C_{A\alpha s}$, $C_{A\beta s}$ são as concentrações molares do componente A na fase α e na fase β , respectivamente, na interface e k_α^c , k_β^c são os coeficientes de transferência de massa na fase α e na fase β , respectivamente. Ao se

multiplicar as equações acima pelo peso molecular do componente A, PM_A , tem-se:

$$m_{A\alpha} = k_{\alpha}^c (\rho_{A\alpha s} - \rho_{A\alpha}) \quad (3.56)$$

$$m_{A\beta} = k_{\beta}^c (\rho_{A\beta s} - \rho_{A\beta}).$$

onde $m_{A\alpha}$ é o taxa mássica do componente A do seio da fase α até a interface, $m_{A\beta}$ é o taxa mássica do componente A do seio da fase β até a interface e $\rho_{A\alpha s}$, $\rho_{A\beta s}$ são a concentrações mássicas do componente A na fase α e na fase β , respectivamente, na interface.

Fazendo-se a “quase-linearização” na função $C_{A\beta s} = f(C_{A\alpha s})$ de tal forma que todas as não linearidades associadas a esta função estejam inseridas em uma constante de proporcionalidade, K^C , obtém-se a Equação 3.57:

$$C_{A\beta s} = K^C C_{A\alpha s} \quad \Rightarrow \quad \rho_{A\beta s} = K^C \rho_{A\alpha s} \quad (3.57)$$

e pela restrição do balanço de massa na interface de que,

$$m_{A\alpha} + m_{A\beta} = 0 \quad (3.58)$$

tem-se,

$$\frac{\rho_{A\beta s}}{K^C} = \rho_{A\alpha s} = \frac{k_{\alpha}^c \rho_{A\alpha} + k_{\beta}^c \rho_{A\beta}}{K^c k_{\beta}^c + k_{\alpha}^c} \quad (3.59)$$

A Equação 3.59 pode ser utilizada para eliminar o termo da concentração na interface na expressão da taxa de transferência de espécies químicas entre as fases. Assim, pode-se calcular o taxa de massa do componente A que cruza a interface como:

$$Y_{\alpha\beta}^A = -Y_{\beta\alpha}^A = k_{\alpha\beta}^c A_{\alpha\beta} (K^c \rho_{A\alpha} - \rho_{A\beta}) \quad (3.60)$$

onde

$$\frac{1}{k_{\alpha\beta}^c} = \frac{1}{k_{\alpha}^c} + \frac{K^c}{k_{\beta}^c}. \quad (3.61)$$

Os valores da constante K^{c13} são determinados pelas equações de equilíbrio, ou seja,

¹³O valor de K^c deve ser convertido da base molar para base mássica para utilização na Equação 3.60

$$\left\{ \begin{array}{l} K^c = \frac{\gamma_{A\beta} P_A^{vap}}{\Phi_{A\alpha} P} \quad (\text{Modelo } \gamma - \phi) \\ K^c = \frac{P_A^{vap}}{P} \quad (\text{Lei de Raoult - líquido puro}) \\ K^c = \frac{H_{A\alpha}^x}{P} \quad (\text{Lei de Henry - diluição infinita}). \end{array} \right. \quad (3.62)$$

Os coeficientes de transferência de massa (k_α^c e k_β^c) podem ser calculados por correlações, freqüentemente, apresentados na literatura. Apresentar-se-á aqui o cálculo do coeficiente global de transferência de massa entre as fases, $k_{\alpha\beta}^c$, pela equação empírica apresentado por Zuiderweg (1982):

$$k_{\alpha\beta}^c = \frac{2,6 \times 10^{-5}}{\mu_\alpha^{0,25}} \quad (3.63)$$

e a área por unidade de volume dada pela Equação 3.64:

$$A_{\alpha\beta} = \frac{\left[\left(\frac{43}{A_{hB}^{0,3}} \right) \left(\frac{(V_s \sqrt{\rho_\beta})^{20} h_{cl} \sqrt{\rho_\beta / \rho_\alpha}}{\sigma_{\alpha\beta}} \right) \right]}{h_f} \quad (3.64)$$

onde A_{hB} é a fração de área perfurada em relação a área de borbulhamento, h_{cl} e h_f são a altura de líquido claro e altura da dispersão, respectivamente, calculados por reconstituição dos campos de fração volumétrica da fase líquida.

3.6.5 Equações constitutivas para os tensores de Reynolds - Turbulência

Como apresentado anteriormente, as equações de Navier-Stokes são equações instantâneas e há a necessidade de aplicar médias estatísticas para obter-se soluções numéricas. Neste trabalho adotou-se a média temporal que, aplicada as equações, resultaram em termos adicionais conhecidos como fluxos de Reynolds. Para estimar os valores dos fluxos de Reynolds, utilizam-se os modelos de turbulência que, dependendo das hipótese adotadas, geram equações de transporte adicionais. Neste trabalho adotou-se a hipótese da viscosidade turbulenta e, a partir disto, um modelo de turbulência de duas equações.

Hipótese da Viscosidade Turbulenta A hipótese da viscosidade turbulenta assume que as tensões de Reynolds são proporcionais aos gradientes de velocidade média (Hinze (1974)):

A partir destas hipóteses, pode-se definir a Equação 3.65.

$$\rho_k \overline{\mathbf{v}'_k \mathbf{v}'_k} = \frac{2}{3} \rho_k k_k \delta - \frac{2}{3} \mu_k^t \nabla \cdot \mathbf{v}_k \delta + \mu_k^t \left[\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_k)^T \right] \quad (3.65)$$

onde μ_k^t é a viscosidade turbulenta da k ésima fase.

Análoga à hipótese da viscosidade turbulenta, a hipótese da difusividade turbulenta sugere que o fluxo de Reynolds de um escalar pode ser relacionado linearmente ao gradiente médio, ou seja,

$$\rho_k \overline{\mathbf{v}'_k \phi'_k} = \Gamma_k^t \nabla \phi_k \quad (3.66)$$

onde Γ_k^t é a difusividade turbulenta e pode ser escrita como:

$$\Gamma_k^t = \frac{\mu_k^t}{Pr_k^t} \quad (3.67)$$

com Pr_k^t sendo o número de Prandtl turbulento.

Quando a hipótese da viscosidade turbulenta e do gradiente de difusão são assumidos, a turbulência pode ser descrita por um equacionamento de duas equações. Dentre estes os mais utilizados são o equacionamento k - ε e o equacionamento k - ω .

Este trabalho concentrará seus esforços na aplicação do conceito de viscosidade turbulenta, pois seus equacionamentos foram concebidos para escoamentos turbulentos completamente desenvolvidos, que, aparentemente, é característica do escoamento em pratos perfurados de colunas de destilação. Neste caso, junto à parede é considerado um perfil logaritmo para suprimir a deficiência dos modelos de viscosidade turbulenta em descrever a região de transição do escoamento. No entanto, as afirmações acima não restringem a aplicação de modelos de turbulência mais elaborados e sua análise deve ser realizada em trabalhos futuros.

Equacionamento k - ε O modelo k - ε introduz duas novas variáveis no sistema de equações: uma para energia cinética turbulenta ($k = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{v}'^2}$), definido anteriormente, e outra para a taxa de dissipação, ε , que corresponde à taxa com que as flutuações de velocidade se dissipam (Launder e Spalding (1974)).

O modelo k - ε também assume que a viscosidade turbulenta está relacionada à energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação da seguinte forma (Launder e Spalding (1974)):

$$\mu_k^t = C_\mu \rho_k \frac{k_k^2}{\varepsilon_k} \quad (3.68)$$

Neste caso, duas novas equações de conservação para os escalares k e ε podem ser escritas como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k k_k) + \nabla \cdot \left(f_k \left[\rho_k \mathbf{v}_k k_k - \left(\mu_k + \frac{\mu_k^t}{\sigma_k} \right) \nabla k_k \right] \right) &= f_k (\mathbf{P}_k - \rho_k \varepsilon_k) + \sum_{k \neq j}^{n_f} T_{kj}^{(k)} \\ \frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k \varepsilon_k) + \nabla \cdot \left(f_k \left[\rho_k \mathbf{v}_k \varepsilon_k - \left(\mu_k + \frac{\mu_k^t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_k \right] \right) &= f_k \frac{\varepsilon_k}{k_k} (C_1 \mathbf{P}_k - C_2 \rho_k \varepsilon_k) + \sum_{k \neq j}^{n_f} T_{kj}^{(\varepsilon)} \end{aligned} \quad (3.69)$$

onde,

$\sum_{k \neq j}^{n_f} T_{kj}^{(k)}$, $\sum_{k \neq j}^{n_f} T_{kj}^{(\varepsilon)}$ \equiv representam a transferência de k e ε entre as fases, respectivamente;

C_μ , C_1 , C_2 , σ_k e σ_ε \equiv são as constantes do modelo;

\mathbf{P}_k \equiv representa a produção de turbulência devido às forças viscosas e gravitacionais e pode ser descrita como:

$$\mathbf{P}_k = \mu_k^t \nabla \mathbf{v}_k \cdot \left[\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_k)^T \right] - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_k (3 \mu_k^t \nabla \cdot \mathbf{v}_k + \rho_k k_k) + \mathbf{P}_{kbb}. \quad (3.70)$$

Para escoamentos incompressíveis, $\nabla \cdot \mathbf{v}_k$ é muito pequeno e o segundo termo pode ser ignorado, ou seja,

$$\mathbf{P}_k = \mu_k^t \nabla \mathbf{v}_k \cdot \left(\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_k)^T \right) + \mathbf{P}_{kbb} \quad (3.71)$$

onde \mathbf{P}_{kbb} \equiv representa a produção de turbulência por convecção térmica natural,

$$\mathbf{P}_{kbb} = - \frac{\mu_k^t}{Pr_k^t} \rho_k \beta_k \mathbf{g} \cdot \nabla T_k \quad (3.72)$$

onde β_k é o coeficiente de expansão térmica da k ésima fase.

3.7 Modelo Euleriano-Euleriano Heterogêneo Aplicado a Pratos Perfurados de Destilação

Com estas informações sistematizadas nos itens anteriores, podem-se descrever as equações de conservação médias temporais que representam o escoamento líquido vapor em pratos perfurados de destilação cujas principais hipóteses adotadas são:

- hipótese do contínuo,

- interpenetrabilidade das fases,
- viscosidade turbulenta,
- taxa líquida de transferência de massa entre as fases igual a zero,
- força de arraste predominante,
- turbulência na fase líquida é mais vigorosa do que na fase vapor, sobressaindo-se. Isto implica na simplificação de que somente a fase líquida é tratada pela turbulência. Os efeitos de turbulência são transferidos a fase gás através da transferência de quantidade de movimento entre as fases.

Destá forma, descreve-se, a seguir, o modelo matemático aplicado neste trabalho para representação do escoamento líquido/vapor em pratos perfurados de destilação¹⁴:

- Conservação da massa total¹⁵:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) = 0; \tag{3.73}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta}) = 0;$$

- Conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) = -f_{\alpha} \nabla P' + \nabla \cdot [f_{\alpha} \mu_{\alpha}^{eff} (\nabla \mathbf{v}_{\alpha} + \nabla \mathbf{v}_{\alpha}^T)] + f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{g} + \mathbf{F}_{\alpha\beta};$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta} \mathbf{v}_{\beta}) = -f_{\beta} \nabla P' + \nabla \cdot [f_{\beta} \mu_{\beta} (\nabla \mathbf{v}_{\beta} + \nabla \mathbf{v}_{\beta}^T)] + f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{g} + \mathbf{F}_{\beta\alpha}; \tag{3.74}$$

onde:

$$\mu_{\alpha}^{eff} = \mu_{\alpha} + \mu_{\alpha}^t,$$

¹⁴A fase contínua (líquida) é representada pelo subscrito α , enquanto que a fase discreta (vapor) é representada pelo subscrito β .

¹⁵A simplificação de que as taxas líquidas de transferência de massa total entre as fases é nula implica na anulação do termo do lado esquerdo da equação de conservação da massa total conforme detalhado no item 3.6.3.

$$\mu_{\alpha}^t = C_{\mu} \rho_{\alpha} k_{\alpha}^2 / \varepsilon_{\alpha},$$

μ_{α} e μ_{β} \equiv são as viscosidades molecular das fases líquida e vapor, respectivamente.

P' \equiv é a pressão modificada, definida por,

$$P' = P + \frac{2}{3} \rho_{\alpha} k_{\alpha} + \nabla \cdot \mathbf{v}_{\alpha} \left(\frac{2}{3} \mu_{\alpha}^{eff} - \xi \right)$$

com ξ \equiv é a viscosidade BULK da fase.

- Conservação da energia:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} h_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} h_{\alpha}) = \nabla \cdot (f_{\alpha} \lambda_{\alpha}^{eff} \nabla T_{\alpha}) + Q_{\alpha\beta}; \quad (3.75)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta} h_{\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta} h_{\beta}) = \nabla \cdot (f_{\beta} \lambda_{\beta} \nabla T_{\beta}) + Q_{\beta\alpha};$$

onde :

$$\lambda_{\alpha}^{eff} = \lambda_{\alpha} + \lambda_{\alpha}^t,$$

$$\lambda_{\alpha}^t = \frac{\mu_{\alpha}^t}{Pr_{\alpha}^t}.$$

λ_{α} e λ_{β} \equiv são as condutividades térmica das fases líquida e vapor, respectivamente.

- Conservação da espécie química:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} y_{A\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} y_{A\alpha}) = \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} D_{A\alpha}^{eff} \nabla y_{A\alpha}) + Y_{\alpha\beta}; \quad (3.76)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta} y_{A\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta} y_{A\beta}) = \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} D_{A\beta} \nabla y_{A\beta}) + Y_{\beta\alpha};$$

onde,

$$D_{A\alpha}^{eff} = D_{A\alpha} + D_{A\alpha}^t,$$

$$D_{A\alpha}^t = \frac{\mu_{\alpha}^t}{Pr_{\alpha}^t},$$

$D_{A\alpha}$ e $D_{A\beta}$ \equiv são as difusividades de A nas fases líquida e vapor, respectivamente.

- Conservação da energia cinética turbulenta:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_\alpha \rho_\alpha k_\alpha) + \nabla \cdot \left(f_\alpha \left[\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha k_\alpha - \left(\mu_\alpha + \frac{\mu_\alpha^t}{\sigma_k} \right) \nabla k_\alpha \right] \right) = f_\alpha (\mathbf{P}_\alpha - \rho_\alpha \varepsilon_\alpha). \quad (3.77)$$

- Conservação da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_\alpha \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + \nabla \cdot \left(f_\alpha \left[\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \varepsilon_\alpha - \left(\mu_\alpha + \frac{\mu_\alpha^t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_\alpha \right] \right) = f_\alpha \frac{\varepsilon_\alpha}{k_\alpha} (C_1 \mathbf{P}_\alpha - C_2 \rho_\alpha \varepsilon_\alpha). \quad (3.78)$$

As Equações de 3.73 a 3.78 aliadas as equações constitutivas apresentadas no ítem 3.6 formam o modelo matemático proposto para a representação dos fenômenos associados ao escoamento com transferência de quantidade de movimento, calor e massa simultâneos presentes em pratos perfurados de destilação.

3.8 Simplificação do Modelo Matemático (Modelo Homogêneo)

O modelo homogêneo é uma simplificação do modelo multi-fluido, no qual é assumido que as velocidades são as mesmas para todas as fases presentes, ou seja:

$$\mathbf{v}_k = \mathbf{v} \quad 1 \leq k \leq n_f. \quad (3.79)$$

No entanto, as frações volumétricas são distintas. Então, a conservação da massa total, da energia e das espécies químicas individuais de cada fase devem ser resolvidas para determinar as frações volumétricas, temperatura e concentrações, com a restrição de que:

$$\sum_{k=j}^{n_f} f_k = 1$$

$$\sum_{A=1}^{n_c} y_{Ak} = 1 \quad (3.80)$$

A conservação da quantidade de movimento é imposta como a da mistura e contrabalancada pelas frações volumétricas de cada fase presente no sistema multifásico.

Quando é aplicada a hipótese das velocidades iguais para todas as fases é importante assumir os efeitos de tensão superficial. O modelo sugerido por Brackbill *et al.* (1992) é baseado nos gradientes de fração volumétrica e pode ser utilizado para descrever estes efeitos. Neste caso, a força de tensão superficial é dada por:

$$F_s = \sigma \kappa \nabla f_\alpha \quad (3.81)$$

onde σ é a tensão superficial, f_α é a fração volumétrica da primeira fase e κ o raio de curvatura definido pela Equação 3.82.

$$\kappa = \frac{1}{|\mathbf{n}|} \left[\left(\frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} \cdot \nabla \right) |\mathbf{n}| - \nabla \cdot \mathbf{n} \right], \quad (3.82)$$

com o vetor normal à superfície dado por:

$$\mathbf{n} = \nabla f_\alpha. \quad (3.83)$$

Quando a interface intercepta a parede, há uma força adicional de adesão que pode ser incluída no tratamento acima, proporcionando uma modificação na superfície normal e na curvatura adjacente à parede. Isto pode ser incluído ao modelo como condição de contorno para fração volumétrica na parede.

Descrições detalhadas do modelo homogêneo podem ser encontrados nos trabalhos desenvolvidos por Noriler (2003) e Soares (2005).

3.9 Síntese da Modelagem Matemática para Destilação

A partir dos estudos de revisão bibliográfica e modelagem fenomenológica realizados neste trabalho de tese de doutorado, faz-se aqui a síntese da modelagem aplicada a pratos perfurados de destilação.

Na Tabela 3.2, apresenta-se à modelagem de estágios de equilíbrio. Pode-se observar que o modelo tem características macroscópicas formando um sistema de equações algébricas não lineares, que não levam em consideração os fenômenos de transferência de massa e calor. A solução matemática destes sistemas é relativamente simples e bem conhecida, e não requer qualquer esforço computacional para resolvê-la. Para suprir as deficiências, decorrentes das simplificações oriundas do estabelecimento do princípio de equilíbrio entre as correntes que

Tabela 3.2: Síntese do Modelo de Estágios de Equilíbrio.

Conservação	Equação
Balanco de Massa Global	$n_{\beta}^{n-1} + n_{\alpha}^{n+1} - n_{\beta}^n - n_{\alpha}^n = 0$
Balanco de Massa para Componente A	$n_{\beta}^{n-1} x_{\beta}^{n-1} + n_{\alpha}^{n+1} x_{\alpha}^{n+1} - n_{\beta}^n x_{\beta}^n - n_{\alpha}^n x_{\alpha}^n = 0$
Balanco de Energia	$h_{\beta}^{n-1} + h_{\alpha}^{n+1} - h_{\beta}^n - h_{\alpha}^n = 0$
Relações de Equilíbrio	$(K^C)^n x_{A\alpha}^n - x_{A\beta}^n = 0$
Equação de Soma para Fase Líquida	$\sum_{A=1}^{NC} x_{A\alpha}^n - 1 = 0$
Equação de Soma para Fase Gás	$\sum_{A=1}^{NC} x_{A\beta}^n - 1 = 0$

abandonam o estágio, surgiram as equações e correlações da eficiência de estágio que, por sua vez, foram progressivamente aperfeiçoadas ao longo do tempo. Como apresentado no Capítulo II, estas equações e correlações avançaram no sentido de incorporar cada vez mais parâmetros associados à transferência de massa e calor e, dentre elas, destacamos a de Barros e Wolf (1997).

No entanto, é possível afirmar que a avaliação da eficiência é meramente arbitrária, ou seja, as tão chamadas eficiências não são eficiências, mas sim fatores associados à transferência de massa e calor. Sendo assim, torna-se mais objetivo o estudo dos estágios de destilação sem considerar a eficiência, e sim, a transferência de calor e massa simultâneos na interface.

Neste sentido, Krishnamurthy e Taylor (1985) desconsideraram o princípio de equilíbrio e desenvolveram a modelagem de estágios de não equilíbrio, que está sintetizada na Tabela 3.3. Pode-se observar que este modelo já incorpora os fenômenos de transferência de massa e calor simultâneos, que resulta em um sistema de equações algébricas não lineares e acopladas. A solução deste sistema, por sua vez, é tratada através de métodos numéricos, o que requer um esforço computacional que, no entanto, está dentro das limitações custo/benefício para equipamentos atuais. Esta modelagem tem se mostrado eficiente para projetos de coluna de destilação, mas tem as limitações oriundas das simplificações decorrentes do equilíbrio mecânico interfacial e por não considerar as variações espaciais das propriedades no está-

Tabela 3.3: Síntese do Modelo de Estágios de Não Equilíbrio.

Conservação	Equação
Balço de Massa para Fase Líquida	$\left(1 + \frac{n_{out\alpha}^n}{n_{\alpha}^n}\right) n_{A\alpha}^n - n_{A\alpha}^{n+1} - n_{A\alpha}^{in} + n_{A\alpha\beta}^n = 0$
Balço de Massa para Fase Gás	$\left(1 + \frac{n_{out\beta}^n}{n_{\beta}^n}\right) n_{A\beta}^n - n_{A\beta}^{n-1} - n_{A\beta}^{in} + n_{A\beta\alpha}^n = 0$
Balço de Energia para Fase Líquida	$\left(1 + \frac{n_{out\alpha}^n}{n_{\alpha}^n}\right) h_{\alpha}^n - h_{\alpha}^{in} - h_{\alpha}^{n+1} + Q_{out\alpha}^n + Q_{\alpha\beta}^n = 0$
Balço de Energia para Fase Gás	$\left(1 + \frac{n_{out\beta}^n}{n_{\beta}^n}\right) h_{\beta}^n - h_{\beta}^{in} - h_{\beta}^{n-1} + Q_{out\beta}^n + Q_{\beta\alpha}^n = 0$
Balço de Massa na Interface	$n_{A\alpha\beta}^n + n_{A\beta\alpha}^n = 0$
Balço de Energia na Interface	$Q_{\alpha\beta}^n + Q_{\beta\alpha}^n = 0$
Relações de Equilíbrio na Interface	$(K^C)^n x_{A\alpha}^n - x_{A\beta}^n = 0$
Equação de soma para Fase Líquida	$\sum_{A=1}^{NC} x_{A\alpha}^n - 1 = 0$
Equação de soma Fase Vapor	$\sum_{A=1}^{NC} x_{A\beta}^n - 1 = 0$

Equações constitutivas

$$Q_{\alpha\beta}^n = h_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} (T_{\beta} - T_{\alpha}) \quad (\text{Transferência de calor entre fases})$$

$$n_{A\alpha\beta}^n = k_{\alpha}^c A_{\alpha\beta} (y_{A\alpha s} - y_{A\alpha}) \quad (\text{Transferência de Espécies químicas entre fases})$$

gio. Além disso, as equações constitutivas são desenvolvidas através de experimentos com sistemas específicos tornando-as muito restritivas.

Propõe-se neste trabalho de tese de doutorado, eliminar a suposição do equilíbrio mecânico interfacial e não consideração das variações espaciais das propriedades no estágio de destilação. Para isto é necessário um aumento da complexidade matemática dos modelos, pois, agora, os modelos são sistemas de equações diferenciais parciais não lineares e acopladas.

A Tabela 3.4 sintetiza o modelo homogêneo, uma simplificação do modelo heterogêneo, proposto e estudado por Noriler (2003) e Soares (2005). Este modelo pressupõe que o arraste de uma fase sobre a outra é tão grande que as duas tem o mesmo campo de velocidade, criando assim, um modelo mais “enxuto” que requer um esforço computacional na ordem de 5 vezes menor que o modelo heterogêneo. As principais vantagens deste modelo são, como já citado, um menor custo computacional e a necessidade de poucas equações constitutivas, principalmente aquelas relacionadas à transferência de movimento entre as fases.

Tabela 3.4: Síntese do Modelo Homogêneo.

Conservação	Equação
Massa para fase gás	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{mix}) = 0$
Massa para fase líquida	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{mix}) = 0$
Quantidade de movimento para mistura	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_{mix} \mathbf{v}_{mix}) + \nabla \cdot (\rho_{mix} \mathbf{v}_{mix} \mathbf{v}_{mix}) = \nabla P' + \nabla \cdot [\mu_{eff} (\nabla \mathbf{v}_{mix} + \nabla \mathbf{v}_{mix}^T)] + \rho_{mix} \mathbf{g} + \mathbf{F}_s$
Energia para fase gás	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta} h_{\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{mix} h_{\beta}) = \nabla \cdot (f_{\beta} \lambda_{\beta} \nabla T_{\beta}) + Q_{\beta\alpha}$
Energia para fase líquida	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} h_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{mix} h_{\alpha}) = \nabla \cdot (f_{\alpha} \lambda_{\alpha}^{eff} \nabla T_{\alpha}) + Q_{\alpha\beta}$
Componente A para fase gás	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta} y_{A\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{mix} y_{A\beta}) = \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} D_{A\beta} \nabla y_{A\beta}) + Y_{A\beta\alpha}$
Componente A para fase líquida	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} y_{A\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{mix} y_{A\alpha}) = \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} D_{A\alpha}^{eff} \nabla y_{A\alpha}) + Y_{A\alpha\beta}$
Energia cinética turbulenta para mistura	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_{mix} k_{mix}) + \nabla \cdot \left(\left[\rho_{mix} \mathbf{v}_{mix} k_{mix} - \left(\mu_{mix} + \frac{\mu_{mix}^t}{\sigma_k} \right) \nabla k_{mix} \right] \right) = (\mathbf{P} - \rho_{mix} \epsilon_{mix})$

Continua na próxima página.

Tabela 3.4: Síntese do Modelo Homogêneo(continuação).

Conservação	Equação
Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta para mistura	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_{mix} \epsilon_{mix}) + \nabla \cdot \left(\left[\rho_{mix} \mathbf{v}_{mix} \epsilon_{mix} - \left(\mu_{mix} + \frac{\mu_{mix}^t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon_{mix} \right] \right) = \frac{\epsilon_{mix}}{k_{mix}} (C_1 \mathbf{P} - C_2 \rho_{mix} \epsilon_{mix})$
Equações constitutivas	
	$\mu_{mix} = f_\beta \mu_\beta + f_\alpha \mu_\alpha, \rho_{mix} = f_\beta \rho_\beta + f_\alpha \rho_\alpha \quad (\text{Leis de mistura})$
	$\mu_{mix}^t = C_\mu \rho_{mix} \frac{k_{mix}^2}{\epsilon_{mix}} \quad \mathbf{P} = \mu_t \nabla \mathbf{v}_{mix} \cdot \left(\nabla \mathbf{v}_{mix} + (\nabla \mathbf{v}_{mix})^T \right) \quad (\text{Modelo de turbulência})$
	$\mathbf{F}_s = \sigma \kappa \nabla f_\alpha \quad (\text{Força de tensão superficial})$
	$Q_{\alpha\beta} = -Q_{\beta\alpha} = h_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} (T_\beta - T_\alpha) \quad (\text{Transferência de calor entre fases})$
	$Y_{A\alpha\beta} = -Y_{A\beta\alpha} = k_{\alpha\beta}^c A_{\alpha\beta} (K^c y_{A\beta} - y_{A\alpha}) \quad (\text{Trans. de espécies químicas entre fases})$

Já a Tabela 3.5 sintetiza o modelo heterogêneo, com equações de movimento para ambas as fases. O estudo do escoamento em pratos de destilação baseados no trabalho de Liu (2000), com avanços na sua implementação realizados por van Baten e Krishna (2000), Gesit *et al.* (2003), Soares *et al.* (2002) e Noriler (2003) mostram o estágio atual desta investigação científica. As limitações do modelo heterogêneo, segundo os autores, consistem nas equações constitutivas para a transferência de quantidade de movimento entre as fases. Foi neste sentido que Noriler (2003) propôs o modelo homogêneo, pois se ambas as fases compartilharem o mesmo campo de velocidade, então a transferência de quantidade de movimento tende ao infinito. Krishna *et al.* (1999) desenvolveu uma equação constitutiva para a curva de arraste, em função da velocidade média de ascensão das bolhas, que tem sido aplicada em colunas de destilação, com sucesso. No entanto, outra relação constitutiva é requerida para estimar a velocidade média de ascensão das bolhas.

Mas o caráter inédito deste trabalho de tese de doutorado está no acoplamento entre as equações de conservação da massa total, da conservação de quantidade de movimento, da conservação de energia e da conservação das espécies químicas.

Tabela 3.5: Síntese do Modelo Heterogêneo

Conservação	Equação
Massa para fase gás	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta}) = 0$
Massa para fase líquida	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) = 0$
Quantidade de movimento para fase gás	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta} \mathbf{v}_{\beta}) = -f_{\beta} \nabla P + \nabla \cdot [f_{\beta} \mu_{\beta} (\nabla \mathbf{v}_{\beta} + \nabla \mathbf{v}_{\beta}^T)] + f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{g} + \mathbf{F}_{\beta\alpha}$
Quantidade de movimento para fase líquida	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) = -f_{\alpha} \nabla P' + \nabla \cdot [f_{\alpha} \mu_{\alpha}^{eff} (\nabla \mathbf{v}_{\alpha} + \nabla \mathbf{v}_{\alpha}^T)] + f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{g} + \mathbf{F}_{\alpha\beta}$
Energia para fase gás	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta} h_{\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta} h_{\beta}) = \nabla \cdot (f_{\beta} \lambda_{\beta} \nabla T_{\beta}) + Q_{\beta\alpha}$
Energia para fase líquida	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} h_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} h_{\alpha}) = \nabla \cdot (f_{\alpha} \lambda_{\alpha}^{eff} \nabla T_{\alpha}) + Q_{\alpha\beta}$
Componente A para fase gás	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\beta} \rho_{\beta} y_{A\beta}) + \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta} y_{A\beta}) = \nabla \cdot (f_{\beta} \rho_{\beta} D_{A\beta} (\nabla y_{A\beta})) + Y_{A\beta\alpha}$
Componente A para fase líquida	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} y_{A\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} y_{A\alpha}) = \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} D_{A\alpha}^{eff} (\nabla y_{A\alpha})) + Y_{A\alpha\beta}$
Energia cinética turbulenta para fase líquida	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} k_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} [\rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} k_{\alpha} - (\mu_{\alpha} + \frac{\mu_{\alpha}}{\sigma_k}) \nabla k_{\alpha}]) = f_{\alpha} (\mathbf{P}_{\alpha} - \rho_{\alpha} \varepsilon_{\alpha})$
Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta para fase líquida	$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} [\rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} - (\mu_{\alpha} + \frac{\mu_{\alpha}}{\sigma_{\varepsilon}}) \nabla \varepsilon_{\alpha}]) = f_{\alpha} \frac{\varepsilon_{\alpha}}{k_{\alpha}} (C_1 \mathbf{P}_{\alpha} - C_2 \rho_{\alpha} \varepsilon_{\alpha})$

Continua na próxima página.

Tabela 3.5: Síntese do Modelo Heterogêneo(continuação).

Conservação	Equação
Equações constitutivas	
	$\mu_{\alpha}^t = C_{\mu} \cdot \frac{k_{\alpha}^2}{\varepsilon_{\alpha}} \quad \text{(Modelo de turbulência)}$
	$\mathbf{P}_{\alpha} = \mu_{\alpha}^t \nabla \mathbf{v}_{\alpha} \cdot (\nabla \mathbf{v}_{\alpha} + (\nabla \mathbf{v}_{\alpha})^T)$
	$\mathbf{F}_{\alpha\beta} = -\mathbf{F}_{\beta\alpha} = \frac{3}{4} \frac{f_{\beta} \rho_{\alpha}}{d} C_D \mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{v}_{\alpha} (\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{v}_{\alpha}) \quad \text{(Trans. de movimento entre fases)}$
	$Q_{\alpha\beta} = -Q_{\beta\alpha} = h_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} (T_{\beta} - T_{\alpha}) \quad \text{(Trans. de calor entre fases)}$
	$Y_{A\alpha\beta} = -Y_{A\beta\alpha} = k_{\alpha\beta}^c A_{\alpha\beta} (K^c y_{A\beta} - y_{A\alpha}) \quad \text{(Trans. de espécies químicas entre fases)}$

Estes estudos possibilitarão compreender, com maior extensão, os fenômenos presentes em um prato de destilação, pois, esta técnica permite avaliar a variação espaço-temporal de todas as propriedades conserváveis que atuam no sistema. Com estes dados é possível projetar e otimizar processos de destilação com maior performance. Outra característica é que este modelo não é restrito à colunas de destilação, mas a qualquer sistema com gás e/ou vapor escoando através de um líquido. A limitação consiste no custo computacional para solução do sistema de equações.

3.10 Conclusões do Capítulo III

A modelagem matemática que tem por objetivo descrever os fenômenos envolvidos nos processos de destilação tem sido tema de pesquisas que buscam a melhor compreensão destes fenômenos, para que, então, essa compreensão possa se tornar desenvolvimento tecnológico. É possível notar que a evolução da modelagem segue a linha de complexidade matemática descrita na Tabela 3.1, partindo de um modelo macroscópico de equilíbrio formando um sistema de equações algébricas não lineares. A sofisticação da modelagem macroscópica surge com Krishnamurthy e Taylor (1985) que assume o não equilíbrio entre as correntes que deixam o estágio. A característica matemática ainda reside em sistemas de equações não lineares, mas é assumido equações de conservação para cada uma das fases. A modelagem onde existem variações espaciais das propriedades teve início com Liu *et al.* (2000) que desenvolveu um modelo monofásico. A característica matemática agora é de um sistema de

equações diferenciais parciais. Na evolução desta modelagem, Noriler (2003) e Soares (2005) descrevem um modelo homogêneo e por fim van Baten e Krishna (2000) desenvolveram um modelo tridimensional e transiente para o escoamento isotérmico e sem transferência de massa. Seguindo o caminho do aumento do grau de complexidade da modelagem e de sua característica matemática, este trabalho propõe um modelo tridimensional e transiente com transferência de quantidade de movimento, calor e massa simultânea entre as fases. Desta forma, acredita-se estar contribuindo para a evolução do conhecimento científico com o fim de desenvolver tecnologia no âmbito dos processos de destilação.

4 MÉTODOS NUMÉRICOS

Este capítulo tem o objetivo de descrever o método numérico base do desenvolvimento deste trabalho. Faz-se um breve histórico da evolução dos métodos numéricos de solução do sistema de equações diferenciais parciais e uma exploração literária das características do método dos volumes finitos e a análise da evolução deste método para métodos mais recentes.

4.1 Base Teórica

Os métodos numéricos tiveram uma revolução nas últimas três décadas, impulsionada pelo avanço da microeletrônica. O desenvolvimento de computadores com alto desempenho numérico tornou possível a utilização de métodos para a solução de modelos complexos e com poucas simplificações. O desejo de engenheiros e cientistas em solucionar problemas, até então sem solução, motivou, por conseguinte, o avanço dos métodos numéricos.

Em princípio, entre os diversos métodos propostos para a solução das equações de conservação, destacam-se dois: o método de diferenças finitas (MDF) e o método dos elementos finitos (MEF). No desenvolvimento do MDF, os problemas de interesse estavam relacionados à mecânica dos fluidos, onde as não-linearidades oriundas do termo convectivo, dificultavam a implementação de geometrias complexas. Paralelamente, o MEF foi desenvolvido para solucionar problemas elásticos, com ausência no modelo das não-linearidades dos termos convectivos. A principal vantagem do MEF é a utilização de malhas não estruturadas que permitem a análise de problemas com geometrias complexas. No início da década de 70 existiam, portanto, dois métodos capazes de resolver as equações de Navier-Stokes, ambos com suas vantagens e desvantagens. Suas fragilidades começaram a ser eliminadas com a adoção do método de Galerkin e dos resíduos ponderados para o MEF, e a utilização de sistemas adaptáveis à geometria arbitrária do domínio de cálculo para o MDF (Souza, 2000).

Estes métodos, entretanto, ainda apresentavam problemas de instabilidade devido à convecção. Estes problemas motivaram pesquisas para o desenvolvimento do método dos volumes finitos (MVF), que por manter o caráter físico de cada termo nas equações discretas, possibilita maior robustez ao método (Maliska, 1995).

A literatura apresenta uma quantidade considerável de material relacionado à utilização do método dos volumes finitos. Destacam-se: Patankar e Spalding (1971) (precursores do método); Patankar (1981); Van Doormaal e Raithby (1984); Meier *et al.* (1999), Noriler (2003); além de livros como Patankar (1980), Minkowycz *et al.* (1988) e Maliska (1995) entre outros.

Patankar (1980) relaciona problemas no uso de um arranjo colocalizado das variáveis, que conduz a inconsistências físicas nos resultados, especialmente relacionadas ao campo de pressão. Peric *et al.* (1988) e Marchi *et al.* (1989) utilizam arranjos que adotam funções de interpolação mais complexas, além de um processo mais completo para a equação de pressão, com resultados positivos. Maliska (1995) e Meier *et al.* (1999) destacam que num arranjo de variáveis desencontradas, onde as velocidades são armazenadas nas faces dos volumes de controle, e as variáveis escalares como a pressão, no centro da malha computacional, podem eliminar muitos problemas citados por Patankar (1980).

Existem vários esquemas de interpolação para definir as variáveis nas faces dos volumes de controle, tais como esquemas tradicionais (diferença central), esquemas de ordem superior, entre outros. A escolha do melhor esquema depende do modelo adotado. Esquemas de primeira ordem podem trazer problemas de difusão numérica, mas são de fácil implementação e exige um menor esforço computacional. Além disso, algumas regras básicas devem ser seguidas na escolha do método (Patankar, 1980), como exemplo a positividade dos coeficientes, a conservação dos fluxos nas interfaces, entre outros.

O acoplamento pressão-velocidade foi tratado por Patankar e Spalding (1971), com o desenvolvimento do método SIMPLE (“Semi IMPLICIT Linked Equations”), onde a pressão é escrita como a soma da melhor estimativa de pressão possível mais uma correção, calculada de forma a satisfazer a equação da conservação da massa. Os demais métodos que surgiram são derivados do SIMPLE como o SIMPLER (SIMPLE-Revisado), PRIME (“Pressure Implicit Momentum Explicit”), entre outros. O SIMPLEC (SIMPLE-Consistente), proposto por Van Doormaal e Raithby (1984), é o mais utilizado atualmente, pois foi desenvolvido visando maior estabilidade do acoplamento e, portanto, melhores taxas de convergência e estabilidade

numérica.

Existem diversos métodos para a solução do sistema de equações tais como Jacobi, Gauss-Seidel, MSI (“Modified Strongly Implicit”), entre outros (Maliska (1995)). Um método comum de solução de sistemas de equações não lineares provenientes da aplicação do método dos volumes finitos é a técnica denominada linha por linha com TDMA que consiste na solução de uma seqüência de sistemas lineares.

4.2 Método dos Volumes finitos

Integração Formal A equação geral de discretização é a equação resultante da integração formal das equações de conservação. A equação geral da conservação, na forma conservativa e monofásica é,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) = -\nabla \cdot \mathbf{F}_\phi + S_\phi, \quad (4.1)$$

onde t é o tempo, ρ é a massa específica, ϕ é uma propriedade fluidodinâmica (u , v , w , k e ϵ), \mathbf{F}_ϕ o fluxo difusivo e S_ϕ é o termo fonte. Fazendo-se a integração formal da Equação 4.1 tem-se:

$$\iiint_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dV + \iiint_V \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) dV = \iiint_V -\nabla \cdot \mathbf{F}_\phi dV + \iiint_V S_\phi dV. \quad (4.2)$$

Com o teorema da divergência de Gauss aplicado na Equação 4.2, chega-se a Equação 4.3.

$$\iiint_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dV + \iint_A (\rho\mathbf{v}\phi \cdot \mathbf{n}) dA = - \iint_A (\mathbf{F}_\phi \cdot \mathbf{n}) dA + \iiint_V S_\phi dV. \quad (4.3)$$

A Equação 4.3 pode ser integrada em um volume de controle genérico, conforme Figura 4.1¹⁶, onde P é um ponto da malha cuja posição coordenada é (x, y, z) e N, S, W, E, T, B seus vizinhos ortogonais nas direções norte $(x, y+(\Delta y)_n, z)$, sul $(x, y-(\Delta y)_s, z)$, oeste $(x-(\Delta x)_w, y, z)$, leste $(x+(\Delta x)_e, y, z)$, topo $(x, y, z+(\Delta z)_t)$ e base $(x, y, z-(\Delta z)_b)$, respectivamente. As faces do volume de controle nas respectivas direções são nomeadas por n, s, w, e, t e b . O volume de controle tem um volume dado por $\Delta x \Delta y \Delta z$.

Reagrupando-se, integrando-se no tempo a Equação 4.4 e fazendo-se a integração sobre

¹⁶A Figura 4.1 apresenta um volume de controle em duas dimensões para que a compreensão da estrutura de integração seja facilitada.

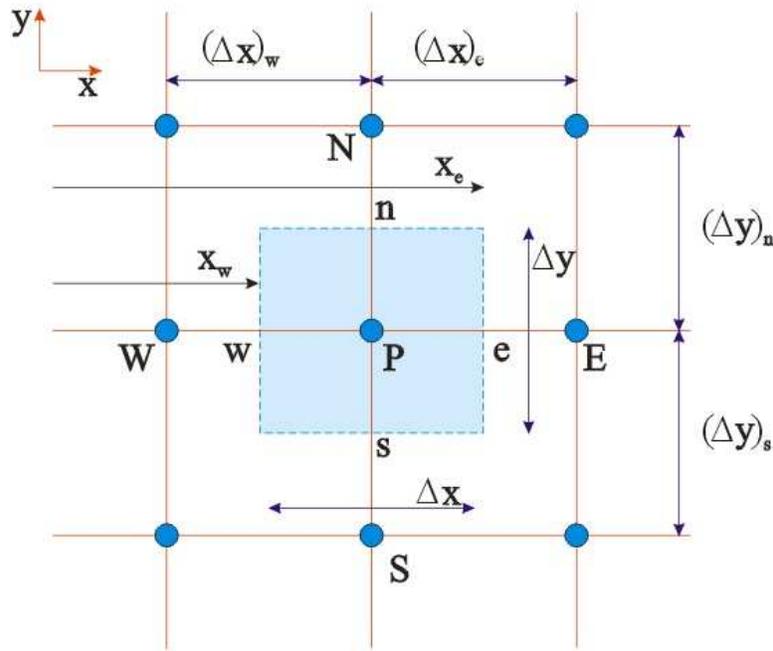


Figura 4.1: Representação de um volume de controle genérico

o volume elementar de controle, representado pela Figura 4.1, num intervalo de tempo de t até $t+\Delta t$, tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) - S_\phi \right]_P \Delta V - (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_w A_w + \\ & (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_e A_e - (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_s A_s \\ & (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_n A_n - (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_t A_t + (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_b A_b \end{aligned} \right\} dt = 0 \quad (4.4)$$

onde A_e , A_w , A_s , A_n , A_t e A_b são as áreas em suas respectivas faces, e ΔV o volume do volume elementar de controle.

Formulação Totalmente Implícita no Tempo A formulação totalmente implícita no tempo é adotada como aproximação numérica básica por razões de estabilidade numérica. A formulação totalmente implícita, onde somente ϕ no ponto P no tempo anterior e ϕ das vizinhanças no tempo atual influenciam na obtenção de ϕ em P no tempo atual, é muito utilizada nos métodos (Maliska (1995)).

Integrando-se a Equação 4.4 no tempo, dividindo-se por Δt e adotando-se o superescrito

$t+\Delta t$ sem índice e t sendo OLD, tem-se;

$$\begin{aligned} & \left[(\rho\phi)_P - (\rho\phi)_P^{OLD} \right] \frac{\Delta V}{\Delta t} - (S_\phi) \Delta V - (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_w A_w + (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_e A_w \\ & - (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_s A_s + (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_n A_n - (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_t A_t + (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_b A_b = 0. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Linearização do Termo Fonte Outra aproximação numérica adotada é a linearização do termo fonte para que a solução iterativa do sistema de equações atinja convergência (Maliska (1995)). O objetivo é obter uma linearização do tipo:

$$(S_\phi) \Delta V = S_P \phi_P + S_C \quad (4.6)$$

onde S_P é o coeficiente angular e S_C o coeficiente linear da linearização. Substituindo-se a Equação 4.6 em 4.5, tem-se a seguinte equação de discretização:

$$\begin{aligned} & \left[(\rho\phi)_P - (\rho\phi)_P^{OLD} \right] \frac{\Delta V}{\Delta t} - (S_P \phi_P + S_C) - (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_w A_w + (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_e A_w \\ & - (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_s A_s + (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_n A_n - (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_t A_t + (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_b A_b = 0. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Note que o fluxo de ϕ , \mathbf{F}_ϕ , é dado pela equação constitutiva, $\mathbf{F}_\phi = \Gamma \nabla \phi$

Interpolação Por inspeção a Equação 4.7, pode-se verificar que, neste ponto do desenvolvimento é necessário o valor da propriedade ϕ e de suas derivadas primeiras nas faces do volume elementar. Esta tarefa exige a definição de interpolações para os termos convectivos e difusivos. Uma definição que não especifica o esquema de interpolação é sugerido por Minkowycz *et al.* (1988) e Maliska (1995). As Equações 4.8 e 4.9 mostram a definição para os termos convectivos e difusivos, respectivamente:

$$\begin{aligned} \phi_w &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) \phi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w \right) \phi_P, & \phi_e &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) \phi_E, \\ \phi_s &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_s \right) \phi_S + \left(\frac{1}{2} - \alpha_s \right) \phi_P, & \phi_n &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_n \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_n \right) \phi_N, \\ \phi_t &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_t \right) \phi_T + \left(\frac{1}{2} - \alpha_t \right) \phi_P, & \phi_b &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_b \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_b \right) \phi_B, \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w &= \beta_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x_w} \right), & \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e &= \beta_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_e} \right), \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s &= \beta_s \left(\frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta y_s} \right), & \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n &= \beta_n \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y_n} \right), \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_t &= \beta_t \left(\frac{\phi_P - \phi_T}{\Delta z_t} \right), & \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b &= \beta_b \left(\frac{\phi_B - \phi_P}{\Delta z_b} \right), \end{aligned} \quad (4.9)$$

onde α e β são parâmetros que definem o esquema de interpolação de cada variável em cada face. Pode-se observar que, fazendo-se a definição genérica do esquema de interpolação, a implementação numérica é simples, pois a equação discreta é a mesma para qualquer esquema específico, variando-se somente o valor de α e β .

Substituindo-se as Equações 4.8, 4.9 na Equação 4.7 e assumindo-se que o termo fonte é constante no volume e com valor correspondente ao ponto P (Meier (1998)), têm-se:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_T \phi_T + a_B \phi_B + b, \quad (4.10)$$

onde:

$$\begin{aligned} a_W &= \left[(\rho v_x)_w \left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) + \frac{\Gamma_{\phi x} \beta_w}{\Delta x_w} \right] A_w ; \\ a_E &= \left[-(\rho v_x)_e \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) + \frac{\Gamma_{\phi x} \beta_e}{\Delta x_e} \right] A_e ; \\ a_S &= \left[(\rho v_y)_s \left(\frac{1}{2} + \alpha_s \right) + \frac{\Gamma_{\phi y} \beta_s}{\Delta y_s} \right] A_s ; \\ a_N &= \left[-(\rho v_y)_n \left(\frac{1}{2} - \alpha_n \right) + \frac{\Gamma_{\phi y} \beta_n}{\Delta y_n} \right] A_n ; \\ a_T &= \left[(\rho v_z)_t \left(\frac{1}{2} + \alpha_t \right) + \frac{\Gamma_{\phi z} \beta_t}{\Delta z_t} \right] A_t ; \\ a_B &= \left[-(\rho v_z)_b \left(\frac{1}{2} - \alpha_b \right) + \frac{\Gamma_{\phi z} \beta_b}{\Delta z_b} \right] A_b ; \\ a_P &= a_W + a_E + a_S + a_N + a_T + a_B + \rho \frac{\Delta V}{\Delta t} - S_P - (\rho v_x)_w A_w + (\rho v_x)_e A_e \\ &\quad - (\rho v_y)_s A_s + (\rho v_y)_n A_n - (\rho v_z)_t A_t + (\rho v_z)_b A_b ; \\ b &= \rho \phi_P^{OLD} \frac{\Delta V}{\Delta t} + S_C. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Na definição do coeficiente a_P , aparece um termo que representa a equação da conservação da massa total discreta. Então, para escoamentos incompressíveis tem-se:

$$-(\rho v_x)_w A_w + (\rho v_x)_e A_e - (\rho v_y)_s A_s + (\rho v_y)_n A_n - (\rho v_z)_t A_t + (\rho v_z)_b A_b = 0. \quad (4.12)$$

Substituindo-se a Equação 4.12 na Equação 4.11, define-se a_P como:

$$a_P = \sum a_{nb} - S_P + \rho \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (4.13)$$

onde $_{nb}$ indica os vizinhos do ponto P.

A Equação 4.10 pode ser aplicada a qualquer variável ϕ para formar um sistema de equações algébricas a ser resolvido pelo método mais adequado. Um método simples e bastante utilizado é o método linha-por-linha com TDMA (Patankar (1981)).

É necessário salientar que as aproximações numéricas básicas são minimizadas na medida em que a malha numérica é concentrada. Isto é, tal que no limite, quando o volume de controle tender a zero, elas praticamente deixam de ser aproximações para representar o valor exato (Meier (1998)).

Acoplamento Pressão-Velocidade Ao inferir-se o sistema de equações não lineares resultantes do modelo matemático após a integração formal pode-se perceber claramente, que o sistema tem um número de equações inferior ao número de variáveis, pois a conservação da massa não serve como equação evolutiva para qualquer variável, assumindo, então, um caráter restritivo para o campo de velocidade. Como, então, determinar um campo de pressão, que por sua vez quando inserido nas equações de *momentum*, que origine um campo de velocidades que satisfaça a conservação da massa? A resposta a essa pergunta surgiu com o desenvolvimento do acoplamento pressão-velocidade. Patankar e Spalding (1972) descrevem o método SIMPLE (“Semi IMPLICIT Linked Equations”) desenvolvido a partir das idéias de Chorin (1971) e, posteriormente, otimizado por Van Doormaal e Raithby (1984) e chamado de SIMPLEC (SIMPLE consistente). É importante lembrar que o problema do cálculo do campo de pressão surge devido à natureza segregada da solução do sistema linear e da inexistência de uma equação elíptica para a pressão.

Malha Numérica As malhas numéricas mais comuns fazem com que suas variáveis sejam concentradas em um único ponto no volume diferencial. No entanto, Patankar (1981) sugere o deslocamento das variáveis, ou seja, as variáveis devem ser calculadas em pontos diferentes do volume elementar. A estratégia mais utilizada, atualmente, é fixar as velocidades nas faces dos volumes e as demais variáveis no centro. Esta técnica é chamada de malha desencontrada. A grande vantagem deste método é que se as velocidades são calculadas nas faces, conseqüentemente, não é necessário interpolar as velocidades, eliminando-se possíveis erros numéricos relacionados às aproximações impostas pelos esquemas de interpolação. No entanto, a implementação computacional é muito complexa, pois a indexação das variáveis torna-se exaustiva. Segundo Maliska (1995), a necessidade da solução de problemas com geometrias complicadas através de coordenadas generalizadas, motivou vários pesquisadores a desenvolverem métodos de acoplamento baseados no arranjo colocalizado (concentrado), que reduzam problemas numéricos como “ZigZag” ou “Check-Boarding”, onde soluções oscilatórias são obtidas para o campo de pressão, mesmo satisfazendo a equação da conservação

da massa.

O método dos volumes finitos, descrito neste capítulo, é base do “software” CFX 4.4 da AEA Technology, que subsidiará as soluções numéricas deste trabalho. Vale a pena ressaltar que a profunda compreensão do método, buscada neste capítulo, é de fundamental importância para a correta condução, análise e discussão dos resultados da experimentação numérica.

4.3 Conclusões do Capítulo IV

Existem novas correntes para solução numérica das equações do modelo, destacando-se o método dos volumes finitos baseados em elementos, que permite uma solução agregada das equações de movimento e massa total. No método dos volumes finitos a solução agregada não é possível pois a discretização não oferece um acoplamento entre as equações de conservação da massa total e quantidade de movimento. A solução, neste trabalho, é obtida utilizando o método segregado de solução iterativa através do acoplamento pressão velocidade, já discutido. No método dos volumes finitos baseados em elementos, a própria discretização descreve a equação suplementar necessária para solução do sistema, além de outras particularidades que conferem ao método a possibilidade da solução agregada das equações hidrodinâmica.

5 ESCOAMENTO ISOTÉRMICO - EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA

Neste capítulo são apresentados os resultados e discussões dos estudos de experimentação numérica em escoamentos isotérmicos planejados para esta investigação científica. Apresenta-se, primeiramente, um estudo baseado no trabalho de Baten e Krishna (2000), com análises dos modelos e métodos utilizados. A seguir é explorada a influência de diferentes equações constitutivas para a predição do coeficiente de arraste gás-líquido, sobre a dinâmica do escoamento. Uma análise da geometria para identificar os efeitos geométricos em sua totalidade é realizada, principalmente no que tange a região de entrada de vapor, eliminando a hipótese de que as velocidades nos furos da placa perfurada sejam iguais. Por fim, avalia-se o desempenho do processo mediante modificações geométricas em pratos perfurados de destilação para verificar a sua performance em relação aos pratos convencionais.

5.1 Escoamento gás-líquido isotérmico

O início dos estudos de experimentação numérica fundamenta-se nos estudos do escoamento gás líquido em pratos perfurados de destilação realizados por Baten e Krishna (2000), Soares *et al.* (2002) e Noriler (2003) que se basearam em um modelo multifásico heterogêneo, em regime de turbulência, onde a força de arraste predomina sobre as demais forças e, em função disso, a única força considerada no modelo. A força de arraste foi considerada uma função do coeficiente de arraste que, por sua vez, foi predito pela equação constitutiva proposta por Krishna *et al.* (1999a), Equação 3.31, que depende da fração volumétrica média de gás e de líquido. Estes parâmetros foram determinados pela correlação de Bennett *et al.* (1983), Equação 3.32, e a turbulência considerada somente na fase líquida. A metodologia de solução das equações diferenciais parciais do modelo foi extensivamente estudada por Nori-

ler (2003) e foi mantida a mesma na solução de todos os experimentos numéricos realizados neste trabalho.

Sendo assim, apresenta-se um estudo do escoamento gás-líquido isotérmico em um prato de destilação utilizando o modelo heterogêneo sem as equações de conservação de energia e massa da espécie química, apresentado na Tabela 3.4, com o coeficiente de arraste e a turbulência avaliados a luz dos trabalhos de Baten e Krishna (2000).

5.1.1 Condições geométricas e operacionais

Nesta primeira análise, considera-se um estágio genérico de destilação com diâmetro de 0,300 m e altura de 0,120 m. A largura da represa é de 0,180 m com uma altura de 0,080 m. O líquido entra por uma seção retangular com altura de 0,015 m e cruza o prato por uma distância de 0,240 m. A Figura 5.1a mostra o domínio físico adotado e a Figura 5.1b apresenta um esquema com as principais dimensões do prato.

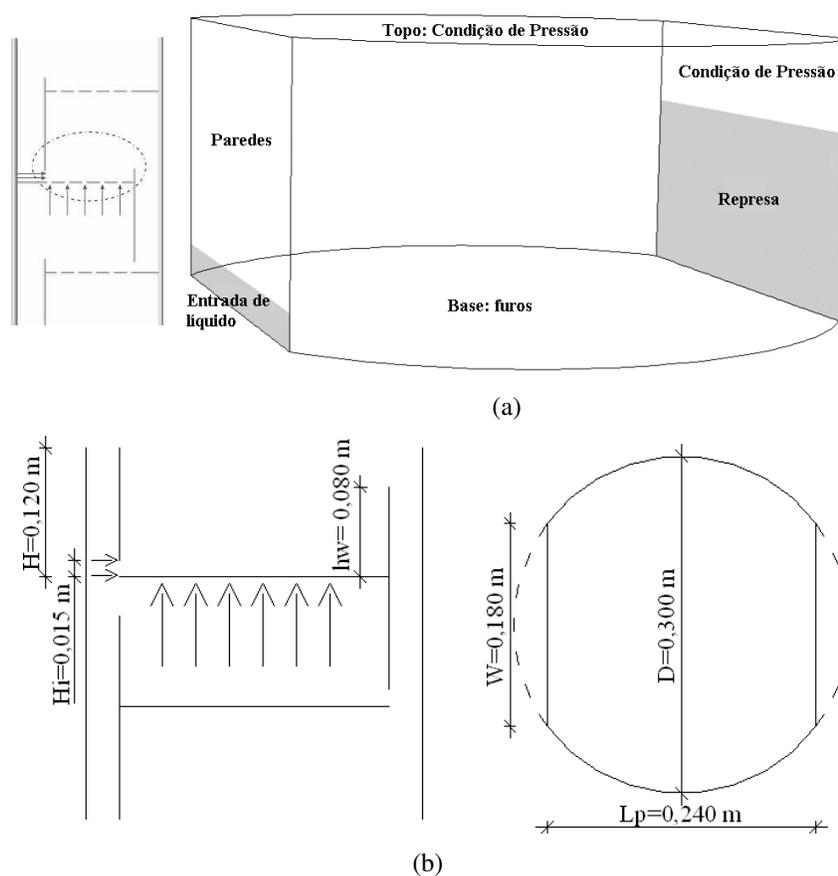


Figura 5.1: a) Condições geométricas do prato; b) Esquema de dimensionamento.

O número total de furos é de 180, de seção retangular, e com uma área total de 0,00414 m². A área efetiva de borbulhamento é de 0,06333 m², resultando numa fração de 6,54% de área perfurada em relação à área efetiva de borbulhamento.

Uma vazão de líquido, Q_L , de $2,16 \times 10^{-4}$ m³/s e velocidade superficial, V_S , de 0,7 m/s são aplicados neste estudo. A água e o ar são utilizados para representar a fase líquida e a fase vapor, respectivamente. A temperatura de operação é de 15 °C, o que resulta na massa específica da água de 996,6 kg/m³ e do ar de 1,184 kg/m³. A viscosidade, nesta temperatura, para a fase líquida é de $9,034 \times 10^{-4}$ kg/ms e para fase gasosa é de $1,835 \times 10^{-5}$ kg/ms. A pressão de operação é a atmosférica, ou seja, 101325,0 Pa.

5.1.2 Metodologia Numérica

O método numérico utilizado para resolver as equações diferenciais parciais do modelo foi o método dos volumes finitos. O Esquema de interpolação HYBRID foi utilizado para as equações de velocidade, pressão, energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação. O acoplamento pressão velocidade do tipo SIMPLEC foi empregado. O algoritmo de interpolação IMPROVED RHIE-CHOW para obter as velocidades nas faces de cada célula foi usado para evitar problemas de divergência e oscilações na solução. Os fatores de relaxação não foram utilizados, pois, em problemas transientes, esses fatores podem trazer atrasos na dinâmica, ou seja, o tempo simulado não concorda com o tempo real. O código comercial CFX 4.4 da ANSYS foi usado para gerar a malha, resolver e analisar os resultados. Um computador com processador Pentium IV e 3,0 GHz e com 1,0 Gbyte de memória RAM, necessitou de aproximadamente 170,0 horas de processamento para simular aproximadamente 15,0 s de tempo real, com incremento no tempo de 0,002 s. A malha contém aproximadamente 69120 elementos. A Figura 5.2 mostra a malha numérica utilizada.

As principais características da metodologia numérica apresentada acima foram exaustivamente estudadas por Noriler (2003) e Soares (2005) e, a partir disto, assume-se a mesma metodologia para todas as análises de experimentação numérica deste trabalho de doutorado.

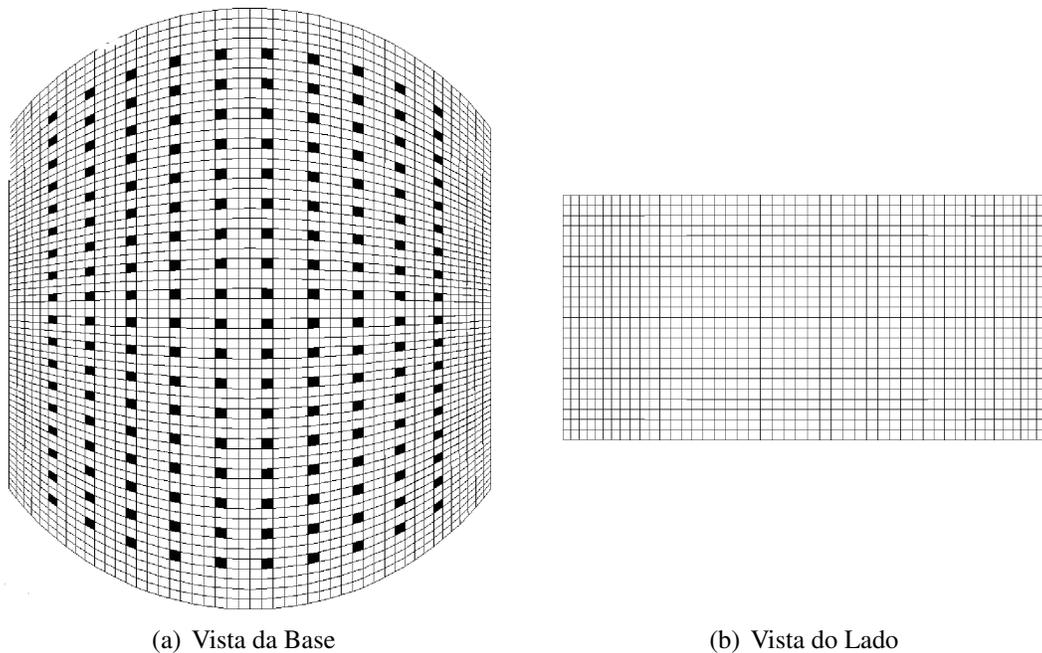


Figura 5.2: Planos da malha numérica empregada para a solução do escoamento gás-líquido isotérmico

5.1.3 Condições iniciais e de contorno

A condição inicial utilizada nas simulações do prato perfurado de coluna de destilação consiste no preenchimento do prato com água e ar até a altura da represa numa fração de volumétrica de 0,9 e 0,1, respectivamente, e acima da represa com ar puro. Esta condição evita problemas de estabilidade numérica no início das simulações. As velocidades de entrada de gás e líquido são normais e constantes nas fronteiras e as propriedades turbulentas são função da intensidade de turbulência de 5% e do diâmetro hidráulico da superfície de entrada. Impôs-se a pressão estática de 101325 Pa nas condições de pressão e as demais propriedades em função da entrada ou saída de fluido, conforme apresentado na Tabela 5.1. A condição de que a água é isenta de ar e o ar é isento de água nas suas entradas foi utilizada para facilitar a análise das regiões de maior e menor concentração de cada fase. A condição de não deslizamento na parede foi aplicada e a temperatura é constante em todo o volume. A Tabela 5.1 descreve a representação matemática das condições de contorno em conformidade com a Figura 5.1a.

Tabela 5.1: Condições de contorno.

Condição de contorno	Propriedade	Fração volumétrica da fase líquida	Fração volumétrica da fase gás
Entrada de Líquido	$v_{\alpha,x} _{in} = \frac{Q_l}{Wh_w}$, $v_{\alpha,y} _{in} = 0$, $v_{\alpha,z} _{in} = 0$ $k_{\alpha} _{in} = 1,5(i \cdot v_{\alpha,x})^2$, $\varepsilon_{\alpha} _{in} = \frac{(k_{\alpha} _{x=0})^{1.5}}{0.3L_s}$	$f_{\alpha,in} = 1,0$	$f_{\beta,in} = 0,0$
Entrada de Gás	$v_{\beta,x} _{in} = 0$, $v_{\beta,y} _{in} = 0$, $v_{\beta,z} _{in} = V_S \frac{A_B}{A_H}$	$f_{\alpha,in} = 0,0$	$f_{\beta,in} = 1,0$
Condição de pressão	Se entrada ^a $\frac{\partial v_{\alpha}}{\partial \eta} _{in} = \frac{\partial v_{\beta}}{\partial \eta} _{in} = 0$, $k_{\alpha} = k_{\alpha,in}$ $\varepsilon_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha,in}$, $P_{static} = P_0$	$f_{\alpha,in} = 0,0$	$f_{\beta,in} = 1,0$
	Se saída ^a $\frac{\partial v_{\alpha}}{\partial \eta} _{out} = \frac{\partial v_{\beta}}{\partial \eta} _{out} = 0$, $\frac{\partial k_{\alpha}}{\partial \eta} _{out} = 0$ $\frac{\partial \varepsilon_{\alpha}}{\partial \eta} _{out} = 0$, $P_{static} _{out} = P_0$	$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \eta} _{out} = 0$	$\frac{\partial f_{\beta}}{\partial \eta} _{out} = 0$
Parede	$\mathbf{v} _{wall} = 0$, $k _{wall} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \zeta} _{wall} = 0$ Função de parede logarítmica	$\frac{\partial f_l}{\partial \zeta} _{wall} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial \zeta} _{wall} = 0$

ζ é a direção ortogonal à parede, η é a direção normal à fronteira

^aA condição de pressão possibilita tanto a entrada de fluido quanto a saída. O software identifica se é entrada ou saída e aplica a condição correta

5.2 Resultados e discussões

O acompanhamento da dinâmica do escoamento gás-líquido no prato perfurado da coluna de destilação é realizado através do monitoramento da altura de líquido claro¹⁷ que é uma variável macroscópica reconstituída a partir de parâmetros de campo.

A Figura 5.3 mostra o monitoramento da altura de líquido claro em função do tempo a partir do início da injeção do gás. Por inspeção a Figura 5.3, pode-se determinar uma retenção gasosa no prato na ordem de 35%. Percebe-se, ainda, que o comportamento do escoamento é oscilatório e não é atingido um estado estacionário estável. Pode-se sim, detectar um estado “quasi-estacionário”, ou seja, um regime onde as propriedades flutuam em torno de uma média bem definida. Apesar do caráter oscilatório, esta oscilação não é periódica e sim aleatória.

¹⁷A altura de líquido claro é definida como a altura de líquido acumulado a partir da superfície do prato, equivalente a uma condição de ausência da fase gasosa.

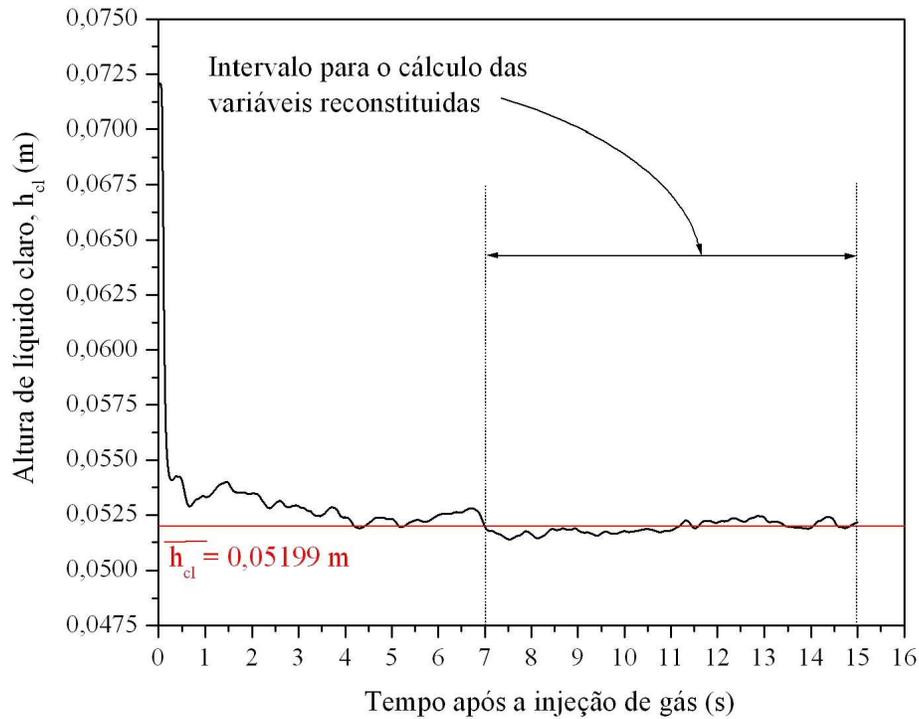


Figura 5.3: Monitoramento da altura de líquido claro em função do tempo após a injeção de gás ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms).

Observando a Figura 5.3, pode-se identificar a região de “quasi-estacionário” a partir dos 7,0 s de tempo real. Limita-se esta condição estabelecendo-se o critério de que a flutuação da altura de líquido claro não tenha variação superior ao desvio padrão da média temporal feita a cada novo passo de tempo. Assim, a partir do ponto onde a média temporal apresenta-se constante dentro do desvio padrão fixa-se o ponto limite do estado de “quasi-estacionário”. Para o cálculo da média temporal de altura de líquido clara aplica-se a seguinte equação:

$$\overline{h_{cl}} = \frac{\int_{t_0}^{t_f} h_{cl}(t) dt}{\Delta t} \quad (5.1)$$

onde, t_0 e t_f são o tempo inicial e o tempo final que limitam a condição de estado “quasi-estacionário”, respectivamente.

Os resultados numéricos foram comparados com a correlação experimental de Bennett *et al.* (1983), que fornece valores reconhecidamente confiáveis e amplamente utilizados para o projeto de colunas de pratos perfurados.

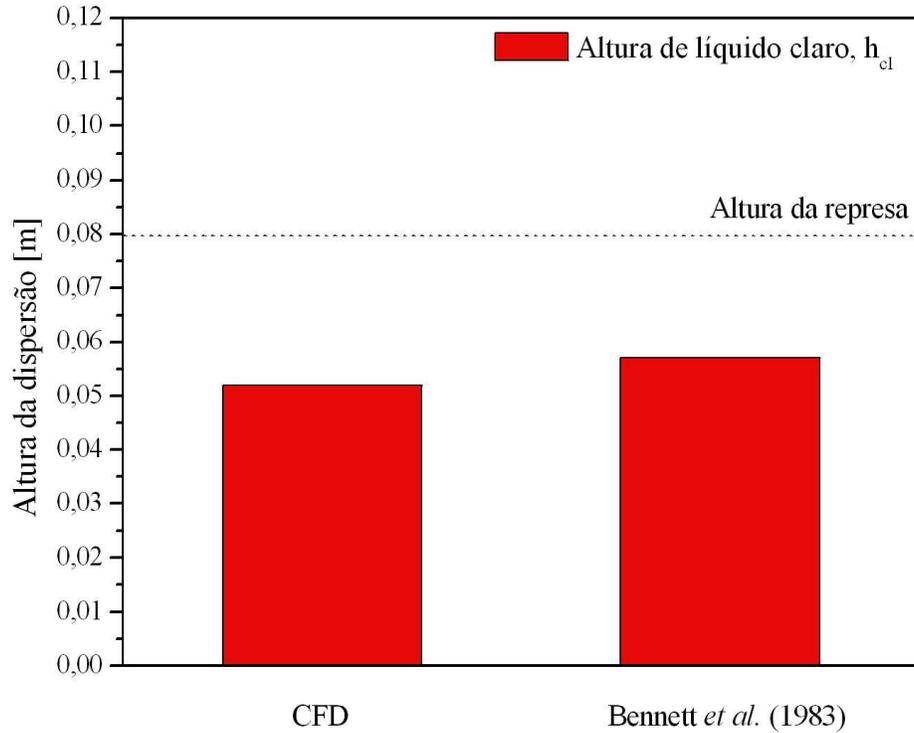


Figura 5.4: Comparação entre altura de líquido claro obtido por CFD e previsto pela correlação de Bennett *et al.*(1983). ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms).

$$h_{cl} = f_l^{media} \left[h_w + C \left(\frac{Q_L}{W f_l^{media}} \right)^{0,67} \right] \quad (5.2)$$

com

$$C = 0,50 + 0,438 \exp(-137,8h_w) \quad (5.3)$$

onde a fração volumétrica média do líquido é calculada com auxílio da Equação 3.32.

A Figura 5.4 compara o valor simulado da altura de líquido claro, reconstituída a partir de parâmetros microscópicos e o valor resultante da aplicação da correlação empírica de Bennett *et al.* (1983).

Pode-se observar na Figura 5.4, uma diferença entre os valores simulados e os obtidos através da correlação na ordem de 8,7%. Isto corresponde a uma diferença absoluta de 0,005 m. Segundo Baten e Krishna (2000), a análise de seus dados experimentais para o sistema ar-água, possibilitou concluir que a altura de líquido claro sofre um pequeno afastamento para valores abaixo dos correlacionados por Bennett *et al.* (1983). Esta afirmação supõe

que o modelo prevê com boa confiança a altura de líquido claro, reconstituída através de variáveis de campo, quando comparado com a correlação de Bennett, já que a correlação é função somente da velocidade superficial do gás, da altura da represa e de seu comprimento, além das propriedades físicas das fases. Já o modelo heterogêneo aplicado, leva em consideração a geometria completa, a variação de todas as propriedades conserváveis inerentes ao escoamento no espaço e no tempo, as condições operacionais, como vazão de líquido, gás e pressão no sistema, além das propriedades físicas do sistema multifásico.

A fração volumétrica de líquido é analisada através de uma média da variável no plano x-y como função da altura da dispersão, calculadas em um intervalo suficiente de tempo para garantir a condição de “quasi-estacionário”, ou seja, entre 7,0 e 15,0 segundos. A Equação 5.4 mostra a descrição matemática aplicada para determinar-se o perfil médio de fração volumétrica de líquido como função da altura da dispersão.

$$\bar{f}_\alpha(z) = \int_{t_0}^{t_f} \left(\frac{\int \int_A f_\alpha(x,y,z,t) dx dy}{\int \int_A dx dy} \right) dt / \Delta t \quad (5.4)$$

onde as direções x e y prescrevem planos transversais da coluna de destilação.

A Figura 5.5 mostra o perfil da fração volumétrica média de líquido, ao longo da altura da dispersão. Ao se observar a Figura 5.5, percebe-se que a fração volumétrica média de líquido cresce rapidamente de uma região de ausência de líquido, próximo ao topo do prato, cruza a faixa imaginária da altura da represa e estabiliza um pouco abaixo da altura da represa, para valores próximos a 0,55. Já, ao se aproximar da base do prato, cerca de 0,020 m da base, a fração volumétrica média do líquido torna a crescer, até valores próximos a 0,75 na base do prato. Isto sugere que, das imediações da base do prato até a altura de 0,020 m, as bolhas sobem verticalmente na forma de jatos e depois se dispersam no líquido formando uma espécie de emulsão que vai se desfazendo à medida que a altura da dispersão aumenta, até que não haja líquido misturado ao gás em quantidade significativa. Neste sentido, Zuiberweg (1982) e Bennett et al. (1983) definem os regimes de escoamentos presentes em um estágio de destilação de duas formas: o regime *spray*, quando em baixas taxas de líquido e altas velocidades do vapor; e o regime de emulsão, presente em condições de altas taxas de líquido e velocidades relativamente baixas de vapor.

Para as situações destacadas acima, existe uma região com alta concentração de líquido junto à base do prato, uma região de mistura até pouco acima da altura da represa e uma região

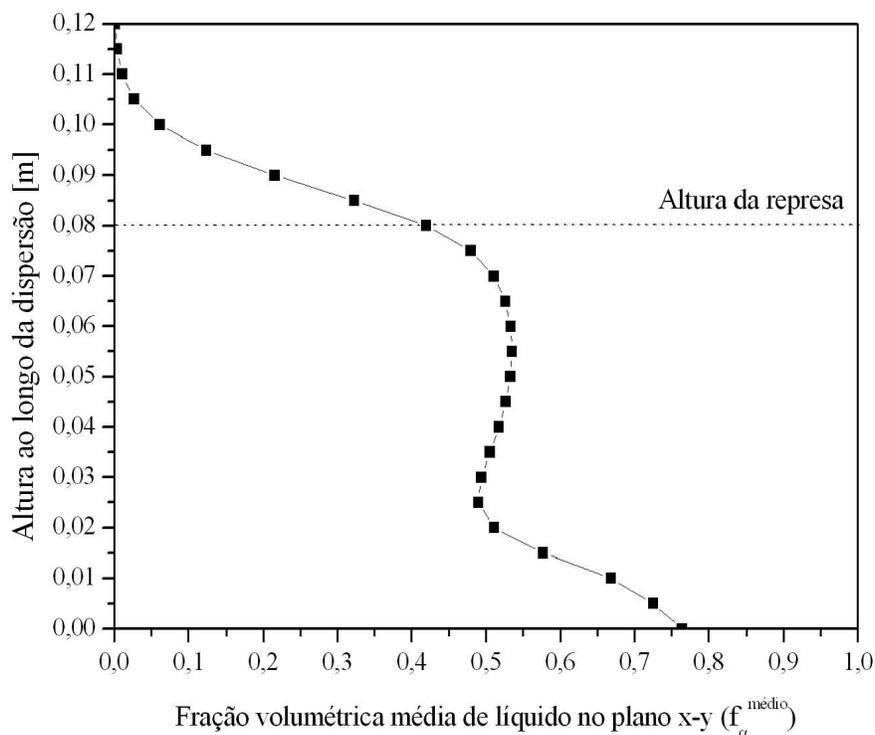


Figura 5.5: Fração volumétrica média de líquido no plano x-y como função da altura ao longo da dispersão ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms).

de gás contínuo com pequenas gotículas de líquido. A região de mistura é caracterizada pelo líquido disperso quase que completamente em pequenas gotas pela ação dos jatos de vapor, no regime *spray*, e pela formação de bolhas completamente dispersas no líquido, formando uma emulsão de fluxo contínuo, no regime de emulsão. Além disso, a característica de estado quasi-estacionário, cujas propriedades flutuam em torno de uma média bem definida (vide Figura 5.3), é típica de qualquer regime de escoamento em pratos perfurados de colunas de destilação. Deste modo pode-se perceber na Figura 5.5, que a fração volumétrica média comporta-se de forma similar ao descrito por Zuiberweg (1982) e Bennett et al. (1983), corroborando assim, de forma qualitativa, os modelos e métodos aplicados.

Tanto a altura de líquido claro quanto a fração volumétrica média de líquido são calculadas através dos campos microscópicos da fração volumétrica de líquido. A Figura 5.6 apresenta uma seqüência dos campos de fração volumétrica de líquido para um segundo de tempo real em um período considerado “quasi-estacionário” em um plano central que vai desde a entrada de líquido até a represa.

Observando-se a Figura 5.6 percebe-se que na base do prato a concentração de líquido é maior, e vai diminuindo até formar uma emulsão que depois termina no limite da região

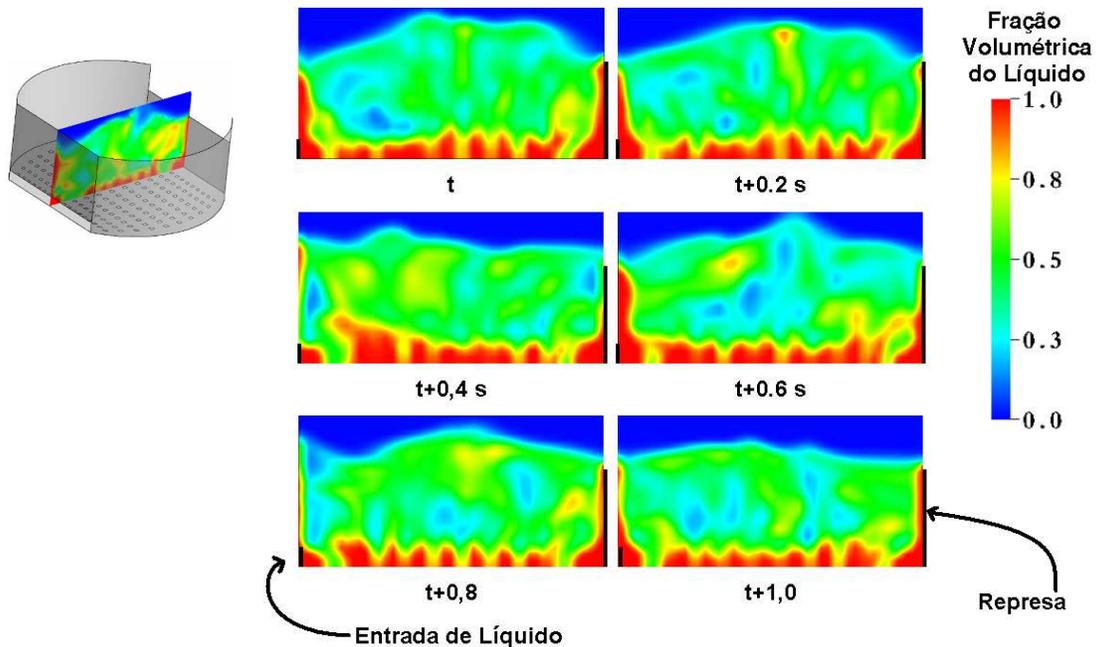


Figura 5.6: Campos de fração volumétrica de líquido em um plano x-z central desde a entrada de líquido, à esquerda, até a represa, a direita, a cada 0,2 segundos em um período de estado “quasi-estacionário” ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms).

de borbulhamento. É importante notar também que, o escoamento é completamente caótico, apresentando fenômenos de arraste de pequenas porções de líquido pelo vapor, que por sua vez, caem sobre a emulsão quando seu peso se torna maior que o arraste. Estes fenômenos acontecem constantemente e, em diversas regiões do prato. Isto faz com que nestas regiões o contato líquido/vapor, ou a área por volume, diminua, tendo como consequência o surgimento de problemas de transferência de calor e massa entre as fases.

Desta forma, a análise do grau de mistura entre as fases torna-se uma variável importante e pode ser visualizada pela Figura 5.7 que apresenta a isocurva de fração volumétrica de líquido igual a 0,5.

É visível, ao observar-se a Figura 5.7, que junto às paredes, nos cantos e próximo à base do prato, o líquido forma uma fase contínua com baixo grau de mistura. Na região central do prato registra-se condição de mistura de líquido e vapor que varia de intensidade com o espaço e com o tempo. Há regiões em que a presença do vapor é mais efetiva e regiões em que o líquido apresenta maiores concentrações. Este aglomerado de líquido contínuo confere ao sistema menor grau de mistura, o que, possivelmente, contribuirá para um fraco desempenho da transferência de calor e massa entre as fases.

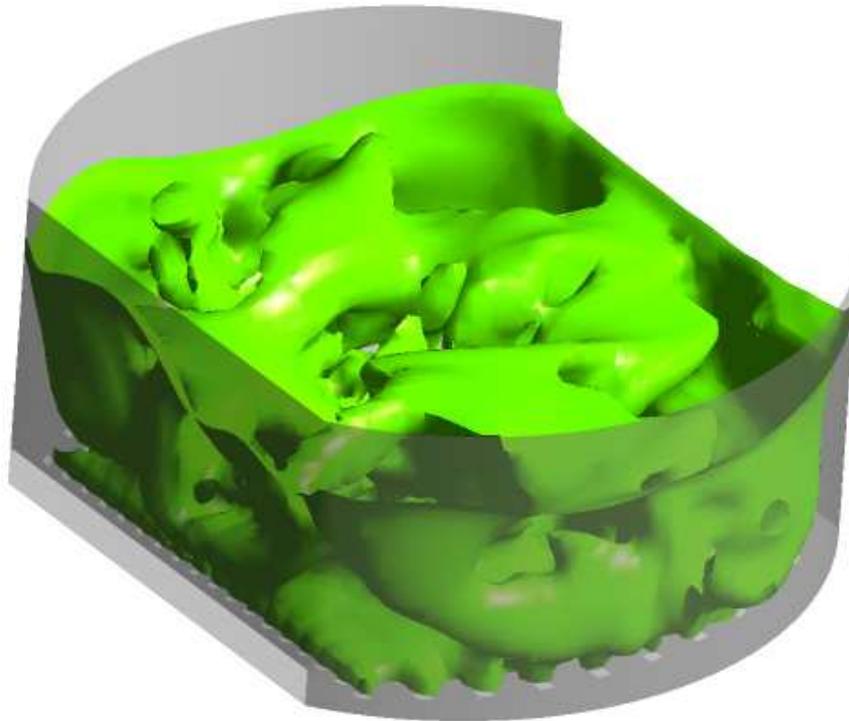


Figura 5.7: Isocurva de fração volumétrica de líquido em um tempo t no estado “quasi-estacionário” ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms).

O campo vetorial de velocidade de líquido, a exemplo dos campos de frações de volume, também varia com o tempo. No entanto, estas variações são menos intensas, mas apresentam as mesmas características caóticas dos campos de frações de volume. A Figura 5.8 apresenta o campo vetorial de velocidade do líquido para 3 planos distintos em um instante de tempo t no estado de quasi-estacionário. Observa-se na Figura 5.8, tendências de recirculação de líquido acima da entrada de líquido e junto à represa, destacado na Figura 5.8a. Já a Figura 5.8b destaca a tendência à recirculação de líquido nas regiões junto à parede. Em um plano x - y a 10 mm da base do prato a tendência é o líquido migrar de regiões próximas à parede para a região central do prato, como destacado na Figura 5.8c.

A Figura 5.9 mostra o campo de pressão em um plano x - y a 10 mm da base do prato em um instante de tempo t no estado de quasi-estacionário. A variação da pressão com a altura do prato é resultado, principalmente, da pressão estática, ou seja, da coluna de líquido. Isto acontece porque a pressão estática é muito superior à pressão dinâmica. Ao se observar a Figura 5.9, nota-se que existem gradientes de pressão ao longo do plano, com regiões de pressões superiores nas proximidades das junções entre a entrada de líquido e a parede cilíndrica, assim como nas junções da represa com a parede cilíndrica. Já nas regiões centrais,

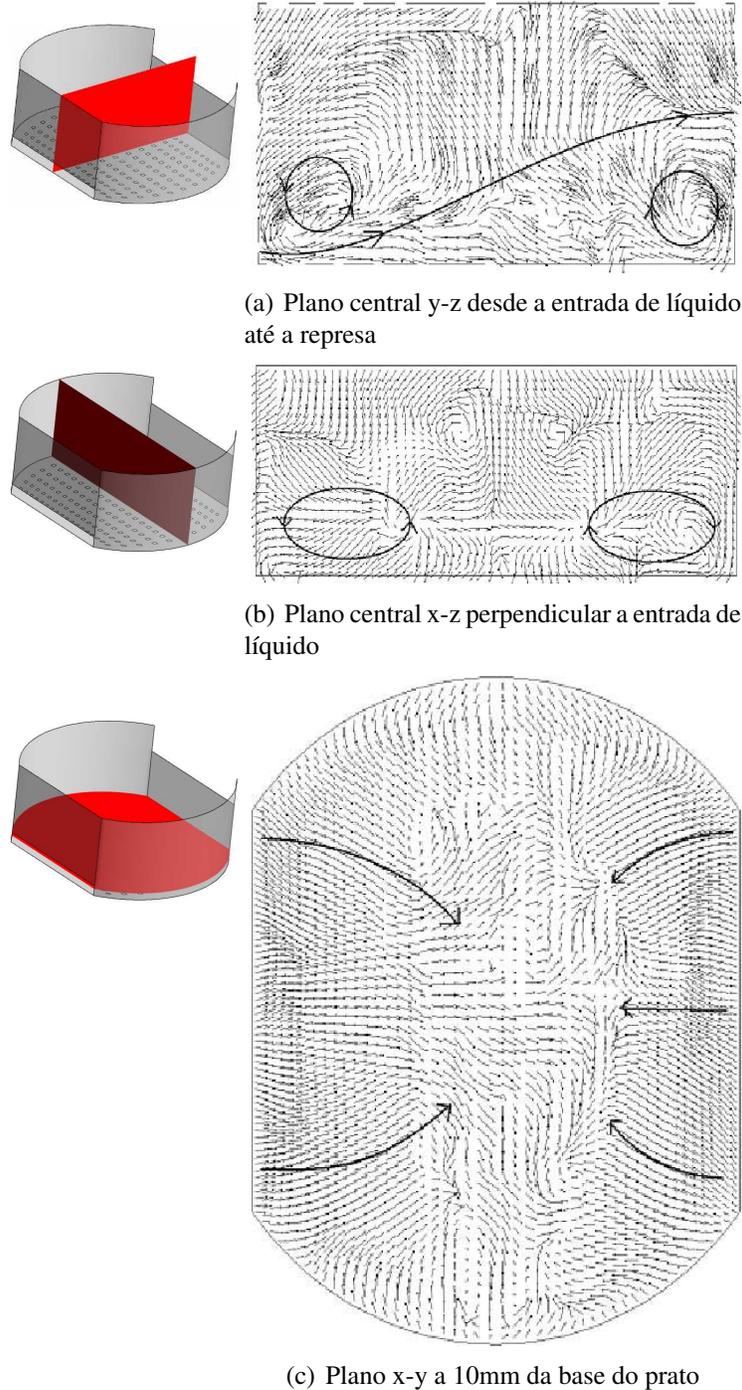


Figura 5.8: Campos vetoriais da velocidade de líquido para: a) plano central y-z; b) plano central x-z; c) plano x-y a 10 mm da base do prato no instante de tempo t .

observa-se pressões baixas e moderadas. Este resultado indica que a hipótese do equilíbrio mecânico adotado na modelagem de equilíbrio e de não equilíbrio não condiz com a realidade física do processo e o campo de pressão no prato deve ser considerado nos projetos de colunas de destilação.

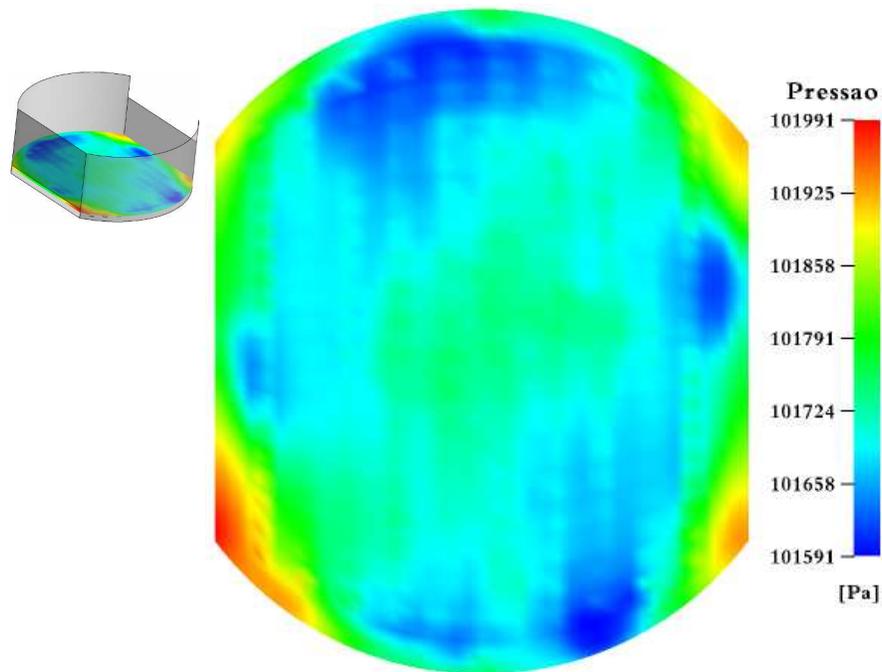


Figura 5.9: Campo de pressão em um plano x-y a 10 mm da base do prato em um instante de tempo t ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms).

5.2.1 Análise do volume de borbulhamento

Para o cálculo da fração volumétrica média de líquido, necessária para estimar a velocidade de ascensão média do gás, é utilizada a correlação de Bennett *et al.* (1983), Equação 3.32, que por sua vez é função da velocidade superficial do gás e das propriedades físicas das fases. No entanto, a fração volumétrica média de líquido é definida como a fração de volume média do líquido no volume de borbulhamento. Como se pode observar na Figura 5.10, que descreve a variação do volume de borbulhamento com o tempo, verifica-se que o volume de borbulhamento varia com o tempo. O limite da região de borbulhamento é definido, neste momento, como sendo a isocurva, acima da altura da represa, cuja fração de volume do líquido é igual a 0,05. Este resultado indica que o cálculo do coeficiente de arraste em função de uma fração volumétrica média de líquido constante pode ser melhorada acoplado a equação constitutiva proposta por Krishna *et al.* (1999) um método de cálculo da fração volumétrica média de líquido que leve em consideração esta variação. Desta forma, a equação de Cowell (1979), que considera esta variação, será aplicada na seção posterior, para avaliar seus efeitos sobre a dinâmica do escoamento no prato perfurado de destilação.

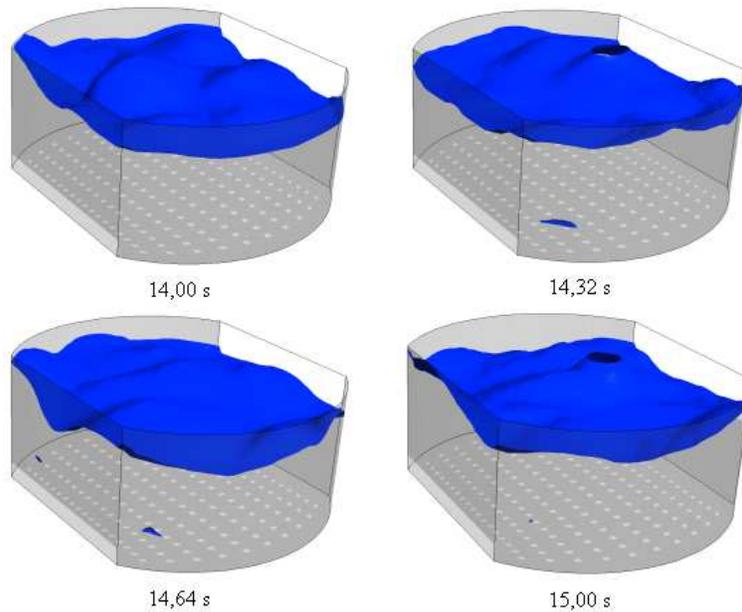


Figura 5.10: Limite do volume de borbulhamento. Isocurvas de fração de volume do líquido igual a 0,05 ($V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms).

5.2.2 Análise dos modelos de coeficiente de arraste

A interação entre as fases é fundamental na interpretação do escoamento multifásico. Em problemas de escoamento gás-líquido onde existem grandes colunas de líquido com pequenas frações de volume de bolhas, muitas forças tem mostrado importância, tais como, força de massa virtual, força de sustentação, entre outras, além da quebra e coalescência de bolhas. No entanto, o regime em pratos perfurados de destilação apresenta frações de volume equivalentes para ambas as fases. Desta forma assumiu-se como hipótese, na modelagem, somente a atuação da força de arraste.

Desta forma, o coeficiente de arraste apresenta-se como “ponto chave” na modelagem matemática para o sucesso da representação do escoamento líquido/vapor em pratos perfurados de colunas de destilação e, em geral, para escoamentos cujas bolhas de gás/vapor cruzam pequenas colunas de líquido. Muitos estudos, conforme os apresentados no Capítulo II, têm revelado melhoras na representação do escoamento neste tipo de problema com o aprimoramento dos coeficientes de arraste.

Neste sentido, foram feitas análises da influência do coeficiente de arraste sobre a representação do escoamento líquido/vapor em pratos perfurados de destilação. Foram analisados três modelos distintos: o modelo clássico para partículas deformáveis, proposto por Ishii e

Zuber (1979); o modelo para o arraste proposto por Krishna *et al.* (1999) acoplado à correlação de Colwell (1979) para a fração volumétrica média de vapor; e por fim o modelo para o arraste proposto por Krishna *et al.* (1999) acoplado à correlação de Bennett *et al.* (1983) para a fração volumétrica média de vapor. Todos os modelos e correlações citados foram apresentados no Capítulo III.

Sugere-se, nesta análise, a implementação de um método de cálculo da fração volumétrica média do líquido no modelo proposto por Krishna *et al.* (1999) através da correlação empírica de Colwell (1979). A análise feita na literatura apresenta este cálculo como um valor fixo, independentemente do tempo. No entanto, esta correlação é função da altura de líquido claro que, por sua vez, como verificado na Figura 5.1, tem comportamento oscilatório e é função do tempo. Sendo assim, a análise considera a variação da fração volumétrica média de líquido correlacionada pela equação proposta por Colwell (1979) em função da variação da altura de líquido claro.

A Figura 5.11 compara a variável macroscópica altura de líquido claro, reconstituída a partir de variáveis de campo, como uma função do modelo de coeficiente de arraste. A altura de líquido claro foi calculada como sendo a média em um tempo suficientemente longo para garantir o estado de “quasi-estacionário”, em todos os casos, da mesma forma que os estudos anteriores. Verifica-se, ao observar a Figura 5.11, que o modelo proposto por Ishii e Zuber (1979) apresenta altura de líquido claro próximo de zero. Isto indica que houve um arraste completo do líquido sobre o prato, causado pelo excessivo arraste do líquido pelo vapor, gerado pelo alto valor do coeficiente de arraste predito pela correlação. Isto se deve ao fato da correlação ser desenvolvida para uma única bolha ascendendo numa coluna de líquido sem movimento. Além disso, a correlação é função do diâmetro médio das bolhas, que apresentam larga faixa de variação e são de difícil predição. Para este caso considerou-se o diâmetro da bolha igual ao diâmetro do furo, ou seja, 5 mm. O modelo proposto por Krishna *et al.* (1999) acoplado à correlação de Colwell (1979) para fração volumétrica média do vapor calculada como uma função do tempo, apresentou valores próximos a 0,01 m, muito abaixo daquela correlacionada por Bennett *et al.* (1983) (vide Figura 5.4) e aquela reconstituída através da aplicação do modelo proposto por Krishna *et al.* (1999) acoplado a correlação de Bennett *et al.* (1983).

O coeficiente de arraste é diretamente proporcional ao quadrado da fração volumétrica média de vapor. Isto implica que quanto maior a fração volumétrica de vapor, maior será

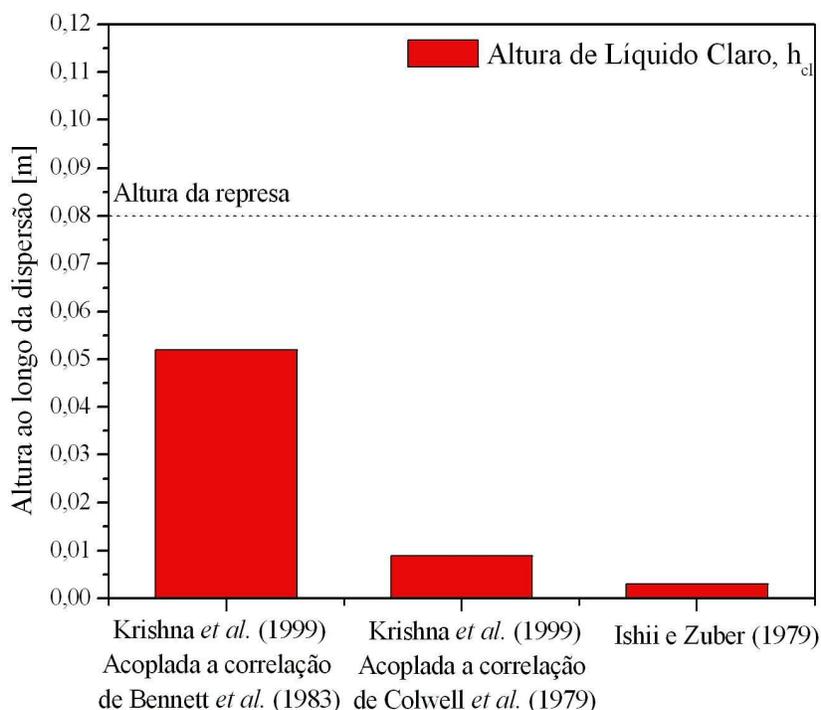


Figura 5.11: Comparação da altura de líquido claro em função do modelo de coeficiente de arraste.

a força de arraste. A oscilação desta variável, calculada pela correlação de Colwell (1979), gera efeitos negativos na determinação do arraste, proporcionando um crescimento gradual da força de arraste tendo, como consequência, o arraste de líquido para além das fronteiras do estágio até que, praticamente, não exista mais líquido sobre o prato. Já os dados reconstituídos através da aplicação do modelo proposto por Krishna *et al.* (1999) acoplado à correlação de Bennett *et al.* (1983) apresentaram valores próximos a 0,05 m que sugere ser um valor representativo para altura de líquido claro quando comparado com a correlação de Bennett *et al.* (1983) apresentada no item anterior.

Diante disto, a partir deste ponto, é assumido, para todas as demais análises deste trabalho, que o coeficiente de arraste é calculado segundo o modelo proposto por Krishna *et al.* (1999) acoplado à correlação de Bennett *et al.* (1983) para determinação da fração volumétrica média de gás seguindo a estratégia adotada por Baten e Krishna (2000).

5.2.3 Análise do efeito geométrico na entrada de gás

Nos casos anteriores, assumiu-se como condição de contorno para entrada do vapor, perfil de velocidade plano e igual em todos os furos de modo que a velocidade superficial seja igual

à especificada. No entanto, a velocidade igual em todos os furos parece uma hipótese que não representa a realidade, pois, conforme Figura 5.9, a pressão é uma função da condição fluidodinâmica do prato e varia ao longo do prato. Para verificar-se a validade desta hipótese, fez-se um estudo da influência da condição de contorno do vapor em relação à distribuição do vapor. Para isto, considera-se a extensão do domínio físico para além da base do prato, e considera-se perfil plano de velocidade em uma região de fase vapor do prato inferior. Além disso, a altura do prato é aumentada para garantir a condição de saída de vapor pela região superior. As condições geométricas básicas das variações utilizadas nesta análise são aquelas já aplicadas na análise anterior, ou seja, diâmetro de 0,300 m, largura da represa de 0,180 m com uma altura de 0,080 m, em ambos os casos. O líquido entra por uma seção retangular com altura de 0,015 m e cruza o prato por uma distância de 0,240 m nas duas geometrias.

A Figura 5.12 apresenta, em detalhes, a geometria base e a geometria estendida utilizada nas análises da influência da condição de velocidade nos furos.

Para a geometria base, a altura do prato é de 0,120 m que por sua vez é aumentada em 0,04 m, totalizando 0,16 m, para a geometria estendida. Esta, ainda, é ampliada em 0,04 m além da base do prato, onde em seu limite é considerado um perfil de velocidade plano, sendo a vazão de vapor a mesma especificada para ambos os casos. As condições de contorno são as mesmas utilizadas anteriormente, apresentadas na Tabela 5.1, à exceção da entrada de vapor que, para geometria base, é realizada diretamente nos furos, e para geometria estendida é feita em um plano 0,04 m abaixo do prato. As condições operacionais correspondem a uma vazão de líquido, Q_L , de $2,16 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ e velocidade superficial, V_S , de 0,7 m/s e os fluidos são considerados água como fase líquida e ar como fase vapor.

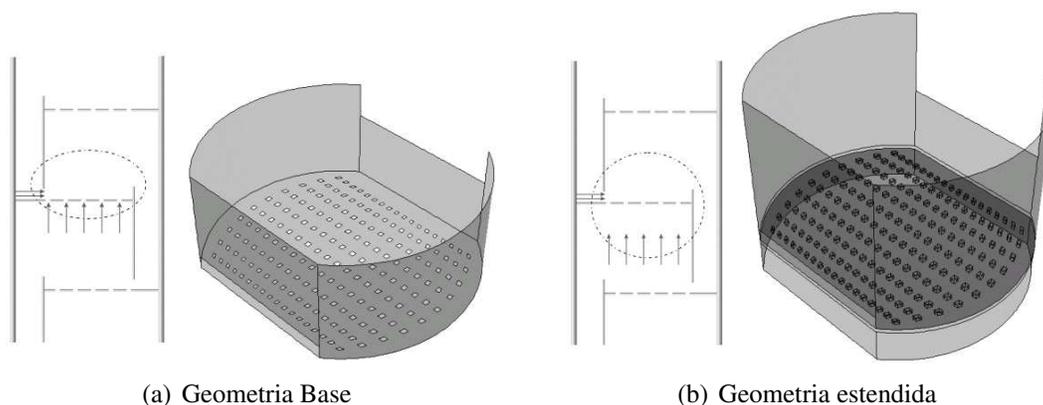


Figura 5.12: Variações da condição de entrada de gás.

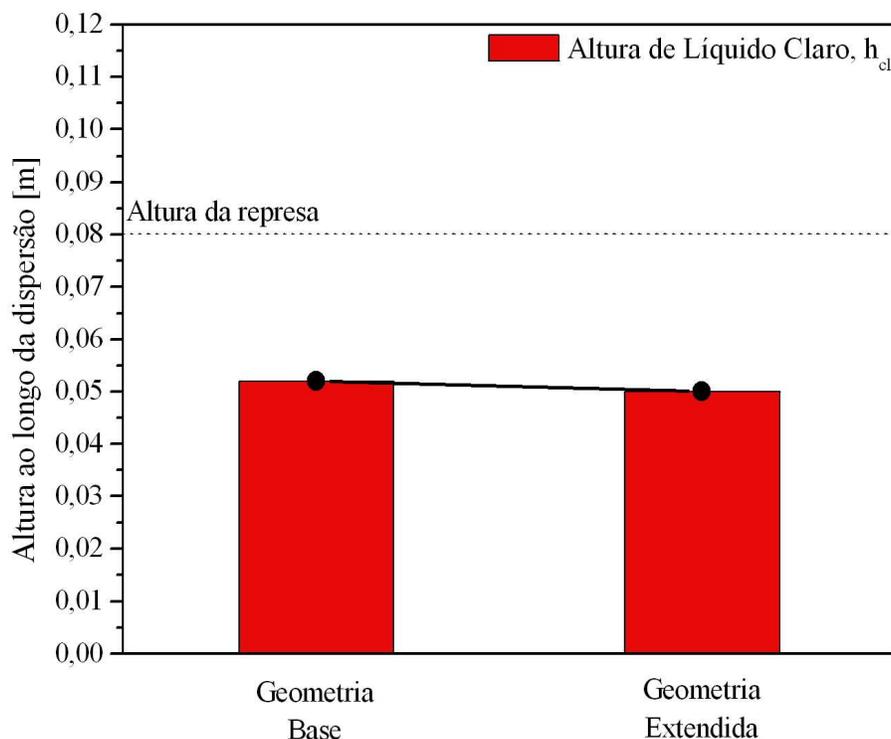


Figura 5.13: Comparação da altura de líquido claro em função da condição de contorno da entrada do vapor.

Assim como nos itens anteriores, a análise da altura do líquido claro se mostra como uma importante variável para avaliação da influência da condição geométrica na entrada de vapor. Sendo assim, na Figura 5.13 pode-se observar a influência da condição de contorno do vapor sobre a altura de líquido claro.

Nota-se, a partir da análise da Figura 5.13, que há uma leve tendência à diminuição da altura de líquido claro na geometria estendida, em relação à geometria base. Esta pequena discrepância, calculada em 4%, mostra que a hipótese de velocidades iguais em todos os furos é uma boa aproximação e pode ser utilizada, quando a variável de análise é a altura de líquido claro.

No entanto, a altura de líquido claro é uma variável macroscópica, reconstituída a partir de parâmetros microscópicos, e é menos sensível à influência da condição de contorno do gás, pois é função, principalmente, da velocidade superficial do vapor, e este, para ambos os casos, é idêntica. A fim de se verificar a influência da condição de contorno sobre as variáveis microscópicas, apresenta-se, primeiramente, na Figura 5.14 o perfil da fração volumétrica média de líquido como função da altura da dispersão. A fração volumétrica média é calculada através da média em sucessivos planos paralelos a base do prato, em um tempo su-

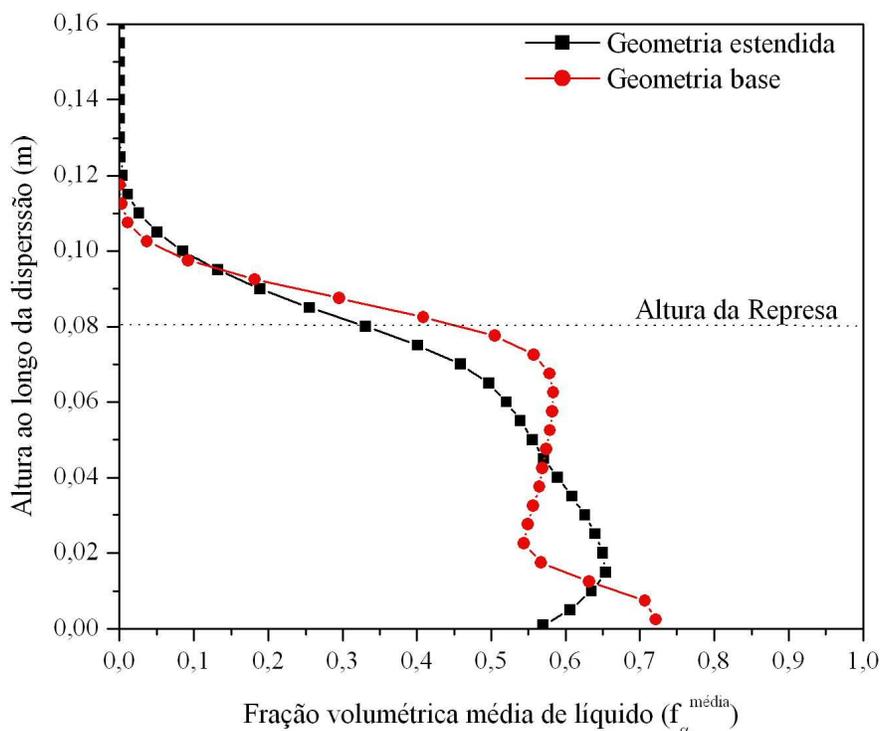


Figura 5.14: Fração volumétrica média no plano x-y como função da altura ao longo da dispersão.

ficientemente grande para garantir a condição de estado quasi-estacionário, a luz da Equação 5.4.

Pode-se observar, na Figura 5.14, que os perfis da fração volumétrica média de líquido seguem a mesma tendência, apresentando valores um pouco menores para geometria estendida na região próxima à altura da represa. No entanto, esta variação não parece ser significativa, quando se compara o custo computacional incrementado pela geometria estendida, pois, é importante ressaltar, que as relações de malha numérica foram mantidas em ambos os casos, o que gera um aumento do esforço computacional em aproximadamente 100% do caso base para o caso da geometria estendida.

A principal análise está relacionada aos valores da velocidade do vapor nos furos. A Figura 5.15 apresenta o perfil de velocidade axial do vapor em uma linha central de furos desde a entrada de líquido até a represa. Pode-se observar que nos furos próximos da entrada e da represa, a variação na velocidade axial do vapor é menor que nas demais regiões do prato, evidenciando maior pressão sobre esses furos causada pela pressão dinâmica associada aos vórtices de líquido presentes próximo as paredes. Percebe-se, também, que há uma variação temporal na velocidade, principalmente no centro, indicando movimentos oscilatórios,

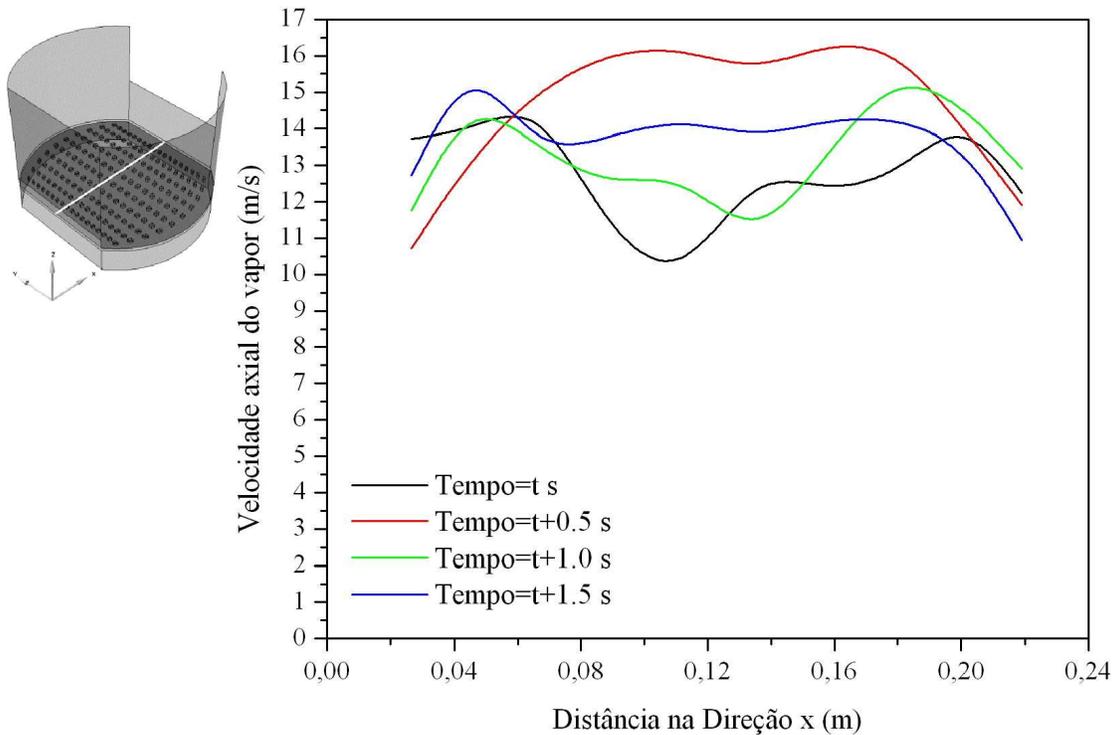


Figura 5.15: Perfil de velocidade axial do vapor em uma linha central de furos, desde a entrada de líquido até a represa como função do tempo.

característicos do regime de quasi-estacionário.

Já a Figura 5.16 apresenta o perfil de velocidade axial do vapor em uma linha central de furos paralela à represa, conforme detalhe na figura. Pode-se observar que as variações nesta direção são mais acentuadas, com picos de velocidade que se deslocam ao longo do tempo em um movimento oscilatório. Estes picos oscilam da direita para a esquerda de uma região cuja razão entre o diâmetro e o diâmetro total é de 0,33 até a região onde esta razão é de aproximadamente 0,66. Esta oscilação promove um perfil médio parabólico, com velocidades maiores na região central do estágio, o que explica, em parte, a tendência ao decréscimo da altura de líquido claro para geometria estendida. Com velocidades maiores na região central, o arraste será maior, pois este depende da velocidade relativa entre as fases e, como consequência, a fração média de vapor aumenta e a altura de líquido claro diminui.

A Figura 5.17 compara os campos vetoriais para a geometria base e geometria estendida em um tempo t no estado de quasi-estacionário. Pode-se notar que para geometria estendida há uma maior tendência dos vetores no centro em direcionar-se para cima, como evidencia a Figura 5.17, motivados pela maior velocidade axial do vapor nas regiões centrais. No entanto, a tendência de regiões de recirculação junto à entrada de líquido e a represa com caminhos

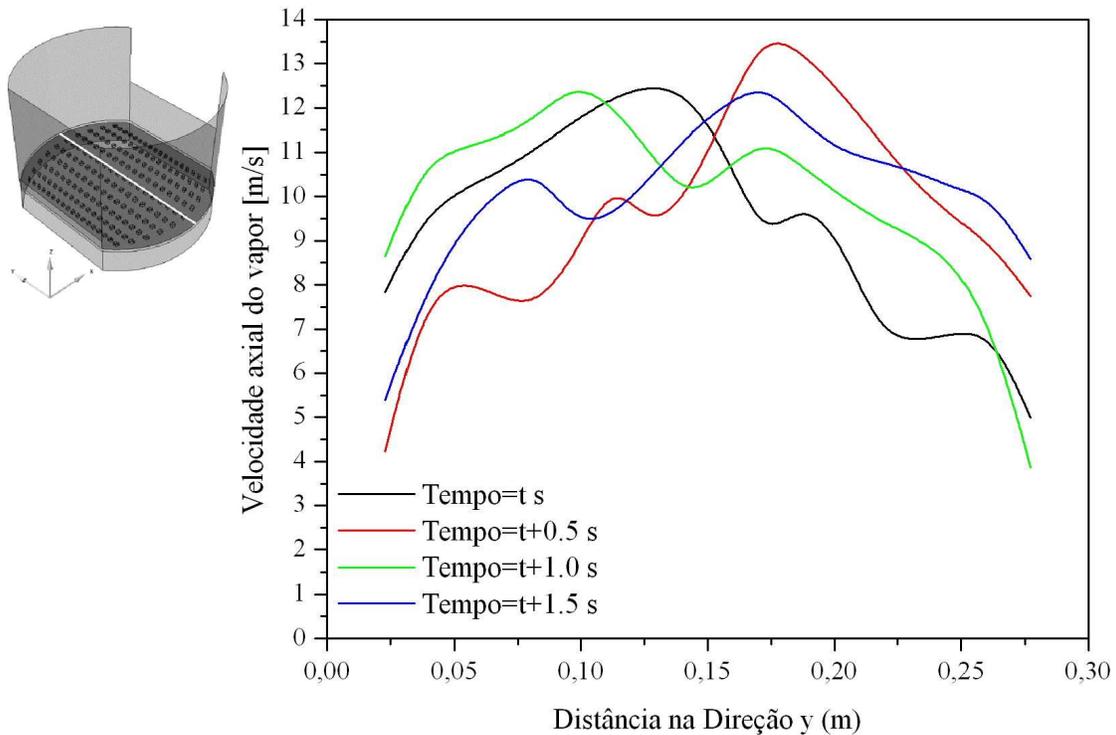


Figura 5.16: Perfil de velocidade axial do vapor em uma linha central de furos na direção paralela à represa como função do tempo.

preferenciais que vão desde a entrada até a saída é evidenciada em ambos os casos.

Diante do exposto, e em função da pouca influência da condição de igualdade de velocidade em todos os furos, como pode ser apurado nesta análise, assume-se a partir deste momento como válida a hipótese da igualdade de velocidade em todos os furos e será aplicada para todos os demais estudos de caso deste trabalho de tese de doutorado.

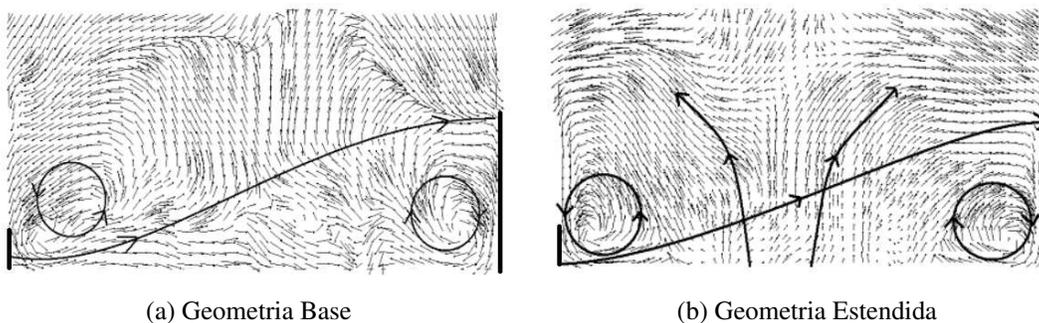


Figura 5.17: Mapas vetoriais para a geometria base e para geometria estendida

5.2.4 Alteração das condições geométricas do prato

Feitas todas as considerações e análises inerentes à aplicabilidade dos modelos e métodos ao escoamento isotérmico e sem transferência de massa, e a conseqüente definição das hipóteses e modelos a serem aplicados, propõe-se agora a avaliação de mudanças geométricas na estrutura do prato para se verificar a influência na dinâmica do escoamento e avaliar o impacto das modificações sobre o desempenho do prato de destilação. Esta atividade está relacionada ao projeto e a ampliação de escala de processo, referenciado como um dos objetivos deste trabalho de tese.

Para tal, é avaliada a modificação geométrica que consiste na divisão do prato em três regiões formando uma cascata. A Figura 5.18 apresenta em detalhes a alteração geométrica sugerida, e a Figura 5.19 relaciona as principais dimensões do prato modificado.

O prato modificado é em um estágio genérico de destilação com diâmetro de 0,300 m, com altura total de 0,200 m. O prato é dividido em três regiões distintas que consistem: na região de entrada com comprimento de 0,075 m e altura de represa de 0,060 m; na região central com 0,060 m de desnível em relação à região de entrada, com comprimento de 0,090

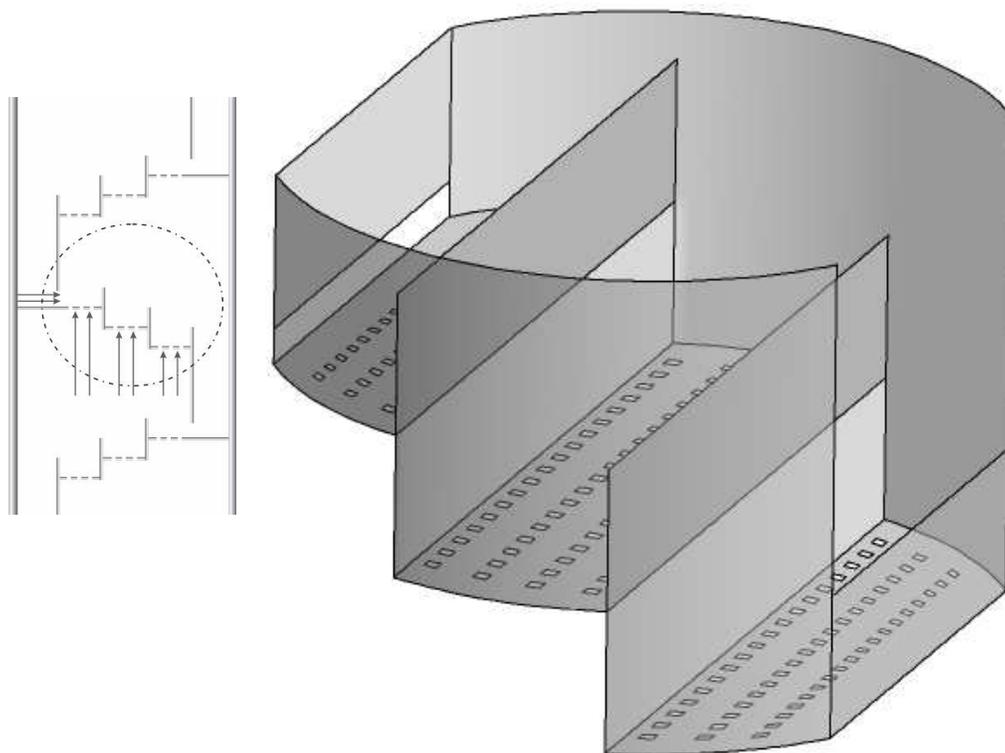


Figura 5.18: Modelo físico adotado para a geometria modificada.

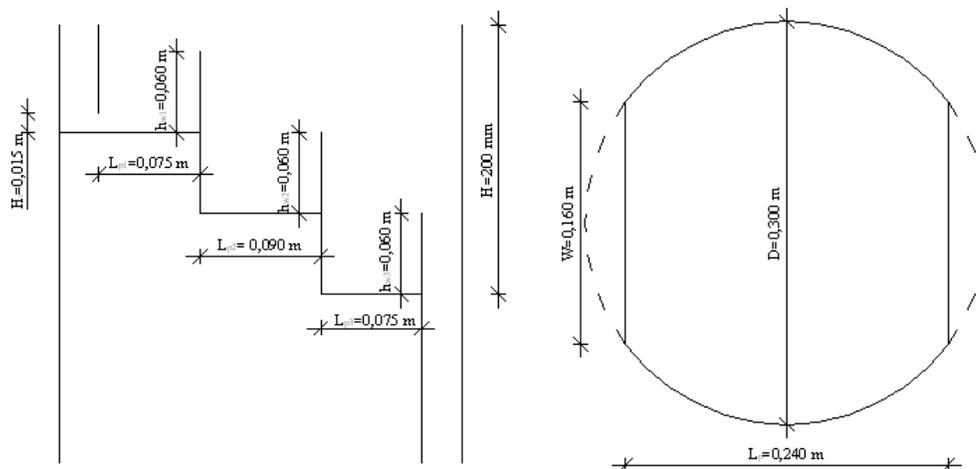


Figura 5.19: Esquema dimensional da alteração geométrica sugerida.

m e altura de represa de 0,060m; e, por fim, na região de saída, também em desnível de 0,060 m em relação à região central, com comprimento de 0,075 m e altura de represa de 0,060 m. O líquido entra por uma seção retangular com altura de 0,015 m e cruza o prato através das três regiões perfazendo uma distância total de 0,240 m.

O número total de furos é de 180 de seção retangular, distribuídos nas três regiões sendo, 54 na região de entrada, 72 na região central e 54 na região de saída, perfazendo área total de 0,00414 m². A área efetiva de borbulhamento é de 0,06333 m², resultando numa fração de 6,54% de área perfurada em relação à área efetiva de borbulhamento, idêntico ao caso geométrico original.

A vazão de líquido, Q_L , de $2,16 \times 10^{-4}$ m³/s e velocidade superficial, V_S , de 0,7 m/s também são aplicados neste estudo. Os fluidos utilizados para representar a fase líquida e a fase gás têm massa específica de 996,6 kg/m³ e de 1,184 kg/m³, respectivamente. A viscosidade da fase líquida é de $9,034 \times 10^{-4}$ kg/ms e da fase gás é de $1,835 \times 10^{-5}$ kg/ms. A pressão de operação é a atmosférica, ou seja, 101325,0 Pa. As demais características de condição de contorno e inicial foram as mesmas aplicada na seção 5.1.

A malha numérica foi mantida com volumes cujo tamanho máximo dos lados sejam iguais ou menores que 0,005 m. Isto resultou em um total de 92160 células computacionais. Um computador Pentium IV com 3,0 GHz e 1 Gb de memória necessitou de aproximadamente 300 horas de esforço computacional para obter 15 s de tempo real.

Da mesma forma que nas análises anteriores, foram calculados os valores da altura de líquido claro para cada uma das subdivisões do prato e uma altura de líquido claro média

do prato que, por sua vez, foram comparadas com os valores previstos pela correlação de Bennett *et al.* (1983) (Equação 5.2).

A Figura 5.20 sintetiza os resultados de altura de líquido claro obtidos por simulação e pela correlação de Bennett *et al.* (1983). Pode-se observar na Figura 5.20 que os valores obtidos por simulação apresentam valores abaixo daqueles oriundos da correlação de Bennett *et al.* (1983), pois a altura de líquido claro médio no prato apresenta valor 7 % abaixo do previsto pela correlação empírica, que equivale a uma diferença absoluta de 0,003 m.

Nota-se, ainda, que existe variação da altura de líquido claro entre as regiões do prato que oscilam em torno da média do prato. A região central é a que apresenta o menor valor, motivado pela não existência de zonas sem perfurações. Já nas regiões de entrada e saída há regiões de estabilização, principalmente, na entrada e junto à represa que diminuem, por consequência, a área de borbulhamento. Este efeito parece ser mais intenso na região de saída. Este comportamento pode apresentar problemas para transferência de calor e massa no estágio, pois representam diferentes valores de perda de carga tendo, como consequência, alterações na velocidade superficial do vapor de região para região. Isto implica diretamente

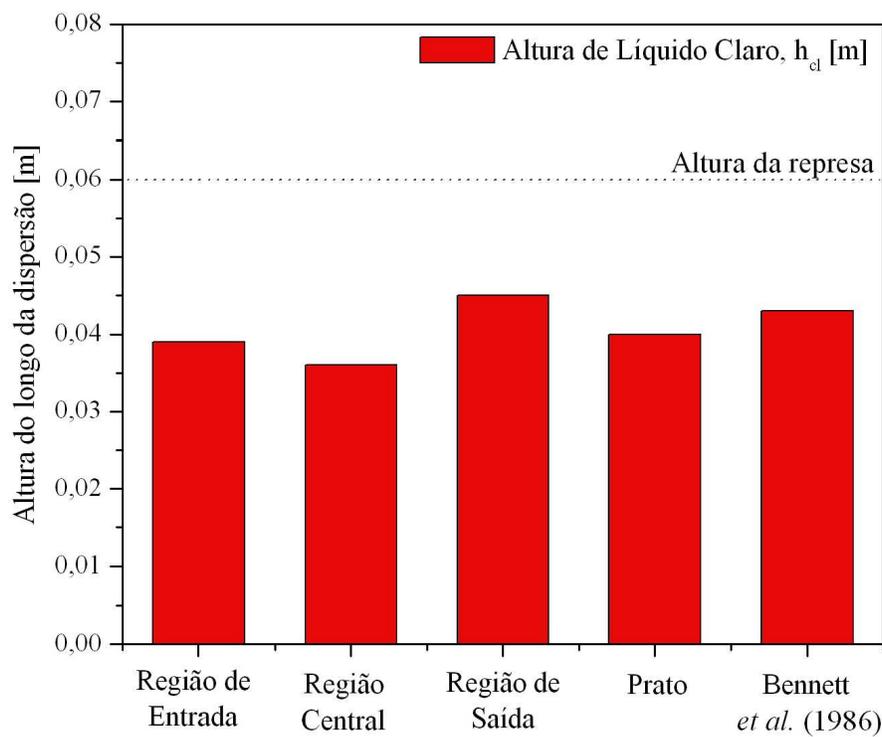


Figura 5.20: Altura de líquido claro como uma função das regiões do prato modificado comparado com a altura média do prato e a prevista por Bennett *et al.* (1983).

nas condições de transferência de calor e massa no prato.

No entanto, esta análise deve ser somada a análise do campo vetorial e do grau de mistura, que fornecem subsídios microscópicos da dinâmica do escoamento e de sua influência no desempenho de transferência de calor e massa do estágio.

A Figura 5.21 apresenta o campo vetorial da fase líquida em um tempo t no estado de quasi-estacionário em um plano central $x-z$ desde a entrada de líquido até a terceira represa do prato.

Percebe-se a presença de zonas de recirculação de líquido em todas as regiões do prato, principalmente próximas à entrada, como mostra a Figura 5.21. As regiões de entrada e saída apresentam entre si características de escoamento semelhantes com recirculações na entrada e reorientação do fluxo da represa para a região central. Há, ainda, uma tendência de ascensão do líquido pelo centro das regiões.

Para a região central, o perfil vetorial é diferente, com uma condição de escoamento mais heterogênea onde os turbilhões acontecem em todos os espaços do prato. Isto pode favorecer a condição de mistura no prato e, como consequência, a eficiência de transferência de calor e massa. A maior tendência de mistura pode explicar o fato da altura de líquido claro na região central ter apresentado valores abaixo da média pois, com aumento do grau

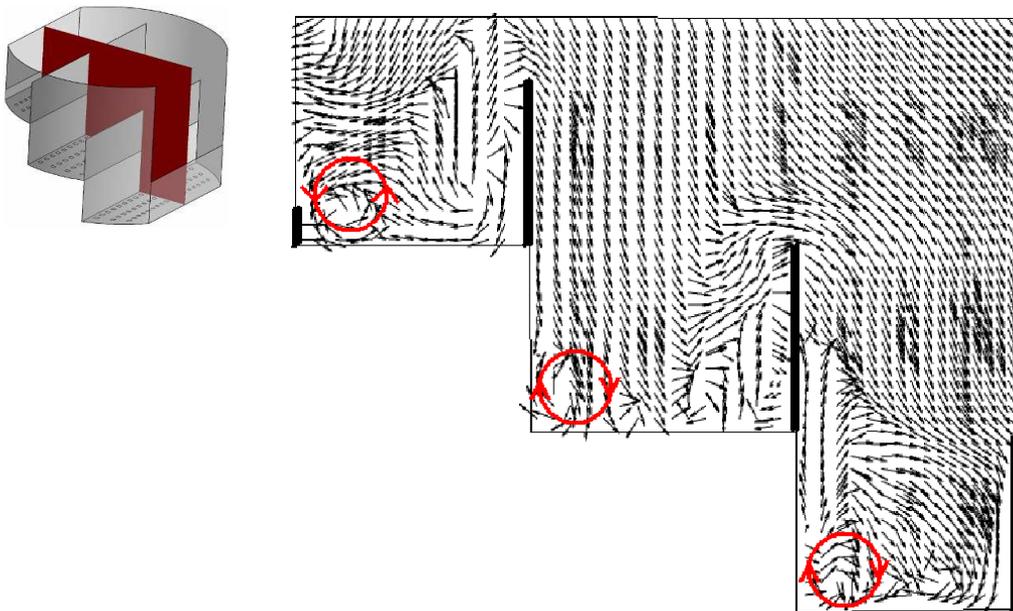


Figura 5.21: Campo vetorial da fase líquida em um plano central $x-z$ no tempo t na condição de quasi-estacionário

de mistura, eliminam-se as porções de líquido contínuo ao longo do prato. Estas porções de líquido contínuo podem ser identificadas através da análise do campo de fração volumétrica de líquido

Neste sentido, a Figura 5.22 apresenta imagem do campo de fração volumétrica do líquido em um tempo t no estado de quasi-estacionário em um plano central $x-z$ desde a entrada de líquido até à terceira represa. Pode-se observar que existem, nas três regiões, a mesma tendência de líquido contínuo próximo à base do prato, uma região de mistura líquido vapor que vai se diluindo até a formação de regiões de vapor contínuo. Este perfil, assim como nas análises anteriores, corrobora, de forma qualitativa, as descrições feitas por Zuiberweg (1982) e Bennett et al. (1983), mostrando que o modelo proposto pode ser aplicado para a análise de variações geométricas de pratos de destilação.

Pode-se ainda verificar que na região de entrada há a formação de porções de líquido contínuo junto às paredes na entrada e na represa (vide Figura 5.23), ocasionado pela presença de uma zona de estabilização, logo na entrada do prato, caracterizada pela ausência de perfurações, cujo propósito é de evitar a presença de correntes de vapor ascendentes no vertedor. As porções de líquido junto às paredes são decorrentes da interação da fase contínua com as paredes, enquanto que as porções de líquido junto à represa na região de saída são mais intensas e é função da zona de estabilização da saída do prato. Na região central,

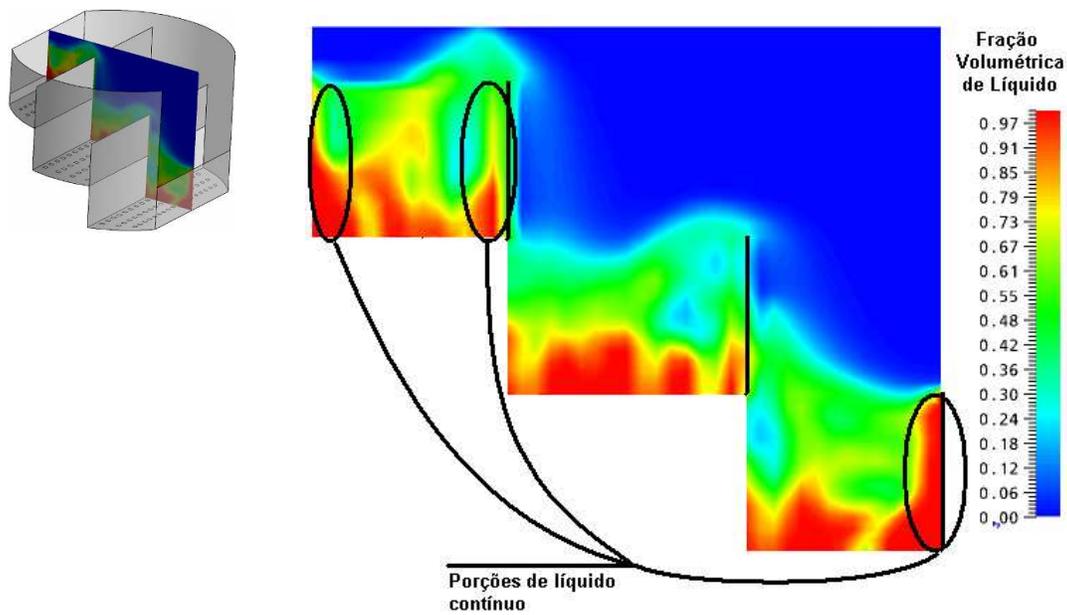


Figura 5.22: Campo de fração volumétrica de líquido num plano $x-z$ central desde a entrada de líquido até a represa num tempo t no estado de quasi-estacionário.

o perfil de fração de volume é bastante homogêneo, apresentando altas concentrações de líquido próximo à base do prato, região de mistura líquido-vapor e região de vapor contínuo. Desta forma, a região central apresenta um grau de mistura melhor que as demais regiões e, portanto, melhora a qualidade de transferência de calor e massa. Estes fatos podem ser visualizados tridimensionalmente pela Figura 5.23 que mostra a isocurva de fração volumétrica de líquido de 0,5 no tempo t , no estado de quasi-estacionário.

Na Figura 5.23, observa-se que o grau de mistura varia com a região do prato, com grandes porções de líquido contínuo nas regiões de entrada e saída. Enquanto que na região central, percebe-se boa condição de mistura, com pequenas porções de líquido ao longo de toda região, caracterizando uma mistura homogênea o que, por sua vez, favorece a transferência de calor e massa, confirmando as análises anteriores. O fato da região central apresentar melhores níveis de mistura é função, principalmente, da simetria geométrica em relação a distribuição das perfurações, o que não acontece nas regiões de entrada e saída em função das zonas de estabilização junto a entrada de líquido no prato e a saída próxima a represa de saída do prato.

Pode-se, também, fazer a análise qualitativa do grau de mistura identificado na condição geométrica da primeira análise, Figura 5.7, com os resultados obtidos deste estudo (alteração geométrica), Figura 5.23. Verifica-se que a região central apresenta mistura bem mais

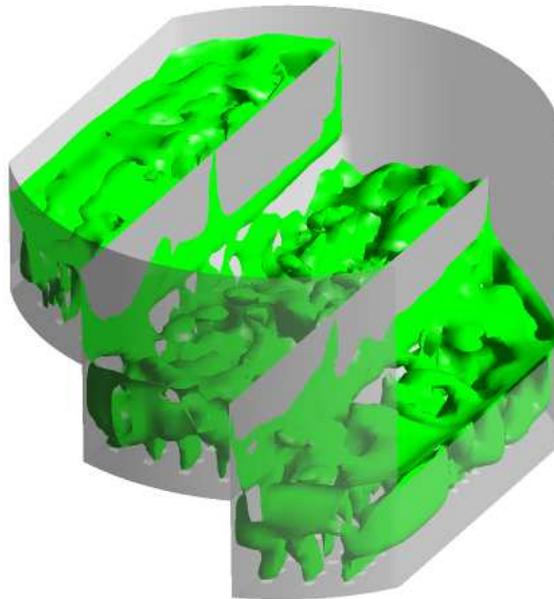


Figura 5.23: Isocurva de fração volumétrica de líquido igual a 0,5 em um instante de tempo t no estado de quasi-estacionário.

homogênea, quando compara-se com a geometria apresentada na Figura 5.7. Já as regiões de entrada e saída apresentam condições de mistura semelhantes. Isto indica que, além da condição de simetria da região central, o fato do prato ser dividido em pequenas partes, ou seja, pequenas regiões, favorece a condição de mistura.

5.3 Conclusões do Capítulo V

A análise do escoamento isotérmico mostra-se importante para definição dos modelos e métodos a serem aplicados a escoamentos em pratos perfurados de colunas de destilação, e apresenta-se como forma de avaliar as condições fluidodinâmicas do prato e sua possível influência na transferência de calor e massa. Com base nos resultados apresentados neste capítulo, é possível desenvolver uma metodologia bastante eficiente para a solução do modelo matemático sistematizado e organizado no Capítulo III utilizando o método dos volumes finitos, apresentado no capítulo IV. Foi possível ainda, verificar a aplicabilidade do modelo, e seus resultados mostraram-se coerentes com valores preditos por correlações consagradas da literatura corroborando, desta forma, qualitativamente o modelo proposto. Foram analisados aspectos de modelagem e as hipótese assumidas, tais como: influência do modelo de coeficiente de arraste e a hipótese da condição de velocidade igual em todos os furos. Estes parâmetros mostraram-se importantes na representação do escoamento líquido/vapor em pratos perfurados de colunas de destilação. Foi possível, também, comprovar a aplicação da metodologia no desenvolvimento, projeto e otimização de pratos perfurados de colunas de destilação usando a ferramenta de CFD através da análise de variações geométricas implementadas na configuração dos pratos convencionais.

Diante destes fatos, pretende-se no próximo capítulo acoplar análises experimentais realizadas em pratos em escala de bancada, às análises numéricas, para consolidar a metodologia de verificação e validação dos modelos e métodos.

6 ESCOAMENTO ISOTÉRMICO - EXPERIMENTAÇÃO FÍSICA

A consolidação das atividades de verificação e validação de modelos e métodos implica, necessariamente, em experimentação numérica acoplada à experimentação física. Isto se faz necessário visto que a segmentação do conhecimento implica em uma compreensão limitada dos fenômenos associados ao sistema de interesse. Desta forma, este capítulo tem por objetivo desenvolver uma análise experimental do escoamento líquido/vapor em pratos perfurados de destilação, de modo a se obter o suporte inerente às condições observáveis de escoamento aos estudos de verificação e validação dos modelos e métodos. Assim, pretende-se integralizar o conhecimento para, então, compreender os fenômenos associados ao sistema de interesse.

Diante da análise bibliográfica descrita no item 2.8 do Capítulo II, vislumbra-se um estudo experimental com o objetivo de adquirir dados de altura de líquido claro em um prato perfurado de seção circular e compará-los com os dados oriundos das simulações. Neste sentido, têm-se como objetivos: desenvolver uma metodologia de medida de altura de líquido claro em um prato perfurado com seção cilíndrica, à luz daquela apresentada por Bennett *et al.* (1983); implementar o sistema de aquisição de dados; desenvolver a interface de hardware e software da aquisição e testá-la para verificar a ausência de ruídos no trajeto entre os sensores e a tabulação dos dados; executar corridas experimentais mediante variação da velocidade superficial do vapor e da vazão de líquido. Nesta trajetória, pretende-se avaliar as constantes a e c_v da Equação 2.14 através da regressão dos dados experimentais de perda de carga no prato seco (h_H). Também, pretende-se fazer a medida da altura de líquido claro local e compará-la com aquela calculada através da equação recomendada por Sargent *et al.* (1964) apud Bennett *et al.* (1983). Por fim serão executados experimentos numéricos para compará-los com os dados experimentais.

6.1 Aparato experimental

O aparato experimental foi disponibilizado pelo Laboratório de Verificação e Validação (LVV) Departamento de Engenharia Química da Universidade Regional de Blumenau e consiste de uma coluna com pratos perfurados de seção circular cujo diâmetro é de 0,350 m e a altura de 0,750 m. A largura da represa é de 0,234 m e a altura de 0,060 m. O líquido entra por uma seção retangular com 0,040 m por 0,234 m, e cruza o prato por uma distância de 0,260 m. O número de furos total é de 66, cujo diâmetro é 6 mm, que resulta numa fração de área perfurada, A_H/A_B , de 2,27% em relação à área efetiva de borbulhamento. A coluna dispõe de três pratos: o prato inferior tem como objetivo distribuir o vapor que ascende ao prato central; o prato superior tem a finalidade de possibilitar as condições reais de entrada de líquido no prato central e este fornece as condições ideais para a coleta de dados. A operacionalização da coluna dá-se-a pelo fornecimento de energia ao líquido (água) através de uma bomba centrífuga, Schneider modelo BCR-2000, com capacidade de 1,8 m³/h à altura manométrica de 10 m de coluna de água.

A Figura 6.1 apresenta um esquema da unidade experimental identificando o prato superior o inferior e o prato central, além com principais componentes do sistema.

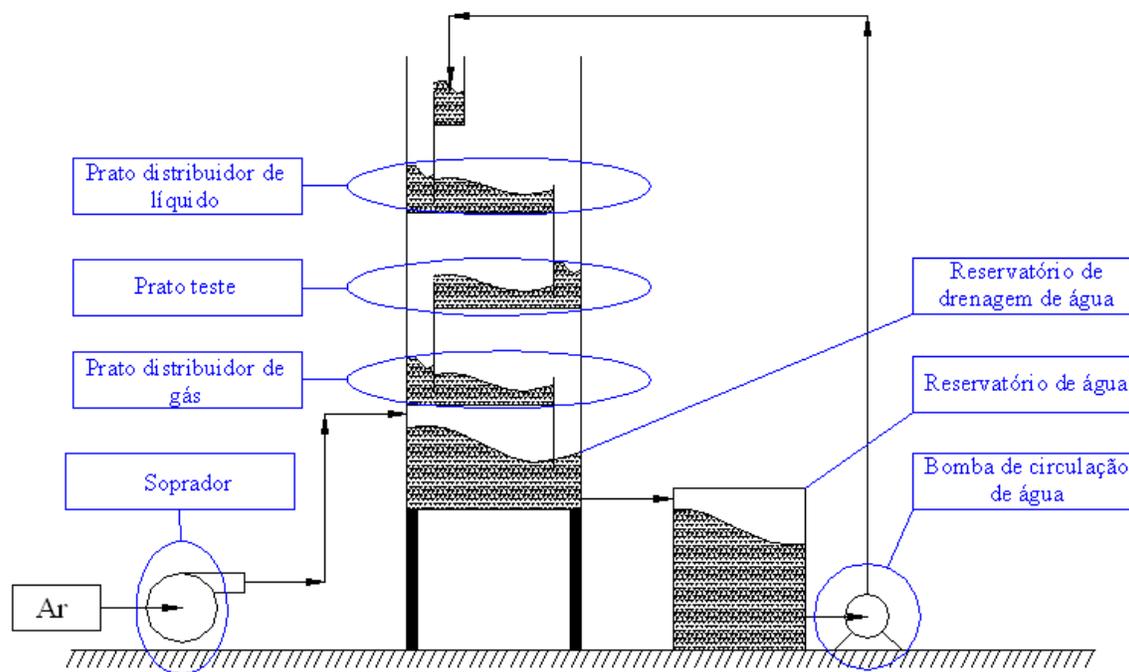


Figura 6.1: Esquema do aparato experimental.



Figura 6.2: Foto do aparato experimental.

A bomba está posicionada junto ao reservatório de líquido construído em polipropileno, com capacidade de 150 l, e faz com que o líquido entre no prato do topo e a partir do topo, por gravidade, percorra os três pratos, sendo coletado no compartimento da base da coluna e então drenado novamente ao reservatório de líquido. O vapor é representado pelo ar, soprado para a coluna por um ventilador Bernauer com capacidade de 480,0 m³/h com perda de carga de 30 mm.c.a. O ar entra no compartimento, no prato da base, e ascende pelas perfurações dos pratos e sai do sistema pelo topo da coluna. Desta forma a coluna tem uma pressão relativa positiva na base que diminui a cada estágio até a condição de pressão relativa 0,0 no topo da coluna.

A Figura 6.2 apresenta a fotografia do aparato experimental. A coluna é construída em acrílico. A água, por sua vez, flui por tubos PVC de 1/2 in. O sistema de transporte de ar é construído em PVC com tubos de diâmetro de 100,0 mm, até próximo da entrada da coluna, que é construído em ferro galvanizado, para suportar o sistema de medida de vazão.

A conexão entre o sistema de medida de vazão de gás e a coluna é feita através de um tubo flexível. O sistema é suportado em uma estrutura de ferro galvanizado que, além de garantir a estabilidade mecânica do sistema, permite a amortização da vibração decorrente do funcionamento da bomba, do soprador e dos agentes externos.

Estudos anteriores na mesma coluna foram desenvolvidos por Soares (2005) com o intuito da utilização da técnica de anemometria de fio quente para a medição dos perfis de velocidade do líquido sobre o prato perfurado.

6.1.1 Sistema de aquisição de dados

A metodologia proposta para a análise experimental demanda a aquisição de dados de vazão de líquido e gás, além das perdas de carga total e a perda de carga devido à altura de líquido em uma posição específica do prato. Para tal, desenvolveu-se uma metodologia para a medição das vazões e da pressão diferencial do sistema. Os dados experimentais foram obtidos e tabulados, utilizando procedimento metodológico apropriado, de forma totalmente eletrônica. Desta forma, dividiu-se o sistema de aquisição de dados em dois grandes grupos: *Hardware*, que incorpora os sensores, os indicadores, a CLP (Controlador Lógico Programado) e o computador; e *Software*, que além da tabulação e visualização dos dados, possibilita o tratamento do sinal analógico e a conversão do sinal para um sinal digital.

Hardware Com a definição dos parâmetros de medida desejados, é necessário formular a metodologia de medição. A medida de vazão, tanto de líquido quanto de gás, foi realizada através de medidores de vazão do tipo turbina produzidos e calibrados pela Contech modelos SVTL 2" G50 para o gás e SVTL 1/2" L12 para líquido, com uma faixa de medição de 34-340 m³/h e 5,3-39 l/min, respectivamente. As medidas da perda de carga total e perda de carga devido a passagem do gás pelas perfurações foram realizadas utilizando-se um manômetro diferencial Sanrello modelo GTPD-A calibrado para uma faixa de pressão diferencial de 0-200 mmc.a. A perda de carga devido à passagem do gás pelas perfurações foi obtida pelo mesmo sensor de perda de carga total mas, neste caso, o experimento foi realizado com o prato seco, ou seja, sem a presença de água, com o gás ascendendo pelo coluna somente pelas perfurações. Neste caso, a perda de carga total se iguala a perda de carga devido à passagem do gás pelas perfurações. A perda de carga local, devida a coluna de líquido, foi medida através de um manômetro diferencial Samrello modelo GTPD-A calibrado para uma

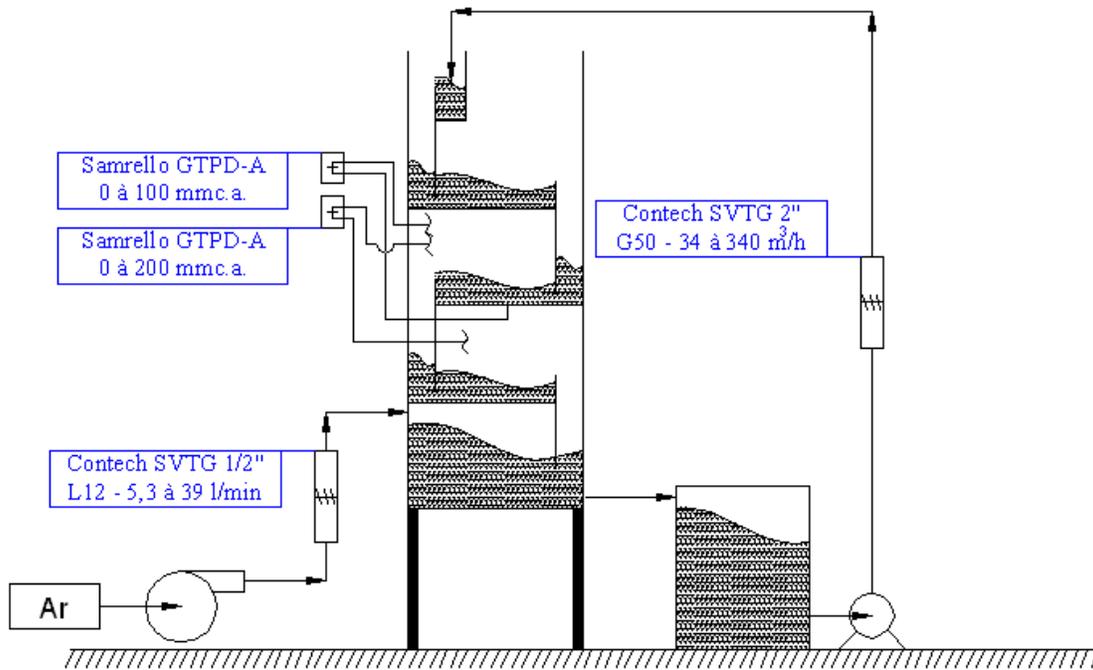


Figura 6.3: Esquema dos sensores de leitura das vazões e perda de carga.

faixa de pressão diferencial de 0-100 mmc.a. A Figura 6.3 apresenta o esquema metodológico de medição e o posicionamento dos sensores.

Os medidores de vazão tipo turbina têm como conceito a transferência de quantidade de movimento do fluido para um conjunto de pás ligadas a um eixo central. As pás da turbina ao receberem energia do fluido, giram em torno do eixo central. Em uma das extremidades do tubo, é gerado um campo magnético influenciado pela passagem de cada pá da turbina por aquele ponto. Assim, como a velocidade de giro é proporcional a energia fornecida pelo fluido que, por sua vez, é proporcional ao quadrado da vazão de fluido é possível calibrar a velocidade de giro da turbina com a vazão de fluido. Esta técnica é utilizada para os dois medidores de vazão, de gás e de líquido.

A Figura 6.4 mostra os pontos de medida de pressão, as células de carga e os medidores de vazão.

Os manômetros diferenciais baseiam-se na propriedade piezoelétrica de alguns materiais. Estes materiais ao sofrerem uma tensão normal de deformação geram uma corrente elétrica. Esta corrente, por sua vez, é proporcional à tensão que é proporcional à diferença de pressão. Para tanto, é necessária a tomada de pressão em dois pontos distintos cuja diferença de pressão não seja superior a 200 mmc.a. (limite da célula de carga). Como se pode obser-



(a) Pontos de medida de pressão



(b) Manômetros Diferenciais



(c) Medidos de vazão de líquido



(d) Medidor de vazão de gás

Figura 6.4: Fotos: (a) pontos de medida de pressão; (b) manômetros diferenciais; (c) medidor de vazão de líquido; (d) medidor de vazão de gás.

var na Figura 6.3, a célula é exposta as pressões na região de escoamento de gás contínuo do prato inferior e do prato central. A conexão entre a célula de carga e o ponto de tomada de pressão é feita através de tubos de polipropileno de 6 mm. Sabendo que no equilíbrio não há fluxo dentro do tubo, e, portanto, a perda de carga por fricção não existe, a pressão em uma extremidade do tubo é rigorosamente igual à outra extremidade. Assim, desprezando a perda de carga devido à coluna de gás, determina-se a perda de carga total média no prato. Para a perda de carga local, uma das extremidades de um dos tubos é conectada em um ponto no centro do prato em contato direto com a dispersão, e a outra extremidade do tubo na região de gás contínuo do prato central. Desta forma, mede-se a pressão da coluna de líquido naquele

ponto, sem a interferência da perda de carga devido à passagem do gás pelas perfurações.

Os componentes de *hardware* contém também módulos eletrônicos de recepção e conversão do sinal analógico, enviado pelos sensores, para transmitir o sinal para o computador. O sistema conta com dois IIT (Indicadores Integradores Totalizadores) Contech modelo DMY-2030 que recebem o sinal analógico dos sensores de vazão, converte-os para um sinal digital, indicam o valor da vazão e retransmitem o sinal analógico. A recepção do sinal analógico dos manômetros diferenciais é feito por um CLP (Controlador Lógico Programado) Softsolution modelo CP1000 com 8 canais de entrada analógica, 2 canais de saída analógica e 2 canais de saída digital. Além de receber os sinais analógicos dos sensores de pressão, a CP1000 recebe os sinais retransmitidos pelos DMY-2030, transforma-os em sinais digitais e estabelece a comunicação com o computador para o arquivamento e interpretação dos resultados.

A Figura 6.5 mostra o esquema de instalação dos sensores aos módulos eletrônicos, a CP1000 e, finalmente ao computador.

Os indicadores integradores totalizadores DMY-2030 foram mantidos no sistema, pois o sinal enviado pelos sensores deve ser filtrado de forma adequada e, como estes componentes apresentam os filtros produzidos pelos próprios fabricantes, justifica-se a permanência dos componentes no sistema. As Figuras 6.6 e 6.7 apresentam imagens dos módulos eletrônicos e do painel de controle, montados ao lado da bancada experimental, respectivamente.

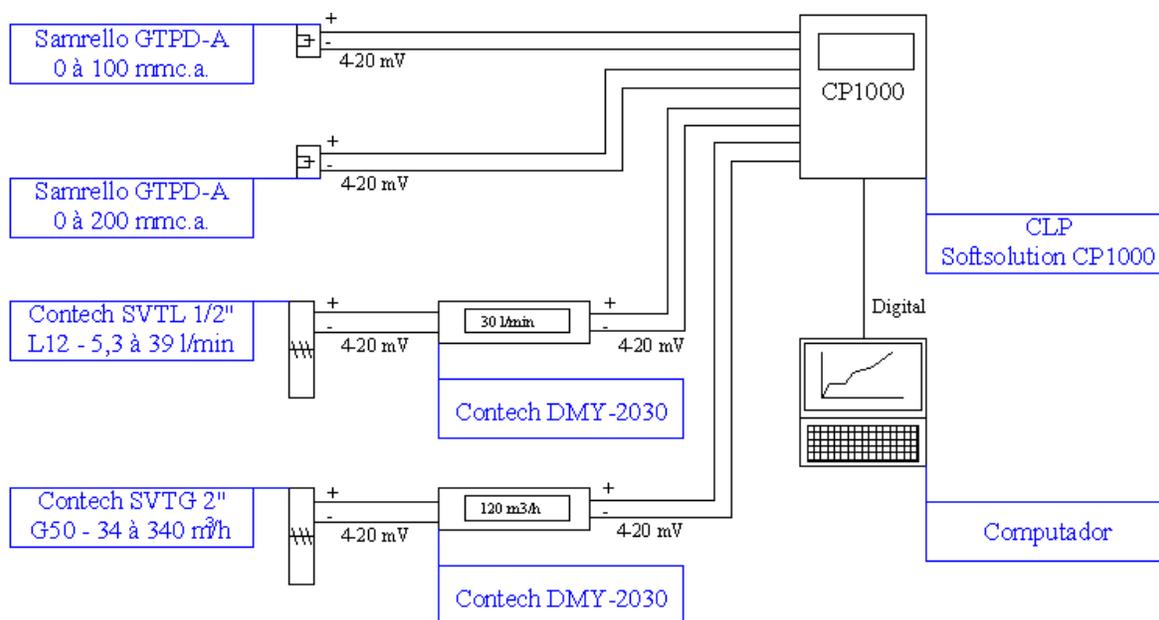
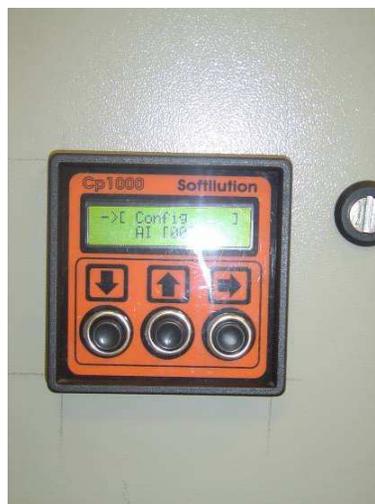


Figura 6.5: Esquema de instalação da instrumentação.



(a) DMY - 2030



(b) CP1000

Figura 6.6: Fotos: (a) indicador integrador totalizador DMY-2030; (a) CLP CP1000.



Figura 6.7: Foto do painel de controle.

Software O *Hardware* é controlado basicamente por dois programas: o programa interno da CP1000 e o programa de interface usuário/sistema. O programa interno da CP1000 foi desenvolvido de forma a possibilitar o funcionamento da unidade sem a necessidade da comunicação com o computador. É responsável, basicamente, pela comunicação com o computador e a definição do endereçamento dos canais de entrada e saída. É programado em baixo nível, e interage diretamente com *hardware*. Em nível mais elevado, existem rotinas

escritas em DELPHI para formação da interface básica, visto que o CP1000 tem a capacidade de gerenciar o sistema sem a presença do computador. Para a função controlador, o CP1000 incorpora rotinas de controle tipo PID e DMC escritas em DELPHI. O software e o CP1000 foram desenvolvidos, pela empresa Softhllution.

O programa de interface usuário/sistema é um *software* supervisor do tipo SCADA (“Supervisory Control and Data Acquisition”) com a finalidade de criar uma interface amigável com o usuário. Tem uma interface com o *software* do CP1000 e com o Interbase Guardian. Do *software* do CP1000 recebe o endereçamento dos canais de aquisição de dados e com o Interbase Guardian estabelece o banco de dados. Este, alias, é um programa *freeware* que cria e gerencia bancos de dados.

A Figura 6.8 ilustra a tela principal do *software* de interface usuário/sistema onde são apresentados dados instantâneos de perda de carga e vazão além de um gráfico de acompanhamento da evolução das medidas com o tempo.

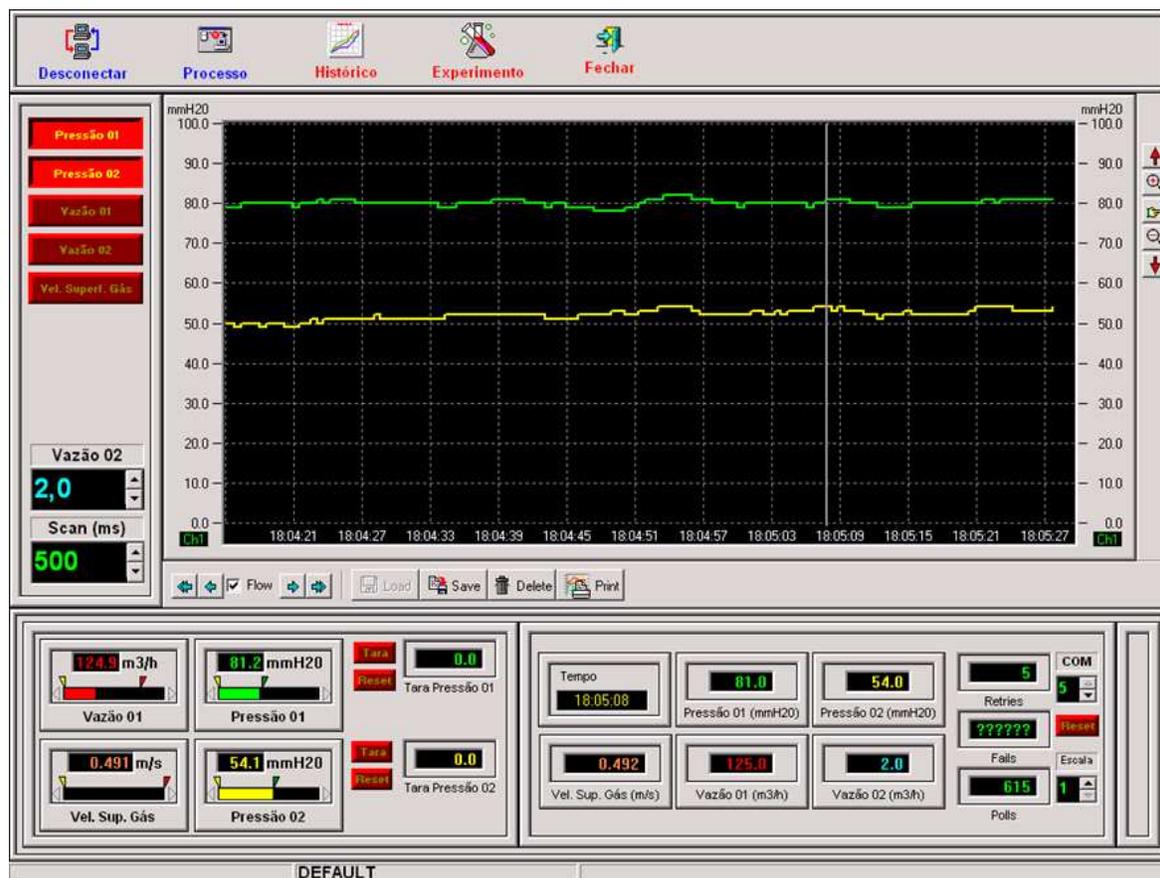


Figura 6.8: Tela principal do software de interface usuário/sistema.

O *software* foi desenvolvido em linguagem DELPHI, em parceria com a Softsolution e apresenta-se de forma customizada para a aquisição de dados da bancada experimental. Conta com a previsão de aprimoramento do sistema, como a inclusão de sondas de concentração e atuação sobre as vazões de gás e líquido. Com este sistema é possível acompanhar a evolução das vazões e da perda de carga com o tempo. Além disso, possibilita calcular e apresentar variáveis como altura de líquido claro e a velocidade superficial do gás. Possui ferramentas de impressão de resultados, arquivamento de dados e busca ao banco de dados.

6.2 Procedimento experimental

Para realização dos experimentos foi elaborado um procedimento experimental sistemático a fim de garantir a reprodutibilidade dos dados adquiridos. Desta forma, os primeiros passos para a execução do experimento são o acionamento da parte elétrica e eletrônica e o estabelecimento da comunicação entre o computador e o sistema de aquisição de dados. Então, é realizado o carregamento do reservatório de líquido com água limpa (vide Figura 6.1). Ao completar-se o volume de água necessário para a execução do experimento, aproximadamente 100 litros, aciona-se a bomba centrífuga que tem por objetivo bombear a água até o topo da coluna. A água, então, por gravidade, desce prato a prato tanto pelas perfurações quanto pelos vertedouros, até ser recolhido no fundo da coluna e drenada até o reservatório de líquido, fechando o circuito. Deixa-se o líquido recircular por alguns minutos pré-ajustando a vazão através da manipulação da válvula gaveta instalada no recalque da bomba. Após alguns minutos inicia-se a injeção de ar ao sistema. Inicialmente deixa-se a válvula esfera, posicionada na entrada de ar coluna, fechada para o acionamento do soprador. Após o acionamento do soprador, a válvula esfera é lentamente aberta para que o ar entre na coluna. Após sua abertura completa da válvula o sistema é deixado em funcionamento por alguns minutos para que atinja o equilíbrio, verificado pela estabilização das vazões de gás e de líquido e do diferencial de pressão. Então as válvulas de entrada de ar e água são ajustadas para a obtenção das vazões especificadas no experimento. O sistema fica em operação durante aproximadamente 15 minutos para garantir-se a condição de equilíbrio. A partir deste ponto as aquisições são realizadas. Para a mudança de condição de vazão, é necessário apenas ajustar as válvulas para especificações do novo experimento, deixar o sistema em operação por novos 15 minutos e então adquirir os dados. Para o final do experimento, primeiramente o soprador é desligado e após sua paralisação completa a bomba de água é desativada. Após

toda drenagem da água do sistema para o reservatório de líquido, a água é liberada para o sistema de efluentes do laboratório. Então a parte elétrica e eletrônica é desativada.

Além do procedimento descrito acima, fez-se experimentos com o prato sem o líquido para que o ar ascendesse somente pelas perfurações, a fim de determinar a perda de carga devida a passagem do gás pelas perfurações. Assim houve a necessidade de obstruírem-se os vertedouros. Esta obstrução foi garantida pela instalação de um aparato nas regiões dos vertedouros. Assim os procedimentos experimentais iniciam-se pelo acionamento elétrico e eletrônico do sistema, o estabelecimento da comunicação entre o sistema de aquisição e o computador e o acionamento da injeção do ar ao sistema. Então a vazão de ar é ajustada para as especificações do experimento e então a operação é continuada por aproximadamente 5 minutos. A partir deste ponto, os dados começam a ser adquiridos. Para novas condições basta manipular a válvula de entrada de ar para condição desejada. A estabilização acontece depois de novos 5 minutos de operação e, após, os novos dados são adquiridos. A desativação do experimento é feita pela desativação do soprador e da parte elétrica e eletrônica. Ao final, os aparatos de obstrução dos vertedouros são retirados.

6.3 Determinação das constantes a e c_v

Para a determinação da altura de líquido claro é necessário estimar a perda de carga devida à passagem do gás pelos furos. Para este fim, usou-se neste trabalho, a equação sugerida por Bennett *et al.* (1983) (Equação 2.14). No entanto, a equação referenciada apresenta dois parâmetros calculáveis por correlações ou por regressão de dados experimentais. Tais parâmetros estão associados às características geométricas do prato e, em especial, a constante c_v é função direta da fração de área perfurada do prato e da relação entre o diâmetro da perfuração e a espessura do prato. Neste trabalho usou-se apenas uma geometria de prato perfurado e, desta forma, não houve a necessidade de avaliar a dependência destas constantes com os parâmetros geométricos. Assim, sabendo que a perda de carga é função direta do quadrado da velocidade do gás nos furos, que corresponde a $V_s (A_B/A_H)$, planejou-se um conjunto de experimentos capaz de representar a dependência da perda de carga com a velocidade superficial do gás. Assim sendo, as constantes obtidas por regressão dos dados experimentais, são válidas para o prato utilizado tendo como faixa de aplicação os limites de velocidade superficial do gás.

Tabela 6.1: Dados experimentais de perda de carga devido à passagem do gás pelos furos.

Exp.	Velocidade Sup. do gás , V_s [m/s]	Velocidade do gás nos furos, V_H [m/s]	Perda de carga média [mm.c.a.]	Desvio padrão [mm.c.a.]
1	0,200	8,79	4,70	0,0677
2	0,222	9,80	5,95	0,0949
3	0,235	10,35	6,89	0,0695
4	0,252	11,12	7,96	0,1095
5	0,269	11,84	9,14	0,1003
6	0,288	12,67	10,59	0,0859
7	0,311	13,69	12,24	0,0863
8	0,328	14,43	13,52	0,1167
9	0,351	15,45	15,18	0,1020
10	0,371	16,34	16,98	0,1621
11	0,392	17,27	18,84	0,0911
12	0,414	18,22	20,87	0,1703
13	0,431	19,00	22,70	0,2677
14	0,454	20,01	25,32	0,1305
15	0,476	20,97	27,91	0,1346
16	0,494	21,75	29,51	0,1715
17	0,514	22,65	31,77	0,1173
18	0,538	23,68	34,35	0,1660
19	0,555	24,46	36,62	0,1777
20	0,575	25,34	38,76	0,2428
21	0,599	26,37	41,68	0,1623
22	0,615	27,11	43,88	0,1915

A Tabela 6.5 descreve as condições operacionais e os resultados obtidos dos experimentos, observando-se que foram executados 22 experimentos que possibilitaram avaliar a influência da velocidade superficial do gás na faixa de 0,200 m/s a 0,615 m/s. A velocidade do gás nos furos e a perda de carga média foram coletados e posteriormente analisados e

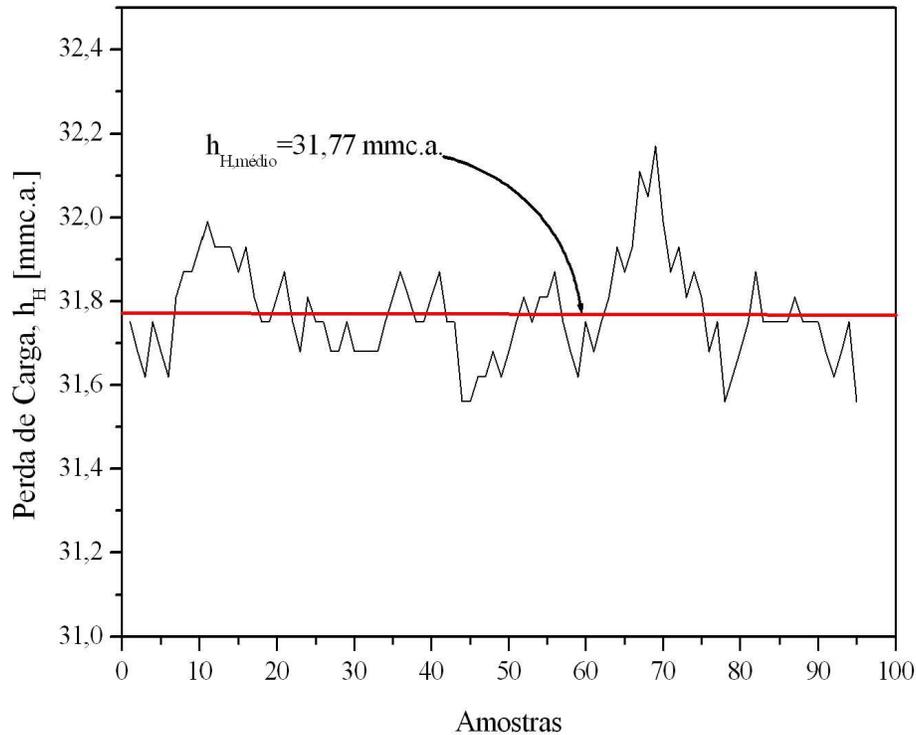


Figura 6.9: Amostragem do experimento 17.

interpretados com a ajuda do software estatístico ORIGIN 6.0 da Microcal. Os dados foram obtidos a cada 0,5 s num tempo total de 50 s, perfazendo um total de 100 amostras por experimento.

A Figura 6.9 apresenta a variação da perda de carga como função no número da amostra para o experimento 17. Pode-se notar que existe uma variação da propriedade com tempo, o que demanda a coleta de um número suficiente de amostras para garantir a reprodutibilidade dos dados. Em seguida fez-se a análise estatística para o cálculo da média e do desvio padrão.

Depois do tratamento estatístico dos dados, necessita-se regredir os dados para avaliarem-se os parâmetros a e c_v . O método de regressão dos dados utilizado foi o método dos mínimos quadrados que mostra-se robusto o suficiente para as demandas deste trabalho. No entanto, a avaliação da Equação 2.14 possibilita identificar dependência quadrática da constante a com a constante c_v , e ainda, que existem infinitas soluções para a regressão, o que condiciona o rearranjo da Equação 2.14 para determinação de uma solução única. Como as constantes são função de parâmetros geométricos e estes não variam, pode-se definir:

$$b = \frac{a}{c_v^2} \quad (6.1)$$

e, então, a Equação 2.14 é escrita como,

$$h_H = b \frac{\rho_\beta V_H^2}{\rho_\alpha g} \quad (6.2)$$

A Equação 6.2 apresenta um único parâmetro obtido através da regressão dos dados experimentais. Assim, determinou-se a constante b igual a 0,50736 com χ^2 igual a 0,38916 e um coeficiente de correlação de 0,99747. A Figura 6.10 apresenta a variação da perda de carga devido a passagem do gás pelas perfurações, em função da velocidade do gás nos furos obtida experimentalmente e obtida pela Equação 6.2 com b igual 0,50736. Pode-se perceber que a equação proposta ajusta, com bastante precisão, os dados experimentais.

Os parâmetros a e c_v apresentam uma relação proporcional a 0,50736 para esta geometria. A determinação destes parâmetros pode ser feita fixando-se a constante a e calculando-se a constante c_v como sendo $\pm \sqrt{a/0,50736}$. Liebson *et al.* (1957), Thomas e Had (1976) e Fasesan (1897) sugerem um valor para constante a de 0,499. Assim, pode-se obter o valor de c_v como sendo $\pm 0,991727$, ou ainda, c_v igual a 0,991727 pois o sinal negativo não apresenta sentido físico. Este parâmetro é conhecido como coeficiente de orifício do prato perfurado.

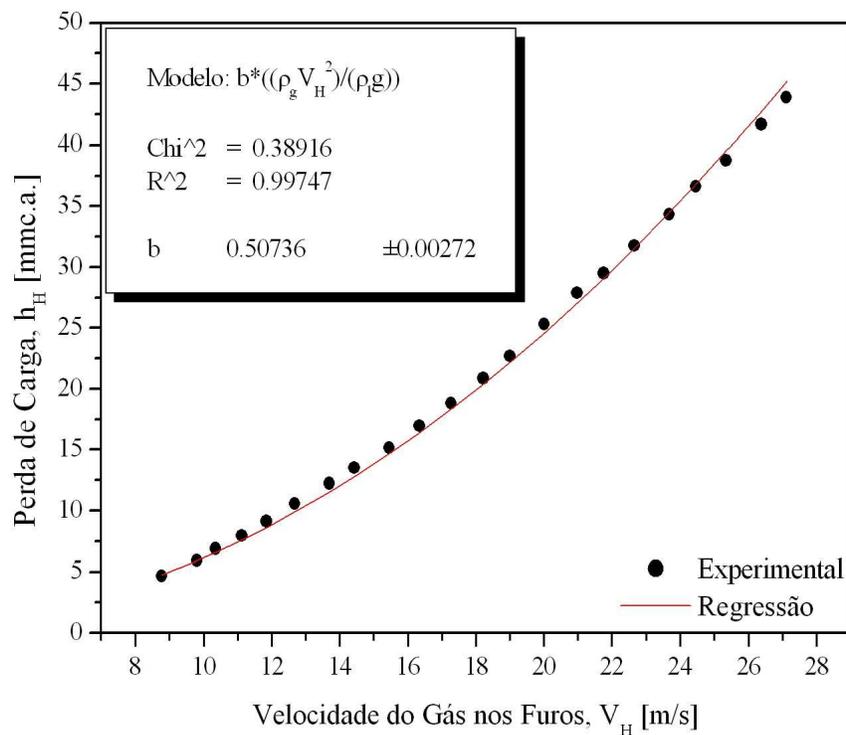


Figura 6.10: Regressão numérica dos dados de perda de carga devido à passagem do gás pelas perfurações.

6.4 Determinação experimental da altura de líquido claro

Determinadas as constantes a e c_v , é necessário coletar os dados de perda de carga total para se determinar a altura de líquido claro global. Para isso foram executados 56 experimentos, explorando-se a variação da velocidade superficial do gás e da vazão de líquido. Os dados de altura de líquido claro total e local foram coletados durante aproximadamente 50 s, com intervalo de 0,5 s, resultando na amostragem de cerca 100 amostras por teste. Estas amostras foram tratadas, estatisticamente, para se determinar a média da propriedade e seu desvio padrão. Para isso utilizou-se a distribuição normal, como mostra a Figura 6.11.

A Figura 6.11 apresenta os resultados de altura de líquido claro global obtidos para vazão de líquido por unidade de comprimento de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e velocidade superficial do gás de 0,193 m/s. Pode-se observar, à esquerda da Figura 6.11, o sinal obtido pelos sensores de altura de líquido claro global¹⁸ (sensores de pressão diferencial). Percebe-se comportamento oscilatório da propriedade em torno de uma média bem definida, a exemplo dos resultados numéricos apresentados no capítulo anterior, que por sua vez pode ser calcu-

¹⁸Os dados apresentados na Figura 6.11 foram corrigidos pela aplicação da equação 2.13.

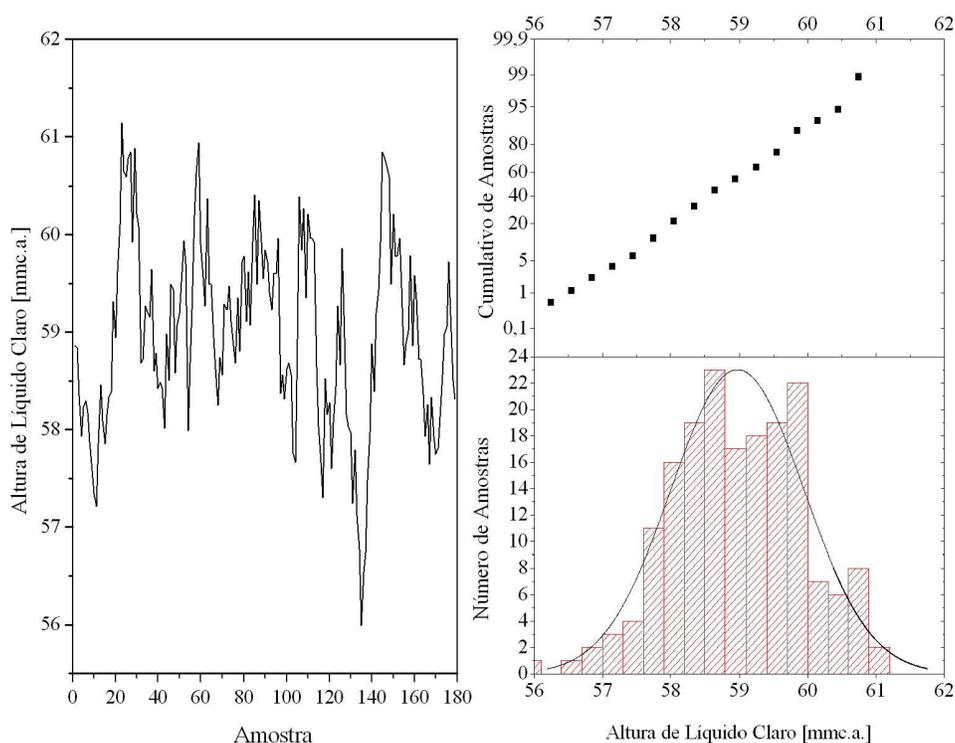


Figura 6.11: Tratamento estatístico dos dados de altura de líquido claro para Q_L/W igual a $2,4 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e V_s igual a 0,193 m/s.

lada aplicando técnicas estatísticas. No canto inferior direito, na Figura 6.11, apresenta-se a distribuição dos dados e percebe-se que esta segue a distribuição normal, com uma média e um desvio padrão bem definidos. Acima, apresenta-se a curva de probabilidade de ocorrência. Percebe-se que a curva de probabilidade apresenta um comportamento logarítmico, típico da distribuição normal. Todos os testes realizados foram estatisticamente analisados para garantir a qualidade e reprodutibilidade dos dados, tanto de altura de líquido claro global quanto da altura de líquido claro local, medida no centro do prato. No Apêndice A, apresenta-se a tabulação das 56 corridas experimentais com dados de vazão de líquido e gás, altura de líquido claro global e local médias e seus desvios padrões.

A Figura 6.12 apresenta os valores medidos de perda de carga total, de perda de carga devido a passagem do gás pelas perfurações e a perda de carga devido a tensão superficial, como função da velocidade superficial do gás para uma vazão de líquido por unidade de comprimento da represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$.

Para o cálculo da altura de líquido claro global, é aplicada a Equação 2.13, que descreve a perda de carga total como a somatória da perda de carga devido a altura de líquido claro,

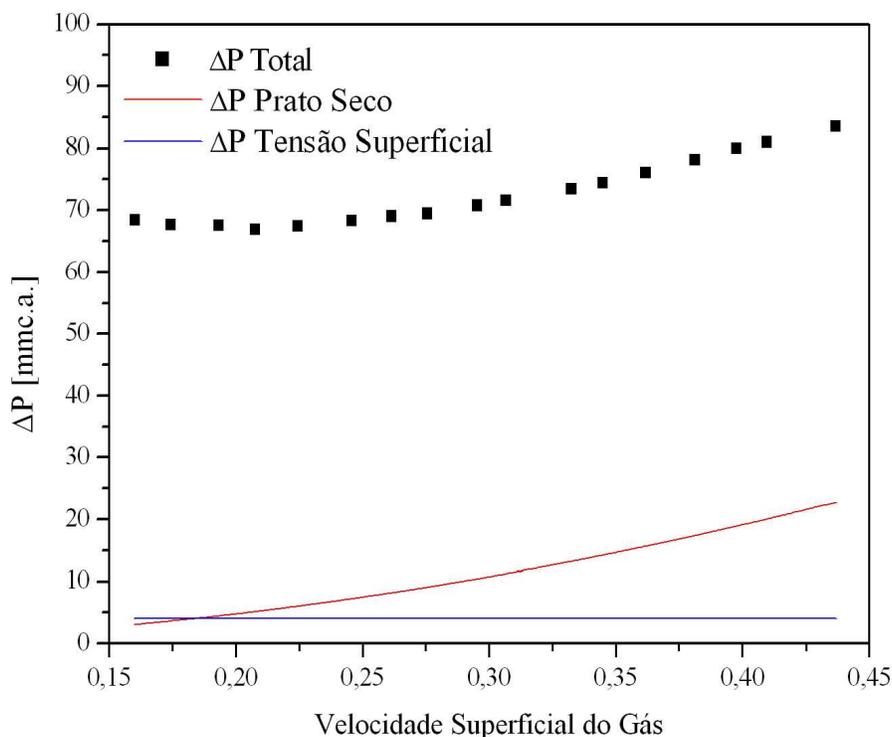


Figura 6.12: Perda de carga total, perda de carga devido a passagem do gás pelas perfurações e perda de carga devido a tensão superficial como função da velocidade superficial do gás e da vazão de líquido por comprimento de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$.

da perda de carga devido a passagem do gás pelas perfurações e devido as forças de tensão superficial. Desta forma, com a Equação 6.2 é possível calcular a altura de líquido claro global no prato.

Observa-se na Figura 6.12 que a perda de carga total no prato perfurado aumenta com o aumento da vazão de gás. É possível, também, observar que a perda de carga devido à passagem do gás pelas perfurações é fortemente dependente da vazão de gás e essa dependência relaciona-se com o quadrado da velocidade do gás nas perfurações. Conclui-se que a dependência da perda de carga total com a vazão de gás é determinada, principalmente, pela perda de carga devido à passagem do gás pelas perfurações, visto que, conforme Figura 6.12 e Equação 2.15, a perda de carga devido à tensão superficial não é influenciada pela vazão de gás. Desta forma, o uso da Equação 2.13 permite determinar a altura de líquido claro global no prato.

A Figura 6.13 descreve o comportamento da altura de líquido claro global e altura de líquido claro local como função da vazão de líquido, por unidade de comprimento da represa e velocidade superficial de gás de 0,348 m/s.

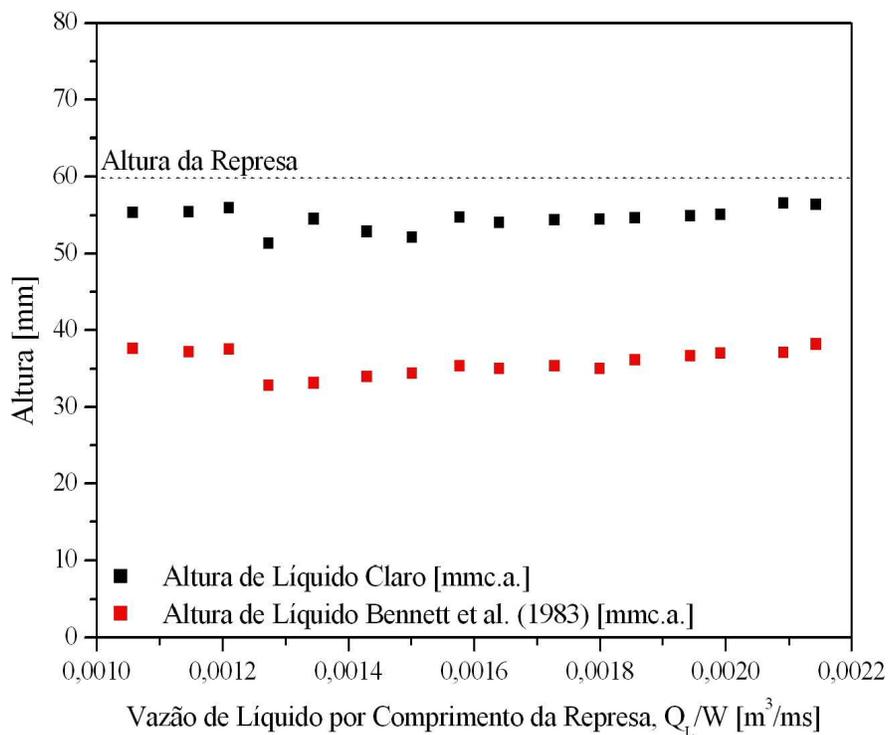


Figura 6.13: Altura de líquido claro global e local como função da vazão de líquido por unidade de comprimento de represa para velocidade superficial do gás igual a 0,348 m/s.

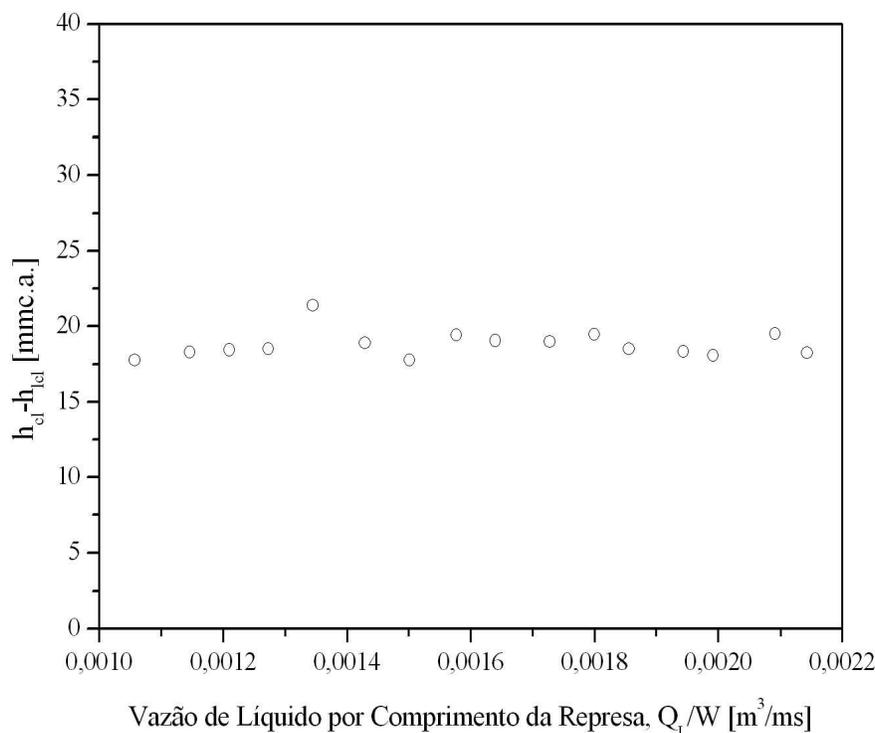


Figura 6.14: Diferença entre a altura de líquido claro global e local como função da vazão de líquido por unidade de comprimento de represa para uma velocidade superficial do gás de a 0,348 m/s

Na Figura 6.13, constata-se que a altura de líquido claro é fracamente dependente da vazão de líquido, conforme a correlação de Bennett *et al.* (1983) (Equação 5.1) sugere. Nota-se, também, que a altura de líquido claro local apresenta valores abaixo da altura de líquido claro global¹⁹. Este comportamento mostra a diferença da condição de mistura entre os diversos pontos do prato. Com a localização do sensor no centro do prato, é possível mensurar os desvios em relação à altura de líquido claro global que, segundo Sargent *et al.* (1964) apud Bennett *et al.* (1983), podem ser preditos por aplicação de um balanço de quantidade de movimento.

A Figura 6.14 apresenta a diferença entre a altura de líquido claro global e local como função da vazão de líquido por unidade de comprimento de represa para uma velocidade superficial do gás igual a 0,348 m/s. Ao observar-se a Figura 6.14, nota-se que a vazão de líquido não influencia na diferença de altura de líquido claro global e local, pois a vazão de líquido não altera as condições de escoamento nos pratos perfurados de destilação. Quando

¹⁹A partir deste ponto leia-se altura de líquido claro e altura de líquido claro global como sendo a mesma variável. A palavra global é adicionada ao termo altura de líquido claro para não ocorrer confusão com a variável altura de líquido claro local.

se calcula esta diferença pela equação de Sargent *et al.* (1964) apud Bennett *et al.* (1983), que não apresenta dependência com a vazão de líquido, chega-se a um valor de aproximadamente 0,65 mmc.a enquanto que os valores medidos foram de cerca de 19 mmc.a. Esta diferença pode ser explicada, a princípio, por duas hipóteses: Bennett *et al.* (1983) atribui essa diferença à aceleração do vapor e sua perda de energia ao atravessar as perfurações e a região de dispersão, visto que a equação sugerida por Sargent *et al.* (1964) é um balanço de transferência de quantidade de movimento e não evidencia estes fenômenos; ou ainda, a técnica de medida de altura de líquido claro local não representa o valor correto deste parâmetro.

A análise da diferença de altura de líquido claro global e local como função da velocidade superficial do gás proporciona novos subsídios para justificar o fenômeno de maneira mais segura. Desta forma, a Figura 6.15 descreve o comportamento da altura de líquido claro global e local como função da velocidade superficial do gás, para a vazão de líquido por unidade de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$. Contrariamente à vazão de líquido, a velocidade superficial do gás influencia fortemente tanto na altura de líquido claro global quanto na altura de líquido claro local, como se observa na Figura 6.15. A altura de líquido claro local sofre

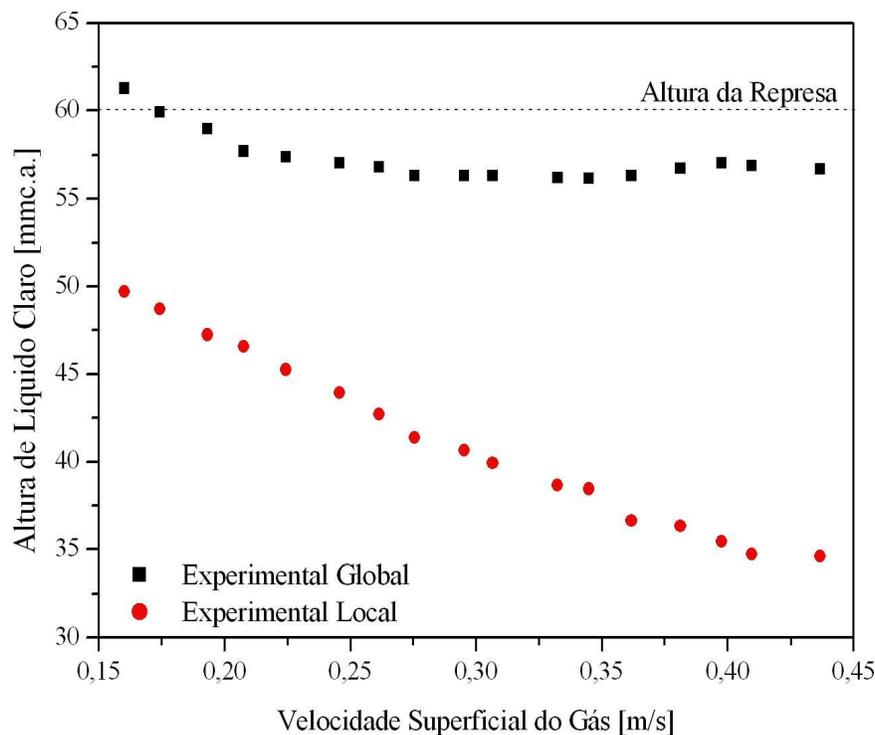


Figura 6.15: Altura de líquido claro global e local como função da velocidade superficial do gás para uma vazão de líquido por unidade de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$.

influência ainda maior, em função, principalmente, do aumento da velocidade superficial do gás que, por sua vez, amplifica os efeitos de arraste na região de dispersão, especialmente no centro, pois, como analisado no capítulo anterior, existe a tendência de velocidades maiores na região central do prato em relação à periferia. Desta forma, a fração de líquido no centro do prato diminui com o aumento da intensidade de borbulhamento quando comparado com as demais regiões do prato.

A diferença entre a altura de líquido claro global e local, em função da velocidade superficial do gás para a vazão de líquido por unidade de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$, pode ser observada na Figura 6.16.

Pode-se notar que a diferença de altura de líquido claro global e local é fortemente dependente da velocidade superficial do gás, com taxa de crescimento constante. Resultados similares foram obtidos por Bennett *et al.* (1983) e outros autores, por diferentes técnicas de medida, o que confirma a aplicabilidade deste método. A discrepância observada entre os dados experimentais e os dados oriundos da equação de Sargent *et al.* (1964) foi, também, apresentada e discutida pelos autores supra citados e revelaram que esta discrepância é su-

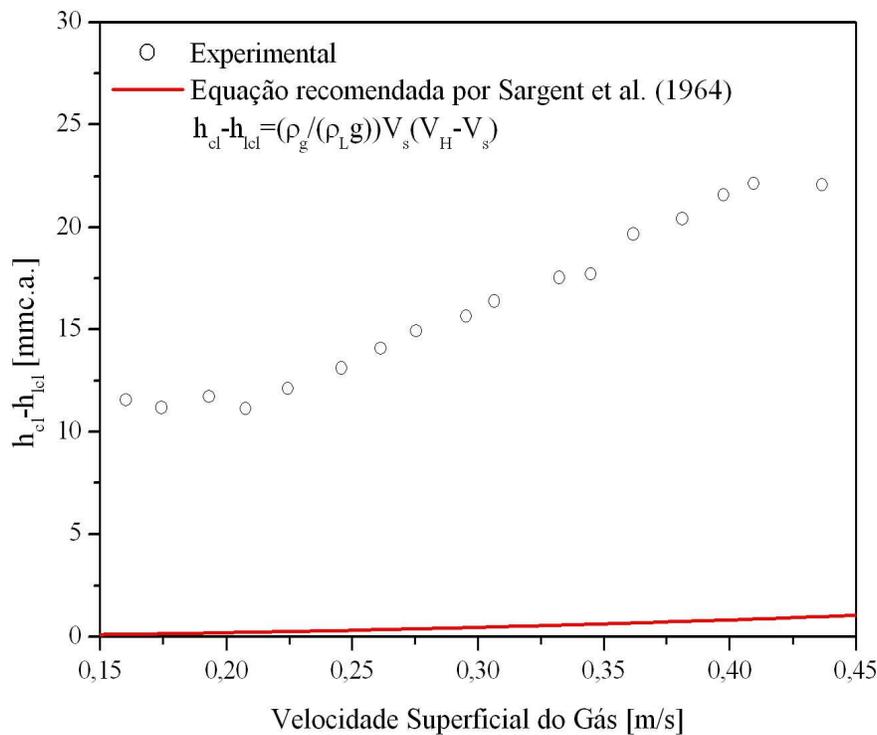


Figura 6.16: Diferença entre a altura de líquido claro global e local como uma função da velocidade superficial do gás para uma vazão de líquido por unidade de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$.

perior a três vezes o valor determinado pelo balanço de quantidade de movimento e, como dito anteriormente, atribuem aos fenômenos de aceleração e perda de carga do vapor esta discrepância, pois a equação leva em consideração somente a transferência de quantidade de movimento entre as fases. Além destes fenômenos, podem-se elencar outros fenômenos que contribuem na discrepância observada, destacando-se a quebra e coalescência das bolhas, os efeitos de massa virtual, efeitos de parede, regime de escoamento, entre outros. No entanto, tais efeitos devem ser melhor analisados para identificar sua influência sobre as medidas de altura de líquido claro. Diante destes fatos, acredita-se que a primeira hipótese é a mais consistente para explicar tal fenômeno, visto que a reprodutibilidade dos resultados garante a confiabilidade da medida.

Figura 6.17 apresenta a altura de líquido claro como função da velocidade superficial do gás e da vazão de líquido. O conhecimento da dependência das propriedades com as vazões é fundamentalmente importante na avaliação dos parâmetros operacionais das colunas de destilação. Desta forma, o conhecimento da altura de líquido claro é fundamental, uma vez que a perda de carga e as condições de mistura afetam diretamente a eficiência de transferência de calor e massa nestes processos de separação. Esta dependência pode ser observada com mais

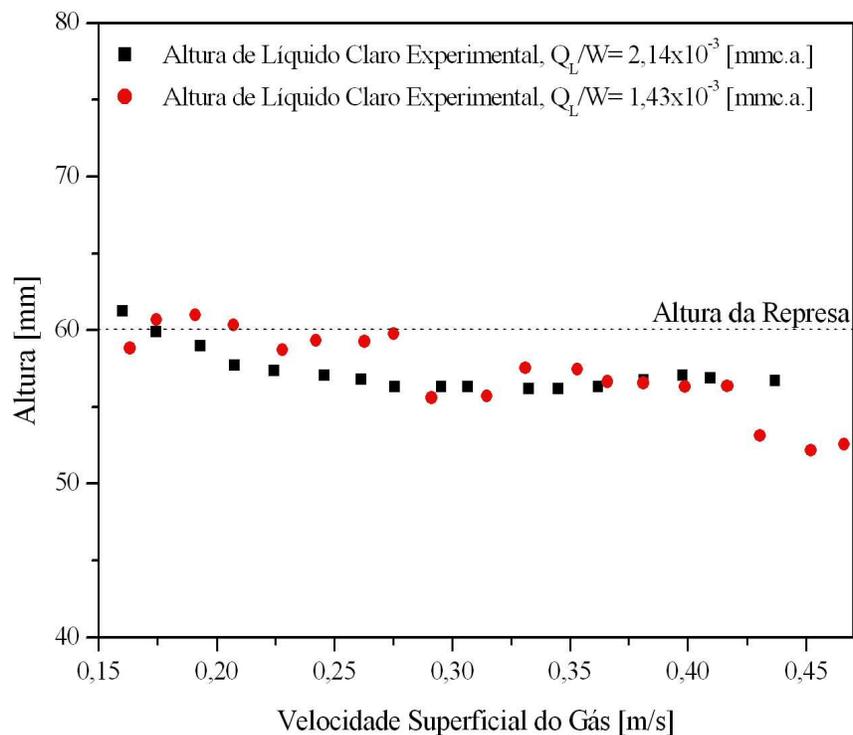


Figura 6.17: Altura de líquido claro como uma função da velocidade superficial do gás e da vazão de líquido por unidade de comprimento de represa.

clareza na Figura 6.17. Nota-se, por análise da Figura 6.17, que há uma forte dependência da altura de líquido claro com a velocidade superficial do gás para ambas as vazões de líquido.

Percebe-se, aliás, que a dependência com a vazão de líquido é muito pequena, com observação de sobreposição dos dados de altura de líquido claro para ambas as vazões. A forte dependência da altura de líquido claro com a vazão de gás e a fraca dependência com a vazão de líquido foi observada por diversos autores, destacando-se Colwell (1979), Bennett *et al.* (1983), Fasesan (1987), Thomas e Mohammad (1976), entre outros. Os resultados obtidos comprovam esta tendência e, além disso, validam a metodologia adotada para coleta e tratamento dos dados de perda de carga total para a determinação da altura de líquido claro.

A comparação dos dados experimentais com os preditos pela correlação de Bennett *et al.* (1983) é feita nas Figuras 6.18 e 6.19. A Figura 6.18 apresenta a comparação da altura de líquido claro predita e a altura de líquido claro medida como uma função da vazão de gás e da vazão de líquido.

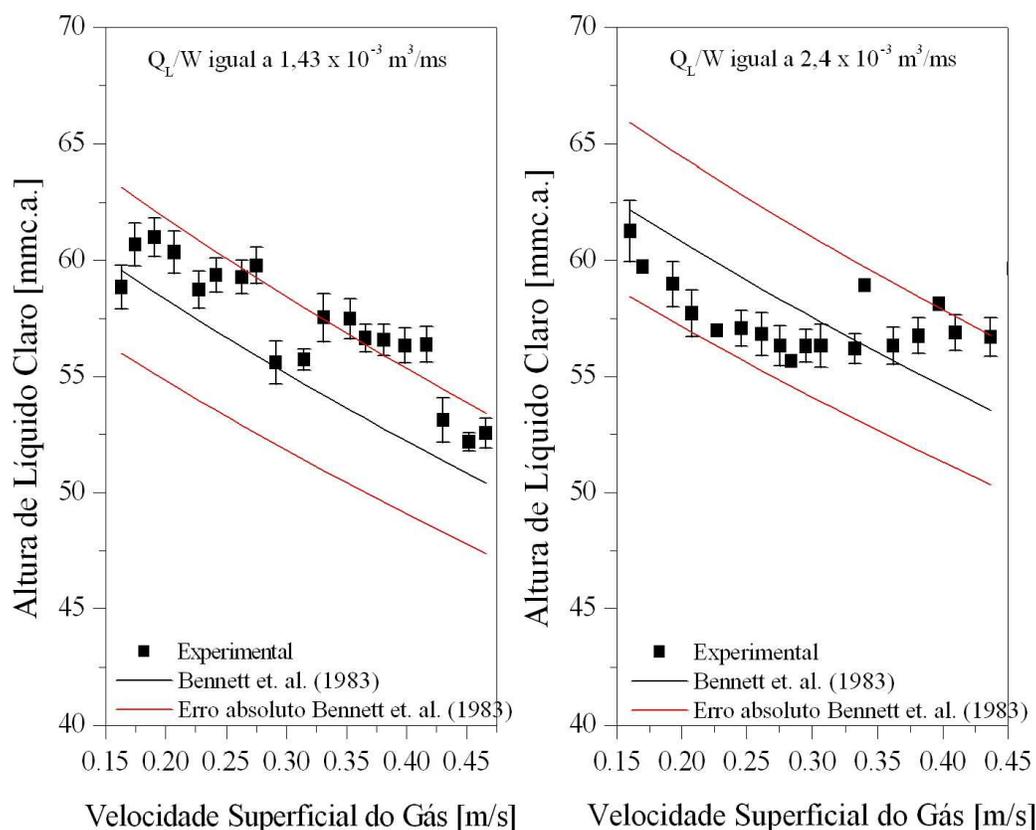


Figura 6.18: Comparação da altura de líquido claro predita por Bennett *et al.* (1983) e medida como função da vazão de gás e da vazão de líquido.

Os pontos, na Figura 6.18, indicam o valor medido de altura de líquido claro e as barras o seu desvio padrão. A linha cheia preta representa o valor predito pela correlação de Bennett *et al.* (1983) e as linhas vermelhas os limites do módulo do erro relativo médio²⁰ aceito para a correlação. Os dados preditos pela correlação e os dados medidos experimentalmente apresentam boa concordância. No entanto, percebe-se uma leve modificação na tendência da altura de líquido claro, em função da vazão de gás, quando a vazão de líquido por comprimento da represa é igual a $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$, apresentando valores praticamente constantes a partir de velocidades superficiais acima de 0,3 m/s. Este efeito, apesar de não observado por outros autores, é devido a alta vazão de líquido que gera altas velocidades de líquido no prato e, assim, diminui o arraste do líquido pelo gás. Além disso, as altas velocidades desestabilizam a formação do regime de dispersão, que favorece a mistura, gerando regimes de escoamento onde a dependência da perda de carga devido a coluna de líquido não seja igual àquela apresentada pela correlação de Bennett *et al.* (1983). Mesmo assim, pode-se observar que todos os valores medidos situam-se na faixa do módulo do erro relativo médio aceito para os dados preditos pela correlação. No entanto, para a vazão de líquido por comprimento da represa de $1,43 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$, a dependência dos valores preditos com a velocidade superficial do gás é similar àquela prevista pela correlação de Bennett *et al.* (1983). Observa-se que há um desvio dos dados medidos para valores acima dos previstos, mas todos estão na faixa de erro da correlação. Comprova-se, desta forma, que para este prato e uma condição de vazão de líquido por unidade de comprimento de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$, portanto para uma alta vazão de líquido, a dependência da altura de líquido claro não apresenta relação direta com a velocidade superficial do gás para valores acima de 0,25 m/s.

A Figura 6.19 mostra a relação entre os dados de altura de líquido claro medidos e calculados pela correlação Bennett *et al.* (1983) para os 56 ensaios experimentais executados neste trabalho. Pela análise da Figura 6.19 pode-se observar que a relação entre os dados é linear, como esperado, e que a dispersão dos dados, a partir da diagonal, mostra-se dentro da faixa de erro da correlação, menores que 0,6 % de erro relativo médio e 6% do módulo do erro relativo médio.

²⁰% Erro Relativo = $\left(\frac{h_{cl,Calculado} - h_{cl,Medido}}{h_{cl,Calculado}} \right) * 100$
 Erro relativo médio = $(\sum \% \text{ Erro relativo}) / \text{número de dados}$
 Módulo do erro relativo = $(\sum |\% \text{ Erro relativo}|) / \text{número de dados}$

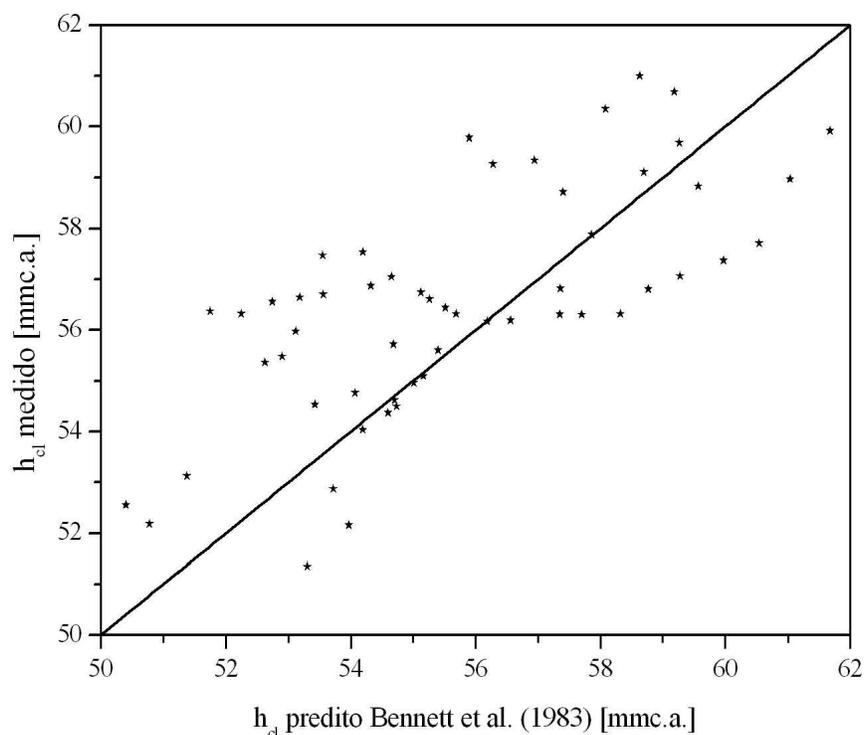


Figura 6.19: Relação entre os dados de altura de líquido claro medidos e calculados pela correlação Bennett et al. (1983) para os 56 ensaios experimentais executados neste trabalhos.

6.5 Determinação numérica da altura de líquido claro

A geometria do prato utilizado nas simulações é idêntica àquela utilizada na aquisição dos dados experimentais, ou seja, um prato com diâmetro de 0,350 m, e largura e altura da represa de 0,234 m e 0,060 m, respectivamente. Entrada retangular com altura de 0,040 m e comprimento de 0,234 m. A fração de área perfurada, A_H/A_B , é de 2,27% em relação à área efetiva de borbulhamento. O líquido entra no estágio com uma vazão por comprimento da represa, Q_L/W , de $2,4 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$, enquanto que a velocidade superficial do gás, V_s , varia entre 0,170 e 0,567 m/s. A massa específica do líquido é fixada em $996,6 \text{ kg/m}^3$ e do gás em $1,185 \text{ kg/m}^3$. A viscosidade da fase líquida é de $1,0 \times 10^{-3} \text{ kg/ms}$, enquanto que para o gás é de $1,835 \times 10^{-5} \text{ kg/ms}$. A pressão de operação é a atmosférica, ou seja, 101325,0 Pa.

A Figura 6.20 apresenta a dinâmica do escoamento no prato perfurado de destilação em um plano central desde a entrada de líquido até a represa para uma vazão volumétrica de líquido por comprimento da represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e velocidade superficial do vapor de 0,340 m/s. Observando-se a Figura 6.20, percebe-se que, na base do prato, a concentração de líquido é maior até a formação da região de dispersão que termina no limite da região de

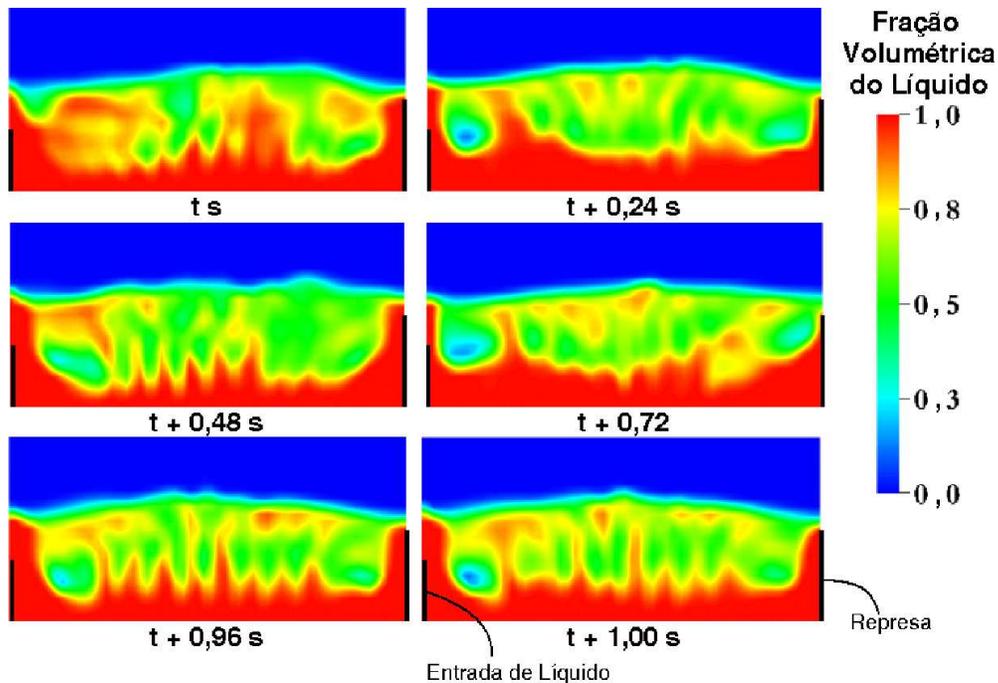


Figura 6.20: Dinâmica do escoamento em um plano central, desde a entrada de líquido até a represa, para 1 s de tempo real a Q_L/W igual a $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e V_s igual a $0,340 \text{ m/s}$.

borbulhamento. É importante notar, novamente, que o escoamento é completamente caótico, apresentando fenômenos de arraste de pequenas porções de líquido pelo gás. Estas formações acontecem constantemente e, em diversas regiões do prato. O contato gás líquido nestas regiões tem como consequência fenomenológica problemas de transferência de calor e massa entre as fases, de acordo com as descrições feitas no Capítulo anterior. As evoluções destas porções de fluidos são as causadoras da condição de quasi-estacionário encontradas neste tipo de escoamento. Estas características foram apresentadas e exploradas no Capítulo anterior onde a geometria e as condições operacionais eram distintas. A principal diferença reside no fato, em função de uma menor fração de área perfurada, de menor região de dispersão, tendo como consequência, a formação de uma região de líquido contínuo próximo a base do prato que se estende até $0,5 h_w$.

Durante as simulações, monitorou-se a fração volumétrica média de líquido na dispersão, e adotou-se o regime quasi-estacionário a partir de 15 s de tempo real, quando considerados campos de velocidade e propriedades turbulentas nulas nas condições iniciais. Os resultados do estado quase-estacionário foram utilizados como condição inicial para os demais casos nos quais se variou a velocidade superficial do gás. Nestes novos casos, o regime quasi-estacionário foi adotado com 8 s de tempo real, aproximadamente.

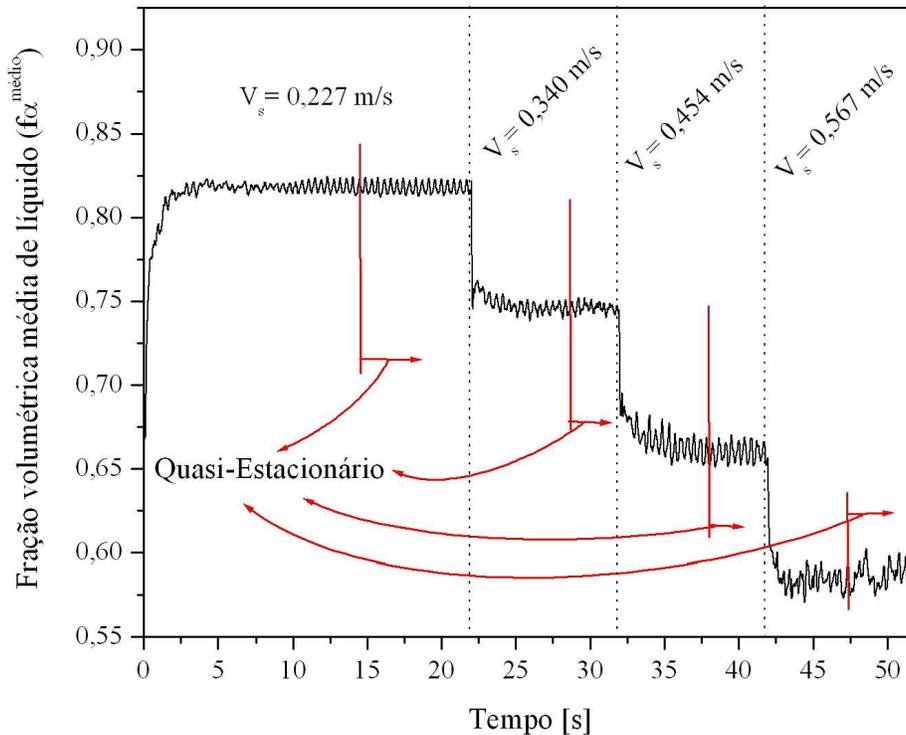


Figura 6.21: Fração volumétrica média de líquido na dispersão ao longo do tempo.

A Figura 6.21 apresenta o perfil de fração volumétrica média de líquido na dispersão com o tempo, para diferentes velocidades superficiais de gás. Nota-se, na Figura 6.21, que com o acréscimo da velocidade superficial do gás as flutuações da fração volumétrica média, com o tempo, foram amplificadas. Este fenômeno ocorre devido ao aumento da turbulência promovida pelo vapor sobre a dispersão líquido-vapor, pois a força de arraste líquido-vapor aumenta com a velocidade superficial do gás.

Tabela 6.2: Dados numéricos de altura de líquido claro para uma vazão de líquido por unidade de comprimento de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$.

Experimento	Velocidade superficial do gás [m/s]	Altura de líquido claro média [mmca]	Desvio padrão [mmca]
1	0,170	66,5	0,012
2	0,227	62,5	0,072
3	0,284	59,1	0,045
4	0,340	57,2	0,115
5	0,397	53,2	0,142
6	0,454	51,3	0,178
7	0,567	47,7	0,334

A Tabela 6.6 apresenta os valores calculados numericamente de altura de líquido claro e o desvio padrão das flutuações de altura de líquido claro, como função da velocidade superficial do gás e da vazão de líquido por unidade de comprimento de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$.

6.6 Comparação entre os dados numéricos e experimentais

A sustentação dos modelos e métodos utilizados para descrever os fenômenos associados ao escoamento em um prato perfurado de destilação, como já definido, passa necessariamente por um processo de verificação e validação. A verificação dos modelos e métodos foram discutidos e apresentados no Capítulo V. Já a validação recai na necessidade de comparar os dados numéricos com os dados experimentais, a fim de corroborar o modelo e validar seus resultados. Neste sentido, fez-se comparações tanto qualitativas quanto quantitativas entre os resultados numéricos e experimentais.

Desta forma, a Figura 6.22 compara a altura da região de líquido contínuo entre os dados simulados e os obtidos na bancada experimental como função da velocidade superficial do gás para Q_l/W igual a $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$. A Figura 6.22 destaca o limite entre a região de líquido, com alta concentração de líquido, e a região de dispersão, na qual o gás e o líquido formam uma mistura homogênea.

As discrepâncias de escala percebidas na Figura 6.22 relacionam-se a geometria cilíndrica da coluna e ao fluido que geram fenômenos de difração que resulta na distorção de imagem. Já a visualização numérica obtida em um plano central da geometria sofreu adaptações na escala para adequar-se a imagem experimental. Desta maneira, avaliaram-se qualitativamente os resultados numéricos e experimentais obtidos através da comparação visual e, percebeu-se que o aumento da velocidade superficial do gás diminui a altura de líquido contínuo sobre o prato. Pode-se afirmar, ainda, que a dependência desta propriedade com a velocidade superficial do gás é da mesma ordem de grandeza para ambos os resultados, o que fornece fortes subsídios para corroboração do modelo.

Para fortalecer a análise qualitativa, determinou-se a altura de líquido claro experimental e numérico, mostrada na Figura 6.23, e fez-se a comparação da altura de líquido claro experimental e numérica como função da velocidade superficial do gás e vazão de líquido por comprimento de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$.

Na Figura 6.23, fica evidente a dependência da altura de líquido claro com a veloci-

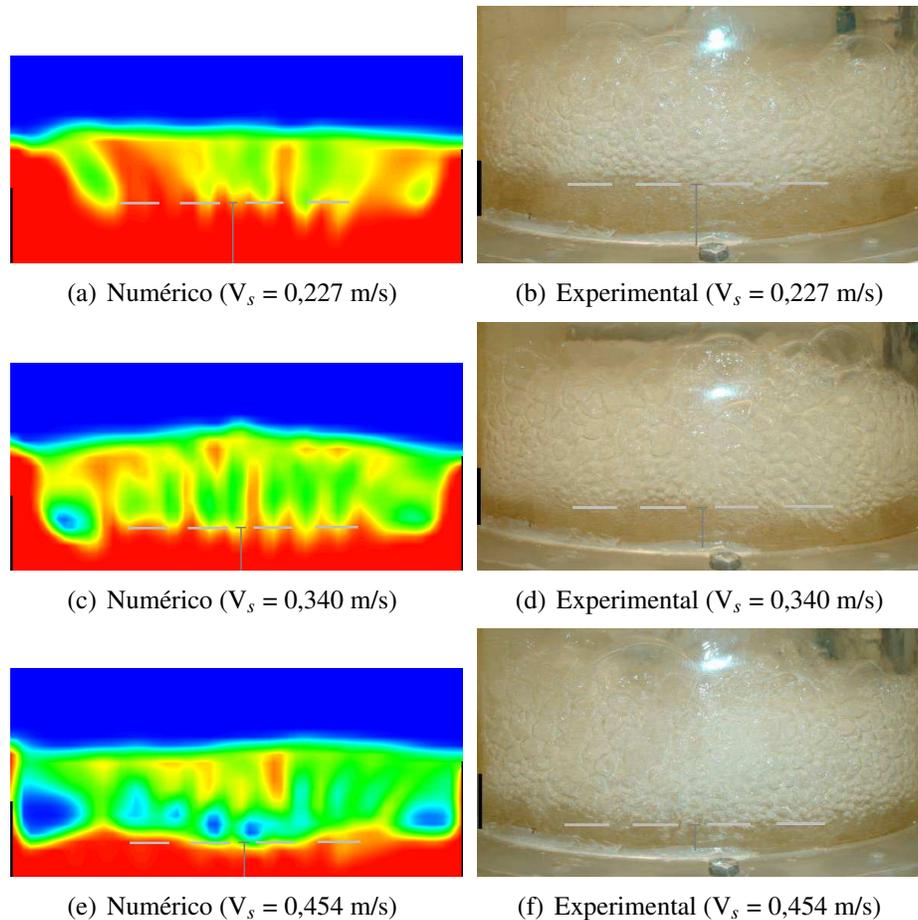


Figura 6.22: Comparação de altura da região de líquido contínuo entre os dados simulados e os obtidos na bancada experimental como função da velocidade superficial do gás para Q_l/W igual a $2,14 \times 10^{-3}$ m³/ms.

dade superficial, para ambos os casos. No entanto, os resultados numéricos não apresentam nenhuma tendência de estabilização da altura de líquido claro, a partir de velocidades superficiais acima de 0,25 m/s, observadas nos dados experimentais. Sabe-se, entretanto, que este comportamento não é comum, e a tendência presente nos dados numéricos é observada na maioria das análises. Esta discordância entre os dados é função, principalmente, da alta velocidade de líquido que, assim como evidenciam os dados experimentais, apresenta-se fora da faixa de operação de um prato perfurado de destilação. No entanto, mesmo com esta leve discrepância, a corroboração dos dados fica evidente, pois como relata Krishna *et al.* (2000), os dados experimentais tendem a apresentar valores inferiores aos calculados por CFD, justificado pelos autores com uma possível contaminação dos fluidos utilizados na bancada experimental. Neste trabalho percebe-se uma discrepância dos dados experimentais, mas verifica-se a similaridade, nunca antes apresentada na literatura, o que fortalece a

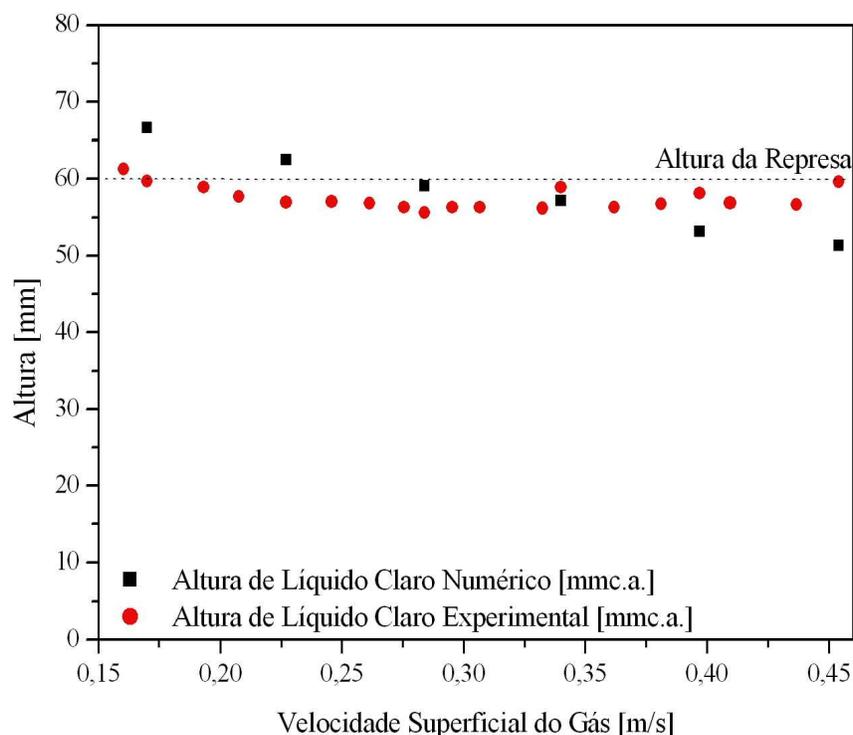


Figura 6.23: Comparação da altura de líquido claro experimental e numérica em função da vazão de gás e vazão de líquido por comprimento de represa de $2,14 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$.

aplicabilidade dos modelos e dos métodos utilizados neste trabalho.

6.7 Conclusões do capítulo VI

Através da análise experimental e numérica feita neste capítulo, é possível concluir que os dados experimentais corroboram e validam qualitativamente e quantitativamente os resultados numéricos, apresentando erros relativos médios de $-0,59\%$ e o módulo dos erros relativos médios de $8,93\%$, como mostra a Figura 6.24, próximos daqueles aceitos para a correlação de Bennett *et al.* (1983), correlação de maior aplicação na atualidade. Isto implica no fortalecendo da aplicabilidade dos modelos e métodos utilizados neste trabalho.

A Figura 6.24 mostra a relação entre os dados numéricos e experimentais de altura de líquido claro. Pode-se observar na Figura 6.24, a pequena dispersão dos dados em relação a diagonal tornando possível concluir-se que os dados numéricos representam, com bastante confiabilidade, os dados experimentais e validam os modelos e métodos utilizados neste trabalho.

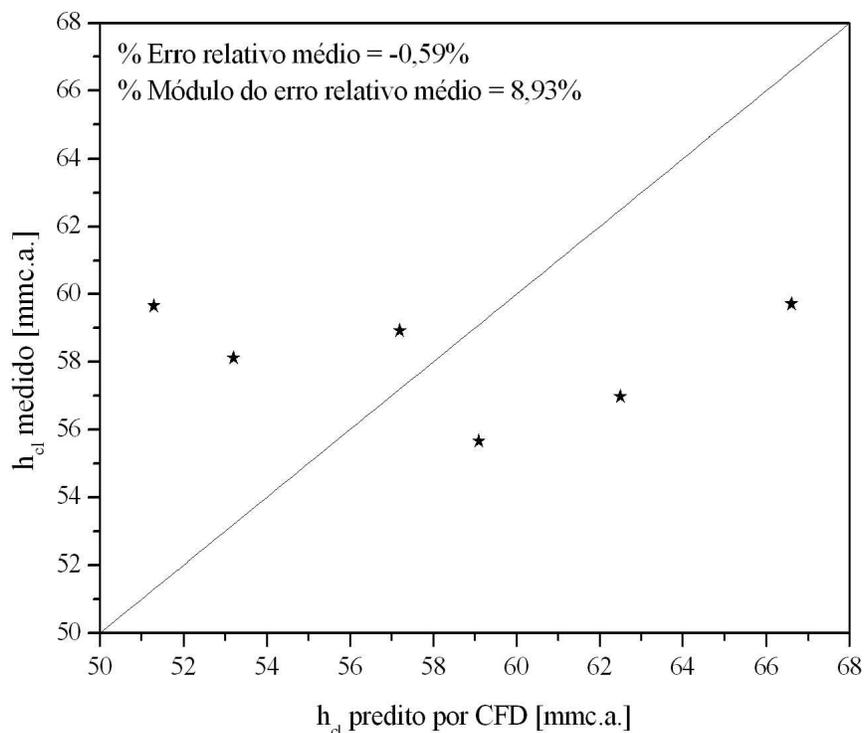


Figura 6.24: Relação entre os dados de altura de líquido claro numéricos e experimentais.

Além do mais, foi possível desenvolver uma metodologia de execução de experimentos, coleta e tratamento de dados o que gerou a reformulação e automatização da unidade experimental, com o desenvolvimento de hardwares e de softwares específicos e dedicados à esta aplicação. Identificou-se uma dependência de altura de líquido claro com a velocidade superficial do gás para altas vazões de líquido não observado anteriormente, o que demanda avaliações mais rigorosas para se determinar as causas e efeitos desta dependência sobre os fenômenos presentes em pratos perfurados de colunas de destilação. Desta forma é possível dar continuidade ao trabalho de acoplamento da conservação de energia e da conservação da massa às equações do movimento, principal objetivo deste trabalho.

7 ESCOAMENTO COM TRANSFERÊNCIA SIMULTÂNEA DE CALOR E MASSA - EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados da simulação de um conjunto de condições operacionais referente ao acoplamento da equação da energia ao modelo, e do acoplamento da equação da energia e da conservação das espécies químicas, visando analisar a influência sobre o padrão de escoamento em pratos perfurados de colunas de destilação.

7.1 Escoamento gás-líquido não-isotérmico

Com a solução do modelo isotérmico, o passo seguinte consiste na solução do modelo não isotérmico, incorporando ao modelo, a equação da energia. No entanto, primeiramente não se considera a transferência de massa entre as fases. A transferência de calor entre as fases é função somente do coeficiente global de transferência de energia, da área interfacial e da diferença de temperatura entre as fases.

Para a análise não isotérmica, utilizou-se como geometria um estágio genérico de destilação com diâmetro de 0,300 m, com altura de 0,120 m, largura da represa é 0,180 m e altura de 0,080 m. O líquido entra por uma seção retangular com altura de 0,015 m e cruza o prato por uma distância de 0,240 m. (vide Figura 5.1 e Figura 5.2). O número de furos total é de 180 de seção retangular e com uma área total de 0,00414 m². A área efetiva de borbulhamento é de 0,06333 m², resultando numa fração de 6,54% de área perfurada em relação à área efetiva de borbulhamento.

A vazão de líquido, Q_L , de $2,16 \times 10^{-4}$ m³/s e velocidade superficial, V_S , de 0,7 m/s

foram usados neste estudo. A água e o ar são utilizados para representar a fase líquida e a fase vapor, respectivamente. com massa específica da água de $996,6 \text{ kg/m}^3$ e do ar de $1,184 \text{ kg/m}^3$. A viscosidade para fase líquida é de $9,034 \times 10^{-4} \text{ kg/ms}$ e para fase gás é de $1,835 \times 10^{-3} \text{ kg/ms}$. A pressão de operação é a atmosférica, ou seja, $101325,0 \text{ Pa}$.

Para se avaliar os efeitos da conservação de energia no escoamento líquido/vapor em pratos de destilação, partiu-se do ponto de escoamento isotérmico estabelecido. Assim, usou-se como condição inicial, para as velocidades e a fração volumétrica, a solução do modelo isotérmico no instante de tempo t igual a 10 s . Desta forma, a geometria, a metodologia numérica e as condições operacionais e de contorno, para a simulação do prato não isotérmico, são idênticas às apresentadas nos itens 5.1.1, 5.1.2 e 5.1.3.

Quanto à condição de contorno de temperatura, adotou-se como temperatura do líquido que entra no prato $25 \text{ }^\circ\text{C}$ e para o vapor que entra no prato $45 \text{ }^\circ\text{C}$, além da condição de fluxo zero nas paredes, enquanto que para condição inicial de temperatura usou-se um perfil para ambas as fases uniforme e igual a $25 \text{ }^\circ\text{C}$. A condição de temperatura $25 \text{ }^\circ\text{C}$ foi considerada para as propriedades de ambas as fases fora do domínio computacional. Isto implica na condição de que, se houver entrada de vapor pela condição de contorno de pressão, esse vapor entrará no domínio a temperatura de $25 \text{ }^\circ\text{C}$.

A variação da massa específica com a temperatura, foi incorporada ao modelo pela aproximação de Boussinesq. Esta estratégia é válida para escoamento com baixo número de Mach, definida como a velocidade do escoamento dividida pela velocidade do som, e para pequenas variações de temperaturas. Estas características são detectadas nesta análise, pois o escoamento tem velocidade muito inferior à velocidade do som e as diferenças de temperatura são mínimas. A aproximação de Boussinesq diz que:

$$\rho = \text{constante} = \rho_{k,ref} \quad (7.1)$$

exceto no termo da gravidade da equação de movimento, onde

$$\rho_k = \rho_{k,ref} [1 - \beta_k(T_k - T_{k,ref})] \quad (7.2)$$

sendo β_k o coeficiente de expansão térmica da fase k .

O acompanhamento da dinâmica térmica do escoamento gás-líquido no prato de destilação foi realizado pelo monitoramento das temperaturas médias, temperatura *Bulk*, de ambas as fases, calculadas pela integração no volume total de cada fase. A temperatura *Bulk* é

definida como:

$$T_{k,bulk}(t) = \frac{\int \int \int_V T_k(x,y,z,t) dx dy dz}{\int \int \int_V dx dy dz} \quad (7.3)$$

A Figura 7.1 mostra o avanço das temperaturas *bulk* do gás e do líquido, ao longo do tempo, a partir da injeção de vapor quente, lembrando que neste instante o escoamento já está em um estado “quasi-estacionário”. Nota-se que o aquecimento do líquido pela entrada de vapor aquecido ao sistema, apresenta taxa maior no início e decai lentamente, até atingir o equilíbrio térmico. Na Figura 7.1 apresenta-se 10 segundos de tempo real do acompanhamento das temperaturas *bulk* e pode-se observar que ambas são muito próximas mas a temperatura média do gás é levemente superior a do líquido, como mostra o detalhe na Figura 7.1. A proximidade das temperaturas *bulk* das fases indica que a resistência à transferência de calor é pequena, devido aos altos valores do coeficiente de transferência de calor. Nota-se, também, que a temperatura média do gás tem características mais caóticas quando comparadas com a do líquido, pois, o gás tem menor capacidade de absorver as variações de energia presentes neste tipo de escoamento em função da baixa capacidade do gás reter o calor, ou seja, baixa capacidade calorífica quando comparada com a do líquido.

A altura de líquido claro é comparada com aquela do escoamento isotérmico para 5 s de tempo real na Figura 7.2. Pode-se notar que a temperatura influencia no escoamento, ge-

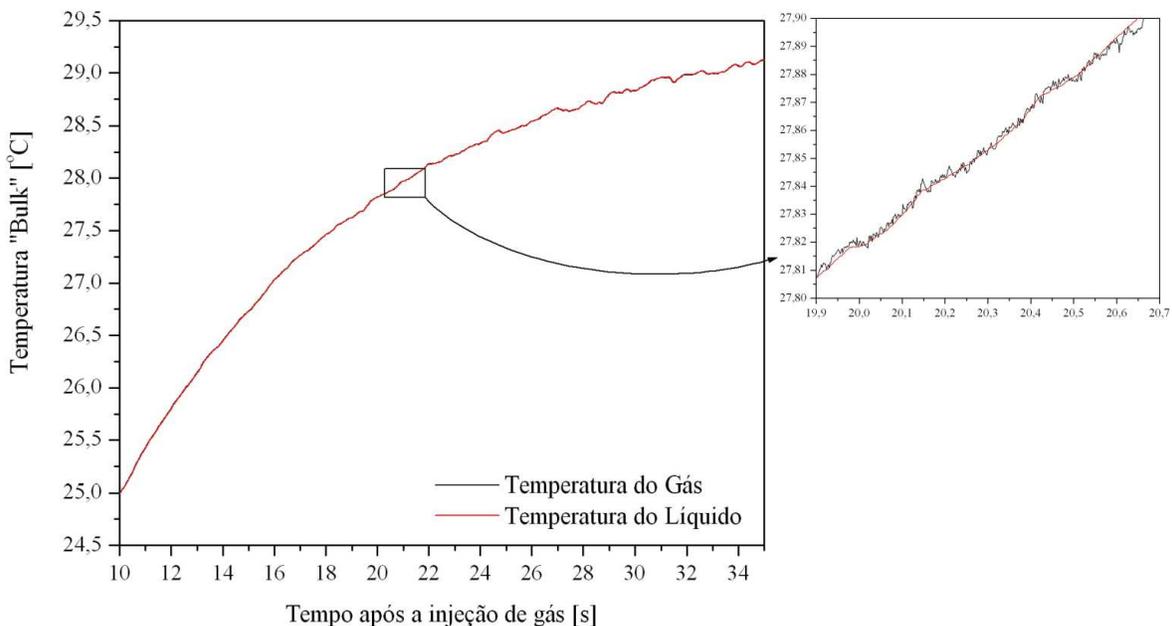


Figura 7.1: Monitoramento da temperatura “bulk” para o gás e líquido após o início da injeção de gás quente: $T_{inL} = 25 \text{ }^\circ\text{C}$; $T_{inG} = 45 \text{ }^\circ\text{C}$.

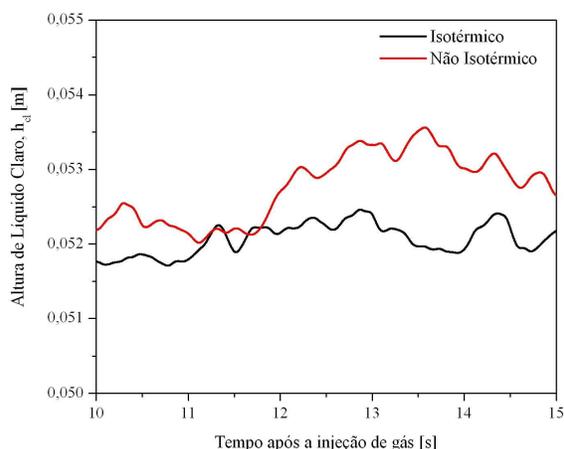


Figura 7.2: Comparação da altura de líquido claro como função do tempo entre o modelo isotérmico e o não isotérmico para $V_S=0,7$ m/s, $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms e $T_{inL} = 25$ °C; $T_{inG} = 45$ °C.

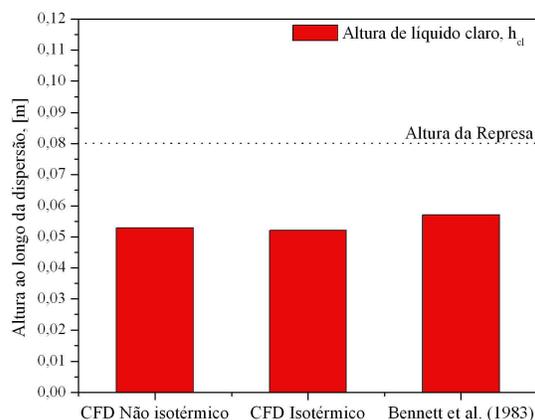


Figura 7.3: Comparação da altura de líquido claro obtidos por CFD não isotérmico, isotérmico e o predito pela correlação de Bennett *et al.* (1983). $V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms; $T_{inL} = 25$ °C; $T_{inG} = 45$ °C.

rando um ligeiro aumento na altura de líquido claro devido, principalmente, aos efeitos de convecção térmica. No entanto, o escoamento permanece com características caóticas, como o apresentado pelo escoamento isotérmico. Já a Figura 7.3 apresenta uma comparação da altura de líquido claro média calculada num tempo suficientemente grande para se garantir o estado de quasi-estacionário, entre os modelos isotérmicos, não isotérmicos e aquele predito pela correlação de Bennett *et al.* (1983). O escoamento não isotérmico gerou um incremento na altura de líquido claro média na ordem de 1,5 %, em relação ao modelo isotérmico que, em valores absolutos corresponde a um acréscimo de 0,0008 m. Este incremento, apesar de pequeno, mostra que a conservação de energia apresenta influência sob o padrão de escoamento.

A Figura 7.4 apresenta uma seqüência de quadros da evolução da temperatura em um plano central x-z desde a entrada de líquido até a represa, do início da injeção de vapor quente até um tempo final de 20,0 segundos.

Na Figura 7.4 observa-se o aquecimento gradual do líquido motivado pela entrada de vapor quente no sistema. Após 10,0 s de tempo real, o campo de temperatura do líquido se estabelece com tendência de temperaturas maiores nas regiões adjacentes à represa. Em contrapartida, as regiões próximas à entrada apresentam temperaturas mais baixas. Percebe-se, também, que o campo de temperatura do líquido é caótico, a exemplo dos campos de fração de volume e velocidades, mas com menor intensidade, conforme Figura 7.1, em fun-

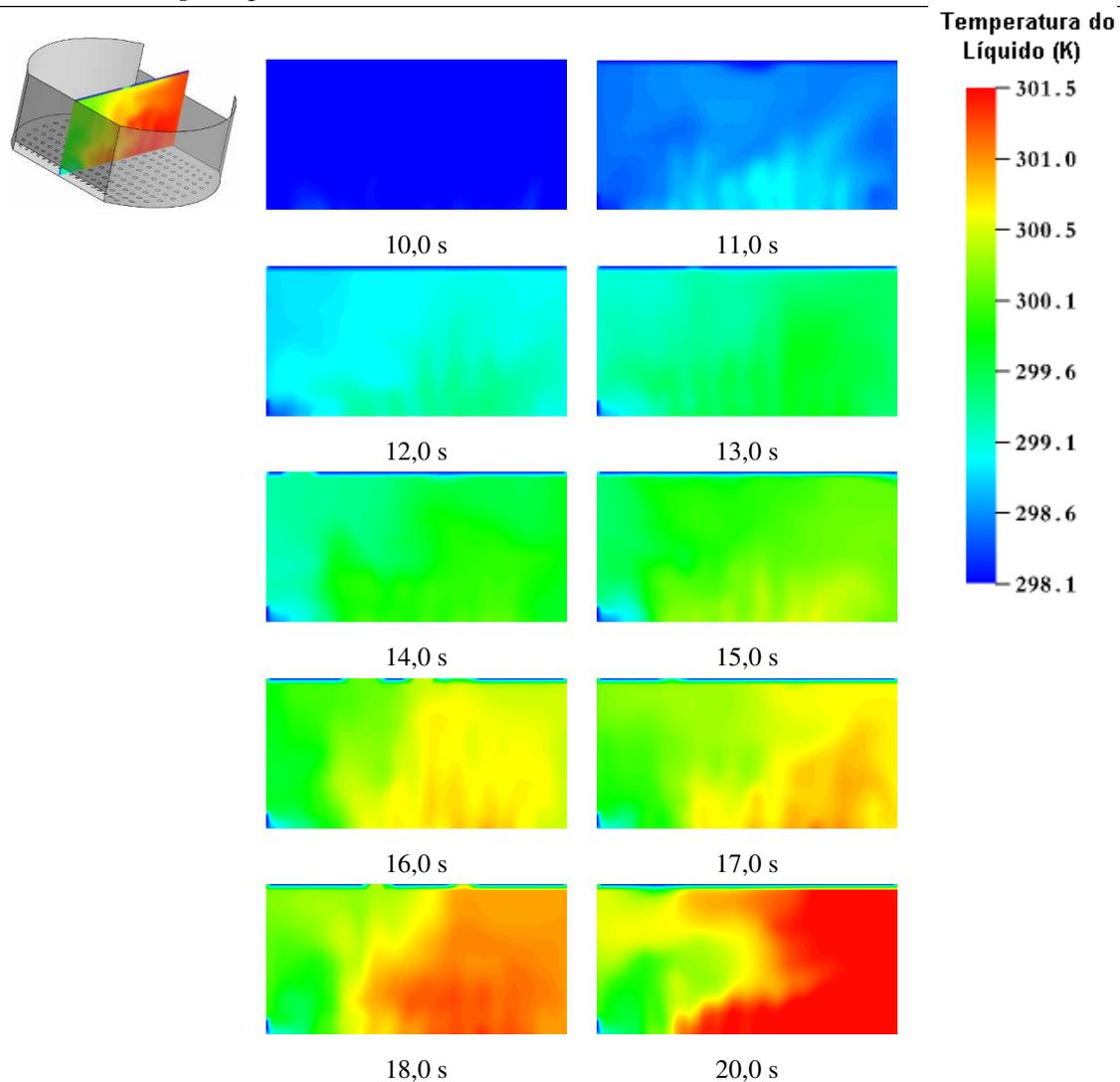


Figura 7.4: Campos de temperatura de líquido em um plano x-z central desde a entrada de líquido, à esquerda, até a represa, a direita, a partir do início da injeção de gás quente até 20 s. $V_S=0,7$ m/s; $Q_L/W=1,2 \times 10^{-3}$ m³/ms; $T_{inL}=25$ °C; $T_{inG}=45$ °C.

ção, principalmente, das alta taxas de transferência de calor entre as fases, causada pela baixa resistência à transferência de calor, e pela dispersão de calor, que, para a equação da energia da fase líquida é da ordem de grandeza da convecção de calor.

Para uma análise geral, as regiões quentes e frias são apresentadas sob ponto de vista tridimensional na Figura 7.5 que mostra as isocurvas de temperatura do líquido à 27,2 °C, regiões de menor temperatura (Figura 7.5a), e a 28,2 °C regiões de maior temperatura (Figura 7.5b). A Figura 7.5 mostra junto à represa uma região de maior temperatura e, por outro lado, junto à entrada de líquido uma região de temperaturas mais baixas. O gradiente de temperatura entre estas duas isocurvas é de 1,0 °C, que pode ser considerado bastante repre-

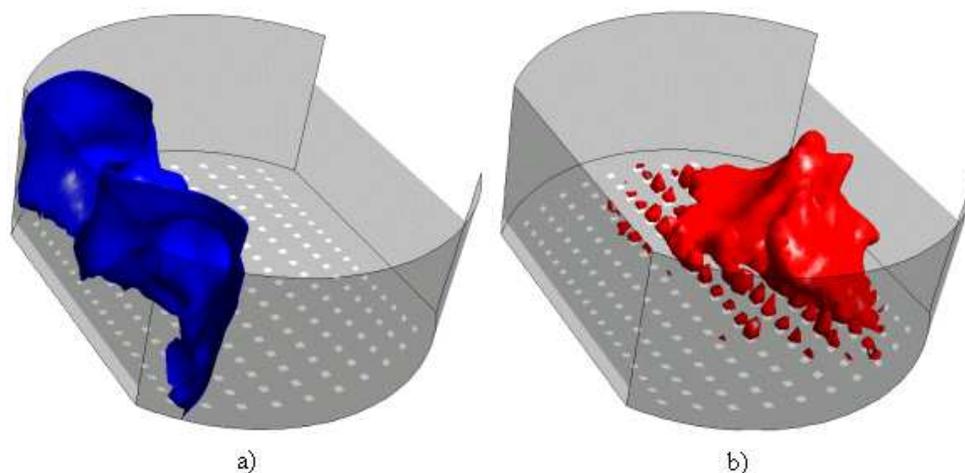


Figura 7.5: Isocurvas de temperatura de líquido em um instante t na condição de quasi-estacionário: a) regiões de menor temperatura ($T = 27,2 \text{ }^\circ\text{C}$); b) regiões de maior temperatura ($T = 28,2 \text{ }^\circ\text{C}$); $V_S = 0,7 \text{ m/s}$; $Q_L/W = 1,2 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$; $T_{inL} = 25 \text{ }^\circ\text{C}$; $T_{inG} = 45 \text{ }^\circ\text{C}$.

sentativo quando se analisa a pratos de destilação. A existência do gradiente deve-se ao fato de que o líquido entra frio por uma das extremidades do prato, cruza toda a extensão do prato aquecendo-se através do contato com o vapor quente, e sai aquecido pela outra extremidade.

Na análise do escoamento não isotérmico, foi possível estabelecer os principais aspectos metodológicos para solução numérica do modelo fluidodinâmico com a incorporação da conservação da energia, além de identificarem-se as características do escoamento quando este é submetido a condições de transferência de calor entre as fases. Delinearam-se, também, as estratégias a serem adotadas para a implementação da conservação da espécie química no modelo. Sendo assim, o próximo passo deste trabalho de tese de doutorado é o acoplamento da conservação da espécie química e, afinal, discutir o efeito da dinâmica dos fluidos na performance de um prato perfurado de destilação.

7.2 Transferência Simultânea de Calor, Massa e Quantidade de Movimento

O principal objetivo deste trabalho é propor uma metodologia para análise da performance de pratos de destilação a partir da utilização de ferramentas de CFD. Desta forma, este capítulo apresenta, de forma lógica e seqüenciada, todas as características metodológicas e os resultados da aplicação dos modelos e métodos, descritos no Capítulo III e IV, para escoamento em pratos perfurados de destilação, através da análise das principais caracterís-

ticas do escoamento e da eficiência de separação do prato, para uma mistura clássica, etanol e água. Para tal, são incorporados ao modelo as equações de conservação das espécies químicas, uma para cada fase, cuja transferência da espécie química é tratada pelo modelo das duas resistências.

7.2.1 Condições de contorno e condições iniciais

Dada à característica elíptica das equações diferenciais parciais do modelo, as condições de contorno em todas as fronteiras do domínio físico são necessárias. Perfis uniformes de velocidade, temperatura, concentração e propriedades turbulentas são impostas nas entradas. Condição de não deslizamento e fluxo zero nas paredes, pressão estática constante e derivada nula para o fluxo das propriedades para as regiões de saída, são aplicadas para ambas as fases.

A geometria utilizada para as análises da influência da transferência de quantidade de movimento, calor e massa simultâneos foi a mesma utilizada na análise do escoamento isotérmico, seção 5.1, e não isotérmico, seção 7.1. As dimensões básica do prato são (vide Figuras 5.1 e 5.2): 0,300 m de diâmetro e altura, H , de 0,120 m; a largura da represa de 0,180 m e altura de 0,080 m; o líquido entra por uma seção retangular, com altura de 0,015 m e comprimento de 0,180 m, cruza o prato por uma distância de 0,240 m; o número total de furos é 180, com seção quadrada, com lados de 5 mm, resultando numa fração de área perfurada de 6,54% em relação à área efetiva de borbulhamento.

As propriedades físicas e as condições de contorno do prato de destilação foram determinadas a partir da simulação macroscópica de uma coluna de destilação no código DESTIL, desenvolvido por Barros (1997), que é baseado no modelo de estágios de não-equilíbrio. A mistura utilizada nos testes foi o etanol/água. No início da simulação, as condições consistiram no preenchimento de líquido até à altura da represa a uma temperatura homogênea, T_0 , para ambas as fases. Os campos de velocidade e propriedades turbulentas foram considerados nulos no início das simulações. A Tabela 7.1 apresenta as condições operacionais e a Tabela 7.2 apresenta as propriedades físicas utilizadas.

7.2.2 Metodologia numérica

Dada a complexidade do modelo, sua solução requer estratégias específicas para se garantir solução estável. Sendo assim, e diante da experiência adquirida ao longo do desen-

Tabela 7.1: Condições operacionais

	Entrada de vapor	Entrada de líquido	Parede	
			Vap	Líq
Fração Volumétrica	1	1	Impermeável	
Velocidade normal à face [m/s]	10,65	0,08	0	0
Temperatura [°C]	83,75	81,65	Isolado	
Fração mássica de etanol	0,812	0,785	Impermeável	
Energia cinética turbulenta	-	$1,5 (i \cdot v_{\alpha})^2$	-	0
Taxa de dis. de energia cinética turbulenta	-	$\frac{(k_0)^{1.5}}{0,3 Ls}$	-	$\frac{d\varepsilon_{\alpha}}{d\xi} = 0$

ξ é a direção ortogonal a parede

Tabela 7.2: Propriedades físicas

	Viscosidade [kg/ms]	Massa específica [kg/m ³]	Condução térmica [W/mK]	Capacidade calorífica [J/kgK]	Difusividade [m ² /s]	Peso molecular [kg/kgmol]
Líq	$1,0319 \times 10^{-3}$	853,8	0,20302	3253,2	$7,13598 \times 10^{-9}$	33,238
Vap	$1,0108 \times 10^{-5}$	1,2916	0,019294	1843,4	$1,6844 \times 10^{-5}$	36,857

volvimento deste trabalho de tese de doutorado, formulou-se uma estratégia de solução de minimização de esforço computacional que garantisse a estabilidade da solução. Neste sentido, a solução foi obtida seqüencialmente, onde, primeiramente, se obtém a solução sem a conservação de massa e energia, a partir de uma condição inicial, de velocidades nulas e completo preenchimento líquido no prato até a altura da represa, atingindo a condição de

quasi-estacionário (aproximadamente 10 s de tempo real). Este resultado é utilizado como condição inicial para o passo seguinte, que consiste na resolução do modelo incorporando a conservação de energia. A condição de quasi-estacionário é garantida pelo acompanhamento de variáveis como: altura de líquido claro e temperatura *bulk* de ambas as fases. Esta segunda etapa requer um esforço computacional tal que o tempo real da solução total seja de aproximadamente 35 s. Os resultados, obtidos nesta etapa são utilizados, como condição inicial, para a etapa seguinte, onde é incorporada, ao modelo, a conservação da espécie química, mas sem o termo de transferência de massa entre as fases. A solução é conduzida até aproximadamente 50 s de tempo real total e utilizada como condição inicial para solução do modelo completo. Na etapa seguinte é incorporada a transferência de massa entre as fases, o que demanda aproximadamente 40 s de tempo real para atingir a condição de quasi-estacionário, perfazendo tempo real total de 90 s. A solução, conduzida da forma descrita acima, fornece bons níveis de estabilidade e convergência. Pôde-se, também, verificar que não há a necessidade de resolver todos os passos a cada nova situação, pois se as alterações correspondem somente a variações de concentração, por exemplo, são necessárias as duas últimas etapas, pois a condição inicial poderá ser a solução obtida pelo modelo com a conservação da energia. As demais características de solução numérica como: a malha numérica, o método de interpolação, a integração no tempo, o acoplamento pressão velocidade, o passo de tempo, entre outros, foram os mesmos utilizados na análise do escoamento isotérmico e pode ser encontrado na seção 5.1.2. O tempo total de esforço computacional para obter-se a solução completa com aproximadamente 90 s de tempo real total, em um computador Pentium 3 Ghz com 1 Gb, de memória foi de aproximadamente 4 meses.

7.2.3 Resultados e discussões

A Figura 7.6 mostra a altura de líquido claro, em função do tempo, onde se pode perceber que o valor de altura de líquido claro varia em torno da média, definida em 0,04676 m. Já a Figura 7.7 apresenta a temperatura *bulk* do líquido enquanto que a Figura 7.8 apresenta a fração mássica média de etanol, no líquido, como função do tempo para a última etapa da solução. A fração mássica média de etanol no líquido é calculada aplicando-se a média volumétrica em todo o domínio computacional, ou seja:

$$\bar{y}_k(t) = \frac{\int \int \int_V y_k(x,y,z,t) dx dy dz}{\int \int \int_V dx dy dz} \quad (7.4)$$

Pode-se verificar, por inferência das Figuras 7.6, 7.7 e 7.8, que a condição de quasi-estacionário é alcançada primeiramente para a variável altura de líquido claro, depois para a temperatura *bulk* e por fim para a fração mássica média de etanol no líquido. Para a altura de líquido claro, pode-se considerar um estado de quasi-estacionário a partir de 56 s de tempo real, para a temperatura *bulk* em 68 s e para a fração mássica média de etanol a partir do 78 s de tempo real. A altura de líquido claro atinge o estado de quasi-estacionário primeiro porque a transferência de massa entre as fases tem pouca influência sobre essa variável e seus efeitos são logo absorvidos. Já os campos de temperatura e fração mássica requerem um tempo maior para se estabilizar e, portanto, como todas as variáveis devem apresentar uma condição de oscilação em torno de média bem definida, a condição de quasi-estacionário é assumida, e todas as variáveis são calculadas num intervalo de tempo suficientemente grande, a partir de

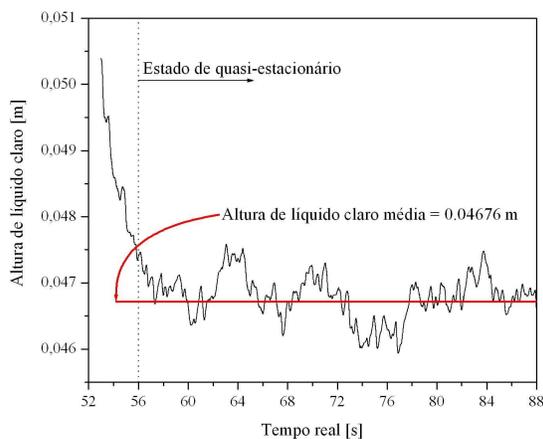


Figura 7.6: Altura de Líquido claro ao longo do tempo.

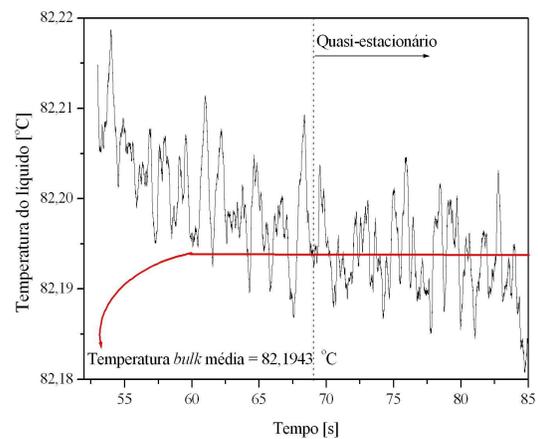


Figura 7.7: Temperatura *bulk* do líquido como função do tempo.

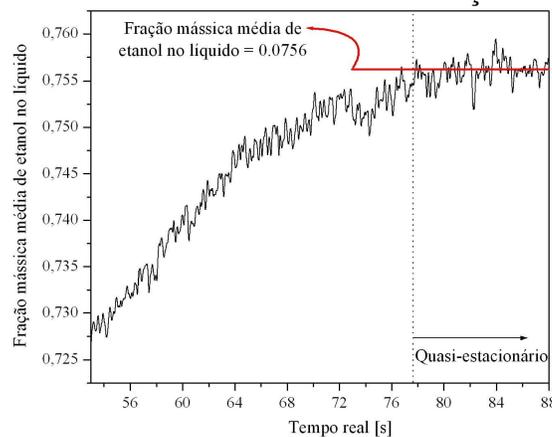


Figura 7.8: Evolução da fração mássica média de etanol no líquido como função do tempo.

78 s de tempo real.

A influência da transferência de massa entre as fases pode ser observada na Figura 7.9, que apresenta o valor da altura de líquido claro média para cada uma das etapas da solução, ou seja, escoamento isotérmico, escoamento não isotérmico, e para a última etapa, na qual é considerada a conservação da espécie química com transferência de massa entre as fases, escoamento não isotérmico com transferência de massa. Os resultados são comparados com os obtidos pela correlação de Bennett *et al.*(1983). Observa-se, na Figura 7.9, que a tendência de incremento da altura de líquido claro em função dos efeitos térmicos é mantida, pois o modelo não isotérmico apresenta um valor de altura de líquido claro 2,6% superior ao modelo isotérmico. Esta tendência já foi observada nos estudos anteriores. No entanto, o efeito de incremento da altura de líquido claro é contrabalançado pelos efeitos de transferência de massa entre as fases. O modelo não isotérmico com transferência de massa indica um valor 3,6 % inferior àquele previsto pelo modelo isotérmico. Esse decréscimo é função dos fenômenos de vaporização e condensação que estão incorporados aos termos de transferências das propriedades entre as fases. Estes fenômenos acabam por induzir uma pequena alteração no padrão do escoamento sobre o prato. Ao comparar-se a altura de líquido claro resultante

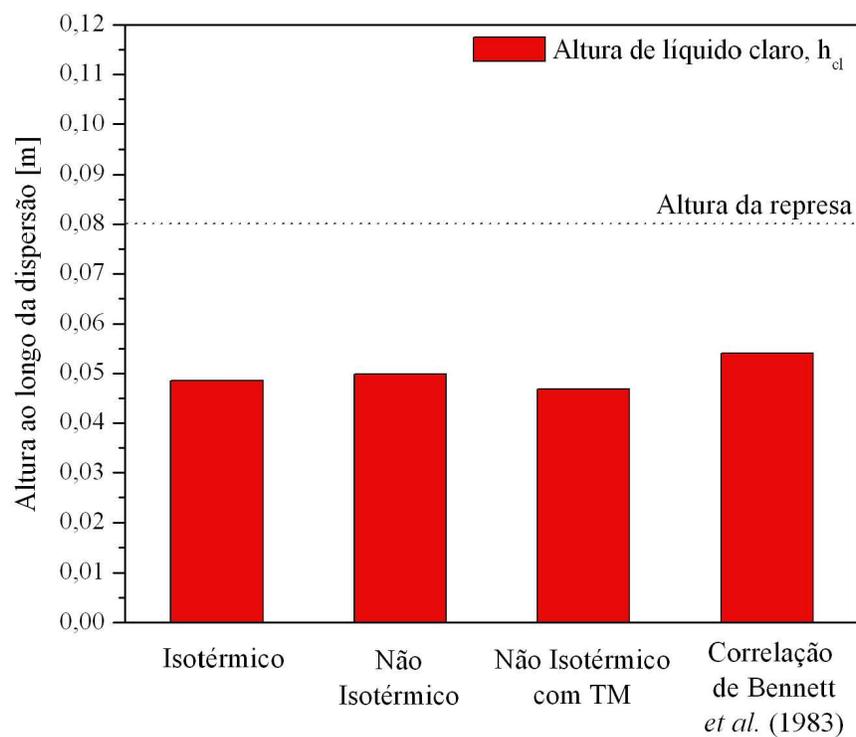


Figura 7.9: Altura de líquido claro para cada etapa da solução, comparada com a correlação de Bennett *et al.* (1983).

da solução do modelo não isotérmico com transferência de massa com aquela prevista pela correlação de Bennett *et al.* (1983) percebe-se um desvio para baixo de aproximadamente 13 %.

A Figura 7.10 apresenta o perfil de fração volumétrica média do líquido ao longo da dispersão para o modelo isotérmico, não isotérmico e não isotérmico com transferência de massa. Pode-se perceber, pela Figura 7.10, que a fração volumétrica média comporta-se de forma similar ao descrito por Zuiberweg (1982) e Bennett *et al.* (1983) confirmando, novamente, que o modelo prediz os padrões de escoamento presentes em um prato perfurado de destilação. Verifica-se que a fração volumétrica média de líquido cresce rapidamente de uma região de ausência de líquido, próximo ao topo do prato, cruza a faixa imaginária da altura da represa e estabiliza-se um pouco abaixo da altura da represa. Já, ao se aproximar da base do prato, cerca de 0,020 m da base, a fração volumétrica média do líquido torna a crescer. Isto representa, como já se concluiu, que das imediações da base do prato até altura de 0,020 m, as bolhas sobem verticalmente na forma de jatos e depois se dispersam no líquido formando uma espécie de emulsão que vai se desfazendo à medida que a altura da dispersão aumenta, até que não haja líquido misturado ao gás em quantidade significativa. Percebe-se, também,

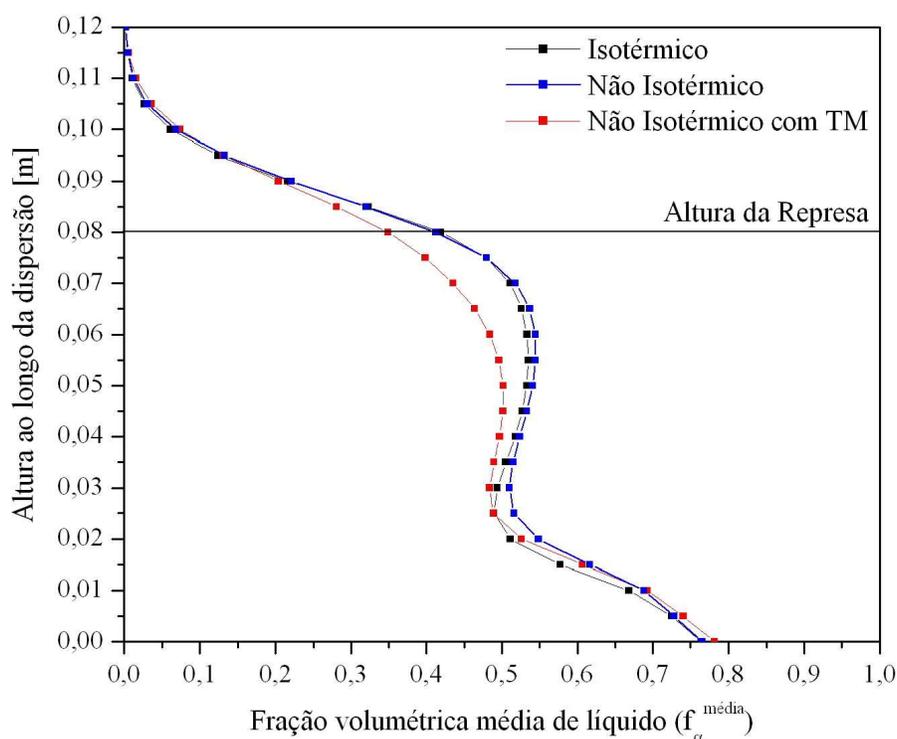


Figura 7.10: Perfil da fração volumétrica média de líquido em função da altura ao longo da dispersão.

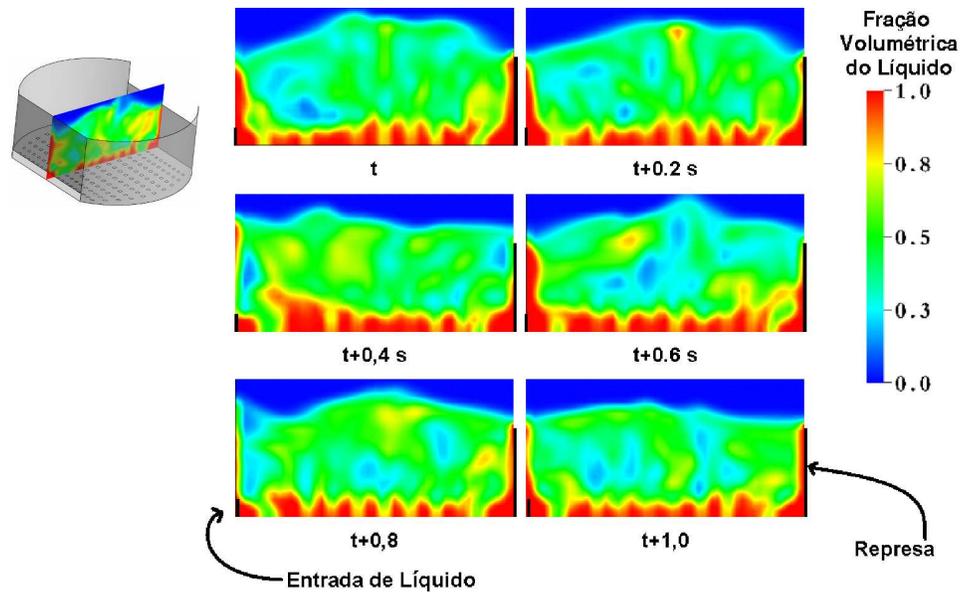


Figura 7.11: Dinâmica do escoamento em um plano central, desde a entrada de líquido até a represa, para 1 s de tempo real para o modelo completo.

que os efeitos de transferência de calor e massa influenciam no perfil de fração volumétrica média de líquido, principalmente na região de mistura líquido/vapor, onde se verifica tendência de maior presença de vapor para problemas com transferência de calor e massa do que em situações de escoamento isotérmico. O fato da região de mistura líquido/vapor ser a mais afetada é esperado, fundamentado nos fenômenos de vaporização e condensação que ocorrem em maior intensidade nesta região. Os efeitos de transferência de calor e massa sobre as frações de líquido e vapor sobre o prato, justificam as variações de altura de líquido claro, já que esta é reconstituída a partir dos campos de frações volumétricas.

A Figura 7.11 apresenta a dinâmica do escoamento no prato, em um plano central, desde a entrada de líquido até a represa para 1 segundo de tempo real, a partir de um tempo igual a t no regime quasi-estacionário, para o modelo não isotérmico com transferência de massa. Observando-se a Figura 7.11, percebe-se que, na base do prato, a concentração de líquido é maior até à formação da região de emulsão que depois termina no limite da região de borbulhamento. É importante notar também que o escoamento é completamente caótico, apresentando fenômenos de arraste de pequenas porções de líquido pelo vapor que, por sua vez, caem sobre a dispersão quando sua força peso se torna maior, como foi identificado e descrito por Zuiberweg (1982) e Bennett et al. (1983). Estes fenômenos acontecem constantemente e em diversas regiões do prato. Isto possibilita nestas regiões diminuição do contato líquido/vapor tendo como consequência, problemas de transferência de calor e massa entre as fases.

A Figura 7.12 mostra o perfil de temperatura média do líquido desde a entrada no domínio até a represa. A temperatura média do líquido é calculada fazendo-se a média ponderada da temperatura do líquido em planos paralelos ao plano de entrada de líquido. Pode-se perceber a dependência da temperatura do líquido com a posição, principalmente na direção do fluxo de líquido. Para as demais direções, da base do prato até o topo e na direção perpendicular ao fluxo de líquido, não se percebe esta dependência com a posição.

As regiões de maior e menor temperaturas, do ponto de vista tridimensional, podem ser observadas na Figura 7.13, que mostra isocurvas de temperatura do líquido. A Figura 7.13a, isocurva a 82,11 °C, evidencia a região de menor temperatura ao longo de toda a região de entrada enquanto que a Figura 7.13b, isocurva a 82,32 °C, mostra uma região de maior temperatura na parte central e junto à represa. Esses gradientes de temperatura modificam a condição de equilíbrio termodinâmico ao longo do estágio que, por sua vez, alteram as condições de transferência de massa. No entanto o modelo proposto confere altas taxas de transferência de calor devido à grande área de transferência, fazendo com que a energia seja transferida do vapor para o líquido de forma muito rápida, resultando em pequenos gradientes de temperatura no estágio.

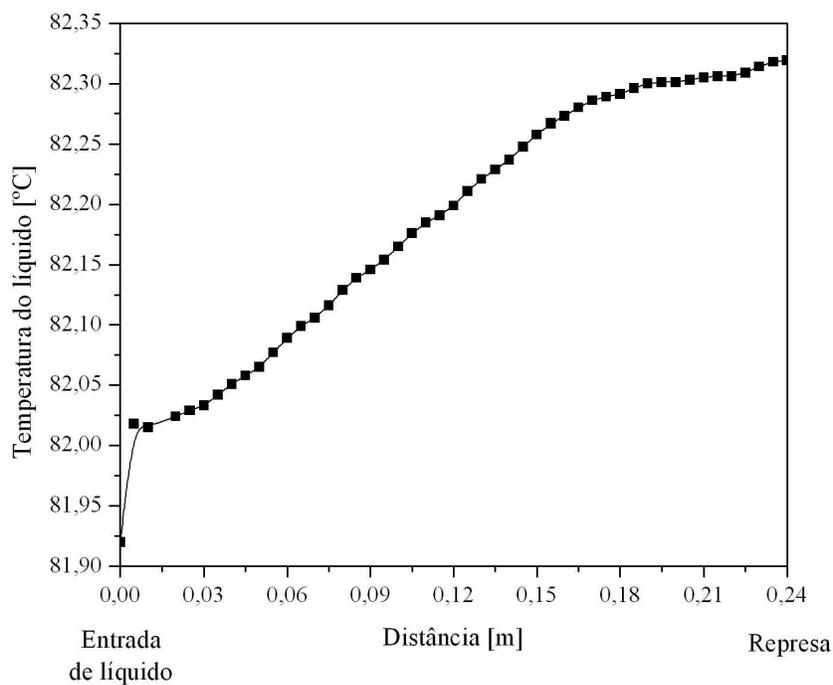


Figura 7.12: Perfil de temperatura médio do líquido desde a entrada até à represa, para o modelo completo.

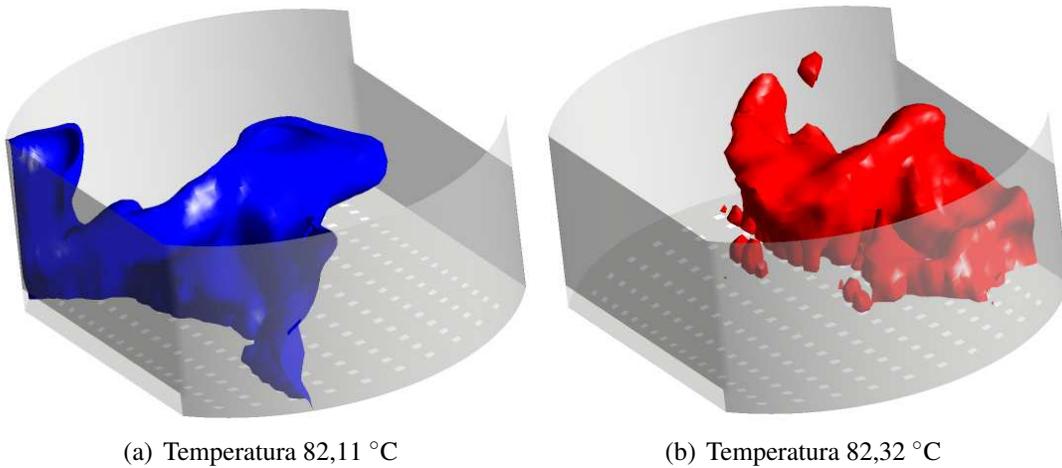


Figura 7.13: Isocurvas de temperatura de líquido em um tempo t no estado quasi - estacionário para o modelo completo.

Com base na Figura 7.8, a fração mássica do líquido apresenta um comportamento oscilatório. Para melhor visualizar a variação da concentração de etanol na fase líquida, com a posição e com o tempo, a Figura 7.14 apresenta uma seqüência dos campos de fração mássica de etanol no líquido para 1 s de tempo real no estado de quasi-estacionário, em um plano central desde a entrada de líquido até a represa. Pode-se observar que o líquido entra no prato com uma maior concentração de etanol e à medida que cruza o prato vai diminuindo a concentração do mais volátil, etanol, e aumenta a concentração do menos volátil, água, através da transferência de massa com o vapor. Assim como o perfil de temperatura, os maiores gradientes estão na direção do fluxo de líquido já que, na direção perpendicular à entrada e na altura, não existem maiores variações. Além disso, percebe-se que o campo de fração de etanol varia com o tempo dentro de um regime oscilatório que tende à média bem definida, assim como a fração volumétrica de líquido. Esta variação, inclusive, é função do comportamento oscilatório da fração volumétrica de líquido, pois as condições de transferência de massa, tais como área de transferência e gradiente de concentração, variam com o tempo. É importante ressaltar que a equação utilizada para o cálculo da área de transferência de massa por unidade de volume não considera variações espaciais, mas somente variações temporais e, no entanto, o efeito é capturado, pois o transporte convectivo de massa, causado pelo movimento do líquido e do gás, é o principal responsável pelas variações temporais da concentração de etanol no líquido. Outro ponto importante é o perfil de temperatura, que como se percebe na Figura 7.13, apresenta regiões de maior e menor temperatura, que por sua vez alteram as condições de equilíbrio no prato e as taxas de transferência de massa.

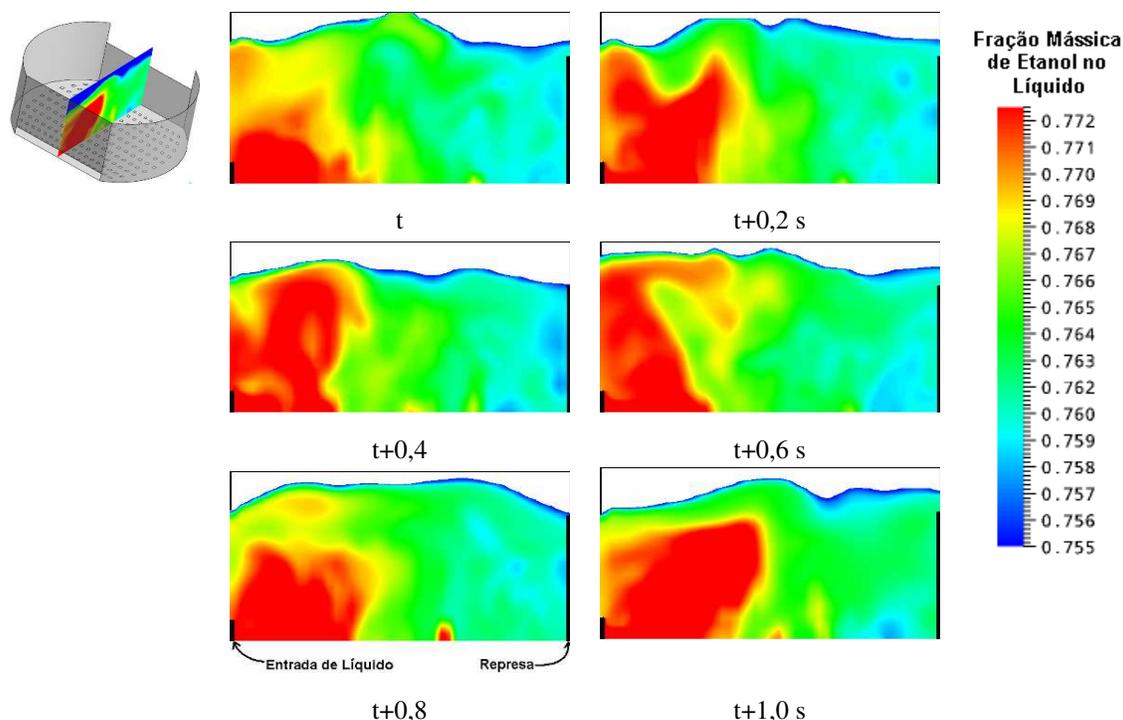


Figura 7.14: Variação do campo de fração mássica de etanol no líquido para 1 s de tempo real no estado de quasi-estacionário desde a entrada de líquido até a represa.

A Figura 7.15 apresenta os mapas da fração de volume do líquido (Figura 7.15a), temperatura do líquido (Figura 7.15b), fração mássica de etanol no vapor e no líquido (Figura 7.15c e 7.15d) em um plano central desde a entrada de líquido até à represa em um tempo t no regime quasi-estacionário. Observa-se uma dispersão entre o vapor e o líquido que aumenta a fração de vapor à medida que se afasta da base do prato. O perfil de temperatura não é influenciado pela variação da fração de volume do vapor com a altura da dispersão, apresentando maiores gradientes na direção perpendicular, ou seja, na direção do fluxo de líquido. Isto se deve, principalmente, a alta taxa de transferência de calor entre o líquido e o vapor. No entanto, esta variação resulta em diferentes condições de equilíbrio termodinâmico que, por sua vez, influenciam o desempenho do prato. Na Figura 7.15c e 7.15d observam-se a concentração, fração mássica de etanol na fase vapor e líquida, respectivamente. As regiões em branco, nestas figuras, são regiões com ausência da fase, como se percebe ao comparar-se com a Figura 7.15a. Pode-se notar que a concentração do etanol no vapor aumenta na direção do escoamento de vapor, ou seja, da base do prato até a saída, enquanto que, na fase líquida, a fração mássica do etanol diminui na direção do fluxo de líquido, da entrada de líquido até a represa. Além disso, observa-se uma pequena variação da concentração de etanol no vapor que sai do estágio na direção do fluxo do líquido. Este comportamento ilustra que

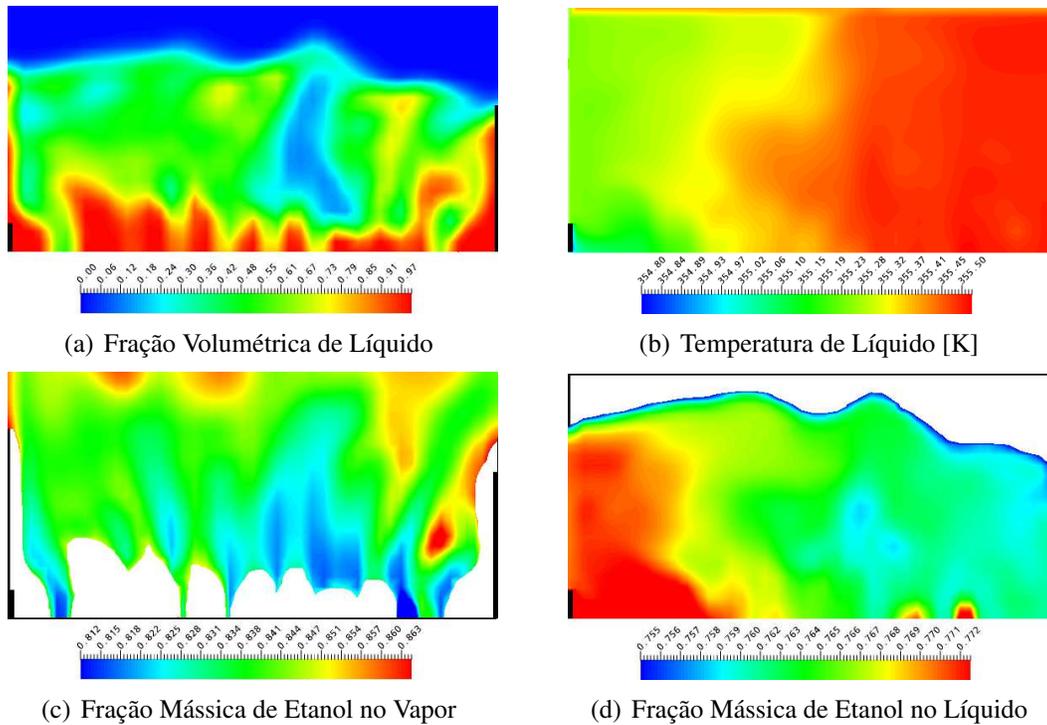


Figura 7.15: Mapas de fração de volume do líquido, temperatura do líquido, fração mássica de etanol no vapor e no líquido em um plano central desde a entrada de líquido até a represa em um tempo t no regime de quasi-estacionário.

existem gradientes de concentração dos componentes ao longo do prato, em ambas as fases, que devem afetar diretamente o desempenho da coluna de destilação. Resultados como estes propiciam o desenvolvimento de metodologias para estudo de eficiências de pratos de destilação, tendo como base os princípios e fundamentos propostos por Murphree (1925) e West et. al. (1952).

A eficiência global do prato, para fase vapor, pode ser calculada utilizando a definição de Murphree (1925), que relaciona o comportamento de um prato real com o de um prato ideal, ou seja,

$$\eta_V^n = \frac{x_{A\beta}^n - x_{A\beta}^{n-1}}{x_{A\beta}^{n*} - x_{A\beta}^{n-1}} \quad (7.5)$$

onde,

$x_{A\beta}^{n*}$ ≡ é a fração molar do componente A no vapor em equilíbrio com a fração do componente A na corrente de líquido que deixa o prato.

Isto implica em relacionar os gradientes de concentração de etanol no vapor que entra e sai do prato com aqueles que poderiam sair do prato se estivessem em equilíbrio com o

líquido que sai do prato. Para o cálculo das frações de etanol que saem do prato, fez-se a análise baseada na média ponderada pelo fluxo mássico, na região de saída de vapor, para o vapor, e na saída de líquido, para o líquido, em 2 segundos de tempo real no regime quasi-estacionário. As Figuras 7.16 e 7.17 apresentam a variação média da fração mássica de etanol na saída do vapor (Figura 7.16) e na saída de líquido (Figura 7.17), respectivamente, como função do tempo. Percebe-se que as composições do etanol no vapor e no líquido apresentam o comportamento caótico similar ao comportamento da altura de líquido claro, da temperatura *bulk* e da fração mássica média de etanol no líquido, descrito e discutido nas Figuras 7.6, 7.7 e 7.8.

Aplicando-se as técnicas estatísticas, os valores médios das frações de etanol podem ser determinados e calcula-se a eficiência do prato. Para as condições geométricas e operacionais usadas, a eficiência do prato é de 64,16 % situando-se na faixa de eficiência de prato para esta mistura, de acordo com os resultados obtidos por Barros (1997). West et al. (1952) propõem o cálculo da eficiência do prato no ponto com base na subdivisão do prato em vários subdomínios (pontos) e a consequente aplicação da definição de Murphree (1925) para o cálculo da eficiência em cada ponto. Esta é a relação de maior fidelidade no estudo e previsão da eficiência. Para viabilizar esta metodologia, subdividiu-se o prato em dez subdomínios (ponto) na direção do fluxo de líquido, de comprimento igual a 0,024 m. O cálculo da fração mássica de etanol no líquido foi feito em cada subdomínio, enquanto que no vapor é calculada a fração de área correspondente à saída de vapor daquele subdomínio.

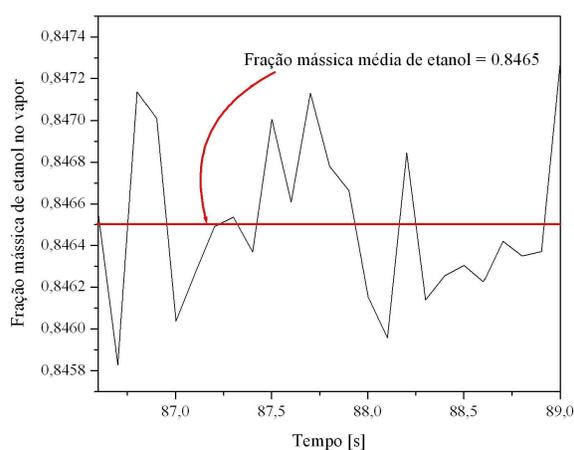


Figura 7.16: Perfil médio da fração mássica de etanol no vapor, na saída do prato, como função do tempo, no regime quasi-estacionário.

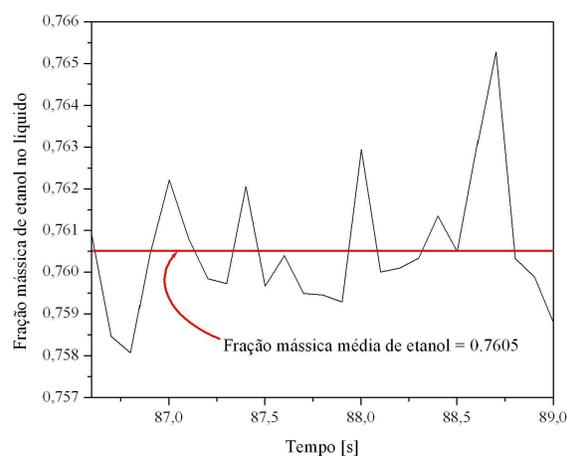


Figura 7.17: Perfil médio da fração mássica de etanol no líquido, na saída do prato, como função do tempo, no regime quasi-estacionário.

A Figura 7.18 apresenta a variação da fração mássica de etanol no vapor, no líquido e no vapor que estaria em equilíbrio com o líquido como função da posição (ponto). Pode-se notar que a fração mássica de etanol no líquido cai gradativamente, com alta taxa nos pontos iniciais, taxas menores nos pontos centrais e por fim taxas ainda menores nos pontos finais. No entanto, verifica-se que a transferência de espécies na saída do prato não é nula, ou seja, existe ainda um gradiente de potenciais químicos que pode promover a transferência de espécies entre as fases, evidenciando que o sistema não atingiu o equilíbrio termodinâmico e portanto, que o prato não está com eficiência máxima. Quanto ao perfil de etanol no vapor, percebe-se uma alta taxa de decaimento nos pontos iniciais e valores médios constante de fração de etanol no vapor a partir do ponto 4, ou seja, nos dois terços finais do prato. Dois parâmetros tem influência neste fenômeno: o fato do gradiente de potencial químico ser maior nos pontos iniciais gera uma taxa líquida de transferência de massa nestes pontos, superior aos pontos seguintes; e a alta difusividade do etanol no vapor, comparada com a do líquido, resulta em uma homogenização do etanol no vapor, motivado pelo transporte difusivo. Estes dois parâmetros associados tornam possível os perfis de fração mássica de etanol encontrados na Figura 7.18.

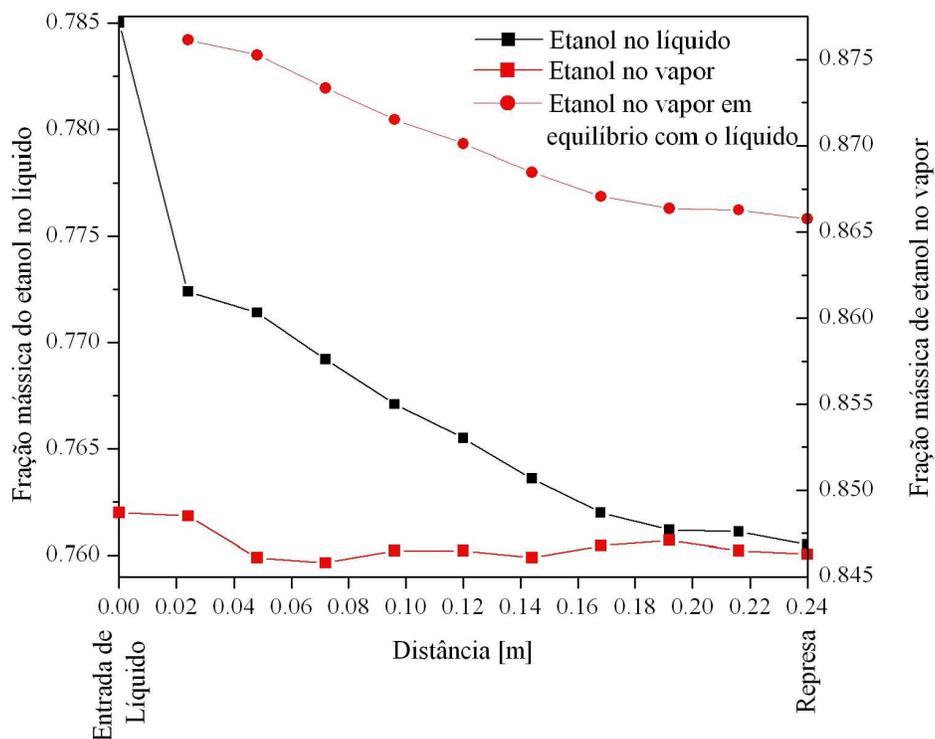


Figura 7.18: Variação da fração mássica de etanol no vapor, no líquido e no vapor que estaria em equilíbrio com o líquido como função da posição (ponto).

A partir dos dados de fração mássica de etanol no vapor e no líquido no ponto, a Figura 7.19 apresenta os valores da eficiência do prato no ponto. Os cálculos da eficiência do prato no ponto basearam-se na equação da eficiência do prato proposta por Murphree (1925). A Figura 7.19 apresenta a variação da eficiência do prato no ponto como função da direção do escoamento de líquido.

Pode-se perceber, por inspeção da Figura 7.19, que a eficiência aumenta na direção da represa, destoando somente no primeiro ponto, onde a eficiência é um pouco maior que o ponto seguinte. A maior eficiência, no primeiro ponto, é função das zonas de recirculação de líquido logo na entrada, como se observa na Figura 7.20b. Estas recirculações aumentam o tempo de contato do líquido com o vapor, tendo como consequência, o aumento da quantidade líquida de massa transferida da fase líquida para a fase vapor, por unidade de massa de líquido. Os caminhos preferências encontrados após o primeiro ponto, possibilita com que a eficiência diminua vertiginosamente no ponto 2 e, à medida que o líquido encontra as regiões com maior intensidade de borbulhamento, o contato aumenta, permitindo um aumento nos valores de eficiência. Além disso, pode-se observar na Figura 7.20c, que, a 0,01 m acima da superfície do prato, há tendência do retorno de fluxo do líquido em direção ao centro do prato que, por sua vez, gera um efeito de ascensão do líquido em direção à saída. Isto, também ratifica as

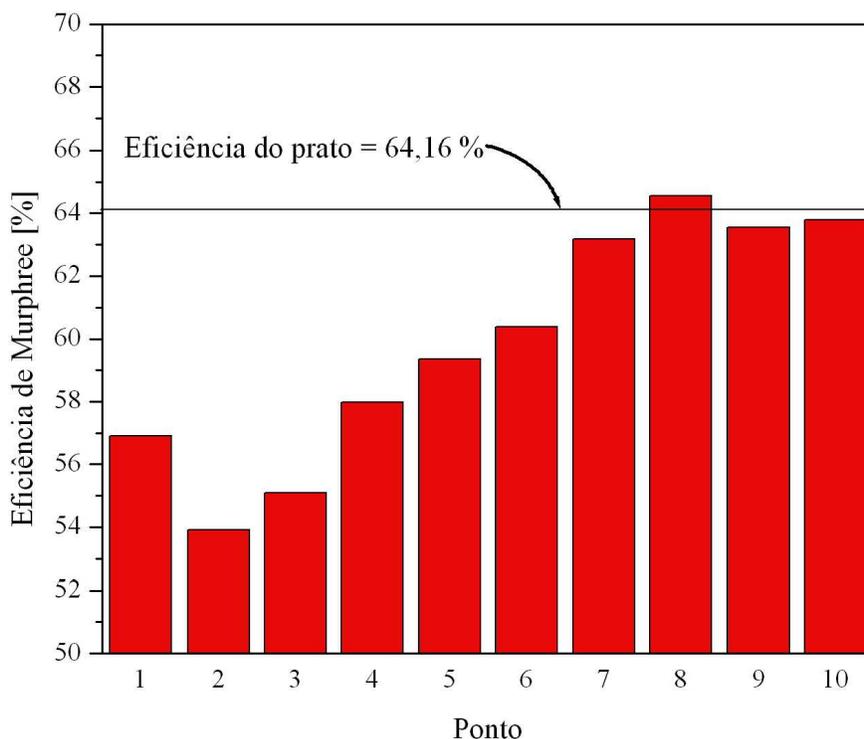


Figura 7.19: Perfil da eficiência de ponto no prato.

altas eficiências encontradas próxima à represa, pois o líquido é redirecionado para o centro do prato, criando-se maior tempo de contato entre as fases. A Figura 7.20 apresenta campos vetoriais e linhas de corrente de vapor (Figura 7.20a) e de líquido (Figura 7.20b e 7.20c). Os

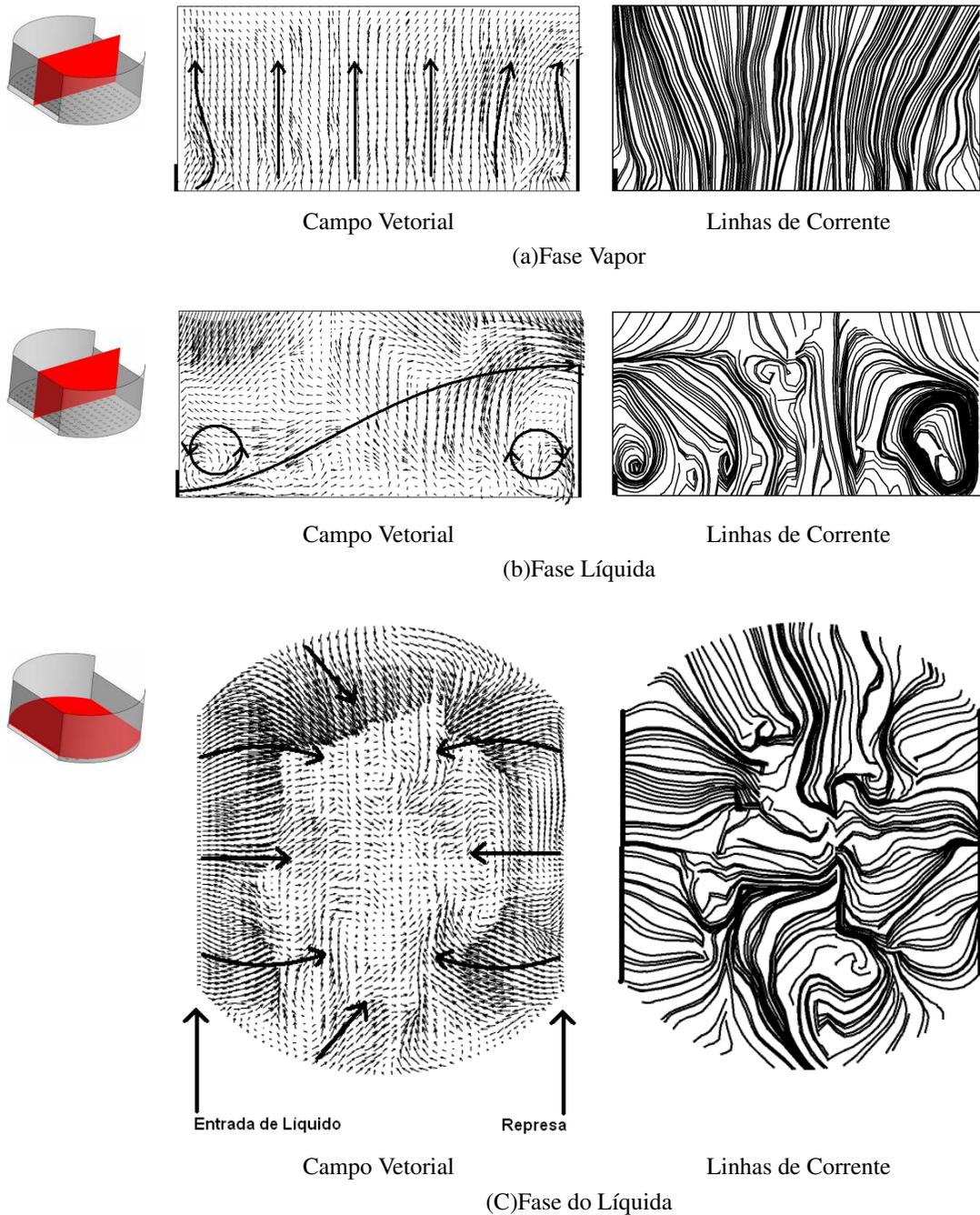


Figura 7.20: Campos vetoriais e linhas de corrente: a) da fase vapor em um plano central desde a entrada de líquido até a represa; b) da fase líquida em um plano central desde a entrada de líquido até a represa; c) da fase líquida em um plano paralelo à superfície do prato, a 0,01 m acima do prato.

detalhes mostram a direção principal do escoamento dos fluidos no prato.

A associação de todos estes fenômenos, ou seja, a conservação da massa, a conservação da energia e a conservação da quantidade de movimento e suas conseqüências, explicam de forma satisfatória o comportamento do escoamento líquido/vapor em pratos perfurados de destilação e, além disso, fornecem subsídios para que engenheiros e pesquisadores possam cada vez mais atingir as condições de minimização de energia, promovendo, assim, processos com alto grau de desenvolvimento tecnológico.

7.3 Conclusões do capítulo VIII

Na análise do escoamento identificaram-se as características do escoamento quando este é submetido às condições de transferência de calor entre as fases. Delinearam-se, também, as estratégias a serem adotadas para a implementação da conservação da espécie química no modelo.

Na avaliação da performance de pratos de destilação por técnicas de CFD executadas neste trabalho, foi possível identificar valores de eficiência, que por sua vez são reconstituídos à partir dos resultados microscópicos obtidos por simulação, apresentam-se dentro da faixa de eficiência deste tipo de prato e para este sistema. Para este estudo de caso observaram-se valores de eficiência de prato iguais a 64,16%. Estes dados mostram-se importantes para o projeto e otimização de pratos de colunas de destilação.

Além disso, fica evidente que as análises da eficiência descritas neste trabalho mostram o quanto é fundamental conhecer o comportamento fluidodinâmico para identificar os fenômenos que afetam a eficiência de transferência de calor e massa em colunas de destilação e a necessidade de acoplar os fenômenos do movimento no estudo e avaliação do comportamento de pratos de colunas de destilação.

8 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Neste capítulo são sintetizados os principais resultados oriundos dos ensaios realizados no desenvolvimento deste trabalho de tese de doutorado. São indicados ainda, os pontos potenciais de investigação para o prosseguimento dos estudos de análise de pratos de destilação por técnicas de CFD.

8.1 Conclusões

A partir dos ensaios numéricos e experimentais executados neste trabalho e dos estudos anteriores presentes na literatura, pode-se destacar as seguintes conclusões:

- A análise do escoamento isotérmico é importante para definição dos modelos e métodos a serem aplicados no escoamento em pratos perfurados de destilação e apresenta-se como forma de avaliar as condições fluidodinâmicas do prato e sua possível influência nas condições de transferência de calor e massa.
- O maior responsável pela presença destes regimes é a troca de quantidade de movimento entre as fases e, neste sentido, somente a força de arraste tem significativa importância na troca de movimento entre as fases. Em princípio, forças como a de massa virtual e de sustentação não são representativas quando a coluna de líquido é pequena e o líquido tem movimento perpendicular ao gás. Sendo assim, é necessária uma equação constitutiva bastante eficiente para o cálculo da troca de quantidade de movimento entre as fases que, por sua vez, é apresentada na literatura por Krishna *et al.* (1999). Esta equação constitutiva para o cálculo da força de arraste é acoplada a Equação de Bennett *et al.* (1983), dependente da velocidade média de ascensão das bolhas e tem como principal vantagem não depender do diâmetro da bolha, parâmetro de difícil avaliação em colunas de destilação. Por sua vez, a velocidade média de ascensão das bolhas é

estimada em função da fração volumétrica média de líquido que, para van Baten e Krishna (2000), pode ser calculada pela correlação de Bennett *et al.* (1983). No entanto, esta propriedade varia com o tempo. A análise da proposta de reconstituir esta variável a cada passo de tempo, a partir das propriedades microscópicas resultantes do modelo ou através da correlação de Colwell (1979) mostraram-se incapazes de melhorar os resultados obtidos anteriormente, gerando, inclusive, problemas de convergência.

- Os modelos de coeficientes de arraste clássicos, como o apresentado por Ishii e Zuber (1979) sem os efeitos de população também foram avaliados e mostraram-se ineficazes na predição do escoamento em pratos perfurados de destilação.
- O escoamento gás-líquido apresenta características caóticas para todas as variáveis conserváveis, com menor ou maior intensidade.
- A hipótese de velocidades iguais em todo os furos pode ser aplicada em problemas que envolvam pratos perfurados de destilação.
- Através de uma rigorosa análise experimental e numérica, é possível entender que os dados experimentais corroboram e validam qualitativamente e quantitativamente de forma satisfatória os resultados numéricos.
- Desenvolveu-se uma metodologia de execução de experimentos, coleta e tratamento de dados que gerou a reformulação e automatização da unidade experimental, com o desenvolvimento de hardwares e softwares específicos e dedicados a esta aplicação.
- Identificou-se dependência de altura de líquido claro com a velocidade superficial do gás, para altas vazões de líquido, não observado anteriormente.
- É possível afirmar que transferência de energia interfere no escoamento gás-líquido em pratos de destilação, embora com pouca intensidade, para problemas sem interação entre bolhas e sem vaporização/condensação.
- É possível identificar as regiões de maiores temperaturas junto à represa e regiões de menores temperaturas junto à entrada de líquido, dados relevantes para o projeto e otimização de pratos de destilação.
- Na avaliação da performance de pratos perfurados de destilação por técnicas de CFD executadas neste trabalho foi possível identificar valores de eficiência, que por sua vez

são reconstituídas a partir dos resultados microscópicos obtidos por simulação, que apresentam-se dentro da faixa de eficiência deste tipo de prato e para este sistema. Além disso, fica evidente que as análises da eficiência, descritas neste trabalho, mostram o quão fundamental é conhecer o comportamento fluidodinâmico para identificar os fenômenos que afetam a eficiência de transferência de calor e massa em colunas de destilação e a necessidade de acoplar os fenômenos do movimento no estudo e avaliação do comportamento de pratos de colunas de destilação.

- A técnica de CFD mostrou-se uma importante ferramenta para a predição de escoamentos em regime turbulento em pratos de destilação e pode ser utilizada, evidentemente com cautela, na otimização do projeto, na definição de estratégias de operação de colunas de destilação e, principalmente, em estudos de eficiência de pratos e de componentes. Esta cautela refere-se, principalmente, a uma boa escolha dos modelos e métodos numéricos, conforme apresentado em detalhes neste trabalho.

Além das conclusões apontadas, este trabalho gerou uma série de publicações em congressos na forma de apresentações orais, pôsteres, com publicações de artigos completos e resumidos e, ainda, com publicação em periódico de reconhecimento mundial. A seguir apresentam-se as referências bibliográficas destes trabalhos:

1. Artigos publicados em periódicos:

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W., *Thermal fluid dynamics analysis of gas–liquid flow on a distillation sieve tray*, Chem. Eng. J. (2007), doi:10.1016/j.cej.2007.03.023.

2. Artigos em fase de publicação em periódicos:

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W., *Sieve tray performance analysis by CFD techniques*. (a ser publicado).

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W., *Behavior of the ethanol-water mixture in distillation sieve tray by CFD techniques*. (a ser publicado).

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W., *Design of distillation sieve tray using the CFD tools*. (a ser publicado).

3. Trabalhos completos publicados em anais de congressos:

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W.; *Analysis of Distillation Sieve Tray Efficiency by CFD Techniques*. In: 2st latin american CFD workshop applied to the oil industry, 2006, Rio de Janeiro. 2st latin american CFD workshop applied to the oil industry proceeding, 2006.

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W.; *Análise Térmica do escoamento Líquido-Vapor em Pratos Perfurados de uma Coluna de Destilação Utilizando Técnicas de CFD..* In: XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Química e III Congresso Brasileiro de Termodinâmica Aplicada, 2006, Santos. Anais do XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Química e III Congresso Brasileiro de Termodinâmica Aplicada, 2006.

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W.; *Thermal fluid dynamics of gas-liquid flow on a distillation tray*. In: 1st latin american CFD workshop applied to the oil industry, 2005, Rio de Janeiro. 1st latin american CFD workshop applied to the oil industry proceeding, 2005.

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W.; *Numerical Analysis of Momentum and Heat Transfer in the Gas-Liquid Flow on a Distillation Sieve Tray*. In: 2005 Ansys Latin American users conference, 2005, São Paulo. 2005 Ansys Latin American users conference proceeding, 2005.

NORILER, D.; SOARES, C.; MEIER, H. F.; BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. W.; *Computational Fluid Dynamics Applied to Diffusional Separation Process*. In: 16TH International Congress Of Chemical and process Engineering, 2004, Praga. 16TH International Congress Of Chemical and process Engineering proceeding, 2004.

SOARES, C.; NORILER, D. ; VOSS, M. L.; MEIER, H. F.; BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. W., *Verification and Validation in CFD: Tridimensional and Transient Model for Multifase Flow*. In: 16TH International Congress Of Chemical and process Engineering, 2004, Praga. 16TH International Congress Of Chemical and process Engineering proceeding, 2004.

NORILER, D.; SOARES, C.; MEIER, H. F.; BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. W.; *Modelagem Matemática e Simulação Numérica do Escoamento Líquido Vapor num Prato de Destilação*. In: XXIV CILANCE - 24nd Iberian Latin-Americam Congress on Computational Methods in Engineering, 2003, Ouro Preto. XXIV CILANCE - 24nd

Iberian Latin-Americam Congress on Computational Methods in Engineering proceeding, 2003.

NORILER, D.; SOARES, C.; MEIER, H. F.; BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. W.; . *Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics for Distillation Columns - V&V in CFD*. In: 1^o Workshop de CFD Aplicado a Industria de Petróleo, 2003, Rio de Janeiro. Anais do 1^o Workshop de CFD Aplicado a Industria de Petróleo, 2003.

NORILER, D.; SOARES, C.; MEIER, H. F.; BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. W.; . *Computational Fluid Dynamics for Simulation of Gas-Liquid Flow on a Sieve Plate: Model Comparisons*. In: International Conference on Distillation & Absorption, 2002, Baden-Baden. International Conference on Distillation & Absorption Proceeding, 2002.

NORILER, D.; SOARES, C.; MEIER, H. F.; BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. W.; . *Numerical Simulation of Liquid Flow on a Distillation Tray*. In: XXII CILANCE - 22nd Iberian Latin-Americam Congress on Computational Methods in Engineering, 2001, Campinas. 22nd Iberian Latin-Americam Congress on Computational Methods in Engineering proceeding, 2001.

4. Trabalhos resumidos publicados em anais de congressos:

NORILER, D.; SOARES, C.; MEIER, H. F.; BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. W.; *CDF Study of a three-dimensional, gas-liquid and transiente flow in a free surface channel flow*. In: IV Encontro de pesquisa da Faculdade de Engenharia Química, 2005, Campinas. Caderno de Resumos - IV EPFEQ, 2005. v. 1. p. 118-118.

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W.; *Termo - Fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor em pratos de destilação*. In: IV Encontro de Pesquisa da Faculdade de Engenharia Química, 2005, Campinas. Caderno de Resumos IV EPFEQ, 2005. v. 1. p. 119-119.

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W.; *Modelagem Matemática, Tridimensional e Transiente para Problemas de Engenharia Química*. In: III Encontro de pesquisa da Faculdade de Engenharia Química, 2003, Campinas. Caderno de Resumos III EPFEQ. Campinas : Editora da Unicamp, 2003. v. 1. p. P-SP4-P-SP4.

NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; MACIEL, M. R. W.; *Modelagem Matemática e Simulação Numérica do Escoamento Gás-Líquido num Prato de destilação*. In: II Encontro de pesquisa da Faculdade de Engenharia Química, 2001, Campinas. Caderno de Resumos: II EPFEQ, 2001. v. 1. p. 151-151.

8.2 Sugestões para trabalhos futuros

Este trabalho apresenta demandas de desenvolvimento de pesquisas científicas e tecnológicas que procurem entender com maior profundidade os fenômenos envolvidos nos processos de separação, especialmente àqueles relacionados a pratos de colunas de destilação, dentre os quais sugere-se os seguintes temas para o prosseguimento e conseqüente avanço no conhecimento dos processos de destilação.

Como principais sugestões tem-se:

- Novas correntes para solução numérica das equações estão em pleno desenvolvimento. Assim sendo, torna-se importante fazer a análise de verificação de modelos e métodos para termos a confiança de que as aproximações numéricas estejam representando o modelo matemático.
- A turbulência é descrita, por todos os autores através do equacionamento k - ϵ padrão, para fase contínua, e laminar, para fase dispersa. A análise dos efeitos gerados pelos modelos existentes teria uma grande relevância pois, em alguns casos, o modelo pode trazer sérios impactos na predição do escoamento, como por exemplo em ciclones (Meier, 1998).
- As forças adicionais como as de arraste, de ascensão e de massa virtual, já foram estudadas experimentalmente em colunas de bolha. Porém, para destilação são incipientes e devem ser mais bem avaliadas.
- As análises experimentais deste trabalho constituem num forte indício da dinâmica no prato de destilação ainda não ser bem conhecida. Desta forma, existe a necessidade de ampliar os experimentos, incluindo novos pontos de coleta de dados, de forma a compreender mais profundamente os fenômenos associados à dinâmica do escoamento em pratos perfurados de destilação.

- Desenvolver novos subsídios para avaliar a tendência da altura de líquido claro em função da velocidade superficial para altas vazões de líquido, observadas neste trabalho.
- Este trabalho sugere o cálculo da área de transferência de calor assumindo a bolha como uma esfera perfeita e, como consequência, o cálculo do coeficiente de convecção de energia baseado nesta hipótese. No entanto, sabe-se que a bolha, em especial em pratos de destilação, nada se parece com uma esfera. Além disso, existem fenômenos de quebra e coalescência de bolhas que tornam essa hipótese um tanto ineficiente. Nas avaliações, percebeu-se alta taxa de transferência de calor, função, principalmente, da alta área de transferência e dos altos coeficientes de convecção. Desta forma, sugerem-se novas avaliações de modelos de previsão de área de transferência, por unidade de volume, preferencialmente, independentes do diâmetro das bolhas. Além do mais, a incorporação de modelos de coeficientes de convecção desenvolvidos para destilação deve ser avaliada.
- Acopladas aos estudos numéricos, novos estudos experimentais acoplando os efeitos térmicos para validar o modelo termo-fluidodinâmico. Além disso, é possível desenvolver, através desta análise, modelos empíricos de área de transferência por unidade de volume e coeficientes de convecção específicos para os processos de destilação em pratos perfurados.
- Assim como os modelos de transferência de calor entre as fases, a modelagem de transferência de massa entre as fases não está sedimentada e novas análises devem ser realizadas para consolidar o modelo.
- Estudos experimentais que avaliem a transferência de massa para subsidiar a validação dos modelos aplicados.
- Desenvolver modelos de transferência de massa entre as fases na bancada experimental existente, acoplando, ao sistema, sensores de umidade relativa.
- Aprofundar os estudos de desempenho de pratos perfurados de destilação para a mistura etanol/água. Ainda, estender estes estudos para outras misturas.
- Estudos numéricos de otimização de geometrias com o objetivo de minimizar as resistências à transferência de calor e massa.
- Coletar dados experimentais microscópicos e validar os modelos.

- Avançar na direção de modelar, além de pratos perfurados, pratos valvulados e pratos com campânulas e vislumbrar a aplicação da técnica para colunas recheadas.
- Desenvolver metodologia de cálculo de eficiência de pratos de destilação que possa subsidiar projetos e otimização de processos de separação como ferramenta na tomada de decisão de novas aplicações e novos processos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AICHE. *Bubble-tray design manual*. [S.l.], 1958.

ALMEIDA, N. H. *Determinação da eficiência do recheio estruturado Mellapak 500Y na destilação da terebintina em coluna piloto*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, São Paulo, 1994.

AZBEL, D. S. *Int. Chem. Eng.*, v. 3, n. 3, p. 319, 1963.

BARROS, A. A. C. *Desenvolvimento de modelo de estágio de não equilíbrio e proposição de correlações para processos de destilação convencional e extrativa*. Tese (Doutorado) — Unicamp, Campinas, 1997.

BARROS, A. A. C.; FOSSY, M. F.; MACIEL, M. R. Estudo da hidrodinâmica dos pratos de destilação e o seu perfil térmico. In: *Anais do X Congresso Brasileiro de Engenharia Química*. São Paulo: [s.n.], 1994.

BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. Desenvolvimento de uma correlação para o estudo da eficiência nas colunas de destilação. In: *Anais do XI Congresso Brasileiro de Engenharia Química*. Rio de Janeiro: [s.n.], 1996.

BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. Aplicação da modelagem de estágios de não equilíbrio na avaliação da nova correlação da eficiência das colunas de destilação. In: *Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia Química*. [S.l.: s.n.], 1998.

BARROS, A. A. C.; PESCARINI, M. H.; MACIEL, M. R. W. Development of a software for simulation separation processes using a nonequilibrium stage model. *Computer Aided Process Engineering*, p. 279–284, 1996.

BATEN, J. M. van; KRISHNA, R. Modelling sieve tray hydraulics using computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Journal*, v. 77, p. 142–151, 2000.

BATEN, J. M. van; KRISHNA, R. Eulerian simulations for determination of axial dispersion of liquid and gas phases in bubble columns operating in the churn-turbulent regime. *Chemical Engineering Science*, v. 56, p. 503–512, 2001.

BENNETT, D. L.; AGRAWAL, R.; COOK, P. J. New pressure drop correlation for sieve tray distillation columns. *AIChE*, v. 26, p. 434–442, 1983.

BERNARD, J. D. T.; SARGENT, R. W. H. *Trans. Instn. Chem. Eng.*, v. 44, p. 314, 1966.

BERTODADO, M. L. Two fluid for two-phase turbulent jets. *Nuclear Engineering and Design*, v. 179, p. 65–74, 1998.

- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Transport Fenomena*. 2nd. ed. New York: Ed. Wiley, 1960.
- BOISSON, N.; MALIN, M. R. Numerical prediction of two-phase flow in bubble columns. *International Journal for Numerical*, v. 23, p. 1289–1310, 1996.
- BOUSSINESQ, J. *Theorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes a grande section*. Paris: Fautiers-Villars, 1877.
- BRACKBILL, J. U.; KOTHE, D. B.; ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, v. 100, p. 335–354, 1992.
- BRAMBILLS, e. a. A. *Inst. Chem. Eng. Symp. Ser.*, v. 32, n. 2, p. 63, 1969.
- CHAIYAVECH, P.; WINKLE, M. V. Effect of system properties on ... small distillation column efficiency. *Ind. Eng. Chem.*, v. 53, n. 3, p. 187–190, 1961.
- CHU, J. C. Plate efficiency correlation in distilling columns and gas absorbers. *Journal Appl. Chem.*, v. 1, n. 12, p. 529–541, 1951.
- COCKX, A. et al. Use of computational fluid dynamics for simulating hydrodynamics and mass transfer in industrial azonation towers. *Chemical Engineering Science*, v. 54, p. 5085–5090, 1999.
- COLBURN, A. P. Effect of entrainment on plate efficiency in distillation. *Ind. Eng. Chem*, v. 28, n. 5, p. 526–530, 1936.
- COLWELL, C. J. Clear liquid height and froth density on sieve tray. *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Div.*, v. 20, p. 298–307, 1979.
- DECKER, R. K. *Modelagem e simulação tridimensional e transiente do escoamento gás-sólido*. Dissertação (Mestrado) - Unicamp, Campinas, São Paulo.: [s.n.], 2003.
- DELNOIJ, E.; KUIPERS, J. A.; SWAAIJ, W. P. M. Dynamic simulation of gas-liquid two-phase flow: effect of column aspect ratio on flow structure. *Chemical Engineering Science*, v. 52, p. 3759–3772, 1997.
- DELNOIJ, E.; KUIPERS, J. A.; SWAAIJ, W. P. M. A three-dimensional cfd model for gas-liquid bubble columns. *Chemical Engineering Science*, v. 54, p. 2217–2226, 1999.
- DOORMAAL, J. P. van; RATHBY, G. D. Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid flows. *Numerical Heat Transfer*, v. 7, p. 147–163, 1984.
- DRICKAMER, H. G.; BRADFORD, J. R. Overall plate efficiency of commercial hydrocarbon fractionating columns as a function of viscosity. *Trans. AIChE*, v. 39, p. 19–60, 1943.
- ENGLISH, G. E.; WINKLE, M. van. Efficiency in bubble cap distillation columns. *Chemical Engineering Science*, v. 70, n. 23, p. 241–246, 1983.

- FAIR, J. R.; SMITH, B. D. I. *design of Equilibrium Stage Processes*. New York: McGraw Hill, 1963.
- FASESAN, S. O. Hydraulic characteristics of sieve and valve trays. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 26, p. 2114–2121, 1987.
- FOSS, A. S.; GERSTER, J. A. *Chem. Eng. Prog.*, v. 52, p. 29–J, 1956.
- FREIRE, P. P. P. M. e. J. S. A. P. S. Turbulência: Anais da i escola de primavera em transição e turbulência. In: *Escola de Primavera em Transição e Turbulência*. Rio de Janeiro.: [s.n.], 1998.
- GESIT, G.; NANDAKUMAR, K.; CHUANG, K. T. Cfd modeling of flow and hydraulics of commercial-scale sieve trays. *AIChE Journal*, v. 49, p. 910–924, 2003.
- GILBERT, T. J. *Chem. Eng. Sci.*, v. 10, p. 243, 1959.
- GUIDASPOW, D. *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. 2^o ed. ed. San Diego: Academic Press, 1994.
- HAMILL, N. Cfd comes of age in the cpi. *Chemical Engineering*, p. 68–72, 1996.
- HARADA, e. a. M. *Int. Chem. Eng*, v. 4, n. 1, p. 165, 1954.
- HARRIS, I. J.; ROPER, G. H.; CAN, J. *Chem. Eng.*, v. 40, p. 245, 1952.
- HAUSEN, H. *Chem Ind. Tech*, v. 25, p. 595, 1953.
- HIMMELBLAU, D. M.; BISCHOFF, K. B. *Process analysis and simulation. Deterministics systems*. 1st edition. ed. New York: John Wiley & Sons Inc., 1968.
- HINZE, J. O. *Turbulence*. 2^o ed. ed. New York: Ed. McGraw-Hill Book Co., 1975.
- HOFHULS, P. A. M.; ZULDERWEG, F. J. *Inst. Chem. Eng. Symp. Ser.*, v. 58, p. 1, 1979.
- HOLLAND, C. D.; MCMAHON, K. S. Comparision of vaporization efficiencies with murphree-type: Efficiencies in distillation – i. *Chemical Engineering Science*, v. 25, p. 431, 1970.
- HUGHMARK, G. A. *AIChE Journal*, v. 13, p. 1219, 1967.
- ISHII, M.; ZUBER, N. Drag coefficient an relative velocity in bubble, droplet or particulate flows. *AIChE Journal*, v. 25, p. 843–855, 1979.
- JAKOBSEN, H. A. et al. Modeling of vertical bubble-driven flows. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 36, p. 4052–4074, 1997.
- JOSHI, J. B.; RANADE, V. V. Computational fluid dynamics for designing process equipment: expectations, currents status, and path forward. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 42, p. 1115–1128, 2003.
- JR., F. E. R. Stirba. *C. AIChE J.*, v. 3, n. 3, p. 336, 1957.

- KAWAGOS, e. a. K. *Int. Chem. Eng.*, v. 16, n. 1, p. 176, 1979.
- KLM, S. K. *Int. Chem. Eng.*, v. 6, n. 4, p. 834, 1966.
- KRISHNA, R. et al. Cfd simulation of sieve tray hydrodynamics. *Chem. Eng. Res. Design, Trans IChenE*, v. 77, p. 639–646, 1999b.
- KRISHNA, R.; BATEN, J. M. van; URSEANU, M. I. Three-phase eulerian simulations of bubble column reactors operating in the churn-turbulent regime: a scale up strategy. *Chemical Engineering Science*, v. 55, p. 3275–3286, 2000.
- KRISHNA, R. et al. Design and scale up of a bubble column slurry reactor for fischer-tropsch synthesis. *Chemical Engineering Science*, v. 65, p. 537–545, 2001.
- KRISHNA, R. et al. Influence of scale on the hydrodynamics of bubble columns operating in the churn-turbulent regime: experiments vs. eulerian simulations. *Chemical Engineering Science*, v. 54, p. 4903–4911, 1999a.
- KRISHNAMURTHY, R.; TAYLOR, R. R. A nonequilibrium stage model of multicomponent separation processes – part i: Model description e method of solution. *AIChE Journal*, v. 31, p. 456–465, 1985.
- KUEHLER, G. P.; WINLDO, M. J. V. *Chem. Eng.*, v. 14, n. 2, p. 225, 1969.
- LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 3, p. 269–289, 1974.
- LEHR, F.; MILLIES, M.; MEWES, D. Bubble-size distributions ond flow fields in bubble columns. *AIChE Journal*, v. 48, n. 11, p. 2426–2443, 2002.
- LEWIS, W. K. The efficiency and design of rectifying coluns for binary mixture. *Journal Ind. Eng. Chem*, v. 4, n. 6, p. 492–497, 1922.
- LIEBSON, I.; KELLEY, R. E.; BULLINGTON, L. A. How to design perforated trays. *Petrol. Ref.*, v. 36, n. 2, p. 127, 1957.
- LIU, C. J. et al. A fluid-dynamic model for flow pattern on a distillation tray. *Chemical Engineering Science*, v. 55, p. 2287–2294, 2000.
- MACFARLE, e. a. S. A. Predict distillation efficiency. *Hydrocarbon Processing*, v. 51, p. 111–114, 1972.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Ltc editora. Rio de Janeiro: [s.n.], 1995.
- MARCHI, C. H.; MALISKA, C. R.; BORTOLI, A. L. The use of co-located variables in the solution of supersonic flow. In: *Anais do X Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*. [S.l.: s.n.], 1989.
- MAUGERI, L. never cry wolf – why the petroleum age is far from over. *Science*, v. 304, p. 1140–1150, 2004.

- MEIER, H. F. *Modelagem fenomenológica e simulação bidimensional de ciclones por técnicas da fluidodinâmica*. Tese (Doutorado) — Unicamp, Campinas, S/ ao Paulo., 1998.
- MEIER, H. F.; ALVES, J. J. N.; MORI, M. Comparison between staggered and collocated grids in the finite-volume method performance for single and multi-phase flows. *Computers and Chemical Engineering*, v. 23, p. 247–262, 1999.
- MEIER, H. F. et al. Computational fluid dynamics (cfd) zur berechnung und auslegung von zyklonen - teil 1. *ZKG International*, v. 55, n. 04, p. 75, 2002.
- MEIER, H. F. et al. Computational fluid dynamics (cfd) zur berechnung und auslegung von zyklonen -teil 2. *Zkg International - Cement-Lime-Gypsum*, v. 55, n. 06, p. 58–64, 2002.
- MICHELE, V.; HEMPEL, D. C. Liquid flow and phase holdup-measurement and cfd modeling for two-and three-phase bubble columns. *Chemical Engineering Science*, v. 57, p. 1899–1908, 2002.
- MINKOWYCZ, W. J. et al. *Handbook of numerical heat transfer*. New York: Ed. John Wiley & Sons Inc., 1988.
- MURPHREE, E. V. *Ind. Eng. Chem*, v. 17, p. 747, 1925.
- NETO, A. S. *Turbulência nos Fluidos Aplicada*. Notas de aula. Uberlândia - MG.: Faculdade de Engenharia Mecânica Universidade Federal de Uberlândia., 2003.
- NORILER, D. *Modelagem matemática e simulação numérica do escoamento líquido-vapor num prato de destilação*. Dissertação (Mestrado) - Unicamp, Campinas, São Paulo.: [s.n.], 2003.
- NORILER, D. et al. Computational fluid dynamic applied to diffusional separation precess. In: *16th International Congress of Chemical and Process Engineering*. Prague, Czech Republic: [s.n.], 2004.
- NUNHEZ, J. R. *Método spline modificado: acoplamento do método da máxima verossimilhança ao método spline*. Dissertação (Mestrado) - Unicamp, Campinas, São Paulo.: [s.n.], 1990.
- NUTTER, D. E. In: *68th National Meeting of AIChE*. Houston: [s.n.], 1971.
- O'CONNELL, H. E. Plate efficiency of fractionating columns and absorbers. *Trans. AIChE*, v. 42, p. 741–755, 1946.
- OSRZAG, S. A.; STAROSELSKY, I. Cfd: progress and problems. *Computer Physics Communication*, v. 127, p. 165–171, 2000.
- PAN, Y.; DUDUKOVIC, M. P.; CHANG, M. Dynamic simulation of bubble flow in bibble columns. *Chemical Engineering Science*, v. 54, p. 2481–2489, 1999.
- PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere. New York: Co, 1980.

- PATANKAR, S. V. A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations. *Numerical Heat Transfer*, v. 4, p. 409–425, 1981.
- PATANKAR, S. V.; SPALDING, D. B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Int. Journal Heat Mass Transfer*, v. 15, p. 1787–1806, 1971.
- PERES, A. P. *Técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) aplicadas a escoamentos em ciclones*. Tese (Doutorado) — Unicamp, Campinas, São Paulo., 2002.
- PERICA, M.; KESSLER, R.; SCHEUERER, G. Comparison of finite-volume numerical methods with staggered and co-located grid. *Computers and Fluids*, v. 16, p. 398–403, 1988.
- PESCARINI, M. H. *Desenvolvimento de um algoritmo para simulação de colunas de destilação multicomponente em estado estacionário utilizando a modelagem de estágio de não equilíbrio*. Tese (Doutorado) — Unicamp, Campinas, São Paulo., 1996.
- PFLEGER, D.; BECKER, S. Modelling and simulation of the dynamic flow behaviour in a bubble column. *Chemical Engineering Science*, v. 56, p. 1737–1747, 2001.
- PRAUSNITZ, J. et al. *Computer calculations for multicomponent vapor-liquid and liquid-liquid*. Prentice-Hall.: Equilibria, 1980.
- RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R. *Chemical Engineering Progress*, v. 48, n. 3, p. 141, 1952.
- ROPELATO, K. *3D e simulação dinâmica do escoamento gás-sólido em reator downer*. Dissertação (Mestrado) - Unicamp, Campinas, São Paulo.: [s.n.], 2004.
- ROSA, L. *Simulação de Reatores Químicos e Consumo de Calor em Risers*. Dissertação (Mestrado) - Unicamp, Campinas, São Paulo.: [s.n.], 2004.
- SANYAL, J. et al. Numerical simulation of gas-liquid dynamics in cylindrical bubble column reactors. *Chemical Engineering Science*, v. 54, p. 5071–5083, 1999.
- SARGENT, R. W. H. et al. The performance of sieve plates in distillation. In: *Proceeding of the Symp. On Distillation*. [S.l.: s.n.], 1964.
- SCHILLER, L.; NAUMANN, A. *VDI Zeits*, v. 77, p. 318, 1933.
- SLATTERY, J. C. *Momentum, energy, and mass transfer in continua*. New York: McGraw-Hill Book Co., 1980.
- SMITH, B. D. *Design of equilibrium stage processes*. New York: McGraw-Hillx, 1963.
- SOARES, C. *Avaliação experimental dos coeficientes de transferência de massa e calor em uma coluna com pratos perfurados*. Dissertação (Mestrado) - Unicamp, Campinas, São Paulo.: [s.n.], 2000.

- SOARES, C. *Desenvolvimento de uma Metodologia para Avaliação Numérica e Experimental do Escoamento Líquido/Vapor em Colunas de Destilação*. Tese (Doutorado) — Unicamp, Campinas, S/ ao Paulo., 2005.
- SOARES, C. et al. Numerical simulation of liquid flow on a distillation tray. In: *Iberian Latin-American Congress On Computational Methods In Engineering and Brazilian Congress on Computational Mechanics*. Campinas – São Paulo – Brasil: [s.n.], 2001.
- SOARES, C. et al. Computational fluid dynamics for simulation of gas-liquid flow on a sieve plate: Model comparisons. In: *Distillation & Absorption 2002 - 634th Event of the European Federation of Chemical Engineering*. Baden-Baden – Alemanha.: [s.n.], 2002.
- SOKOLICHIN, A.; EIGENBERGER, G. Applicability of standart k- ϵ turbulence model to the dynamic simulatin of buble columns: Part i. detailed numerical simulations. *Chemical Engineering Science*, v. 54, p. 2273–2284, 1999.
- SOKOLICHIN, A.; EIGENBERGER, G.; LAPIN, A. Simulation of buoyancy driven bubbly flow: established simplifications and open questions. *AIChE Journal*, v. 50, p. 24–45, 2004.
- SOUZA, D. P. de. *Aplicação das equações fundamentais para a solução do escoamento em ciclones e hidrociclones*. Dissertação (Mestrado) - UFSC, Florianópolis, Santa Catarina.: [s.n.], 2000.
- SPICKA, P.; DIAS, M. M.; LOPES, J. C. B. Gas-liquid flow in a 2d column: comparison between experimental data and cfd modelling. *Chemical Engineering Science*, v. 56, p. 6367–6383, 2001.
- STANDART, G. L. Studies on distillation – v. generalized of a theoretical plate or stage of contacting equipament. *Chemical Engineering Science*, v. 20, p. 611, 1965.
- STREETER, V. L. *Mecânica dos fluidos*. [S.l.]: McGraw Hill Inc., 1977.
- SUN, Z. M. et al. New turbulent model for computational mass transfer and its application to a commercial-scale distillation column. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 44, p. 4427–4434, 2005.
- TECHNOLOGY., A. *CFX-4.4 User Guide*. [S.l.], 2001.
- THOMAS, W. J.; CAMPBELL, M. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, v. 45, p. T53, 1987.
- THOMAS, W. J.; HAD, M. A. Studies of performance of a sieve tray with 3/8-in diameter perforations. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 15, n. 4, p. 509–518, 1976.
- WANG, X. L. et al. Computational fluid dynamics simulation of three-dimensional liquid flow and mass transfer on distillation column trays. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 43, p. 2556–2567, 2004.
- WEST, F. B. Mechanism of mass transfer on bubble plates. plate efficiencies. *Ind. Eng. Chem.*, v. 44, n. 10, p. 2470–2478, 1952.

WIEMANN, D.; LEHR, F.; MEWES, D. Numerical calculation of the flow field in a bubble column considering the absorption of the gas phase. In: *634th Event of the European Federation of Chemical Engineering, Baden*. Baden – Alemanha.: [s.n.], 2002.

ZUIDERWEG, F. J. Sieve trays: a view on the state of the art. *Chemical Engineering Science*, v. 37, p. 1441–1464, 1982.

APÊNDICE

Apêndice A - Dados Experimentais

Abaixo são reproduzidos os dados experimentais obtidos neste trabalho de tese de doutorado.

Dados experimentais

Exp.	V_s [m/s]	Q_l/W [m ³ /ms]	h_{cl} [mmc.a]	σ^2 do h_{cl} [mmc.a]	h_{lcl} [mmc.a]	σ^2 do h_{lcl} [mmc.a]
1	0,3493	0,00106	55,3657	0,7381	37,5981	0,8977
2	0,3486	0,00115	55,4828	0,7676	37,1992	0,6379
3	0,3475	0,00121	55,9777	0,6779	37,5392	0,9946
4	0,3473	0,00127	51,35	0,8735	32,8327	0,5934
5	0,3499	0,00135	54,534	0,6499	33,1296	0,6746
6	0,3477	0,00143	52,876	0,6069	33,9938	0,4697
7	0,3456	0,0015	52,1611	0,5806	34,3902	0,7518
8	0,3492	0,00158	54,7692	0,8943	35,3610	0,8359
9	0,3507	0,00164	54,0379	0,6277	34,9919	0,4489
10	0,3445	0,00173	54,3729	0,8212	35,3654	0,7164
11	0,3460	0,00180	54,5013	0,7156	35,0392	0,6700
12	0,3518	0,00186	54,6255	0,7597	36,1022	0,7166
13	0,3486	0,00194	54,9628	0,6325	36,6218	0,7148

Continua na próxima página.

Dados experimentais (continuação).

Exp.	V_s [m/s]	Q_l/W [m ³ /ms]	h_{cl} [mmc.a]	σ^2 do h_{cl} [mmc.a]	h_{lcl} [mmc.a]	σ^2 do h_{lcl} [mmc.a]
14	0,3473	0,00199	55,0996	0,5445	37,0168	0,7127
15	0,3521	0,00209	56,616	0,8078	37,0852	0,7570
16	0,3477	0,00214	56,4418	0,8965	38,1861	0,6875
17	0,1537	0,00120	59,6929	0,8369	45,8678	1,127
18	0,1700	0,00120	59,1199	0,8731	46,0638	1,2756
19	0,1946	0,00120	57,8868	0,8339	43,7841	1,0363
20	0,2097	0,00120	56,8232	1,1705	42,6238	1,0225
21	0,1634	0,00143	58,8395	0,9335	47,5293	1,4886
22	0,1746	0,00143	60,6858	0,9359	46,4785	1,8153
23	0,1909	0,00143	60,9976	0,8270	45,9196	1,0862
24	0,2072	0,00143	60,3483	0,9136	43,9848	1,1813
25	0,2278	0,00143	58,7240	0,7955	43,1727	1,1279
26	0,2421	0,00143	59,3510	0,7382	41,8079	0,8605
27	0,2628	0,00143	59,2759	0,7300	40,6636	0,8505
28	0,2751	0,00143	59,7862	0,7753	39,7454	0,6526
29	0,2912	0,00143	55,6078	0,9196	38,9039	0,8291
30	0,3147	0,00143	55,7255	0,4562	37,1546	0,8651
31	0,3311	0,00143	57,5434	1,0358	36,7250	0,6238
32	0,3531	0,00143	57,4764	0,8739	35,6285	0,5794
33	0,3658	0,00143	56,6508	0,6004	35,0053	0,8864
34	0,3812	0,00143	56,5639	0,6815	34,5111	0,7813
35	0,3987	0,00143	56,3270	0,7536	34,0401	0,8139

Continua na próxima página.

Dados experimentais (continuação).

Exp.	V_s [m/s]	Q_l/W [m ³ /ms]	h_{cl} [mmc.a]	σ^2 do h_{cl} [mmc.a]	h_{lcl} [mmc.a]	σ^2 do h_{lcl} [mmc.a]
36	0,4167	0,00143	56,3716	0,7725	33,3144	0,6031
37	0,4304	0,00143	53,1297	0,9575	32,4889	0,6263
38	0,4520	0,00143	52,1860	0,3960	31,3613	0,6025
39	0,4661	0,00143	52,5551	0,6270	31,4689	0,6697
40	0,1603	0,00214	61,268	1,3078	49,7045	1,5011
41	0,1745	0,00214	59,9155	0,9959	48,7325	1,3163
42	0,1931	0,00214	58,9765	0,9658	47,2506	1,2406
43	0,2076	0,00214	57,7161	0,9990	46,5900	0,9593
44	0,2244	0,00214	57,3780	0,8552	45,2578	0,8042
45	0,2457	0,00214	57,0687	0,7777	43,9491	0,8466
46	0,2614	0,00214	56,8131	0,9288	42,7226	1,1089
47	0,2755	0,00214	56,3189	0,8619	41,3796	0,7502
48	0,2953	0,00214	56,3066	0,7085	40,6609	0,7797
49	0,3066	0,00214	56,3129	0,9256	39,9219	0,7468
50	0,3325	0,00214	56,1931	0,6562	38,6540	0,6313
51	0,3450	0,00214	56,1744	0,6754	38,4583	0,5600
52	0,3619	0,00214	56,3189	0,8008	36,6514	0,5971
53	0,3813	0,00214	56,7490	0,7763	36,3255	0,8568
54	0,3978	0,00214	57,0523	0,7056	35,4553	0,6678
55	0,4095	0,00214	56,8778	0,7745	34,7376	0,6239
56	0,4367	0,00214	56,7079	0,8375	34,6286	0,6987