

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS**

**Transferência de Calor e Massa em Colunas de Destilação a
Vácuo: uma abordagem Euleriana-Lagrangeana**

Autora: Karolline Ropelato

Orientador: Prof. Dr. Milton Mori

Co-Orientador: Washington de Oliveira Geraldelli, PhD

Campinas - São Paulo

Dezembro – 2008

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

R681t Ropelato, Karolline
Transferência de calor e massa em colunas de
destilação a vácuo: uma abordagem Euleriana-
Lagrangeana / Karolline Ropelato. --Campinas, SP:
[s.n.], 2008.

Orientadores: Milton Mori, Washington de Oliveira
Geraldelli.

Tese de Doutorado - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. escoamento multifásico. 2. Destilação. 3.
Dinâmica dos fluidos. 4. Calor-Transmissão. 5. Massa-
Transferência. I. Mori, Milton. II. Geraldelli,
Washington de Oliveira. III. Universidade Estadual de
Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV.
Título.

Título em Inglês: Heat and mass transfer in vacuum towers: an Eulerian-
Lagrangian approach

Palavras-chave em Inglês: Multiphase flow, distillation, Fluid dynamics,
Heat-Transmission, Mass transfer

Área de concentração: Departamento de Processos Químicos

Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora: Rodrigo Koerich Decker, José Roberto Nunhez,
Marcos D' Ávila, Waldir Pedro Martignoni

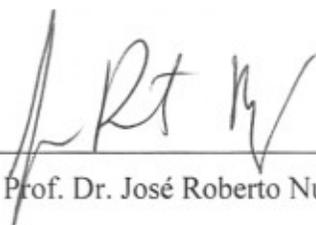
Data da defesa: 18/12/2008

Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Tese de Doutorado defendida por Karolline Ropelato e aprovada em 18 de dezembro de 2008 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



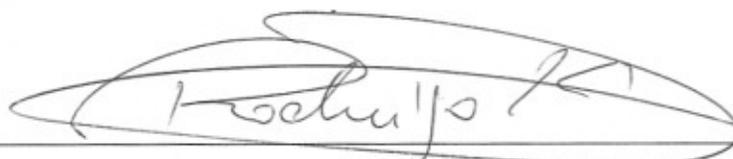
Prof. Dr. Milton Mori - Orientador



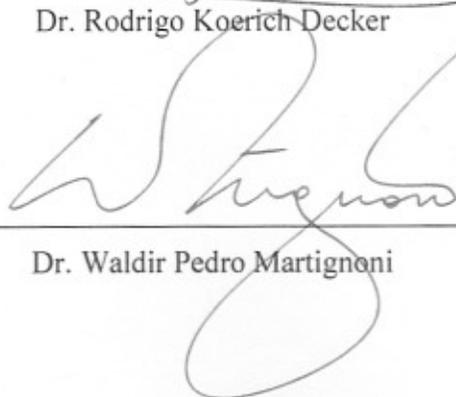
Prof. Dr. José Roberto Nunhez



Dr. Marcos D'Ávila



Dr. Rodrigo Koerich-Decker



Dr. Waldir Pedro Martignoni

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

AGRADECIMENTOS

Agradeço a meu orientador Prof. Milton Mori e ao meu co-orientador o Eng. Washington Geraldelli, pelo incentivo e confiança.



Prof. Dr. Milton Mori - Orientador

Agradeço a PETROBRAS pela liberação do tema em que se desenvolveu o meu estudo de pesquisa.

AGRADECIMENTOS

Agradeço o meu orientador Prof. Milton Mori e ao meu co-orientador o Eng. Washington Geraldelli, pelo incentivo e confiança.

Agradeço a PETROBRAS pela liberação do tema em que se desenvolveu o meu estudo de pesquisa.

RESUMO

A compreensão dos fenômenos existentes em equipamentos industriais é de extrema importância para o seu projeto e otimização. O uso de colunas de destilação é conhecido antes mesmo do século XX. Desde o seu surgimento até os tempos atuais, significativos avanços ocorreram. A literatura apresenta diversos trabalhos considerando o estudo de colunas de destilação com pratos ou recheios. No entanto, pouca atenção tem sido dada para colunas com vazios. O presente trabalho apresenta uma metodologia para o estudo da transferência de calor e massa em colunas de destilação com distribuidores do tipo *sprays* em processos de destilação, considerando uma abordagem Euleriana-Lagrangeana. Neste tipo de abordagem, as gotas são modeladas individualmente a partir de trajetórias na fase contínua. O modelo k- ϵ foi empregado para prever o comportamento da fase vapor. O equilíbrio termodinâmico é modelado considerando a lei de Raoult. Utilizando conjuntamente conhecimentos de Termodinâmica, Processos de Separação (destilação) e de Fluidodinâmica Computacional (CFD), um modelo matemático é proposto. A aplicação das escalas características de tempo como metodologia de análise e compreensão dos resultados é proposta.

ABSTRACT

The understanding of fluid dynamic phenomena in industrial equipments are extremely important for new projects and their optimization. Distillation columns are being used even before the XX century. Since that time many advances have happened. The literature presents different studies as far as plates or packed columns are concerned, but few attention have been done in empty section. The present study shows a methodology to study the heat and mass transfer in empty sections of distillation columns considering the Eulerian-Lagrangian approach. The Lagrangian tracking for the liquid droplets was used to predict *spray* distribution. The model takes into account the influence of the liquid flow within the vapor phase flow. The k- ϵ turbulence model was applied to predict the vapor behavior. The thermodynamic equilibrium considered the Raoult's Law. Considering the different areas as thermodynamics, Separation Process (distillation) and the Computational Fluid Dynamics (CFD), a mathematical model is proposed. The time scales methodology is important as a feature to analyze and understanding the results.

Índice

AGRADECIMENTOS	v
RESUMO	vi
ABSTRACT	vii
Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
Nomenclatura	xiii
CAPÍTULO 1. CONSIDERAÇÕES INICIAS	1
1.1 Objetivos da Tese	2
1.1.1 Objetivos Específicos	3
1.1.2 Organização da Tese.....	3
CAPÍTULO 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	5
2.1 O Processo de Refino (ABADIE, 2003)	5
2.2 Tendências de um Projeto de Coluna de Destilação	9
2.3 O Fenômeno de Mudança de Fase	11
2.4 Caracterização da Fluidodinâmica de Bolhas/Gotas	12
2.5 Sprays	13
2.5.1 Simulação de sprays	15
2.6 Escolha da Abordagem Experimental - Numérica	17
2.7 A Técnica Numérica Empregada	19
CAPÍTULO 3. MODELAGEM MATEMÁTICA	21
3.1 Modelagem Matemática da Fase Contínua	21
3.1.1 Turbulência.....	24
3.1.2 Equações constitutivas.....	25
3.2 Modelagem Matemática da Fase Dispersa	27
3.2.1 Equilíbrio líquido-vapor (ELV)	31
3.2.2 ELV para fluidos ideais – Lei de Raoult.....	32
3.2.3 Regras de mistura	34
3.3 Correção do diâmetro de gota	34
3.4 Compreendendo a Fluidodinâmica do Escoamento	35
3.5 Representação dos Pseudocomponentes	39
CAPÍTULO 4. MÉTODOS NUMÉRICOS E O CÓDIGO DE CFD	42
4.1 Aspectos Gerais Sobre o Método dos Volumes Finitos (MVF)	43
4.1.1 Discretização do termo transiente.....	45
4.1.2 Discretização do termo referente à contribuição convectiva	45
4.1.3 Discretização do termo referente à contribuição difusiva.....	45
4.1.4 Discretização do termo fonte	46
4.1.5 Esquemas de interpolação.....	46
4.1.6 Esquemas de interpolação Upwind Difference Schme (UDS)	48
4.1.7 Esquemas de interpolação Higher Upwind.....	48

4.1.8	Esquemas de interpolação High Resolution	48
4.1.9	Acoplamento pressão velocidade	49
4.2	MVF com base em Elementos Finitos	50
4.3	Geometria e Malha Numérica	50
CAPÍTULO 5. APARATO DE ESTUDO		53
5.1	Modelo de resistência para validação do modelo empregado.....	55
CAPÍTULO 6. RESULTADOS E DISCUSSÕES		59
6.1	Verificação de Coerência Física do Modelo.....	59
6.1.1	Resultados: ar úmido e água	61
6.1.2	Modelo 1D para Pseudocomponentes.....	63
6.2	Modelo 3D para Pseudocomponentes	64
6.2.1	Verificação da malha numérica	65
6.2.2	Representação da trajetória dos sprays	67
6.2.3	Método de interpolação	69
6.2.4	Modelos de turbulência	72
6.2.5	Análise fluidodinâmica do escoamento	76
6.3	Validação do Modelo de CFD Empregado	80
6.4	Análise de Sensibilidade Paramétrica.....	82
CAPÍTULO 7. CONCLUSÕES E SUGESTÕES		85
7.1	Principais dificuldades encontradas.....	87
7.2	Sugestões para trabalhos futuros	88
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS		89

Lista de Figuras

Figura 2.1: Esquema de destilação (ABADIE, 2003).	6
Figura 2.2: Evolução conceitual dos projetos de fracionadoras de unidades de coqueamento retardado.	10
Figura 2.3: Exemplos de diferentes características de <i>spray</i> , (a) cone oco, (b) “flat” e (c) cone cheio (Hede <i>et al.</i> , 2008).	14
Figura 3.1: Mapa de regimes de interação entre gotas e a turbulência. (ELGHOBASHI, 1994).	35
Figura 3.2: Fração mássica dos componentes presentes na seção de GOL.	40
Figura 4.1: Balanço de massa para um volume de controle.	43
Figura 4.2: Representação de um volume de controle.	50
Figura 4.3: Detalhamento da malha numérica. (a) Malha 1, (b) Malha 2, (c) Malha 3 e (d) 10 camadas de prismas.	52
Figura 5.1: Torre de vácuo para destilação. (CALDAS <i>et al.</i> , 2007).	54
Figura 5.2: Equipamento de estudo.	54
Figura 5.3: (a) Torre a vácuo, (b) distribuidor de líquido e (c) entrada do vapor.	55
Figura 5.4: Modelo de resistência para validação dos resultados.	56
Figura 5.5: Modelo de aleta para ilustração do modelo.	57
Figura 6.1: Representação do Modelo 1D empregado.	60
Figura 6.2: Carta psicrométrica com os valores obtidos para o caso de validação e verificação do modelo empregado.	61
Figura 6.3: Perfil de temperatura para simulação de ar úmido e água em condições unidimensionais.	62
Figura 6.4: Fração mássica de água em condições unidimensionais.	63
Figura 6.5: Fração mássica para as hipóteses para a modelagem dos componentes do sistema.	64
Figura 6.6: Avaliação da fração molar do pseudocomponente no vapor para diferentes malhas.	66
Figura 6.7: Perfil de temperatura para diferentes malhas.	66
Figura 6.8: Perfil de velocidade para diferentes malhas.	66
Figura 6.9: Fração molar do pseudo no vapor para trajetórias diferentes.	68

Figura 6.10: Temperatura do pseudo no vapor para trajetórias diferentes.	68
Figura 6.11: Velocidade do vapor para trajetórias diferentes.	69
Figura 6.12: Fração molar de pseudo no vapor para diferentes esquemas advectivos.	71
Figura 6.13: Temperatura do pseudo no vapor para diferentes esquemas advectivos.	71
Figura 6.14: Velocidade do vapor para diferentes esquemas advectivos.	72
Figura 6.15: Fração molar do pseudo no vapor para diferentes modelos de turbulência.	73
Figura 6.16: Temperatura do pseudo no vapor para diferentes modelos de turbulência.	73
Figura 6.17: Velocidade do pseudo no vapor para diferentes modelos de turbulência.	74
Figura 6.18: (a) Fração volumétrica média de líquido, (b) Plano de corte a 1 m do distribuidor spray.	75
Figura 6.19: Trajetória das gotas.	75
Figura 6.20: Energia cinética turbulenta para a fase contínua.	76
Figura 6.21: Taxa de dissipação de energia turbulenta.	77
Figura 6.22: Escala integral Euleriana de turbulência do fluido (t_c).	77
Figura 6.23: Escala dissipativa de Kolmogorov (t_k).	78
Figura 6.24: Tempo de relaxação da gota (t_d).	79
Figura 6.25: Correlação turbulenta gota-vapor (t_{dg}).	79
Figura 6.26: Stokes na escala de Kolmogorov (St_k).	80
Figura 6.27: Validação do modelo empregado.	82
Figura 6.28: Perfil de fração mássica do pseudo para diferentes alturas do equipamento: (a) altura original, (b) 85,7% da altura original e (c) 71,4% da altura original.	83
Figura 6.29: Perfil de temperatura do vapor para diferentes alturas do equipamento: (a) altura original, (b) 85,7% da altura original e (c) 71,4% da altura original.	84

Lista de Tabelas

Tabela 2.1: Vantagens da modelagem Lagrangeana para representação de <i>sprays</i>	18
Tabela 2.2: Exemplos de aplicações de CFD.	19
Tabela 3.1: Regras de mistura para as propriedades de transporte.....	34
Tabela 3.2: Propriedades dos componentes.....	40
Tabela 3.3: Condições iniciais para o modelo.....	41
Tabela 4.1: Números de nós e camadas de prismas simulados.	51
Tabela 6.1: Distribuição de tamanho de gota.	70
Tabela 6.2: Valores globais comparativos entre os resultados analisados para o vapor.	81

Nomenclatura

Letras Latinas

A	Área e coeficiente matricial
C	Coeficiente convectivo e concentração de partículas
CD	Coeficiente de arraste
D	Tensor taxa de deformação
D	Difusividade cinemática e operador difusão
d	Diâmetro
e	Vetor unitário
F	Vetor força
f	fugacidade
G	Geração de energia cinética turbulenta
g	Aceleração gravitacional
H	Comprimento vertical
h	Distância entre os nós e entalpia sensível
I	Tensor identidade
k	Energia cinética turbulenta
Ke	Constante de equilíbrio
L	Comprimento horizontal
l	Comprimento de mistura e ponto leste da malha
M	Forças interfaciais
m	Fluxo de massa
n	Vetor normal
o	Ponto oeste da malha
P	Ponto central do volume de controle
p	Pressão
PM	Massa molar
Q	Vazão volumétrica e termo para representar a transferência de calor da fase através da interface
q	Escala de velocidade

R	Constante universal dos gases
Re	Número de Reynolds
s	Tensor cisalhante
S	Termo fonte
Sh	Número de Sherwood
S _c	Número de Schimidt
SP	Coefficiente angular de linearização
Stκ	Stokes na escala de Kolmogorov
SU	Coefficiente linear
T	Tensor tensão
T	Temperatura
t	Tempo
U	Velocidade axial e coeficiente global de transferência de calor
V	Volume
v	Vetor velocidade
x	Fração molar em uma fase líquida
Z	Fator de compressibilidade
y	Componente ou fração molar em uma fase vapor
w	Fração mássica

Letras Gregas

Γ	Taxa de transferência de massa entre fases
δ	Solubilidade
ε	Taxa de dissipação de energia térmica turbulenta
λ	Condutividade térmica
γ	Coefficiente de atividade
μ	Viscosidade molecular
ν	Viscosidade cinemática

ξ	Fração volumétrica
ρ	Massa específica
σ	Tensor normal, constante do modelo k- ϵ , tensão superficial
ϕ	Propriedade escalar genérica e coeficiente de fugacidade
Ω	Fator acêntrico

Constantes e Parâmetros

A, B, C	Parâmetros para o cálculo do equilíbrio
a, b	Parâmetros da equação cúbica
C_1, C_2, C_μ	Constantes do modelo k- ϵ
K_1, K_2	Constantes do modelo de coeficiente de arraste
$\sigma_k, \sigma_\epsilon$	Constantes do modelo k- ϵ

Superescritos

`	Indica flutuação
—	Indica propriedade média temporal
ef	Valor efetivo
T	Indica operação matricial de transposição
t	Turbulento

Subscritos

b	Condição de ebulição
c	Fase contínua ou condição crítica
d	Fase dispersa
g	Fase gás
i	Componente i
k	Relativo a fase genérica k
L	Fase líquida

nb	Vizinhanças das regiões analisadas
O, o	Referente ao ponto a oeste de P
P	Referente ao ponto central do volume de controle
p	gota
res	resistiva
sat	Condição de saturação
V	Fase vapor
x	Direção axial
y	Direção radial
z	Direção tangencial

Escalas de tempo

τ_c	Escala integral Euleriana de turbulência do fluido
τ_d	Tempo de relaxação das gotas
τ_e	Tempo de duração dos grandes vórtices
τ_{dc}	Correlação turbulenta gota-vapor
τ_κ	Escala dissipativa de Kolmogorov

Siglas

CFD	Fluidodinâmica Computacional (<i>Computational Fluid Dynamic</i>)
CFX	Código CFD comercial
E-E	Euleriano - Euleriano
E-L	Euleriano - Lagrangeano
FEQ	Faculdade de Engenharia Química
MVF	Método dos Volumes Finitos
1D	Unidimensional
2D	Bidimensional
3D	Tridimensional

CAPÍTULO 1

CONSIDERAÇÕES INICIAIS

O processo de destilação pode ser considerado como o precursor das operações unitárias, sendo utilizado antes do século XX. A origem exata do processo não fica totalmente clara, sabe-se apenas que estaria relacionada à produção de bebida alcoólica. FORBES (1949) apresentou em seu livro intitulado *A Short history of the art of distillation from the beginnings up to the death of Cellier Blumenthal* uma descrição da origem da destilação a partir de estudos de outros pesquisadores. O autor menciona que de acordo com etnologistas os quais estudam civilizações de tribos primitivas, uma tribo africana tinha um licor intoxicante que era obtido através da fermentação de uma farinha de aveia com água, bebida esta chamada de “manawa”, uma espécie de bebida tradicional da tribo. Esta seria a primeira aplicação de um processo de destilação. Outros relatos apontados por Forbes também mencionam tribos da Ásia, e que a civilização Grega já desenvolvia bebidas alcoólicas. Entretanto o autor ressalta que nenhuma destas bebidas foi comprovada como sendo de origem destilada, embora seja possível deduzir que, de alguma forma, a destilação já era conhecida 1000 a 2000 A.C., devida à existência nesta época, de produtos como óleos essenciais, remédios e perfumes, entre outros.

A primeira coluna para o processo de separação conhecido por destilação foi desenvolvida por Cellier-Bumenthal na França em 1813. Perrier introduziu uma nova versão para o prato com *bubble-cap* na Inglaterra em 1822. Colunas com recheio já eram usadas antes de 1820 por Clement, o qual usava esferas de vidro para a destilação de bebidas alcoólicas. Coffey inventou a primeira coluna com pratos em 1830. Apesar de haver relatos desde 1813 do início do processo de separação conhecido por destilação, somente cem anos depois surgiu a primeira publicação na forma de um livro tratando dos fundamentos da destilação: “*La Rectification de l’alcool*”, publicado por Ernest Sorel em 1893 intitulado (KISTER, 1992).

Significativos progressos ocorreram nesta área, até o ano de 1930. As aplicações envolvendo destilação evoluíram de uma ferramenta para a produção de bebidas alcoólicas

destiladas, tornando-se parte primordial nos processos da indústria química, tais como a extração de produtos para química fina, extração de óleos essenciais e indústria de petróleo, entre outros. Um marco significativo neste avanço foi quando a destilação passou a transformar o petróleo bruto em derivados de maior valor agregado, como o diesel e a gasolina.

A complexidade que envolve os atuais avanços tecnológicos tornou imprescindível a aplicação de novas ferramentas que permitam o desenvolvimento de novos conhecimentos técnicos. Destaca-se, atualmente, o uso da Fluidodinâmica Computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*), que vem se tornando uma ferramenta de engenharia cada vez mais importante, reproduzindo detalhes locais do escoamento em equipamentos de forma tridimensional e transiente, além de possibilitar a análise de complexos fenômenos físicos, como escoamentos multifásicos, turbulentos e reacionais. O uso de CFD no dia a dia do engenheiro é uma forte tendência que permite, entre outras coisas, a redução dos custos de um projeto tradicional. Trata-se de uma área com crescimento em torno de 30% a 40% ao ano na indústria brasileira em geral e, especificamente, na indústria de petróleo. O avanço da CFD deixou de ser uma promessa para se tornar uma realidade, relativamente barata e eficiente, com resultados consolidados na indústria moderna.

1.1 Objetivos da Tese

Utilizando conjuntamente conhecimentos de Termodinâmica, Processos de Separação (destilação) e de Fluidodinâmica Computacional (CFD), o presente trabalho propõe o desenvolvimento de um modelo matemático para representação simultânea dos fenômenos de transferência de calor, massa e momento em processos de destilação, considerando uma abordagem Euleriana-Lagrangeana. Neste tipo de abordagem, as gotas são modeladas individualmente a partir de trajetórias na fase contínua. Neste caso específico, esta técnica foi utilizada para a predição do comportamento em uma coluna de destilação a vácuo com distribuidor do tipo *spray*. Condições fluidodinâmicas para analisar perfis de temperatura, velocidade e composição das fases contínua e dispersa serão detalhadamente discutidas ao longo deste trabalho e foram usadas para melhor compreensão e otimização do equipamento citado.

1.1.1 Objetivos Específicos

- Realização de experimentação numérica para obtenção de um modelo matemático multifásico, multicomponente, tridimensional, turbulento e permanente, utilizando o *software* comercial ANSYS CFX com o acoplamento para a representação do fenômeno de mudança de fase a partir de rotinas FORTRAN para o estudo do equilíbrio Líquido-Vapor em uma coluna de destilação a vácuo com *sprays*;
- aplicação do modelo desenvolvido para análise de melhorias na performance do equipamento, aperfeiçoando e otimizando projetos a partir do estudo detalhado dos fenômenos envolvidos e determinação das variáveis de maior relevância.

1.1.2 Organização da Tese

- Capítulo 2 – apresentam-se os fundamentos teóricos para uma melhor compreensão do processo de refino contextualizando a região da coluna a vácuo, as tendências de um projeto de coluna de destilação, além de descrever os principais fenômenos envolvidos no estudo de colunas de destilação. Estes serão detalhadamente discutidos neste trabalho, incluindo o fenômeno da mudança de fase e a caracterização da fluidodinâmica de gotas.
- Capítulo 3 – a modelagem matemática adotada para a resolução desse trabalho é apresentada, comparando-se os fundamentos matemáticos para a representação da fluidodinâmica de colunas de destilação a vácuo a partir dos princípios da conservação de massa, momento e energia, e das equações constitutivas de natureza empírica necessárias para o fechamento do modelo.
- Capítulo 4 – os métodos numéricos, que se apresentam como uma ferramenta poderosa na tentativa de reproduzir e prever o comportamento da natureza, são apresentados numa discussão sobre o método dos volumes finitos baseado em elementos finitos além da caracterização da malha numérica e da solução de equações, adotada nos experimentos numéricos.
- Capítulo 5 – para facilitar a compreensão dos fenômenos envolvidos, detalha-se o equipamento adotado para a modelagem.

- Capítulo 6 – são apresentados os resultados obtidos com modelo multifásico com transferência de calor e massa, adotado como aproximação da fluidodinâmica de colunas de destilação a vácuo, e os estudos realizados para corroborá-los. Apresenta-se também uma discussão sobre a influência do acoplamento das fases e uma proposta para otimização geométrica a fim de garantir a troca de energia necessária para o equipamento de estudo.
- Capítulo 7 - as conclusões e sugestões são apresentadas, apontando alguns desdobramentos para a continuidade deste estudo.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O Capítulo 2 apresenta a Revisão Bibliográfica elaborada no desenvolvimento desta Tese. O estudo da transferência de calor e massa associado ao mecanismo de mudança de fase constitui um fenômeno extremamente complexo. Os trabalhos de maior relevância para esta tese são apresentados, com ênfase na descrição do processo de refino de petróleo, caracterização da fluidodinâmica de bolhas e gotas, estado da arte em simulação de *sprays* e a escolha da abordagem experimental-numérica. Embora o presente trabalho destine-se principalmente à avaliação da fluidodinâmica da seção de gás-óleo leve em uma torre de destilação a vácuo, a metodologia proposta pode ser empregada para outras seções de destilação onde distribuidores do tipo *spray* são utilizados.

2.1 O Processo de Refino (ABADIE, 2003)

A destilação é um processo físico de separação, baseado na diferença de ponto de ebulição (temperatura) entre os compostos numa mistura líquida. Variando-se as condições de aquecimento do petróleo, é possível vaporizar compostos leves, intermediários e pesados que, ao se condensarem, podem ser separados. Paralelamente, ocorre a formação de um resíduo pesado constituído principalmente de hidrocarbonetos de elevada massa molar, que não se vaporizam em condições de temperatura e pressão na qual a destilação é realizada.

Além da temperatura, a pressão é outro fator importante no processo de destilação. O ponto de ebulição de um determinado líquido é função da pressão a que ele está sendo submetido. Quanto maior for a pressão exercida, maior será a temperatura de ebulição do líquido. Assim, a diminuição da pressão acarreta na diminuição da temperatura de ebulição do líquido.

A conjugação desses dois parâmetros – temperatura e pressão – permite que um líquido como o petróleo seja separado em diversas frações.

Para a descrição detalhada do processo de destilação, Figura 2.1, considera-se como ponto de partida o início do bombeamento contínuo do petróleo frio, por meio de vários trocadores de calor, nos quais o óleo é progressivamente aquecido e ao mesmo tempo em que resfria os produtos acabados que deixam a unidade de refino.

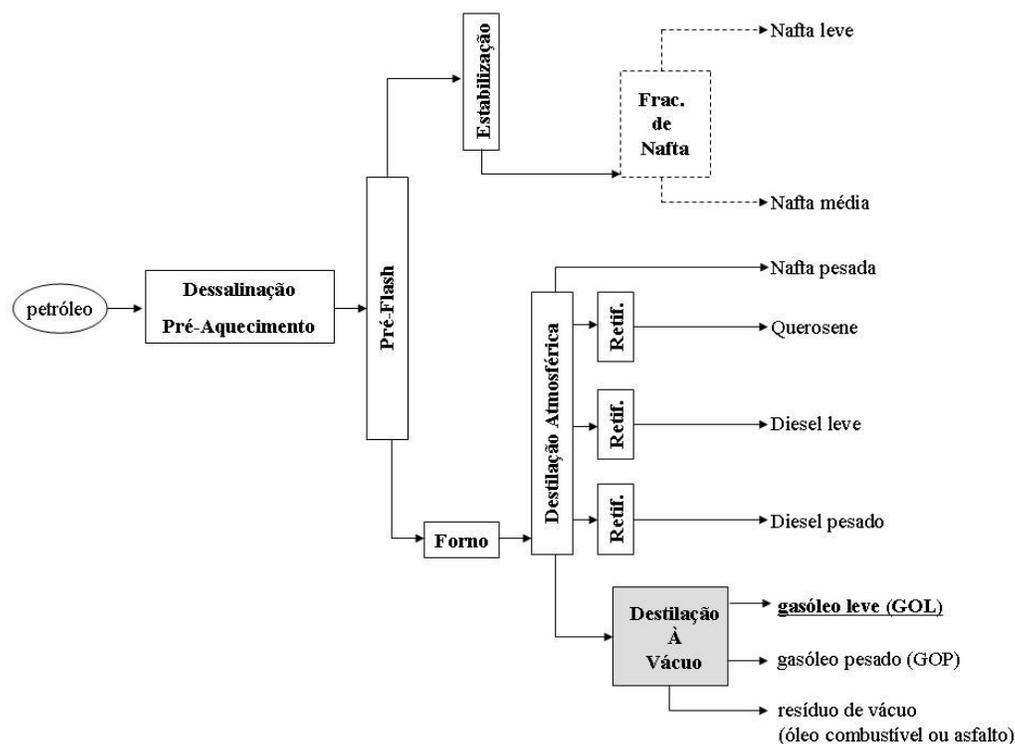


Figura 2.1: Esquema de destilação (ABADIE, 2003).

Antes do o petróleo ser enviado à seção de fracionamento, este passa pela dessalgadora (ou dessalinizadora) para remoção de sais, água e suspensões de sólidos particulados, permitindo maior flexibilidade operacional em relação aos tipos de petróleo processados. Esses contaminantes causam sérios danos à unidade de destilação se não forem removidos do óleo cru, limitam o tempo de funcionamento efetivo do equipamento, e causam ineficiência na operação da unidade.

A dessalgadora é um precipitador eletrostático. A mistura água/óleo é submetida a um campo eletrostático ao entrar em um vaso de pressão para coalescer as gotas de óleo e promover a separação. O petróleo dessalinizado flui pelo topo do vaso, e continua seu fluxo

dentro da unidade, enquanto a salmoura formada (água, sais e sedimentos) é contínua e automaticamente descartada pelo fundo.

O petróleo, após ser dessalinizado, passa numa segunda bateria de pré-aquecimento, onde a sua temperatura é elevada ao máximo valor possível conseguido por troca térmica com as correntes quentes que deixam o processo. Quanto mais alta for a temperatura atingida no pré-aquecimento, menor será a quantidade de combustível gasta nos fornos para o aquecimento final do óleo.

Após deixar o último trocador da bateria de pré-aquecimento, o petróleo ainda está com uma temperatura abaixo da requerida para que ocorra um fracionamento eficaz. Com a finalidade de elevar mais a temperatura, possibilitando assim que as condições ideais de fracionamento sejam atingidas, a carga é introduzida em fornos tubulares, onde recebe energia térmica produzida pela queima de óleo e/ou gás combustível.

Para que se consiga vaporizar todos os produtos (que serão retirados na torre de destilação atmosférica), a carga deverá ser aquecida até o ponto estipulado, não devendo ultrapassar uma temperatura limite, a partir da qual tem início a decomposição das frações pesadas presentes no óleo bruto. Em temperaturas demasiadamente elevadas, pode ocorrer o craqueamento térmico, que é uma ocorrência altamente indesejável em unidades de destilação, pois provoca a deposição de coque nos tubos dos fornos e nas regiões inferiores das torres, causando problemas operacionais. A máxima temperatura de aquecimento de petróleo, sem que haja perigo de decomposição térmica, é de 400°C, temperatura a qual boa parte do petróleo já se encontra vaporizado, e nessas condições a carga é alimentada na torre.

O ponto de entrada da torre é conhecido como zona de vaporização ou “zona de flash”. Esta é a região onde a separação em duas distintas correntes: uma constituída de frações vaporizadas que sobe em direção ao topo da torre, e outra líquida, que desce em direção ao fundo.

Os produtos são retirados da torre de destilação em determinados pontos da coluna, segundo as temperaturas limites de destilação das frações desejadas (óleo diesel, querosene e nafta pesada).

Pelo topo da torre de destilação são retirados os vapores de nafta leve e GLP, os quais são condensados, fora da torre, e posteriormente separados. O resíduo da destilação atmosférica que deixa o fundo da coluna é chamado de resíduo atmosférico (RAT), e dele ainda devem ser retiradas frações importantes por meio da destilação a vácuo.

O resíduo atmosférico, subproduto da destilação atmosférica do petróleo, é um produto de elevada massa molar e de baixo valor comercial. Sua única utilização prática é como óleo combustível. Contudo nele, encontram-se contidas frações de elevado potencial econômico, tais como os gasóleos, os quais não podem ser separados por meio da destilação usual porque, devido aos seus altos pontos de ebulição à pressão atmosférica se torna impossível vaporizá-los, devido ao limite de 400°C imposta pela decomposição térmica dos hidrocarbonetos pesados.

A destilação a vácuo é empregada usualmente em dois casos: produção de óleos lubrificantes ou produção de gasóleo para carga da unidade de craqueamento catalítico. O resíduo atmosférico que deixa o fundo da torre principal é bombeado e enviado aos fornos da seção de vácuo, para que sua temperatura seja aumentada. Os hidrocarbonetos vaporizados na zona de flash desta coluna são geralmente coletados em duas retiradas: gasóleo leve (GOL), pelo topo e gasóleo pesado (GOP) por uma retirada lateral.

O gasóleo leve é um produto ligeiramente mais pesado que o óleo diesel podendo ser a ele misturado, desde que seu ponto final de ebulição não seja muito elevado. O gasóleo leve é um produto de topo, saindo neste local somente vapor d'água e hidrocarbonetos leves, e uma pequena quantidade de ar proveniente de ligeiros escapes nos equipamentos. Esses gases são succionados da torre pelo sistema de produção de vácuo.

Entre a zona de flash e a retirada de gasóleo pesado existe um conjunto de telas de aço superpostas chamadas de eliminador de névoa (conhecido comumente pelo nome comercial de Demister Pad), com a finalidade de evitar o arraste conduzido pelo vapor de gotas das frações pesadas oriundas do produto de fundo, que iriam contaminar os cortes laterais, aumentando o resíduo de carbono e o teor de metais na carga a ser destinada ao craqueamento catalítico.

O produto residual da destilação é comumente chamado de resíduo de vácuo. Este é constituído de hidrocarbonetos de elevadíssima massa molar, além de contar com uma

razoável concentração de impurezas. Conforme as suas especificações pode ser vendido como óleo combustível de baixo valor agregado como por exemplo o piche.

As torres de vácuo, comumente, possuem grande diâmetro (valores superiores a 4m), uma vez que o volume ocupado por uma determinada quantidade de vapor é bem maior em pressões reduzidas do que à pressão atmosférica.

Os esforços para o estudo fluidodinâmico com transferência de calor e massa avaliando a mudança de fase foram concentrados na seção de gás-óleo leve da torre de destilação a vácuo. O modelo proposto trata-se de um modelo genérico e capaz de representar os fenômenos envolvidos para outras seções de destilação.

2.2 Tendências de um Projeto de Coluna de Destilação

A evolução conceitual de um projeto de uma coluna de destilação vem levando à substituição dos tradicionais dispositivos de contato entre fases (pratos de destilação, recheios e chicanas) por seções de vazios em que *sprays* permitem o contato entre as fases. Este movimento é uma tendência natural, visando a minimização da perda de carga da seção. O domínio dos fenômenos envolvidos além do conhecimento das variáveis de maior relevância vem a ser fundamental para a aplicação destas tecnologias. A Figura 2.2 ilustra a evolução desse conceito em torres fracionadoras de Unidades de Coqueamento Retardado. Para colunas de destilação a tendência é a substituição de seções com recheios para vazios.

A Figura 2.2 (a) apresenta um projeto tradicional de uma coluna com pratos de destilação (vermelho) e chicanas (azul) idealizado em 2001. Na Figura 2.2 (b) um projeto idealizado em 2004, os pratos de destilação são substituídos por chicanas. Já a Figura 2.2 (c), projeto idealizado em 2006, demonstra a tendência da utilização de distribuidores do tipo *spray* onde o “dispositivo” de troca de calor pode ser considerado como a própria superfície da gota.

Esta evolução conceitual traz diversas vantagens:

- Eliminação de regiões de formação de acúmulos indesejáveis;
- Maior facilidade de inspeção e reparos do equipamento;

- Maior tempo de operação do equipamento;

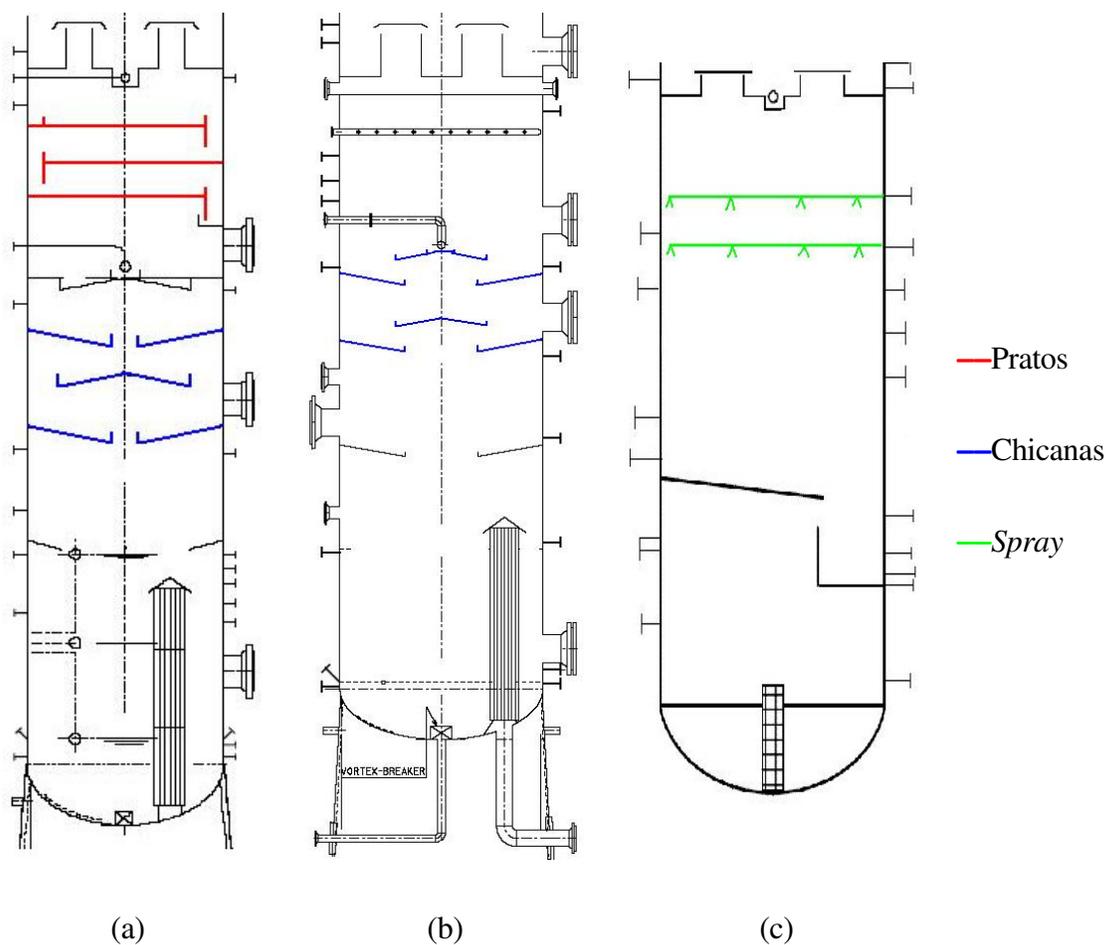


Figura 2.2: Evolução conceitual dos projetos de fracionadoras de unidades de coqueamento retardado.

A literatura apresenta um vasto estudo sobre colunas com recheios, como os trabalhos apresentados por TROMPIZ (2000) e SPIEGEL (2003). Contudo, o mesmo não ocorre para colunas com vazios (*sprays*). O primeiro passo na busca da compreensão dos parâmetros que governam o desempenho da torre de destilação a vácuo pode consistir em experimentação virtual (numérica). Para isto, a ferramenta mais indicada é a fluidodinâmica computacional. Na aplicação da fluidodinâmica computacional é possível realizar avaliações adequadas de grandezas fundamentais, tais como: distribuição de velocidades das fases envolvidas no processo, distribuições do tempo de residência, influência da variação do diâmetro da gota

sobre a mudança de fase. Estes aspectos fenomenológicos serão explorados ao longo deste estudo.

2.3 O Fenômeno de Mudança de Fase

Os fenômenos de condensação e evaporação estão associados diretamente aos fenômenos de transferência de calor e de massa. Este estudo é altamente complexo pela dificuldade de representação dos fenômenos físicos envolvidos, principalmente quando envolvem uma fase contínua e outra polidispersa. Essas dificuldades estão associadas tanto ao estudo numérico do problema quanto ao experimental.

Em diversos processos industriais, o contato entre a fase gasosa e a fase líquida ocorre por dispersão de gotas da fase líquida na fase gasosa. Para simular corretamente a representação da condensação e evaporação é necessário um modelo composto de pelo menos duas fases, uma dispersa e outra contínua. De forma geral, para o estudo do fenômeno de mudança de fase em uma coluna de destilação baseada em *sprays*, a fase contínua representa a fase vapor, enquanto que as gotas de óleo caracterizam a fase dispersa. A fase dispersa fica diretamente em contato com a fase contínua durante um intervalo de tempo que deve ser o necessário para se atingir o equilíbrio termodinâmico e térmico necessário. As taxas de calor e massa envolvidas são dependentes das propriedades das fases envolvidas (área de troca, velocidade relativa e propriedades físicas) e dos coeficientes de transferência de calor e massa.

Nos trabalhos de mudança de fase aplicados ao estudo de borbulhamento, geralmente, durante o contato entre as fases envolvidas, constata-se uma variação na hidrodinâmica do sistema. Isto é provocado, entre outros fatores, pelas mudanças na geometria das bolhas e nas temperaturas de ambas as fases, gerando, assim, um processo que opera em regime transiente. Este fato implica em dificuldades nas soluções das equações envolvidas, tanto do ponto de vista teórico quanto em aplicações experimentais, sendo que a literatura, embora trate de processos transientes, geralmente o faz de uma forma isolada apresentando resultados isoladamente para transferência de massa ou de calor (SCHMEHL, 1999).

Diversos autores estudaram o processo de borbulhamento, como SANTANA (1994) que mostra os fenômenos de transferência envolvidos, abordando aspectos fundamentais a serem levados em conta (propriedades dos fluidos, velocidade de ascensão, diâmetro da fase

dispersa, entre outros), descrevendo as dificuldades na obtenção das taxas de transferência de calor e/ou massa.

Alguns aspectos importantes das pesquisas desenvolvidas na literatura são:

- análise simultânea de transferência de calor e massa, ou seja, as equações de conservação resultantes devem ser resolvidas simultaneamente;
- necessidade do conhecimento das quantidades de calor envolvidas no processo para a determinação das quantidades de massa evaporada;
- ocorrência de mudança na geometria que, além de impossibilitar a representação do fenômeno através de um conjunto de equações axialmente simétricas, provoca alteração na circulação interna com modificações no perfil de velocidade e conseqüente mudança nas taxas de transferência de calor e massa.

A transferência de calor e massa, que ocorrem no fenômeno de mudança de fase, devem ser caracterizadas para uma descrição apropriada dos fenômenos envolvidos, permitindo que os coeficientes de transferência expressem os efeitos das diferenças de temperaturas. Para a obtenção de um modelo mais completo para uma coluna de destilação, torna-se imprescindível o conhecimento dos fenômenos de transporte das duas fases.

2.4 Caracterização da Fluidodinâmica de Bolhas/Gotas

Para sistemas em que há gotas, fatores ligados à hidrodinâmica das gotas (tais como forma, dimensões, velocidade de ascensão, perfis de velocidade, forças de arraste, tempo de resistência) têm influência direta ou indireta nas taxas de transferência, o que leva à necessidade de quantificá-las tanto na fase gasosa, quanto na fase líquida. Devido à complexidade do comportamento de grupos de bolhas ou gotas em um meio contínuo, atualmente ainda se modelam estes sistemas polidispersos com base nos estudos de uma partícula isolada. Mesmo esta abordagem simplificada permite uma melhor descrição desse comportamento e suas principais características.

O conhecimento da distribuição de gotas de um sistema é requisito fundamental para a análise de todos os fenômenos em um sistema disperso como, por exemplo, o que se observa

em equipamentos do tipo de ciclone. A literatura apresenta diversos trabalhos onde os autores discutem diversas metodologias para a determinação do diâmetro de gotas. Os trabalhos desenvolvidos por MUGELE e EVANS (1951), SELLENS e BRZUSTOWSKI (1986), SOVANI *et al.* (1999), e BABINSKI e SOJKA(2002) apresentam detalhadamente diferentes metodologias para a caracterização da distribuição de gotas.

SANTANA (1994) indica em seu trabalho que, para diâmetros pequenos, a bolha ou a gota possui formato esférico, enquanto que, para número de Reynolds elevados, há uma distorção desse formato. O pesquisador observou que a dimensão das bolhas e/ou gotas, é dependente, entre outros fatores, das propriedades físicas do gás e do líquido, do diâmetro do orifício onde é gerado, da tensão interfacial gás-líquido ou líquido-líquido e da taxa volumétrica do escoamento do gás através do orifício.

Um estudo de caracterização fenomenológica para bolhas foi desenvolvido por GUET *et al.* (2003) observando que pequenas bolhas possuem menores velocidades de ascensão no líquido quando comparada com bolhas grandes. Pequenas bolhas no escoamento ascendente se movem no sentido da parede, enquanto que bolhas grandes se movimentam para o centro da tubulação. Por esses motivos, bolhas pequenas ficam distribuídas mais uniformemente na tubulação e, conseqüentemente, a concentração de gás no fluxo com bolhas pequenas é menor.

2.5 *Sprays*

O processo de atomização (também chamado de nebulização) consiste basicamente em transformar uma fase contínua líquida em gotas pequenas. O jato líquido é desintegrado pela energia cinética da própria fase líquida, ou pelo contato com a fase gás em contra-corrente. As diversas origens do fenômeno de atomização faz com que na sua grande maioria resulte em um *spray* caracterizado por um amplo espectro de tamanhos de gotas. Este comportamento faz com que a caracterização da distribuição do diâmetro de gotas seja dificultado, o que se torna um obstáculo na determinação de uma metodologia completamente eficaz para tal representação.

A eficiência de um atomizador é influenciada pela sua própria geometria (detalhes internos, diâmetro de saída do *spray*) além das características da fase contínua. As

propriedades da fase líquida (massa específica, tensão superficial, viscosidade) também influenciam significativamente as características do tipo de distribuição de gotas obtido no *spray*.

No estudo apresentado por Hede *et al.* (2008), uma revisão bibliográfica sobre os trabalhos de maior relevância em *sprays* é apresentada. A ilustração apresentada na Figura 2.3 representa as diferentes “áreas molhadas” obtidas com os diferentes tipos de bicos *spray*. A Figura 2.3 (a) apresenta o *spray* do tipo cone oco, Figura 2.3 (b) o *spray* do tipo flat e Figura 2.3 (c) *spray* do tipo cone cheio. Para o presente estudo é empregado o *spray* do tipo cone cheio com um ângulo de 60°.

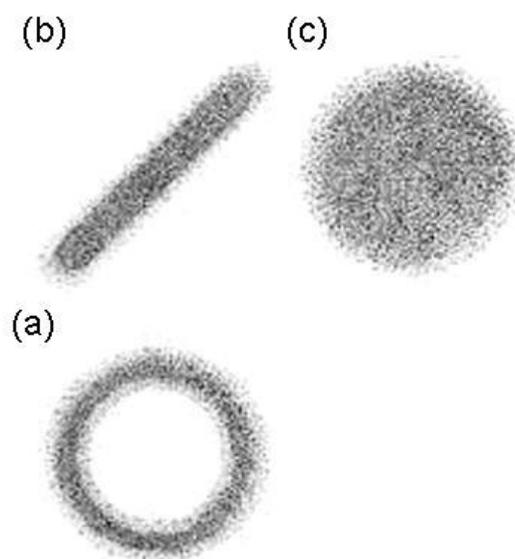


Figura 2.3: Exemplos de diferentes características de *spray*, (a) cone oco, (b) “flat” e (c) cone cheio (Hede *et al.*, 2008).

No trabalho desenvolvido por LEFEBVRE (1989), um amplo estudo sobre caracterização de *sprays* é apresentado. Descrevendo as propriedades dos líquidos que exercem maior influência sobre a distribuição do diâmetro de gotas, concluiu-se que a tensão superficial, é uma das variáveis de maior relevância. Conceitualmente, a tensão superficial pode ser entendida como a força de resistência à formação ou ampliação de uma nova área de contato entre duas ou mais fases. A energia mínima requerida para que ocorra a atomização é igual à própria tensão superficial multiplicada pelo aumento da área superficial do líquido. A

razão entre a razão da força inercial e a tensão superficial é representada pelo parâmetro adimensional conhecido como Número de Weber (We), que é empregado para correlacionar os valores obtidos para diâmetro de gotas.

A viscosidade consiste em uma das propriedades mais importantes dos líquidos. Apesar de a tensão superficial influenciar mais na atomização, esta propriedade também é fundamental para a descrição do fluxo desta fase e as tendências de escoamento das gotas geradas pelo *spray*.

2.5.1 Simulação de *sprays*

Para a representação matemática do escoamento bifásico gás-líquido são empregados basicamente dois tipos de abordagens: a Euleriana-Lagrangiana (E-L); e a Euleriana-Euleriana (E-E). Na abordagem E-L, aplicada neste estudo, o gás é considerado como uma fase contínua, enquanto o líquido é considerado uma fase descontínua. As fases interagem entre si por meio de forças de interação, como as de arraste. A fase contínua é modelada por equações clássicas de conservação baseadas na mecânica do contínuo, e as gotas (ou bolhas), como entidades individuais, tratadas pela mecânica clássica do corpo sólido, especificamente pela aplicação da 2ª Lei de Newton. Para a abordagem E-E, todas as fases são consideradas como fases contínuas, possuindo propriedades distintas na mesma localização do espaço-tempo, interagindo entre si e induzindo à interpenetrabilidade das fases (MEIER, 1998).

A simulação de *sprays* é um tema que tem chamado a atenção da comunidade científica em função da ampla gama de aplicações. Alguns dos primeiros trabalhos detalhados nessa área foram desenvolvidos por PIGFORD e PYLE (1951) e BOZORGI *et al.* (2006), nos quais foram realizados experimentos para determinar a influência de parâmetros como a razão de gás/líquido do sistema, distribuição de gotas, tipo do bico (*spray*) utilizado, formação de filme na parede, além dos diversos parâmetros de projetos envolvidos. O trabalho desenvolvido por Pigford e Pyle teve um caráter predominantemente experimental, segundo Bozorgi.

Colunas de destilação operando em condições de vácuo são equipamentos que usualmente possui grandes diâmetros. Portanto, existe um grande empenho no projeto otimizando tais equipamentos, o que inclui a opção de utilização de atomizadores (*sprays*). A

substituição de chicanas por *sprays*, conforme mencionado no item 2.2, mostra diversas facilidades, tais como o aumento da área de contato entre fases líquido/gás, além da redução de paradas do equipamento para manutenção.

Alguns fatores podem influenciar significativamente na região de vazios:

- redução do espaço entre os *sprays* e o leito;
- análise da escolha do tipo de *spray* empregado;
- estudo do arranjo para a distribuição dos *sprays*.

A formação de um filme na parede do equipamento é um fenômeno real, o qual vem sendo alvo de estudo de alguns pesquisadores. O trabalho desenvolvido por OLUIC (2001) apresenta o estudo experimental sobre *sprays* do tipo cone cheio com grande ângulo ($\cong 120^\circ$). Neste estudo, o pesquisador considera o diâmetro médio para as gotas variando entre 0,2 mm e 2 mm. Chama a atenção para o fato de grande quantidade do líquido se deslocar no sentido da parede, formando um filme que chega a conter 50% do líquido aspergido pelo *spray*.

Quantificar a massa de líquido na parede é extremamente difícil, por ser uma quantidade muito influenciada pelas condições de operação do sistema e do tipo de *spray* adotado. BOZORGI *et al.* (2006) também demonstram estudos experimentais em que em torno de 75% de líquido está na região próxima à parede do equipamento, nas condições experimentais realizadas. SHARMA e MEHTA (1970) fizeram seus estudos tendo como foco principal a transferência de massa em torres que dispõem de *spray*, Nestas pesquisas foram negligenciadas, no modelo, a formação do filme na parede do equipamento, mas ressaltaram a existência da formação deste.

A pesquisa desenvolvida por MICHALSKI (1997) empregou um modelo unidimensional para a estimativa do comportamento fluidodinâmico das gotas. Por este motivo não é possível considerar a formação do filme na parede.

A distribuição do diâmetro de gotas empregada neste trabalho foi fornecida pela empresa fabricante dos *sprays* utilizados na coluna analisada. A distribuição do diâmetro de

gotas é correlacionada através da capacidade e perda de carga do *spray*. Maiores detalhes sobre os valores da distribuição bem como do *spray* são apresentados no decorrer do trabalho.

2.6 Escolha da Abordagem Experimental - Numérica

Códigos de CFD têm sido empregados desde o ano de 1960 para a simulação de casos industriais, basicamente para casos unidimensionais (1D), e com sérias limitações no detalhamento matemático necessário para um bom resultado.

O desenvolvimento de uma nova geração de ferramentas computacionais e métodos numéricos, a partir da década passada, vem proporcionando maior nível de detalhamento fenomenológico na análise de casos de estudo, aumentando significativamente a qualidade das predições teóricas. Isto foi possível graças aos avanços computacionais.

MASON e LEVY (1998) compararam a utilização de um modelo unidimensional (1D) com um tridimensional (3D), simulando o escoamento gás-sólido em uma tubulação. Ambos os modelos resolveram as equações de conservação de massa, de momento e de energia. Observaram que o modelo 1D apresenta, como esperado, resultados mais rápidos em relação ao 3D, embora este apresente a vantagem de predizer problemas em algumas regiões para geometrias com curvas, tais como o desgaste em curvas, e na predição de escoamento estratificados, onde a velocidade de transporte é menor que o da suspensão. Para representação adequada da fluidodinâmica do sistema de estudo a modelagem 3D é fundamental.

MUDDE e SIMONIN (1999) simularam a injeção de bolhas no centro da base de uma geometria retangular, utilizando o código ASTRID. As simulações incluíram a turbulência com o modelo $k-\epsilon$ para as geometrias bidimensional (2D) e tridimensional (3D). Observaram que, para o caso 2D, uma solução estacionária é obtida enquanto para o caso 3D, o escoamento não atinge o regime estacionário, de tal maneira que o escoamento é inerentemente transiente. A viscosidade turbulenta observada para o caso 3D é menor do que o 2D; conseqüentemente a difusão da bolha é menor no caso 2D.

Em 2001, MUDDE e VAN DEN AKKER avaliaram a simulação de condições 2D e 3D em um reator *air lift*, considerando a condição de estado estacionário. Basearam-se no escoamento bifásico com o modelo de turbulência $k-\epsilon$. A geometria 3D apresentou uma

reprodutibilidade fenomenológica melhor das condições reais, comparada ao desempenho da geometria 2D.

NORILER (2003) observou a formação de pequenas zonas de recirculação ao simular o escoamento 3D transiente em um prato de destilação, o que não foi observado no modelo 2D.

O modelo matemático empregado ao longo desta tese consiste em uma abordagem Euleriana-Lagrangeana para o escoamento multifásico. Tal abordagem demonstra-se a mais indicada para aplicações em que a fração volumétrica da fase dispersa (fase líquida no caso) seja próxima ou inferior a 1% (FAETH, 1987). Ao comparar a modelagem Euleriana-Lagrangeana com a abordagem Euleriana-Euleriana, diversas vantagens podem ser ressaltadas. A Tabela 2.1 apresenta as vantagens da modelagem Lagrangeana comparativamente com a Euleriana.

Tabela 2.1: Vantagens da modelagem Lagrangeana para representação de *sprays*.

	Lagrangeana	Euleriana
Representação do diâmetro das gotas	Possibilidade de modelagem de uma ampla faixa de diâmetro de gotas	Solução de um sistema adicional de equações de conservação para cada diâmetro de gota simulado (aumento do tempo computacional)
Discretização geométrica	Definição de pontos de injeção representando a entrada da fase líquida nos <i>sprays</i>	Discretização da região de entrada de líquido, acarretando em malhas extremamente refinadas (aumento do tempo computacional)

Em contrapartida às vantagens apresentadas na Tabela 2.1 para o caso de estudo a que se propõe este trabalho, para uma aplicação onde fosse de interesse a representação da influência do detalhamento interno do *spray* uma abordagem E-E seria mais adequada. Outro caso seria, por exemplo a necessidade de reproduzir o fenômeno de cavitação no interior do *spray*.

2.7 A Técnica Numérica Empregada

Segundo GUNZBURGER e NICOLAIDES (1993), CFD consiste na análise de problemas, ou seja, situações físicas envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor, de massa, e fenômenos associados (como reações químicas), por meio de fontes computacionais de simulação numérica. Esta técnica é poderosa e abrange várias aplicações nas áreas industrial e educacional (Tabela 2.2).

Tabela 2.2: Exemplos de aplicações de CFD.

ÁREA DE APLICAÇÃO	EXEMPLOS
Automotiva	Aerodinâmica de veículos, escoamento através de válvulas, filtros e tanques.
Processos Industriais	Escoamento de plástico e vidro, matrizes de extrusão, transferência de calor e de massa em reatores químicos, operações unitárias (destilação, evaporação, filtração e secagem) e tratamento de águas e efluentes.
Biomédica e Farmacêutica	Escoamento de fluidos através de veias, artérias, próteses e cérebros.
Alimentícia	Processos de pasteurização e envase de líquidos.
Aeroespacial	Escoamento em torno de corpos submergidos, efeitos da ação (ou ausência) da gravidade, cabines de ventilação e tanques.

As técnicas de CFD apresentam grande utilidade na concepção de projetos novos e/ou otimizados, produzindo grandes volumes de resultados computacionais com baixos custos, se comparados com o caso da construção de um aparato experimental e execução de experimentos reais. Entre as vantagens da utilização da técnica de CFD como uma ferramenta aliada ao conhecimento técnico e científico, destacam-se:

- redução substancial de tempo computacional e custos, relativos à concepção de novos projetos;
- facilidade em estudar problemas onde os controladores experimentais são difíceis, impossíveis ou perigosas de se estabelecerem como, por exemplo, situações relacionadas a grandes escalas;
- nível ilimitado de detalhes dos resultados com as simulações para projeto;

O emprego de CFD têm crescido em torno de 30 a 40% ao ano na indústria brasileira (segundo dados da empresa ESSS do ano de 2007), especialmente na indústria de petróleo. Na maior empresa de refino de petróleo do Brasil, a PETROBRAS, as aplicações se iniciaram há cerca de duas décadas. As primeiras análises eram uni ou bidimensionais, em regime estacionário, monofásicas e em geometria retangular (DAMIAN, 2007). Com avanço computacional, iniciaram-se as análises em regime turbulento, transiente e em geometrias complexas. Atualmente têm sido simulados vários equipamentos acoplados, incluindo fenomenologia complexa em um número de aplicações cada vez maior.

CAPÍTULO 3

MODELAGEM MATEMÁTICA

Um modelo matemático não é a representação fiel da realidade concreta do fenômeno, mas apenas uma tentativa de representá-la adequadamente num campo abstrato da realidade matemática. Assim, tanto melhor será o modelo quanto mais adequadamente ele descrever a realidade, com a simbologia, regras de “sintaxe”, propriedades e definições típicas da matemática (MEIER, 1998).

O objetivo principal desse capítulo é apresentar a modelagem matemática proposta para a representação das equações que governam o escoamento multifásico, tridimensional e turbulento, associados à fluidodinâmica de uma seção de uma coluna de destilação a vácuo equipada com distribuidor do tipo *spray*.

3.1 Modelagem Matemática da Fase Contínua

O modelo matemático dos fenômenos de transporte são aqueles que utilizam os princípios físico-químicos regidos por leis de conservação de massa, de energia e momento, ou seja:

- conservação de massa (Lei de Lavoisier) \equiv “Na natureza nada se perde, nada se cria, tudo se transforma”;
- conservação de energia (1a Lei da Termodinâmica) \equiv “A variação na energia de um sistema é igual ao calor fornecido ao sistema, menos o trabalho realizado pelo sistema”;
- conservação de momento (2ª Lei do Movimento de Newton) \equiv “O somatório das forças atuantes sobre o sistema é igual a variação do momento”.

Para um caso CFD, o modelo matemático pode ser considerado fechado, ou seja, passível de solução matemática, se estiver composto por todas as equações de conservação relevantes, com todas as informações experimentais ou constitutivas, e por todas as condições iniciais e de contorno que descrevem o fenômeno a ser estudado.

As equações de conservação e as condições de contorno tradicionais aplicadas em simulações CFD, para escoamentos monofásicos, podem ser encontradas em diversas publicações clássicas, como BIRD (2002), MALISKA (2004).

Aplicando estas leis de conservação ao escoamentos multifásicos e multicomponentes (as fases são misturas de diversas substanciais), para uma abordagem Lagrangeana-Euleriana em um sistema Gás-Líquido, onde a fase contínua é a gasosa, que escoar no sentido ascendente, e a fase dispersa é a líquida, que escoar no sentido descendente chega-se a seguinte descrição matemática (BIRD, 2002):

Equação da conservação de massa total (equação da continuidade)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_c) + \nabla \cdot (\rho_c \mathbf{v}_c) = \sum_{D \neq C}^{N_p} \Gamma_{CD} \quad (3.1)$$

onde

$\Gamma_{CD} \equiv$ é a taxa líquida de transferência de massa entre as fases contínua e dispersa por unidade de volume.

C e D \equiv representam as fases contínua e dispersa respectivamente.

Equação da conservação de momento (equação do *momentum*)

$$\frac{\partial(\rho_c \mathbf{v}_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_c \mathbf{v}_c \mathbf{v}_c) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{M}_c + \rho_c \mathbf{g} \quad (3.2)$$

em que \mathbf{M}_c representa as forças interfaciais presentes sobre a fase contínua devido à presença de outras fases e \mathbf{T} é o tensor tensão que, para um fluido newtoniano, pode ser expresso pela equação de Stokes:

$$\mathbf{T} = \mu_c \left[\nabla \mathbf{v}_c + (\nabla \mathbf{v}_c)^T \right] \quad (3.3)$$

onde μ_c é a viscosidade dinâmica.

Equação de conservação do componente i na fase contínua

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_c y_{iC}) + \nabla \cdot (\mathbf{v}_c y_{iC}) - \nabla \cdot (\rho_c D_{iC} (\nabla y_{iC})) = \Gamma_{i,mC} \quad (3.4)$$

$\rho_c D_{iC} \equiv$ coeficiente de difusão molecular;

$D_{iC} \equiv$ difusividade cinemática.

$\Gamma_{i,mC} \equiv$ é o termo fonte (Ex.: - transferência entre fases, reações químicas)

Equação da energia

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_c h_c) + \nabla \cdot (\rho_c \mathbf{v}_c h_c) - \nabla \cdot (\lambda_c \nabla T_c) = \sum_{i=1}^{N_{\text{comp}}} \Gamma_{i,mC} h_c + Q_c + S_c \quad (3.5)$$

onde:

$h_c \equiv$ entalpia sensível da fase contínua

$T_c \equiv$ temperatura da fase contínua

$\lambda_c \equiv$ condutividade térmica

$S_c \equiv$ representa fontes externas de calor

$Q_c \equiv$ representa a transferência de calor da fase “c” através da interface com outras fases

$\Gamma_{i,mC} \equiv$ representa a transferência de calor induzida pela transferência de massa

3.1.1 Turbulência

As equações de conservação médias temporais podem ser usadas como uma aproximação para representar tanto o escoamento em regime laminar quanto o escoamento em regime turbulento, em virtude deste último ser de natureza instantânea (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). Entretanto, não é comum, para propósitos de cálculos de engenharia, resolver tais equações na forma direta, pelo fato da necessidade de escalas temporal e espaciais muito pequenas para caracterizar o escoamento instantâneo. Isto conduz a um esforço computacional atualmente indisponível, exceto para escoamentos em baixo número de Reynolds. Devido a isto, introduz-se os conceitos das médias temporais e o da decomposição de Reynolds.

A média temporal de uma propriedade qualquer é definida como¹:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi dt \quad (3.6)$$

em que Δt é uma diferença de tempo grande em relação às flutuações turbulentas, e pequeno em relação ao tempo em que se almeja avaliar. Separando-se em termos das flutuações, têm-se:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.7)$$

sendo ϕ uma variável fluidodinâmica instantânea, $\bar{\phi}$ a sua média temporal, e ϕ' a flutuação de ϕ (isto é, a diferença entre a média e seu valor instantâneo).

Introduzindo este conceito nas equações de transporte, e aplicando o procedimento conhecido como decomposição de Reynolds, obtém-se as equações médias temporais para as propriedades envolvidas (massa, velocidade e pressão):

- Equação média-temporal da continuidade,

¹ Todas variáveis serão consideradas como variáveis médias-temporais sem a notação ($\bar{\quad}$), por questões de conveniência.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho_c}) + \nabla \cdot (\overline{\rho_c \mathbf{v}_c}) = \sum_{D=1}^{N_p} \Gamma_{CD} \quad (3.8)$$

- Equação média-temporal de energia

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho_c h_c}) + \nabla \cdot (\overline{\rho_c \mathbf{v}_c h_c}) - \nabla \cdot (\lambda_c \nabla T_c) = \sum_{i=1}^{N_{comp}} \Gamma_{i,mC} h_c + Q_c + S_c \quad (3.9)$$

- Equação média-temporal do *momentum*,

$$\frac{\partial(\overline{\rho_c \mathbf{v}_c})}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho_c \mathbf{v}_c \mathbf{v}_c}) = \nabla \cdot (\overline{\mathbf{T}} + \overline{\mathbf{T}}^t - \overline{\rho \mathbf{v}'_c \mathbf{v}'_c}) - \nabla p + \mathbf{M}_c \quad (3.10)$$

O termo da Equação (3.9), $\overline{\rho \mathbf{v}'_c \mathbf{v}'_c}$ refere-se à média temporal do produto diádico da flutuação da velocidade e é chamado de tensor de Reynolds ou tensor turbulento. E é justamente este novo termo na equação do momentum que é responsável pela “mistura” de momentum em escoamentos turbulentos, ou seja, responsável pela dissipação de energia..

Dificuldades aparecem quando da caracterização do tensor de Reynolds em termos das propriedades médias temporais. Este problema é conhecido como problema de fechamento da turbulência (*turbulence closure*) e ainda é considerado “em aberto” na Física contemporânea. Este fechamento se dá pela utilização dos chamados modelos de turbulência.

Para o estudo da troca de calor e massa na coluna de destilação de interesse serão avaliados, para representação da fase contínua, dois modelos de turbulência, o modelo clássico de turbulência k-ε (WILCOX, 2000) e o modelo SST (MENTER, 2003).

3.1.2 Equações constitutivas

Para o cálculo de momento pode-se dizer que a força total exercida na interface (forças inerciais) entre as fases, pode ser escrita da seguinte forma

$$\sum_{D \neq C}^{N_p} \mathbf{F}_{CD} = \mathbf{F}_{CD} \quad \text{e} \quad \mathbf{F}_{CD} = -\mathbf{F}_{DC} \quad (3.11)$$

Alguns dos efeitos que podem criar forças de interface, em que;

$$\mathbf{F}_{CD} = \mathbf{F}_{CD}^D + \mathbf{F}_{CD}^L + \mathbf{F}_{CD}^{LUB} + \mathbf{F}_{CD}^{VM} + \mathbf{F}_{CD}^{TD} \quad (3.12)$$

onde:

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

$\mathbf{F}_{CD}^L \equiv$ força *lift*;

$\mathbf{F}_{CD}^{LUB} \equiv$ *wall lubrication force*;

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

$\mathbf{F}_{CD}^{TD} \equiv$ força de dissipação turbulenta.

Neste trabalho é discutido apenas a força de arraste, por esta ser a de maior relevância para a aplicação que esse estudo se propõe.

A força de arraste é a força exercida pelo fluido sobre um corpo imerso:

$$\mathbf{F}_{CD}^D = \beta_{CD} (\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D) \quad (3.13)$$

Como $\beta_{CC} = 0$ e $\beta_{CD} = \beta_{DC}$

Como já discutido na literatura em trabalhos como o de GIDASPOW (1994), o arraste sofrido por uma partícula escoando em uma fase contínua pode ser dado por:

$$\mathbf{F}_P = \frac{1}{2} C_D \rho_C A_P |\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C| (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \quad (3.14)$$

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

$$\mathbf{F}_{CD}^D = n_p \mathbf{F}_P \quad (3.15)$$

onde:

$A_p \equiv$ área projetada por uma única partícula, na direção do escoamento;

$n_p \equiv$ número de partículas ou gotas por unidade de volume;

$C_D \equiv$ coeficiente de arraste na interface.

Para o estudo da transferência de calor e massa na seção de vácuo foi utilizado o coeficiente de arraste de Shiller Naumann. Este coeficiente é aplicável para gotas que podem ser consideradas como esféricas.

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,687}) \quad (3.16)$$

Para a equação de energia o tratamento para a transferência de calor entre uma fase contínua e dispersa pode ser escrito da seguinte forma, a partir do Número de Nusselt na interface (BIRD, 2002) para o regime turbulento.

$$Nu = 2 + 0,6 Re^{0,5} Pr^{0,3} \quad (3.17)$$

onde:

$Pr \equiv$ Número de Prandtl.

Sendo que o Número de Nusselt, para a interface entre as fases pode ser definido da seguinte forma (INCROPERA, 2006)

$$Nu = \frac{h_{CD} d_p}{\lambda_{CD}} \quad (3.18 (a))$$

3.2 Modelagem Matemática da Fase Dispersa

Para a representação efetiva de um sistema envolvendo *sprays* adotou-se a abordagem Lagrangeana para a modelagem da fase dispersa que, neste caso é a fase líquida. Esta abordagem se apresenta como a mais adequada para a discretização dos pontos de injeção das gotas, conforme justificado no Capítulo 2 – Fundamentação Teórica.

A literatura apresenta uma grande diversidade de trabalhos de simulação de funcionamento de *sprays*, destacando-se o trabalho de alguns pesquisadores como MUGELE (1951). Em sua pesquisa, MUGELE (1951) ressalta a importância do conhecimento do diâmetro de gotas, como uma condição do sistema em estudo, sendo pré-requisito para uma análise fundamental dos fenômenos de transferência de massa e de calor. A distribuição dos diâmetros de gota em uma coluna de fracionamento determina, por exemplo, a taxa de transferência de calor e massa entre as fases. Diferentes metodologias são discutidas para a determinação dos diâmetros de gota para as mais diversas substâncias, além de propor uma expressão para a determinação destes diâmetros com bons resultados. Contudo, para a aplicação da metodologia proposta por Mugele para a determinação do diâmetro de gota, muitas vezes, nem todos os parâmetros necessários são conhecidos.

A aplicação de um modelo Euleriano-Euleriano para análise simultânea da transferência de calor e massa no projeto de colunas com *sprays* foi proposto por MEYER (1995). Do ponto de vista macroscópico o modelo inclui a presença da fase contínua (gás), o bico *spray* e a dispersão de gotas além da consideração da formação de um filme na parede do equipamento. Do ponto de vista microscópico, foram consideradas as transferências simultâneas de calor e massa. Os resultados obtidos com o modelo foram comparados com dados experimentais obtidos em uma planta piloto, com boa concordância. O pesquisador utilizou o diâmetro médio de Sauter para caracterização do diâmetro médio das gotas adotado para o estudo. Embora as considerações do estudo possam parecer razoáveis, poucos detalhes foram apresentados no trabalho, como por exemplo, as condições detalhadas de processo em que os dados experimentais foram obtidos. As características do distribuidor com 41 bicos do tipo *spray*, fazem com que o uso de uma abordagem Euleriana-Euleriana para discretização dos bicos seja inviável, considerando os recursos computacionais atuais.

TROMPIZ (2000) apresenta uma metodologia para determinação do diâmetro inicial da gota em função do número de Weber (We), do número de Reynolds (Re) e do diâmetro do orifício do *spray*. Entretanto variáveis importantes para a estimativa do diâmetro de gota, como a tensão superficial do fluido, são desconsideradas.

BECK (2003) considera uma abordagem Euleriana-Eulerina, apresentando uma metodologia desenvolvida pelo próprio autor para a representação das gotas formadas por um *spray* como uma função de distribuição de gotas. O autor propõe um sub-modelo para a representação do arraste, da quebra e colisão das gotas através de equações de transferência de calor e massa. Além das dificuldades encontradas para a discretização do *spray*, a metodologia proposta apresenta a dificuldade de necessitar de uma série de parâmetros iniciais para a representação do fenômeno de interesse.

KIM (2003) considera uma abordagem Euleriana-Lagrangeana para o estudo da evaporação de uma única gota. A metodologia empregada é semelhante à apresentada no presente trabalho, entretanto a aplicação do modelo desenvolvido pelo autor KIM (2003) considera apenas o fenômeno da evaporação e uma única gota. Considerações como a condensação e a variação do diâmetro de gota foram desprezadas.

Assim como KIM (2003), BOZORGI (2006) considera uma abordagem Euleriana-Lagrangeana para o estudo da evaporação de gotas. Entretanto uma forte consideração foi adotada para representar a variação do diâmetro de gota em virtude do fenômeno de evaporação ter sido desconsiderado.

Os trabalhos desenvolvidos pelos pesquisadores, MUGELE (1951), MEYER (1995), TROMPIZ (2000), BECK (2003), KIM (2003) e BOZORGI (2006), não exploraram o nível de complexidade e detalhamento propostos nessa tese. Esta pesquisa contempla o desenvolvimento científico diretamente relacionado com a inovação tecnológica de engenharia para a modelagem de dispositivos tipo *spray* envolvendo os fenômenos de transferência de calor e massa simultâneos para distribuidores do tipo *spray*.

A partir da representação apresentada no *software* ANSYS CFX (2007) para a fase dispersa usando a abordagem lagrangeana, se propõe para a representação da condensação e da evaporação de gotas (considerando a gota como uma esfera rígida), a seguinte equação para a representação do fluxo de massa existente na fase dispersa:

$$\frac{dm_D}{dt} = \Gamma_{i,mC} = -\pi d_p \rho D Sh (w_L K_e - w_v) \quad (3.19)$$

O código multifásico lagrangeano do *software* comercial ANSYS CFX-11.0 para a modelagem de transferência de massa entre fases considera somente a evaporação da fase líquida discreta. Assim, foi desenvolvido um código especial e Fortran, a fim de prever a possibilidade de condensação da fase contínua também. O termo fonte que prevê a transferência de massa nas equações de conservação na Equação (3.19) não é alterado, apenas passa a ser permitido que tenha tanto sinal positivo (condensação) quando sinal negativo (evaporação). O equilíbrio de fases na interface limita a transferência de massa (ANSYS CFX, 2007), já que, para o modelo empregado, não são consideradas variações de composição no interior da gota. Quando o equilíbrio for atingido, a troca de massa cessará.

Conforme a Eq. (3.19), o fluxo de massa pode ser representado da seguinte maneira:

$$\dot{m} = -\pi d_p \rho D \text{Sh} (w_L K_e - w_v) \quad (3.20)$$

onde:

$d_p \equiv$ diâmetro da fase dispersa (gota)

$D \equiv$ difusividade cinemática

$\text{Sh} \equiv$ número de Sherwood

$w_L \equiv$ fração mássica da fase dispersa

$w_v \equiv$ fração mássica da fase contínua

$K_e \equiv$ constante de equilíbrio

O número de Sherwood é função do número de Reynolds e Schmidt, representado nesta pesquisa, da seguinte maneira, ANSYS CFX (2007):

$$\text{Sh} = \frac{h_m d_p}{D} = 2 + 0,6 \left(\text{Re}^{0,5} S_c^{1/3} \right) \quad (3.21)$$

onde:

$D \equiv$ difusividade cinemática

Sh \equiv número de Sherwood

hm \equiv coef. de transferência de massa

O número de Schmidt é a razão entre a difusividade de momento (viscosidade dinâmica) e a difusividade mássica:

$$S_c = \frac{\mu}{\rho D} \quad (3.22)$$

3.2.1 Equilíbrio líquido-vapor (ELV)

A condição de ELV (VAN NESS, 2000) para misturas de hidrocarbonetos pode ser definida de diversas maneiras. Dependendo da abordagem adotada na definição da fugacidade de cada fase, pode-se chegar a diferentes definições para o cálculo da constante de equilíbrio.

As representações para a fugacidade podem ser feitas da seguinte maneira:

- formulação simétrica: quando se utiliza a mesma definição de fugacidade nas duas fases (gama-gama, fi-fi);
- formulação assimétrica: quando se utiliza definições distintas entre as fases (fi-gama, gama-fi).

As abordagens destacadas recebem muita atenção na literatura, sendo base para a maioria dos modelos de ELV encontrados nos simuladores de processo comerciais consagrados e validados. Podem ser citados, por exemplo, os *softwares* PRO-II da Invensys e o HYSYS desenvolvido pela Hyprotech.

Para o cálculo da ELV deste trabalho optou-se pela abordagem “gama-fi”. Nesta abordagem, uma equação de estado, através do coeficiente de fugacidade, é usada para prever o comportamento e as não-idealidades da fase vapor, enquanto um modelo de energia livre de Gibbs em excesso, através do coeficiente de atividade, é usado para prever o comportamento e as não idealidades da fase líquida (AZNAR, 2002). Esta é uma abordagem tradicional, que pode ser aplicada a uma ampla variedade de misturas, e é adequada para sistemas sob pressões baixas ou moderadas, como o caso da coluna a vácuo em questão.

Entretanto, este modelo não é aplicável a sistemas a pressões altas. Esta limitação deve-se aos modelos de energia livre de Gibbs em excesso, que são determinados em condições de baixas pressões. Além disto a abordagem “gama-fi” é uma das mais usadas na indústria de petróleo. A abordagem empregada se baseou nas correlações generalizadas para o cálculo da constante de equilíbrio (K_e) propostas por CHAO e SEADER (1961) e GRAYSON e STREED (1963).

Foi utilizada a abordagem baseada na lei de Raoult (VAN NESS, 2000), já que foi possível considerar tanto o vapor quanto o líquido como fluidos ideais (BEJAM, 1988).

3.2.2 ELV para fluidos ideais – Lei de Raoult

A consideração do equilíbrio ideal pode ser aplicada para sistemas onde existe o comportamento próximo da idealidade nas fases em equilíbrio. Em uma solução ideal, a temperatura e pressão constante, a fugacidade de cada componente é proporcional à fração molar do componente. Considerando um componente “i” qualquer, a seguinte relação fundamental para o equilíbrio termodinâmico pode ser aplicada, PRO-II (2002):

$$f_i^L = f_i^V \quad (3.23)$$

onde L indica a fase líquida, V indica a fase vapor e f_i representa a fugacidade do componente i.

Para a fase vapor, se ideal, a fugacidade é considerada como sendo igual a pressão parcial:

$$f_i^V = y_i p \quad (3.24)$$

onde y_i é a fração molar do componente i na fase vapor e p é a pressão do sistema.

Para a fase líquida, se ideal:

$$f_i^L = x_i p_i^{\text{sat}} \quad (3.25)$$

onde x_i é fração molar do componente i na fase líquida e p_i^{sat} é pressão de saturação do componente i na temperatura do sistema.

Substituindo as Eq (3.24) e (3.25) na Eq. (3.23), obtém-se a lei de Raoult, descrevendo o ELV da seguinte forma:

$$y_i p = x_i p_i^{\text{sat}} \quad (3.26)$$

A constante de equilíbrio para um sistema ideal, pode ser representada da seguinte forma:

$$K_e = \frac{y_i}{x_i} = \frac{p_i^{\text{sat}}}{p} \quad (3.27)$$

A pressão de saturação é obtida a partir da equação de Antoine generalizada, Eq. (3.28) (PRO-II, 2002), na qual a temperatura deve ser usada em Rankine e a pressão é dada em psi

$$\ln(p_{\text{vap}}) = A + \frac{B}{T + C} \quad (3.28)$$

$$A = \ln(14,696) - \frac{B}{T_b + C} \quad (3.29a)$$

$$B = \frac{\ln(P_c) - \ln(14,696)}{\frac{1}{T_c + C} - \frac{1}{T_b + C}} \quad (3.30b)$$

$$C = -80 \quad (3.31c)$$

Conforme se observa nas equações anteriores, a constante de equilíbrio é função da temperatura e pressão locais.

Esta abordagem geralmente pode ser empregada quando a solução é composta de espécies químicas análogas e de peso molecular próximo.

3.2.3 Regras de mistura

As regras de mistura utilizadas na etapa anterior principalmente, para as propriedades de transporte. Apresentam-se na Tabela 3.1, as regras de mistura utilizadas pelo *software* PRO-II:

Tabela 3.1: Regras de mistura para as propriedades de transporte

<i>Propriedade</i>	<i>Regra de mistura</i>
Condutividade Térmica do vapor	$\lambda_m = \frac{\sum_i Y_i \lambda_i PM_i^{1/3}}{\sum_i Y_i PM_i^{1/3}} \quad (3.32)$
Viscosidade do vapor	$\mu_m = \frac{\sum_i Y_i \mu_i PM_i^{1/2}}{\sum_i Y_i PM_i^{1/2}} \quad (3.33)$
Condutividade Térmica do líquido	$\lambda_m = \left(\sum_i w_i \lambda_i^{-2} \right)^{-1/2} \quad (3.34)$
Viscosidade do líquido	$\mu_m = \left(\sum_i Y_i \mu_i^{1/3} \right)^3 \quad (3.35)$

3.3 Correção do diâmetro de gota

Os valores obtidos para diâmetro de gota foram fornecidos pelo fabricante de *sprays* BETE Fog Nozzle, obtidos para a água. Os resultados foram comparados considerando a influência da variação de diâmetro de gota a partir da correlação proposta por MUGELE (documento interno da Petrobras) para o diâmetro de gota. A Equação (3.36) apresenta a correlação proposta por MUGELE. Para a correção do diâmetro de gota, a Equação (3.36) apresenta as variáveis relevantes segundo esta correlação.

$$\frac{d_{\text{óleo}}}{d_{\text{água}}} = \left(\frac{\sigma_{\text{óleo}}}{\sigma_{\text{água}}} \right)^{0,5} \left(\frac{\mu_{\text{óleo}}}{\mu_{\text{água}}} \right)^{0,2} \left(\frac{\rho_{\text{água}}}{\rho_{\text{óleo}}} \right)^{0,3} \quad (3.36)$$

As variáveis σ , μ e ρ representam a tensão superficial, a viscosidade dinâmica e a massa específica dos fluidos óleo e água. Um aspecto interessante desta equação está no fato de considerar as principais propriedades mencionadas por MUGELE (1951) como sendo as mais relevantes na determinação do diâmetro da gota.

3.4 Compreendendo a Fluidodinâmica do Escoamento

O estudo do comportamento fluidodinâmico é fundamental para prever o transporte da fase dispersa pela fase contínua. Para tal é necessária a compreensão do acoplamento entre as fases e a turbulência envolvida, responsável pela interação entre as fases. A Figura 3.1, proposta por ELGHOBASHI (1994) apresenta um mapa com a classificação dos regimes de interação entre as gotas e a turbulência da fase contínua.

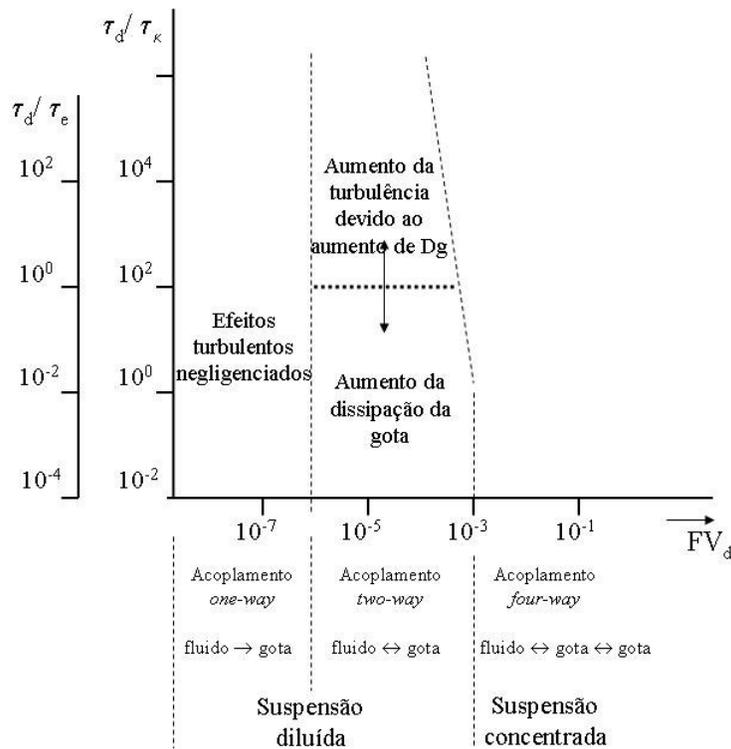


Figura 3.1: Mapa de regimes de interação entre gotas e a turbulência. (ELGHOBASHI, 1994).

onde:

$FV_d \equiv$ Fração Volumétrica da fase dispersa;

$D_p \equiv$ Diâmetro da gota;

$\tau_d \equiv$ tempo característico de resposta hidrodinâmica das gotas ou tempo de relaxação das gotas;

$\tau_\kappa \equiv$ Escala dissipativa de Kolmogorov;

$\tau_e \equiv$ tempo de duração dos grandes vórtices (*large eddy*)

O tempo de resposta da gota pode ser representado da seguinte forma (ELGOBASHI, 1994):

$$\tau_d = \frac{4D_p \rho_d}{3\rho_c C_D |V_{slip}|} \quad (3.37)$$

$$|V_{slip}| = \sqrt{(u_d - u_c)^2} \quad (3.38)$$

A escala dissipativa de Kolmogorov (ELGOBASHI, 1994) e o tempo de duração médio das menores escalas dissipativas podem ser representados, respectivamente, da seguinte forma:

$$\tau_\kappa = \left(\frac{\nu_c}{\epsilon} \right)^{0,5} \quad (3.39)$$

$$\tau_e = \frac{\sqrt{k^3}}{\epsilon^2} = \frac{l}{u} \quad (3.40)$$

onde:

$\nu_c \equiv$ viscosidade cinemática da fase contínua;

$l \equiv$ comprimento de escala de energia que contém os vórtices (*eddies*);

$u \equiv$ velocidade do fluido.

Para baixos valores da fração volumétrica da fase dispersa ($FV_d = 10^{-6}$) a turbulência da fase dispersa não exerce influências sobre a fase contínua, ou seja a transferência de momentum das gotas para a fase contínua é desprezível para o escoamento. Este tipo de interação entre as fases pode ser caracterizada pelo termo de acoplamento do tipo uma via (*one-way*).

Para o segundo regime, $10^{-6} < FV_d \leq 10^{-3}$, a transferência de momento das gotas é suficiente para alterar as estruturas turbulentas, sendo necessário usar um acoplamento do tipo duas vias (*two-way*). Neste regime e para um dado valor de FV_d os baixos valores de τ_d (menores valores para o diâmetro da gota considerando as mesmas propriedades da gota e a mesma viscosidade do fluido) aumentam a área superficial da gota e, conseqüentemente, o aumento da taxa de dissipação turbulenta. Por outro lado, com o aumento de τ_d para um mesmo valor de FV_d o número de Reynolds da gota e para valores de Reynolds superiores a 400 indicam a presença de regiões com altos valores de energia turbulenta. A coordenada τ_d/τ_e está relacionada com a coordenada τ_d/τ_k através do número de Reynolds turbulento sendo que $(\tau_e/\tau_k) = Re^{0.5}$. Deste modo a coordenada mostrada no gráfico é para a região de $Re = 10^4$. Escoamentos delimitados nesta faixa são denominados de escoamentos diluídos.

O terceiro regime de escoamento, em virtude da grande quantidade de gotas $FV_d > 10^{-3}$, são chamados de escoamentos densos e, para este tipo de regime, as colisões entre as gotas também se tornam importantes, caracterizando um acoplamento do tipo quatro vias (*four-way*).

O comportamento de gotas/partículas em escoamentos turbulentos caracterizados pelo acoplamento *one-way* é razoavelmente bem entendido, pelo menos para escoamentos livres e homogêneos. Escoamentos considerando o acoplamento *two-way* e *four-way* ainda apresentam desafios para a completa compreensão dos fenômenos envolvidos devida à própria complexidade dos fenômenos envolvidos na interação entre a fase dispersa e a fase contínua. Para o desenvolvimento deste trabalho científico, considerando as características fenomenológicas do sistema de interesse, foi empregado o acoplamento *two-way*, considerando as propriedades e características do regime estudado se encaixarem neste tipo de acoplamento, segundo a descrição apresentada por PEIRANO (1998) e CROWE (1998).

Além das equações anteriormente descritas para a representação do acoplamento entre as fases, o trabalho desenvolvido por PEIRANO (1998) apresenta o detalhamento de outras escalas de tempo fundamentais para a classificação e compreensão do mecanismo dominante em suspensões. Para análise do campo turbulento do vapor a escala integral Euleriana de turbulência do fluido (τ_c) do modelo k- ϵ pode ser representada segundo a Equação (3.41). A relação existente entre a energia cinética turbulenta (k) e a taxa de dissipação de energia turbulenta (ϵ) determinam o comportamento de τ_c representando o tempo de duração média das grandes escalas de turbulência modelada pelo k- ϵ .

$$\tau_c = 0,09 \frac{k}{\epsilon} \quad (3.41)$$

Para estudo das propriedades do escoamento tratando-se da gota o tempo de relaxação da gota τ_d , (representando o tempo de resposta da gota ao escoamento) pode ser descrito segundo a Equação **Error! Reference source not found.**, sendo que, altos valores para o tempo de relaxação da gota indicam grande inércia da gota (o comportamento da gota não é afetado pelo gás); outra maneira de análise para o τ_d é através do C_D , onde altos valores indicarão que as fases contínua e dispersa estão completamente “misturadas” ou seja, se movimentando juntas.

A correlação turbulenta gota-vapor (τ_{dc}) representa o tempo de duração das grandes escalas dos turbilhões “vistas” pelas gotas (tendo as gotas como referencial), esta é a escala integral de tempo Lagrangiana, Equação (3.42).

$$\tau_{dc} = \frac{\tau_c}{\left(1 + C_\beta \frac{3}{2} \frac{|V_{slip}|^2}{k}\right)^{0,5}} \quad (3.42)$$

Onde : $C_\beta = 0,45$.

A partir da definição do tempo de relaxação da gota (τ_d) e a escala dissipativa de Kolmogorov (τ_κ), chega-se à definição de Stokes na escala de Kolmogorov (St_κ).

$$St_{\kappa} = \frac{\text{tempo de relaxação da gota}}{\text{dissipação de Kolmogorov}} = \frac{t_d}{t_{\kappa}} \quad (3.43)$$

Pode-se resumir da seguinte forma os valores obtidos para Stokes:

Stokes $\rightarrow 0$: gota se comporta como o fluido, acompanhando a turbulência;

Stokes $\rightarrow \infty$: A velocidade da gota não é afetada pelo fluido;

Stokes = 1: correlação entre as gotas, concentração preferencial e risco de coalescência.

3.5 Representação dos Pseudocomponentes

O petróleo possui inúmeros componentes, e a caracterização de todos os componentes em uma simulação seria atualmente inviável. Para as simulações se considerou o petróleo em pseudocomponentes *lumps*. Isso significa dizer que os compostos existentes no petróleo são divididos em grupos que são representados por uma espécie de “componente médio”, de tal maneira que poucas “pseudo-substâncias” podem representar razoavelmente bem as propriedades de uma mistura bastante complexa. A seção da coluna que é o alvo de estudo desta pesquisa, por se tratar da seção de gásóleo leve, pode ser caracterizada com um único pseudocomponente além da presença de água e ar no sistema.

O modelo empregado adota a hipótese da existência de um componente de restrição, ou seja, serve como “fechamento” no cálculo das frações mássicas de cada fase. A Figura 3.2 ilustra as frações dos componentes utilizados no estudo. A definição desta condição de restrição é imposta pelo *software* comercial utilizado para a caracterização das fases envolvidas. Neste trabalho foi estudada a possibilidade de se considera duas condições de simulação: a primeira, onde pseudocomponente e água trocam massa e energia e, sendo assim, o ar passa a ser o componente inerte; e a segunda, em que apenas o pseudocomponente trocaria calor e massa e a água passaria a trocar apenas calor com o sistema tendo a função de inerte. As propriedades dos componentes utilizados para as simulações são apresentados na Tabela 3.2.

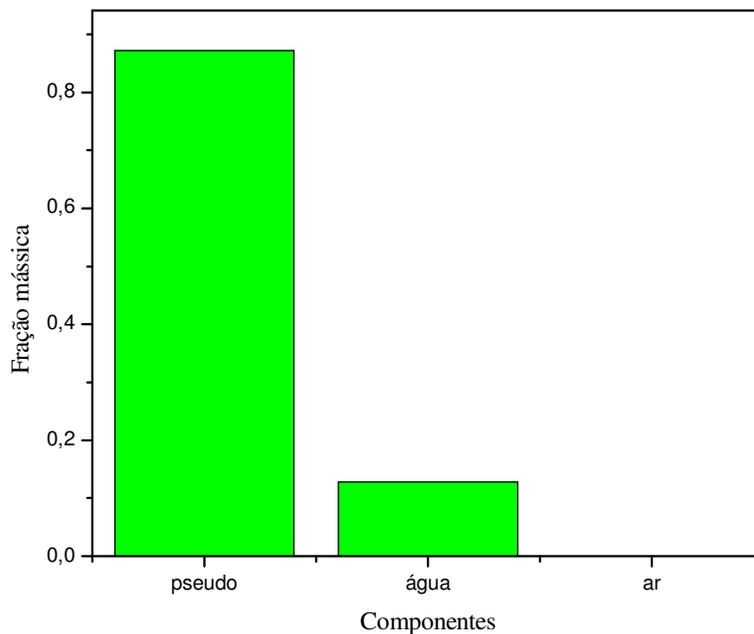


Figura 3.2: Fração mássica dos componentes presentes na seção de GOL.

Tabela 3.2: Propriedades dos componentes.

	Ar	Água	Pseudocomponente
PM [kg/kgmol]	—	18,020	252,192
ρ [kg/m ³]	—	997,000	859,526
T _b [K]	77,350	373,150	591,605
T _C [K]	126,200	647,130	775,590
P _C [Pa]	3,398.10 ⁶	22,055.10 ⁶	1,600.10 ⁶
V _C [m ³ /gmol]	9,010.10 ⁻⁵	55,900.10 ⁻⁶	926,250.10 ⁻⁶
Fator acêntrico	0,0037	0,3446	0,6814

Para fins de validação, os resultados das simulações serão comparados com os resultados experimentais globais, considerando as propriedades da corrente de vapor e de líquido. A Tabela 3.3 apresenta as condições iniciais que servirão de base para comparação com os resultados obtidos com as simulações de CFD.

Tabela 3.3: Condições iniciais para o modelo.

	Vapor	Líquido
Temperatura (°C)	204	47
Fração Mássica	0,872	1

Para avaliar a velocidade na entrada do equipamento a literatura comumente correlaciona esta velocidade com o C-factor, Equação (3.44).

$$C - \text{factor} = v_s \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L - \rho_v}} \quad (3.44)$$

onde:

v_s ≡ velocidade superficial do gás, baseada na seção transversal do equipamento;

ρ_v ≡ massa específica do vapor;

ρ_L ≡ massa específica do líquido.

Projetos de torres a vácuo são normalmente feitos considerando a velocidade uniforme do vapor ascendente. Trabalhos usando o C-factor são apresentados na literatura para avaliar as características de velocidade ascendente em torres a vácuo, tais como os discutidos por WILLIAMSON (2000) e por HANSON (1999). Segundo HANSON *et al.* (1999), valores entre 0,05 até 0,65 ft/s são indicados como os limites para a entrada do equipamento. Velocidades de entrada em torno de 0,15 ft/s são consideradas baixas, sendo utilizadas apenas em projetos de novos equipamentos onde uma futura alteração na carga do equipamento pode vir a ocorrer. Por outro lado valores de 0,65 ft/s são considerados muito altos. Ainda segundo os autores, os valores adequados para a entrada do equipamento são entre 0,30 e 0,35 ft/s.

CAPÍTULO 4

MÉTODOS NUMÉRICOS E O CÓDIGO DE CFD

Os métodos numéricos associados aos avanços tecnológicos têm se tornado cada vez mais ferramentas imprescindíveis no desenvolvimento das mais variadas áreas da atividade científica, permitindo a solução de modelos que prevêm o comportamento e propiciam otimizações de processos.

Pacotes computacionais têm feito largo uso deste tipo de ferramenta e o aperfeiçoamento dos pacotes tem permitido realizar cálculos rápidos e testar, com facilidade, a influência dos parâmetros presentes nos modelos. Simular a realidade, segundo várias versões de possíveis soluções discretas, traz uma vantagem inquestionável para otimizar um processo ou equipamento com base na resposta esperada da realidade física desejada. Este procedimento traz menor custo em relação aos métodos experimentais, sem almejar transpor a necessidade dos estudos experimentais.

Existe uma quantidade considerável de material bibliográfico sobre a utilização do método dos volumes finitos para a solução de problemas de fluidodinâmica computacional destacando-se PATANKAR e SPALDING (1971) (precursores do método); VAN DOORMAAL e RAITHBY (1984); MEIER et al. (1999); salientando os trabalhos desenvolvidos por PATANKAR (1980) e MALISKA (2004).

Este capítulo apresenta, de forma sucinta o método numérico empregado no desenvolvimento desse trabalho, o esquema de interpolação, características importantes para a geração de malha, fatores necessários para a verificação e validação da abordagem a que se propõe essa tese. Apresentam-se também os principais aspectos associados ao código de CFD usado nos estudos do presente trabalho.

4.1 Aspectos Gerais Sobre o Método dos Volumes Finitos (MVF)

O método dos volumes finitos é o método utilizado pelo código de CFD ANSYS CFX para a aproximação numérica da conservação das propriedades de estudo (momento, massa, entre outros), para um volume elementar ou célula numérica, discretizada no domínio do espaço e do tempo.

O *software* usado para o desenvolvimento desse trabalho utiliza o método dos volumes finitos (MVF), porém possui abordagem em elementos finitos para a representação do domínio de estudo.

O MVF com base em elementos finitos possui a vantagem, em relação aos outros métodos, de garantir que, para qualquer tamanho de malha, os princípios de conservação são respeitados.

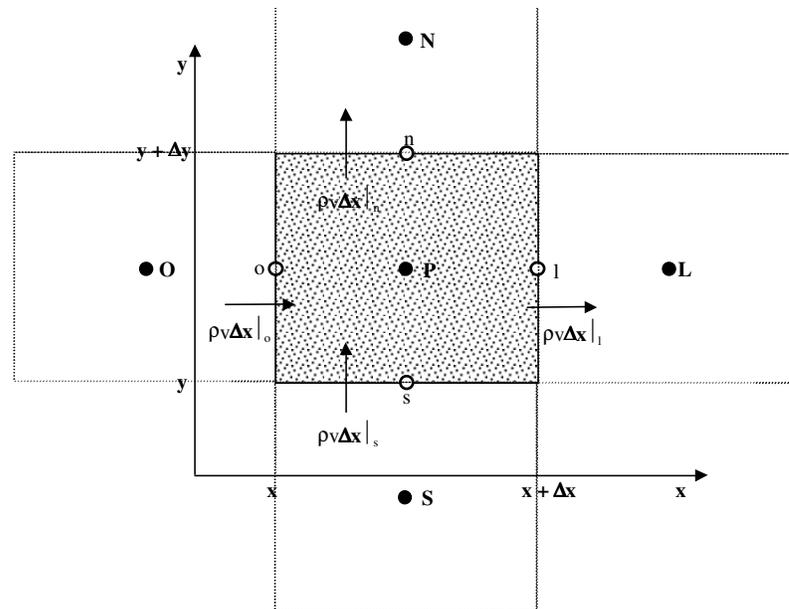


Figura 4.1: Balanço de massa para um volume de controle.

Para ilustrar a obtenção das equações diferenciais, é considerado o balanço de massa, em um volume de controle representado na Figura 4.1. No centro do volume há o ponto P cercado pelas faces do volume (n, s, l e o) hachurado seguindo o segundo nível pelos pontos N, S, L e O que formam, por sua vez, seus próprios volumes vizinhos ao volume do ponto P. Todo domínio do fenômeno que está sendo observado é então discretizado em volumes de

controle (ou computacionais) que interagem entre si trocando massa, momento e energia, na forma de células de informações de conservação no algoritmo numérico de solução.

Uma equação genérica para as equações de transporte pode ser representada da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) - \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) = S^\phi \quad (4.1)$$

onde Γ é o coeficiente de difusão para uma dada variável genérica transportada dependente ϕ e S^ϕ , o termo fonte.

Integrando a Equação (4.1) no volume “V” do volume de controle tem-se:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV + \int_V \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) dV + \int_V -\nabla \cdot \Gamma \cdot \phi \cdot dV = \int_V S^\phi dV \quad (4.2)$$

Com o Teorema da Divergência de Gauss,

$$\int_V \nabla \cdot \phi dV = \int_A (\phi \cdot \mathbf{n}) dA \quad (4.3)$$

aplicado à Equação (4.2), chega-se à Equação (4.4) equação integrada no volume de células em todas as suas superfícies:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV + \int_A (\rho\mathbf{v}\phi \cdot \mathbf{n}) dA - \int_A (\Gamma\phi \cdot \mathbf{n}) dA = \int_V S^\phi dV \quad (4.4)$$

Cada termo da Equação (4.4) (acúmulo, contribuição convectiva, contribuição difusiva e termo fonte) deve ser integrado em um volume de controle para se obter a sua representação discreta no domínio computacional:

$$\underbrace{\int_V \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV}_{\text{Termo Transiente}} + \underbrace{\int_A (\rho\mathbf{v}\phi \cdot \mathbf{n}) dA}_{\text{Contribuição Convectiva}} - \underbrace{\int_A \nabla\Gamma\phi \cdot \mathbf{n} dA}_{\text{Contribuição Difusiva}} = \underbrace{\int_V S^\phi dV}_{\text{Termo Fonte}} \quad (4.5)$$

A seguir são demonstradas, sucintamente, as principais etapas da discretização da equação geral de conservação para uma propriedade conservável genérica ϕ .

4.1.1 Discretização do termo transiente

A determinação do termo transiente ocorre por meio da sua integração para um determinado intervalo de tempo Δt , aplicando aproximação backward Euler de primeira ordem como:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV \cong \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV \quad (4.6)$$

e,

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV \cong \left[\frac{(\rho\phi^n - \rho\phi^{n-1})}{\Delta t} \right] \Delta V \quad (4.7)$$

em que o sobrescrito “n” está associado ao instante de tempo entre os passos de tempo.

4.1.2 Discretização do termo referente à contribuição convectiva

A integração do termo referente à contribuição convectiva para a face oeste, segundo Figura 4.1, resulta em:

$$\int \rho\phi \mathbf{v} n dA = \rho \mathbf{v}_o A_o \phi_o \quad (4.8)$$

$$\int \rho\phi \mathbf{v} n dA = C_o \phi_o$$

sendo C_o , a representação do fluxo convectivo na face oeste, que deve ser aproximado por um esquema de interpolação adequado na face oeste do volume de controle.

4.1.3 Discretização do termo referente à contribuição difusiva

O termo referente à contribuição difusiva na superfície oeste do volume de controle é discretizado de acordo com:

$$\int \Gamma \nabla \phi \mathbf{n} dA = \frac{\Gamma A_o}{h_o} (\phi_p - \phi_o) \equiv D_o (\phi_p - \phi_o) \quad (4.9)$$

onde, 'A' representa a área na face correspondente e 'h' a distância entre o centro da face oeste e o centro do volume de controle (P), e DO o coeficiente de transporte de massa difusivo na face oeste.

4.1.4 Discretização do termo fonte

A integração do termo fonte é dada por:

$$\int S dV = SU + SP\phi_p \quad (4.10)$$

onde SP representa o coeficiente angular da reta e SU o coeficiente linear para a aproximação numérica de linearização do termo fonte.

4.1.5 Esquemas de interpolação

Os esquemas de interpolação geram aproximações diferentes, produzindo diferentes soluções para uma mesma equação diferencial, enquanto a malha não for suficientemente refinada. O esquema de interpolação é fundamental na solução de um problema e para a análise de um resultado, já que sua função é a de relacionar os locais de armazenamento da função ϕ .

Integrando-se a equação genérica, Equação (4.7), unidimensionalmente e para um escoamento em regime estacionário, no volume de controle representado na Figura 4.1, resulta em::

$$\rho u \phi|_e - \rho u \phi|_w = \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}|_e - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}|_w \quad (4.11)$$

Utilizando o esquema de segunda ordem de diferenças centrais (CDS - Central Differencing Scheme), obtém-se:

$$\rho u \frac{(\phi_E + \phi_P)}{2} - \rho u \frac{(\phi_P + \phi_W)}{2} = \Gamma \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x} - \Gamma \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x} \quad (4.12)$$

Rearranjando:

$$\Psi_P \phi_P = \Psi_e \phi_E + \Psi_w \phi_W \quad (4.13)$$

onde os coeficiente Ψ_P , Ψ_e e Ψ_w são representados da seguinte forma:

$$\text{coeficientes} \begin{cases} \Psi_P = \frac{2\Gamma}{\Delta x^2} \\ \Psi_e = -\frac{\rho u}{2\Delta x} + \frac{\Gamma}{\Delta x^2} \\ \Psi_w = \frac{\rho u}{2\Delta x} + \frac{\Gamma}{\Delta x^2} \end{cases} \quad (4.14)$$

Considerando a velocidade (u) positiva, a seguinte relação deve ser satisfeita para que o coeficiente Ψ_e seja positivo:

$$\underbrace{\frac{\rho u \Delta x}{\Gamma}}_{\text{N}^\circ \text{ de Reynolds da célula}} \leq 2 \quad (4.15)$$

Quando a velocidade aumenta, a malha deve ser refinada proporcionalmente, dessa forma o coeficiente Ψ_e será positivo. Manter os coeficientes positivos é uma característica desejada por qualquer método numérico, pois coeficientes negativos causam instabilidades numéricas. O uso do esquema CDS na aproximação de termos convectivos/difusivos, pode produzir coeficientes negativos, pois é impraticável (em problemas reais) refinar a malha até forçar a sua positividade, ou seja, manter o número de Peclet menor ou igual a 2 (por se tratar de um esquema de interpolação de segunda ordem).

Algumas dificuldades encontradas em coeficientes negativos são discutidas por PATANKAR (1980) e MALISKA (2004). A solução tenderá a divergir caso o método não seja tão robusto como os métodos ponto a ponto. Uma outra dificuldade está relacionada à ordem de aproximação da função de interpolação: aproximações de alta ordem, como o CDS, que causa instabilidade nos termos convectivos caso estes sejam dominantes – implicando em solução com oscilações numéricas. A principal justificativa desse tipo de limitação encontrado no esquema CDS deve-se ao fato deste ter sido originado a partir de problemas unidimensionais e ainda é comumente aplicado para problemas multidimensionais.

A representação correta das propriedades transportadas nos processos físicos, evitando os coeficientes negativos, utiliza-se de aproximações adequadas para o termo advectivo, que garantem a necessária positividade dos coeficientes da discretização, tais como o esquema de interpolação de primeira ordem do tipo *Upwind* e o de segunda ordem chamado *Higher Upwind*.

4.1.6 Esquemas de interpolação Upwind Difference Schme (UDS)

Considerando a Figura 4.1, a função de interpolação tem as seguintes expressões:

$$\phi_o = \phi_O \quad , \quad \phi_l = \phi_P \quad \text{para} \quad v > 0 \quad (4.16)$$

$$\phi_o = \phi_P \quad , \quad \phi_l = \phi_L \quad \text{para} \quad v < 0 \quad (4.17)$$

O esquema Upwind tem sua relação direta com o valor na interface, o qual é igual ao valor da função no volume a montante, variando de acordo com o sentido da velocidade (MALISKA, 2004).

4.1.7 Esquemas de interpolação Higher Upwind

O esquema de interpolação Upwind é de primeira ordem, enquanto que o higher upwind é de segunda ordem, por utilizar valores de dois pontos a montante, para determinar o valor de ϕ na face. Dessa forma, têm-se:

$$\phi_o = \phi_o + \frac{1}{2}(\phi_o - \phi_{oo}) \quad (4.18)$$

$$\phi_e = \frac{3}{2}\phi_p - \frac{1}{2}\phi_o$$

sendo ϕ_{oo} a variável na face oeste oeste.

4.1.8 Esquemas de interpolação High Resolution

O esquema de interpolação usado nesta Tese foi o *High Resolution*. O esquema de interpolação *High Resolution* considera um fator ' β ' para o domínio estudado; para altos gradientes $\beta = 0$ representa o esquema UDS, e para baixos gradientes os valores de β ficarão

em torno da unidade 1. O valor de 'β' pode ser determinado automaticamente pelo *software* empregado.

A forma discreta para a equação geral de conservação fica:

$$A_P \phi_P - \sum_{nb} A_{nb} \phi_{nb} = SU \quad (4.19)$$

$$A_P = \sum_{nb} A_{nb} - SP + C_U - C_D + C_N - C_S + C_L - C_O + \frac{\rho V}{\Delta t} \quad (4.20)$$

Os termos C_U , C_D , C_N , C_S , C_L , C_O representam as contribuições convectivas advindas dos fluxos convectivos nos pontos adjacentes ao ponto P do volume de controle.

4.1.9 Acoplamento pressão velocidade

O *software* comercial ANSYS CFX usa um acoplamento pressão-velocidade baseado no esquema de interpolação *Rhie-Chow* modificado para a solução do sistema de equações em um único nó do elemento da malha numérica (arranjo co-localizado). A representação unidimensional da conservação da massa pode ser escrita como:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^3 A}{4\dot{m}} \left(\frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \right)_i = 0 \quad (4.21)$$

onde

$$\dot{m} = \rho v_j \Delta n_j$$

O termo de *Rhie-Chow*, ou equivalente, é de quarta ordem de suavização da pressão, e tem, por muitos anos, fornecido uma maneira confiável para permitir soluções fisicamente consistentes e estáveis em malhas co-localizadas. Para a grande maioria dos escoamentos, este tratamento amarra os campos de pressão para render soluções suaves, afetando minimamente

o transporte das velocidades da massa. A literatura apresenta trabalhos onde é feito um maior detalhamento sobre acoplamentos pressão-velocidade tais como: PATANKAR (1980), RHIE e CHOW (1983), PRAKASH e PATANKAR (1985), SCHNEIDER e RAW (1986), MALISKA (2004).

4.2 MVF com base em Elementos Finitos

A Figura 4.2 representa o volume de controle onde os balanços materiais são realizados. Todo o desenvolvimento demonstrado nos itens anteriores são aplicados para o MVF com base em Elementos Finitos, mas a grande diferença está na maneira da consideração do volume de controle de estudo, onde cada nó do elemento é rodeado por uma superfície o qual determinará um novo volume de controle a ser discretizado.

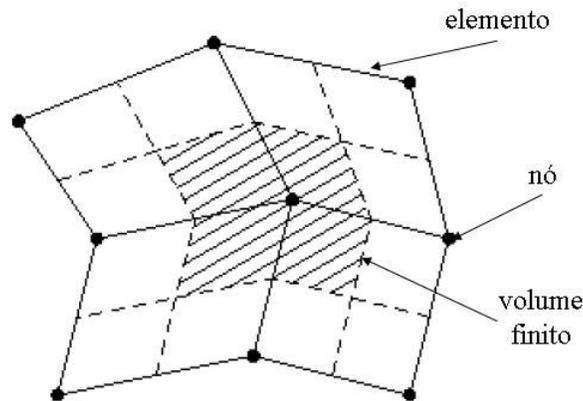


Figura 4.2: Representação de um volume de controle.

4.3 Geometria e Malha Numérica

Processos envolvendo escoamentos multifásicos na indústria são, na sua grande maioria, dependentes da concepção geométrica. A modelagem matemática e concepção geométrica devem estar aliadas para se garantir o sucesso da metodologia empregada. Parâmetros como número de nós, ortogonalidade, razão de crescimento e refino da malha próximo à parede influenciam tanto o tempo computacional como a convergência da solução numérica, já que quanto maior a malha numérica maiores serão os cálculos envolvidos durante a simulação.

Para a definição da malha numérica adequada para os estudos numéricos desta tese, foram realizados testes de convergência de malha buscando a independência dos resultados obtidos em função da malha numérica adotada. Três diferentes malhas foram construídas e avaliadas em simulações que consideraram apenas vapor e líquido trocando, massa e energia.

Para a simulação de um equipamento, com a consideração de pontos discretos representando os *sprays* que injetam a fase líquida, cuidados acerca do refino da malha nessa região foram tomados, além do refino próximo à parede do equipamento. A Tabela 4.1, apresenta o número de nós, de elementos e o número de camadas de prismas avaliadas. As três malhas empregadas consideraram o mesmo número de camadas de elementos prismáticos. As diferenças geradas pelo número de nós estão relacionadas ao tamanho global empregado na malha numérica. As Figura 4.3 (a) até (c) exemplificam as malhas numéricas empregadas. A Figura 4.3 (d) mostra o detalhamento da camada de prisma empregado nas três malhas avaliadas. Netas figuras, a entrada da fase contínua (vapor) está representada pela cor vermelha, as paredes do equipamento pela cor azul, em cinza a condição de saída dos fluidos de dentro do sistema de estudo e a base do equipamento em verde.

Tabela 4.1: Números de nós e camadas de prismas simulados.

	Número de nós	Número de elementos	Camadas de prismas
Malha 1	630.875	2.578.876	10
Malha 2	1.110.274	4.811.904	10
Malha 3	2.650.840	12.066.400	10

A geometria para as simulações desta aplicação foram feitas no *software* comercial *Design Modeler*, versão 11.0, da ANSYS. As malhas tetraédricas com camadas de prismas na parede do equipamento foram geradas no *software* ICEM 11.0 da ANSYS. Estas foram importadas para o *software* ANSYS CFX.

Pelas considerações da modelagem adotada, além das características da malha numérica, outro fator importante e necessário de ser avaliado é o número de injeções de gotas

na saída do *spray* (*Particle Tracking*). Da mesma forma que na malha numérica, foram avaliados a independência dos resultados em relação à injeção de gotas para a fase dispersa. Estes resultados são detalhadamente discutidos no Capítulo 6 – Resultados e Discussões.

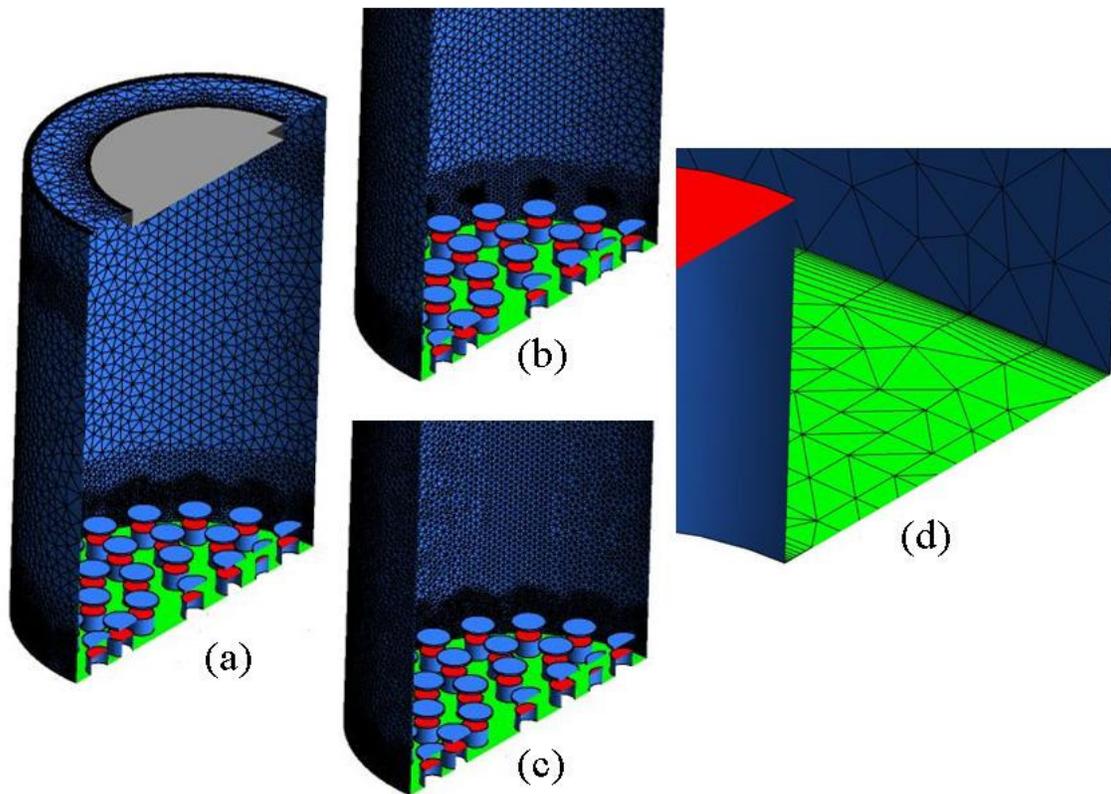


Figura 4.3: Detalhamento da malha numérica. (a) Malha 1, (b) Malha 2, (c) Malha 3 e (d) 10 camadas de prismas.

CAPÍTULO 5

APARATO DE ESTUDO

O uso de regiões de *spray* para a troca térmica sem recheio (*empty spray section*) vem sendo empregado em tecnologias de torres a vácuo, com o objetivo principal de redução de perda de carga ao longo da coluna, além do benefício da economia de investimento e facilidades na manutenção.

O objetivo da maioria das torres a vácuo em refinarias de petróleo é obter o máximo possível de gásóleo do resíduo atmosférico (CALDAS *et al.* 2007). Apesar de dois gásóleos serem produzidos, gásóleo leve (GOL) e gásóleo pesado (GOP), para aumentar a recuperação de calor do sistema, na maioria dos casos estes gásóleos são recombinados para a produção de diesel, não necessitando serem fracionados na torre. Porém, para se condensar um gásóleo limpo, com qualidade adequada para servir de carga para a unidade de craqueamento catalítico, é necessário eliminar as gotículas de líquido contaminado, arrastadas pelo gásóleo vaporizado.

As torres possuem normalmente duas seções de refluxo circulante para a condensação do gásóleo, e uma seção de lavagem para a eliminação do arraste de líquido, conforme a Figura 5.1. Esta coluna de destilação a vácuo ilustrada apresenta recheios como internos.

A Figura 5.2 ilustra esquematicamente a região superior da torre de vácuo, foco dos estudos deste trabalho. A corrente de vapor é alimentada na base do equipamento e escoar no sentido ascendente, na região superior do equipamento, a qual não possui internos. Destaca-se a presença do *Demister Pad* com a finalidade de evitar o arraste de líquido conduzido pelo vapor, e o distribuidor do tipo *spray* onde a corrente líquida é alimentada no sentido contracorrente ao da fase vapor.

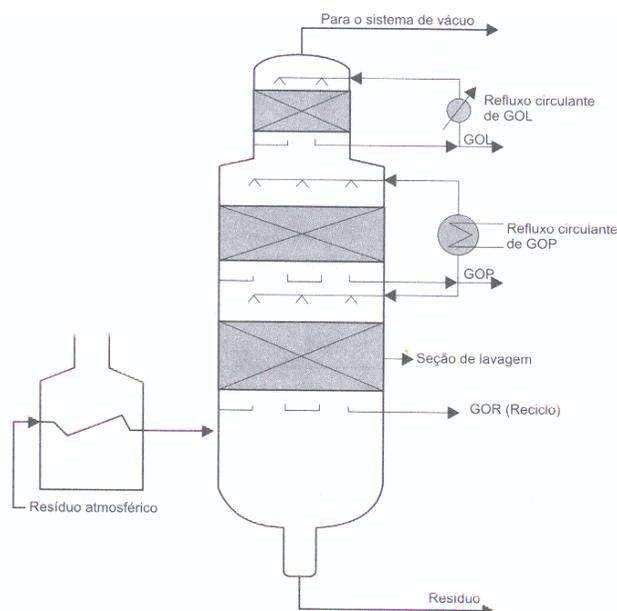


Figura 5.1: Torre de vácuo para destilação. (CALDAS *et al.*, 2007)

Foram realizadas medidas em 8 posições periféricas no costado para temperaturas considerando 10 níveis axiais, ilustrada na Figura 5.2 com N1 até N10. Além destas medidas, utilizou-se para validação do modelo empregado, medidas experimentais na região chamada de panela GOL (MB) e na região superior do equipamento (MT). Balanços globais de massa e de energia foram realizados comparando os dados de CFD obtidos com o simulador de processo PETROX, *software* interno desenvolvido pela PETROBRAS em linguagem FORTRAN.

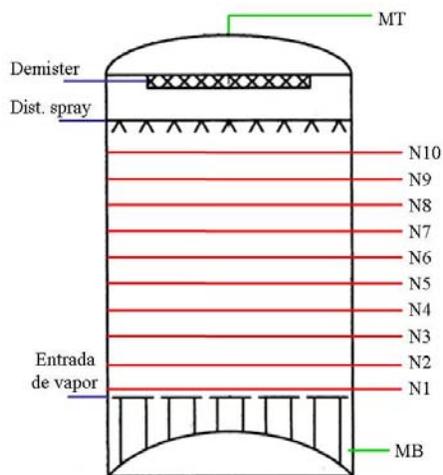


Figura 5.2: Equipamento de estudo.

A Figura 5.3 (a) apresenta o domínio usado para as simulações; o plano em azul representa a região onde os pontos do distribuidor *spray* foram definidos. Na Figura 5.3 (b) é possível identificar a distribuição dos 41 pontos de injeção do líquido. Embora o distribuidor de líquido apresente simetria, o mesmo não ocorre com a entrada de vapor, Figura 5.3 (c), inviabilizando o uso de condições de simetria para simplificação do modelo de estudo.

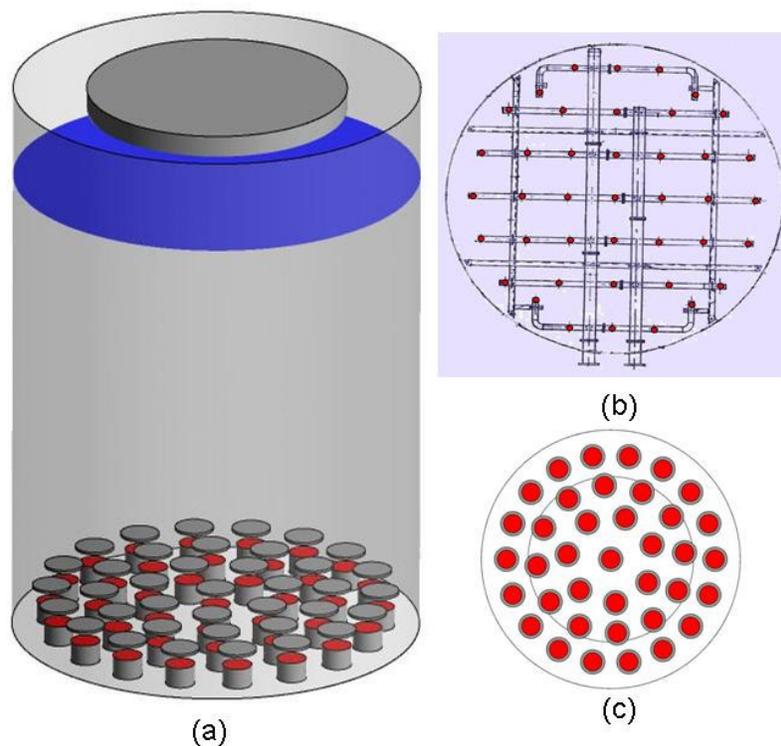


Figura 5.3: (a) Torre a vácuo, (b) distribuidor de líquido e (c) entrada do vapor.

5.1 Modelo de resistência para validação do modelo empregado

Para validação do modelo proposto com os dados experimentais obtidos foram propostas duas metodologias. Uma delas considera o modelo clássico de resistências em série e a outra a transferência de calor em uma aleta.

A Figura 5.4 apresenta o modelo proposto a partir da abordagem das resistências em séries. A temperatura obtida através de simulação (T_{CFD}) será validada com a temperatura obtida através de medidas realizadas no costado do equipamento. Entretanto o efeito da presença do isolamento térmico foi considerado nos cálculos, já que a área de isolamento

retirada para realizar a medida experimental pode ser desconsiderada. Também foi considerado o efeito do filme nos cálculos do modelo térmico proposto.

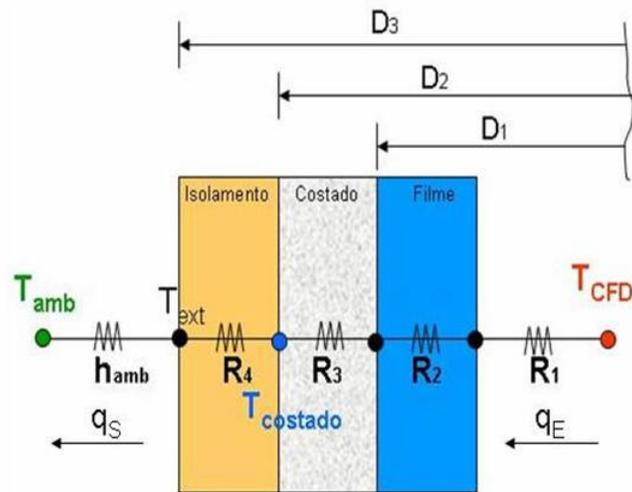


Figura 5.4: Modelo de resistência para validação dos resultados.

Sabendo que D_1 , D_2 e D_3 representam respectivamente o diâmetro interno da torre, diâmetro do costado e o diâmetro do isolamento. As variáveis q_E e q_S representam a taxa de calor na entrada e a taxa de calor na saída. A Temperatura ambiente é representada pela variável T_{amb} , a temperatura externa ao isolamento por T_{ext} e a temperatura obtida com o modelo de CFD por T_{CFD} . Os valores de 'R' representam as resistências calculadas e h_{amb} representa o coeficiente de transferência de calor no ambiente.

A Equação (5.1) representa o cálculo da temperatura no costado obtida a partir temperatura de CFD a partir do modelo proposto:

$$T_{cost} = T_{CFD} - \frac{q_E}{U_E A} \quad (5.1)$$

Sendo que $U_E A$ representa o coeficiente global de transferência de calor na entrada. Para definição do modelo de resistência empregado, os coeficientes foram baseados nas correlações apresentadas e discutidas em INCROPERA (2003).

A outra abordagem considera a parede da coluna, que está em contato com o fluido interno em uma das faces, e com o isolante na outra face. Tanto o fluido interno quanto o ambiente estão em temperaturas constantes. A parede tem comprimento L e circunferência C e tem uma temperatura fixa em seu ponto inicial ($z = 0$), diferente das temperaturas do ambiente e do fluido, Figura 5.5.

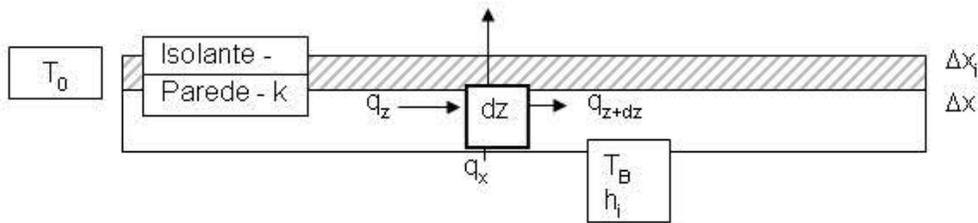


Figura 5.5: Modelo de aleta para ilustração do modelo.

para validação dos resultados parte do princípio de que a troca de calor ocorre preferencialmente no sentido axial do equipamento; desta forma a abordagem clássica da aleta () considerando o costado.

Como a resistência térmica da parede é muito menor que a dos demais meios, considera-se que não há gradiente de temperatura na direção x . Assim, a temperatura em qualquer ponto do elemento de volume será constante e igual à temperatura do costado T . Além disto, como a espessura da parede é muito menor que o raio da coluna, será desprezada a diferença da circunferência interna e externa, tratando a parede como uma chapa plana de largura igual a C . Uma modelagem semelhante a adotada para aletas é proposta (INCROPERA, 2003). No entanto, no caso da aleta, a chapa encontra-se imersa em um mesmo fluido, e não há isolante, portanto é considerado apenas um fluxo de calor convectivo ao redor da aleta.

A equação final para o cálculo da temperatura corrigida foi obtida com a expressão:

$$T_{\text{cost}} = C_1 e^{Az} + C_2 e^{-Az} + \frac{B}{A^2} \quad (5.2)$$

Sendo que A^2 e B são representados pelas seguintes equações:

$$A^2 = \frac{(h_i + U)}{k\Delta x} \quad (5.3)$$

$$B = \frac{(h_i T_B + UT_\infty)}{k\Delta x} \quad (5.4)$$

onde:

$h_i \equiv$ Coeficiente de transferência de calor

$U \equiv$ Coeficiente Global de Transferência de Calor

$T_B \equiv$ Temperatura de entrada do líquido

$T_\infty \equiv$ Temperatura no ambiente

$\Delta x \equiv$ Elemento de área onde ocorre o fluxo transversal de calor

$k \equiv$ Condutividade térmica

C_1 e C_2 são definidos da seguinte forma:

$$C_1 = \frac{T_B - T_0 e^{-AL} - (1 - e^{-AL}) \frac{B}{A^2}}{e^{AL} - e^{-AL}} \quad (5.5)$$

$$C_2 = T_0 - \frac{B}{A^2} - C_1 \quad (5.6)$$

T_0 representa a temperatura do vapor na base do equipamento e 'L' a altura do equipamento.

CAPÍTULO 6

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Serão apresentados os resultados obtidos experimentalmente para a região de vazios de gásóleo de uma torre a vácuo, comparando com dados obtidos numericamente considerando o modelo de transferência de calor e massa com abordagem Euleriana-Lagrangeana.

6.1 Verificação de Coerência Física do Modelo

Em um sistema 1D, considerando ar úmido e água trocando calor e massa simultaneamente a partir das considerações desenvolvidas na pesquisa em questão, os resultados obtidos serão validados com dados disponíveis na literatura. A clássica situação em questão é facilmente validada quando se conhece a solução por meio de uma carta psicrométrica.

O Modelo 1D (Figura 6.1), é composto por uma malha hexaédrica com elementos que respeitam a razão de crescimento, ortogonalidade, e qualidade da malha. São empregadas quatro simetrias distintas, com o intuito de reprodução de um escoamento sem os efeitos de parede.

A simulação numérica considera o ar com uma umidade relativa de 50% a uma temperatura de 30°C; a concentração e temperatura de saturação adiabática são conhecidas.

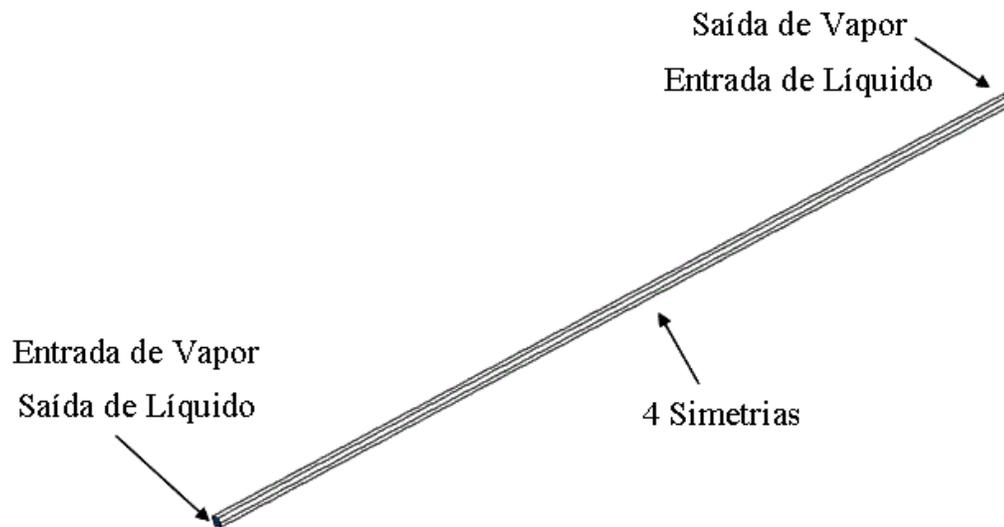


Figura 6.1: Representação do Modelo 1D empregado.

Foi considerado nas simulações a constante de equilíbrio segundo a Lei de Raoult, detalhadamente descrita no Capítulo 3 - Modelagem Matemática. As condições simuladas podem ser consideradas da seguinte forma:

- Entrada de vapor:
 - Umidade relativa 50% (fração mássica = 0,01325);
 - Temperatura de 30°C;
 - Após saturação (umidade relativa de 100%), a temperatura do vapor é de 22°C.
- Entrada de líquido:
 - Água pura;
 - Temperatura de 22°C.

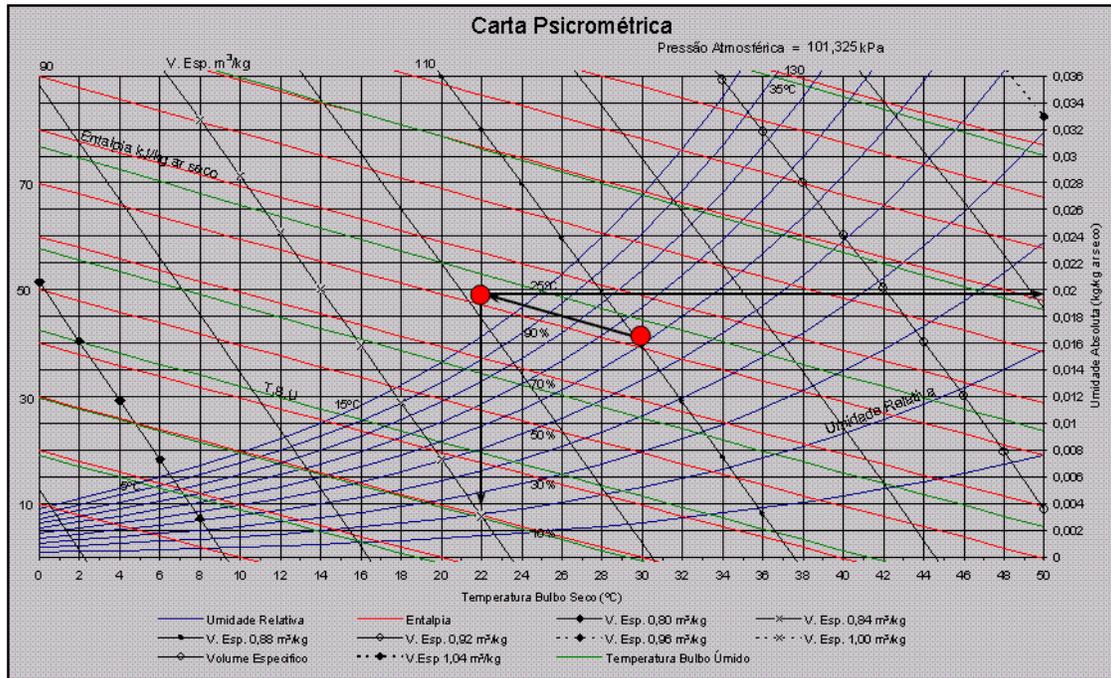


Figura 6.2: Carta psicrométrica com os valores obtidos para o caso de validação e verificação do modelo empregado.

A Figura 6.2 apresenta o resultado obtido a partir de uma carta psicrométrica para o sistema ar úmido e água de acordo com a solução disponível na literatura (SMITH e VAN NESS, 2000). O vapor entra em equilíbrio em uma temperatura de 22°C e a concentração de saturação de água no ar é de 0,0162 kg/kg de ar seco.

6.1.1 Resultados: ar úmido e água

Os resultados obtidos com o modelo de transferência de calor e massa apresentam satisfatória concordância com os dados obtidos na literatura. Considerando as diferentes abordagens empregadas, para o cálculo do equilíbrio, o resultado obtido através da carta psicrométrica foi comparado considerando a variação de altura do modelo 1D de CFD estudado. A Figura 6.3, apresenta o perfil de temperaturas obtido para o vapor ao longo da altura do modelo 1D. O comportamento assintótico obtido revela a saturação do vapor atingida na temperatura de 22°C, valor confirmado com o valor de acordo com a carta psicrométrica (experimental).

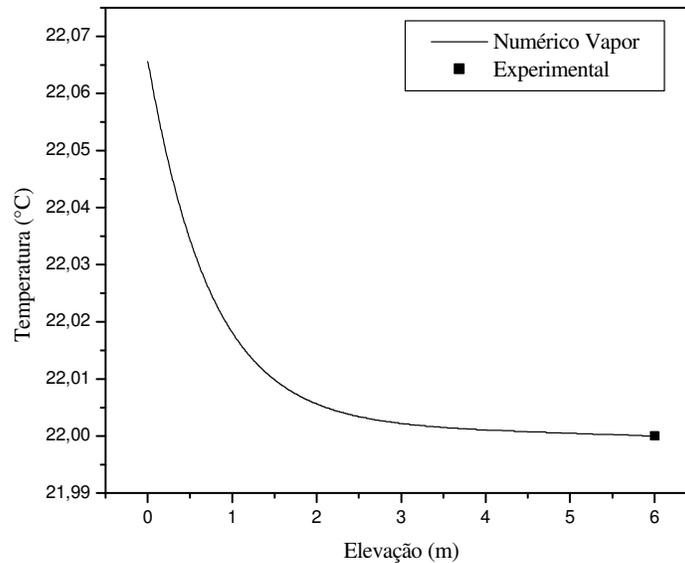


Figura 6.3: Perfil de temperatura para simulação de ar úmido e água em condições unidimensionais.

A Figura 6.4 apresenta o resultado obtido para a fração mássica de água para o modelo 1D, onde na condição de saturação é obtido uma fração mássica de água de 0,0158. De acordo com a carta psicrométrica (experimental), o valor seria 0,0162. A diferença de 2,4% encontrada provavelmente se deve ao fato da troca de calor sensível no início do eixo apresentar o aquecimento da fase líquida. Contudo a ordem de grandeza destas diferenças não é significativa. Deve-se destacar também que por tratarem-se de abordagens diferentes para o cálculo do equilíbrio, os valores obtidos com o modelo proposto foram excelentes.

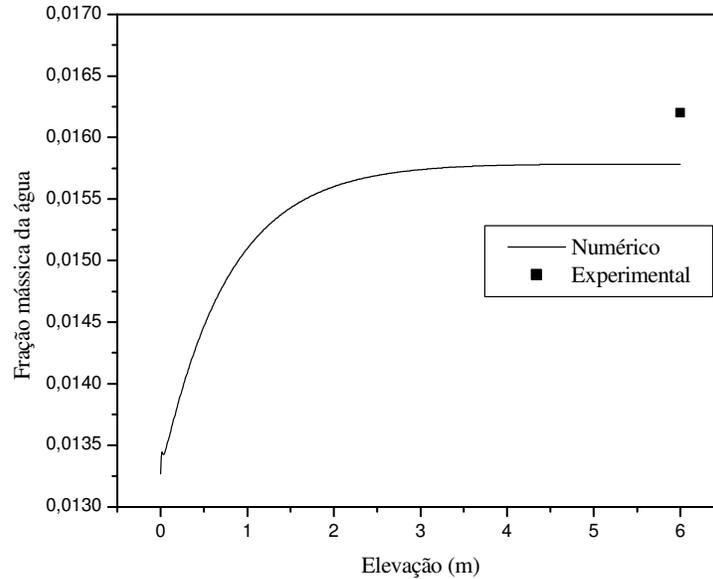


Figura 6.4: Fração mássica de água em condições unidimensionais.

6.1.2 Modelo 1D para Pseudocomponentes

Para a representação dos componentes existentes no sistema de estudo, foram realizados testes de sensibilidade para a definição da melhor abordagem a ser adotada. Sendo assim, duas possibilidades foram testadas, a primeira considerando os componentes existentes no meio como sendo o pseudocomponente e a água apresentando comportamento “inerte”, e a segunda possibilidade onde o pseudocomponente, água e ar participam como os componentes representativos do sistema e a água passa a ter papel de “inerte” no sistema.

Buscando menor tempo computacional, as simulações foram realizadas com o modelo 1D semelhante ao apresentado na Figura 6.1, diferenciando-se apenas na altura do modelo. Para a representação do modelo de transferência de massa e calor na torre a vácuo se considerou um altura igual a que será utilizada na geometria tridimensional.

A Figura 6.5 apresenta os resultados obtidos para a definição da abordagem dos componentes do sistema. Nota-se que para a fração mássica de pseudocomponente as diferenças obtidas com as duas considerações não são significativas. A diferença observada está associada à presença da água que influencia no equilíbrio de fases. Embora a corrente

de entrada possua em torno de 10% de água, devido à intensa condensação do pseudocomponente nos primeiros metros da seção, a pressão parcial do mesmo reduz consideravelmente, diminuindo a condensação, o que não ocorre no caso do componente puro. A partir da altura aproximada de 0,12 m, nota-se o equilíbrio termodinâmico sendo atingido, mais adiante a confirmação dessa altura será apresentada para o modelo 3D.

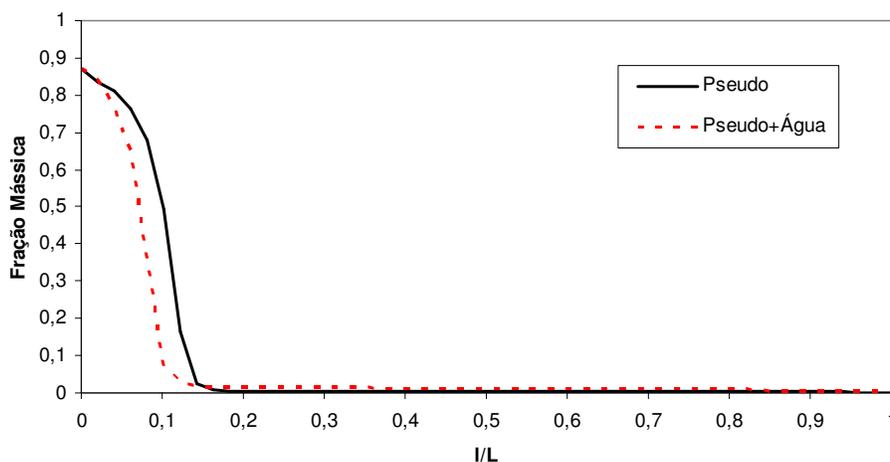


Figura 6.5: Fração mássica para as hipóteses para a modelagem dos componentes do sistema.

6.2 Modelo 3D para Pseudocomponentes

Para estudo do Modelo 3D para representação da troca de massa e energia dentro de uma coluna a vácuo, foram realizadas verificações numéricas para garantir a confiabilidade nos resultados obtidos com o modelo empregado. Para análise da independência de malha e número de trajetórias, foi empregado o diâmetro médio de Sauter fornecido pela empresa fabricante de bicos dispersores BETE Fog Nozzle. A partir dos resultados obtidos para verificação do esquema advectivo se considerou a distribuição de gotas. Todos os resultados consideraram a análise de planos médios da variável de estudo ao longo da altura do equipamento, além da normalização da abscissa representando a elevação do equipamento. Para análise dos planos médios de temperatura também foi considerada a normalização deste eixo. Após as verificações de modelagem foi empregada a correlação para a correção do diâmetro de gota considerando as propriedades do hidrocarboneto.

6.2.1 Verificação da malha numérica

Sabe-se que um número adequado de volumes de controle é de extrema importância para a determinação de alguns comportamentos; a utilização de malhas sem o refino adequado pode invalidar a análise dos resultados. Durante a geração das malhas para estudo da fluidodinâmica da seção de vácuo, todos os critérios necessários de controle de uma malha foram respeitados, tais como razão de aspecto, ortogonalidade, ângulo dos elementos e razão de crescimento. Conforme já apresentado no Capítulo 4, foram testadas três malhas para a mesma geometria: Malha 1 (630.875 nós), Malha 2 (1.110.274 nós) e Malha 3 (2.650.840 nós).

O escoamento em uma torre a vácuo é multifásico; a fase vapor (contínua) troca calor e massa com a fase líquida (dispersa). Sendo assim, é fundamental realizar os estudos de independência dos resultados para a malha numérica considerando o modelo completo, ou seja, as duas fases.

Para avaliar a independência de malha as análises ficaram concentradas nas variáveis: fração molar de pseudocomponente, temperatura e velocidade da fase vapor, sendo representados pelas Figura 6.6, Figura 6.7 e Figura 6.8 respectivamente.

Ao comparar as três propostas de malhas, não foram observadas diferenças significativas. A Malha 2 e a Malha 3 apresentaram resultados semelhantes para a representação das variáveis analisadas. Mesmo nas regiões de maiores gradientes, entrada de vapor e a região dos bicos dispersores, as diferenças nos resultados foram desprezíveis. Por apresentar menor número de nós que a Malha 3, representando as mesmas tendências para as variáveis analisadas se optou por utilizar a Malha 2 a qual se apresentou adequada para representar os fenômenos de interesse.

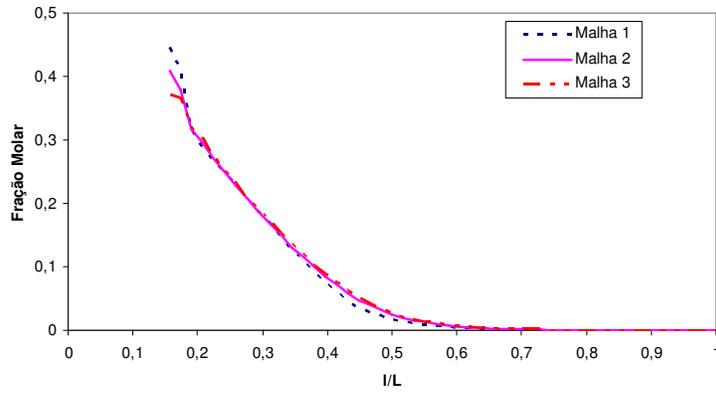


Figura 6.6: Avaliação da fração molar do pseudocomponente no vapor para diferentes malhas.

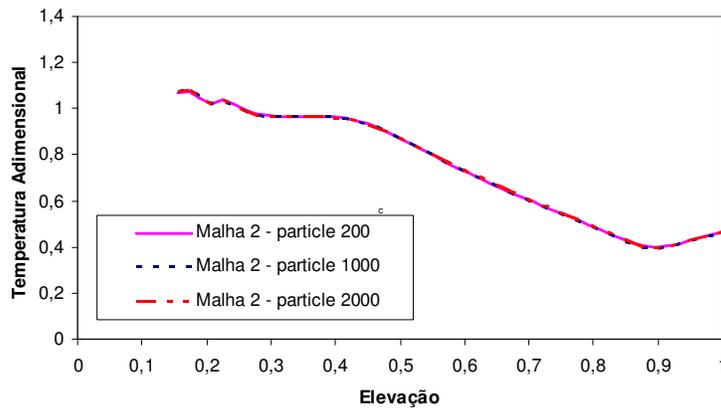


Figura 6.7: Perfil de temperatura para diferentes malhas.

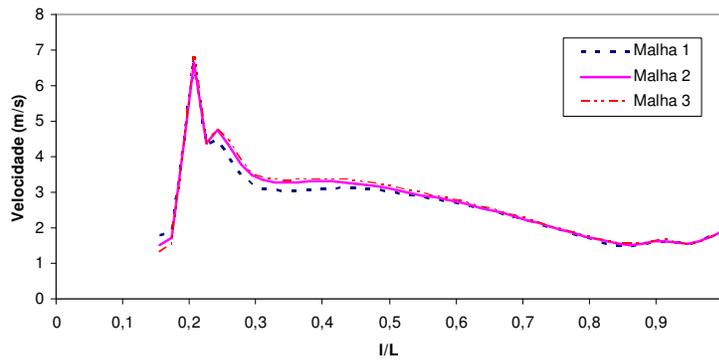


Figura 6.8: Perfil de velocidade para diferentes malhas.

Para garantir o sucesso da modelagem empregada para representação da troca térmica e de massa em uma torre a vácuo, outra etapa fundamental consiste no estudo da

independência dos resultados em relação ao número de trajetórias de líquido (gotas) dos *sprays* por ponto de injeção, variável Lagrangeana

6.2.2 Representação da trajetória dos *sprays*

Para a representação da fase dispersa através da abordagem Lagrangeana é preciso definir o número de trajetórias de gotas que deixam os pontos discretos representados pela trajetória dos *sprays*.

Independente do número de trajetórias de gotas, a vazão mássica de líquido que entra no domínio é conservada. As gotas são integradas no caminho que percorrem o domínio discretizado. Cada gota percorre a sua trajetória até deixar o domínio ou através de limites de integração. Sendo assim, cada gota percorre uma trajetória a partir do ponto de injeção especificado, o *spray*, até seu destino final.

As simulações para análise da trajetória de gotas foram realizadas considerando os seguintes valores: 200, 1000 e 2000 trajetórias de gotas por ponto de injeção do *spray*. Optou-se por uma grande faixa de análise para garantir a independência dos resultados.

Os resultados de verificação desta etapa indicaram que mesmo com um incremento de até cinco vezes no número de trajetórias, conforme ilustrado nas Figura 6.9, Figura 6.10 e Figura 6.11, as diferenças no comportamento para as variáveis estudadas são imperceptíveis. É interessante ressaltar que um número menor de trajetórias significa que cada trajetória representa uma quantidade maior de gotas, já que a massa se conserva, podendo trazer dificuldades de convergência já que o termo fonte calculado representará um número maior de gotas. Por outro lado, o número maior de gotas representa a presença do termo fonte em mais regiões do domínio; no entanto, o tempo necessário para o cálculo é maior. Para o número de gotas avaliado, observou-se um incremento no tempo computacional de aproximadamente 40% comparando o caso de 2000 trajetórias com o de 200 trajetórias.

A análise de planos médios para a fração molar do pseudocomponente considerando a verificação da independência dos resultados em relação ao número de trajetórias, não demonstram diferenças entre os casos analisados, conforme apresentado na Figura 6.11.

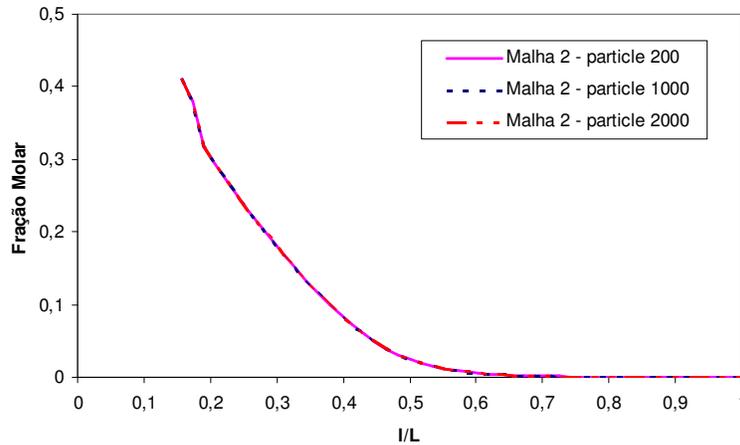


Figura 6.9: Fração molar do pseudo no vapor para trajetórias diferentes.

Para a condição de diâmetro de gota constante (0,7 mm), o equilíbrio térmico não é atingido dentro do equipamento. Entende-se por equilíbrio térmico a condição em que a temperatura do vapor não sofre variações ao longo do equipamento. Na região próxima ao nível de injeção de líquido ($I/L=0,9$) ocorre o escape do vapor, este comportamento é confirmado com a elevação da temperatura do vapor após este nível

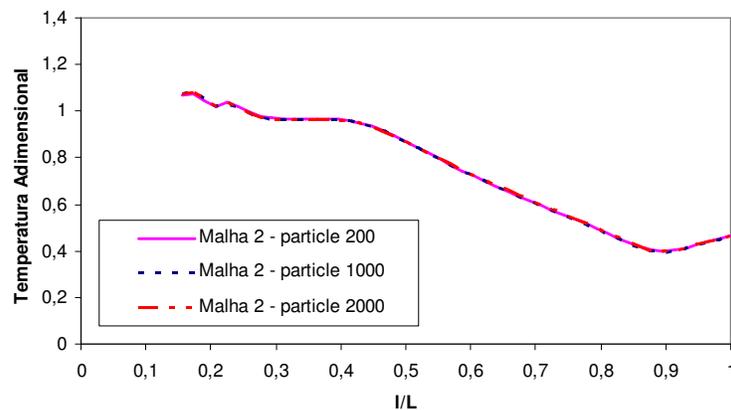


Figura 6.10: Temperatura do pseudo no vapor para trajetórias diferentes.

O perfil de velocidade do vapor pode ser observado na Figura 6.9. A região na base do equipamento apresenta picos de velocidade, efeito resultante da proximidade da entrada do vapor no equipamento. Nota-se o declínio no perfil de velocidade até próxima a região de $I/L=0,9$ onde a influência do efeito da presença dos bicos dispersores é ainda perceptível.

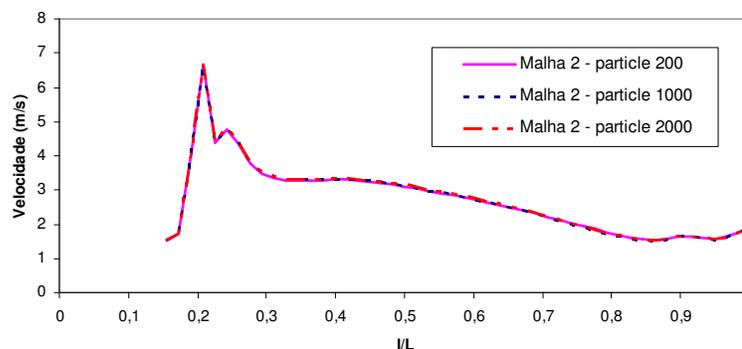


Figura 6.11: Velocidade do vapor para trajetórias diferentes.

A partir das análises de verificação para o número de trajetórias das gotas, optou-se por 200 trajetórias de gotas por ponto de injeção de *spray*. Não foram observadas diferenças entre os demais casos de verificação. O aumento no número de trajetórias por ponto de injeção implica no aumento do custo computacional, conforme explicado anteriormente, no entanto, não foram observadas significativas diferenças para a faixa testada.

6.2.3 Método de interpolação

Para verificação da modelagem adotada, compararam-se dois esquemas advectivos, *upwind* e *high resolution*. Tal estudo baseia-se na influência que o esquema de interpolação pode ter sobre os resultados.

Os resultados analisados foi considerada uma alteração nas condições de simulação. Nos itens anteriores de verificação numérica, as simulações foram realizadas considerando o diâmetro médio de Sauter fornecido pela empresa fabricante de *sprays*, obtido para a água. A partir do item de verificação numérica, para o esquema, advectivo além da comparação do método de interpolação se considerou, também, a comparação dos resultados com a correlação proposta por MUGELE (correlação apresentada em documento interno da Petrobras) para o diâmetro de gota.

A partir dos valores fornecidos pela empresa fabricante de *sprays* BETE Fog Nozzle, a Tabela 6.1 apresenta a correção do diâmetro de gota proposta na Equação (3.36).

Tabela 6.1: Distribuição de tamanho de gota.

	BETE Fog Nozzle (mm)	Mugele (mm)
D_{10}	0,37	0,33
D_{Sauter}	0,67	0,60
D_{90}	2,7	2,42

Pequenas diferenças foram notadas entre os métodos, para a análise da fração molar do pseudocomponente na fase vapor, da temperatura e da velocidade do vapor na coluna de destilação estudada. Além da análise do esquema advectivo, testou-se a utilização da correlação de Mugele para a correção do diâmetro de gota levando em conta as propriedades do fluido.

Considerando a análise da influência do esquema advectivo para os casos estudados pequenas diferenças foram observadas. Considerando a fração molar do pseudocomponente na fase vapor esta diferença pode ser considerada desprezível. Mesmo com a consideração do uso da distribuição de gotas na troca de calor e massa no equipamento em questão não foram observadas diferenças significativas entre os resultados. Embora a variação do diâmetro de gota seja um parâmetro de alta relevância para a troca térmica de um equipamento, a altura de troca térmica observada para o diâmetro médio se mantém para a distribuição de gotas, como visto na Figura 6.12.

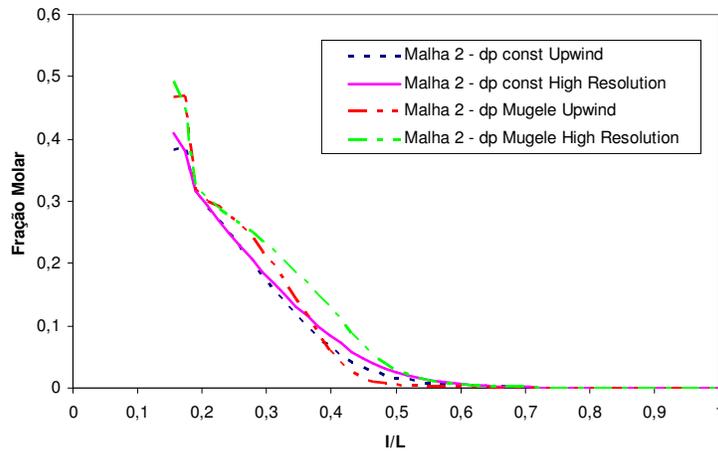


Figura 6.12: Fração molar de pseudo no vapor para diferentes esquemas advectivos.

A análise dos planos médios ao longo da elevação do equipamento para as variáveis de temperatura, Figura 6.13, e velocidade do vapor considerando a comparação entre os esquemas advectivos para um diâmetro de gota constante e para a distribuição de diâmetro, o padrão de comportamento observado para o diâmetro constante é mantido com o uso da distribuição do diâmetro de gota.

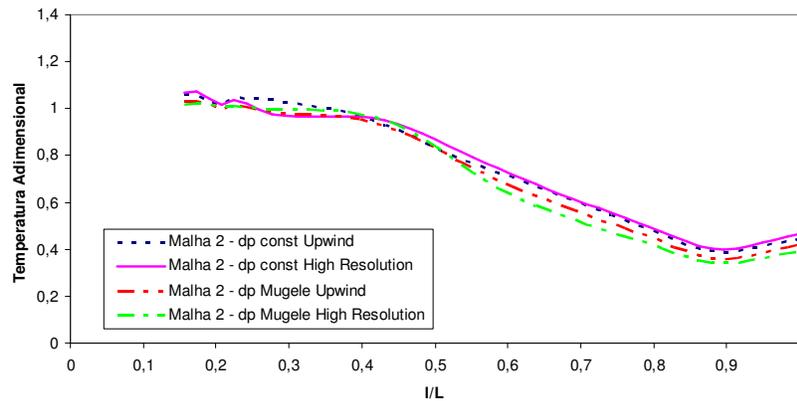


Figura 6.13: Temperatura do pseudo no vapor para diferentes esquemas advectivos.

O esquema advectivo de primeira ordem empregado atenua o comportamento fluidodinâmico na região próxima a entrada de vapor, isto pode ser verificado na Figura 6.13 para a análise do perfil de velocidade do vapor. Esquemas de interpolação de primeira ordem

causam efeitos de difusão numérica quando um dos componentes de velocidade é muito maior que os demais, entretanto este tipo de comportamento fluidodinâmico não é observado para o estudo em questão.

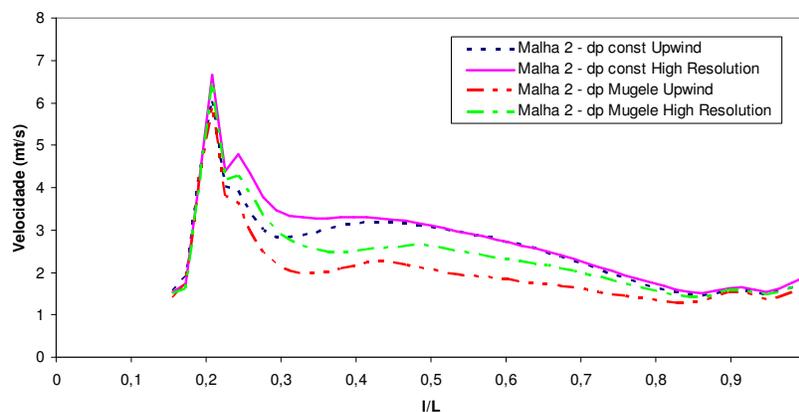


Figura 6.14: Velocidade do vapor para diferentes esquemas advectivos.

Não foram observadas diferenças significativas entre os estudos comparando o diâmetro constante de gota e o uso de uma distribuição de diâmetros de gota. Este comportamento pode ser justificado por a seção em questão se tratar de uma região caracterizada pela forte condensação do pseudocomponente, logo nos primeiros metros do equipamento. Esta característica pode justificar as pequenas diferenças observadas nas variáveis estudadas. Em outra seção de uma coluna de destilação a influência do diâmetro de gota tende a ser mais relevante, em função de regiões com maiores gradientes de temperatura, velocidade e composição.

O método *high resolution* por se tratar de um método que automaticamente emprega o esquema de interpolação adequado em função de regiões com altos gradientes como para regiões de baixos gradientes, tende a ser o mais confiável para a continuação dos estudos desenvolvidos neste trabalho.

6.2.4 Modelos de turbulência

Para verificação da turbulência na coluna de destilação foram estudados dois modelos de turbulência para modelar a fase contínua (vapor). Os modelos testados foram o modelo clássico $k-\epsilon$ e o modelo SST. Para esta verificação foi empregada a distribuição de diâmetro de gota para a fase dispersa.

Os resultados comparativos para as variáveis de maior interesse indicam não haver diferenças significativas entre os modelos estudados. A Figura 6.15 apresenta a fração molar para o pseudocomponente e a Figura 6.16 a temperatura para o pseudo na fase vapor.

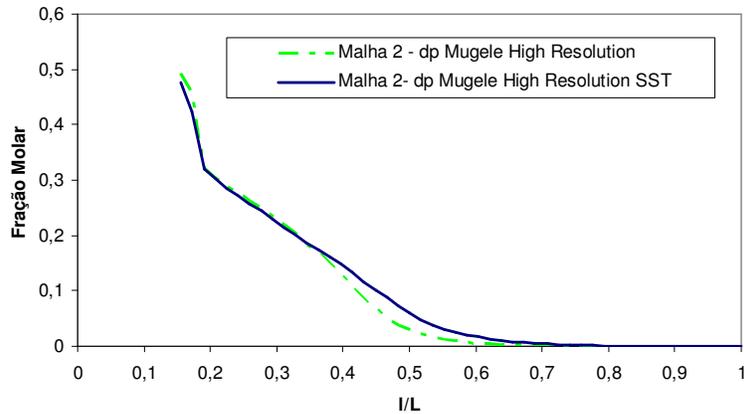


Figura 6.15: Fração molar do pseudo no vapor para diferentes modelos de turbulência.

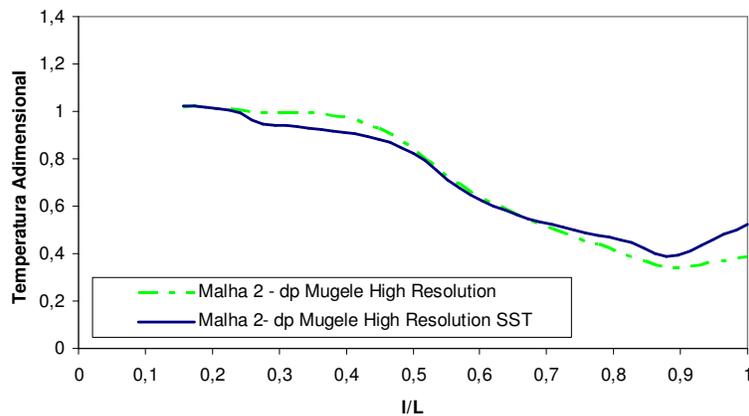


Figura 6.16: Temperatura do pseudo no vapor para diferentes modelos de turbulência.

Maiores diferenças foram encontradas para os planos médios de perfil de velocidade, Figura 6.17. O modelo k- ϵ atenua os valores obtidos para a velocidade para as regiões próximas a entrada de líquido. Entretanto, considerando as baixas velocidades observadas nesta região, as diferenças obtidas entre os dois modelos podem ser consideradas desprezíveis. Por se tratar de um equipamento onde não são observadas regiões de recirculação (que vêm a promover variações de pressão nos escoamento), o fato de não terem sido notadas diferenças entre os dois modelos de turbulência é explicado dado

que o modelo SST consiste na combinação do modelo k- ϵ (para a região interna do escoamento) com o modelo k- ω (para a região próxima da parede).

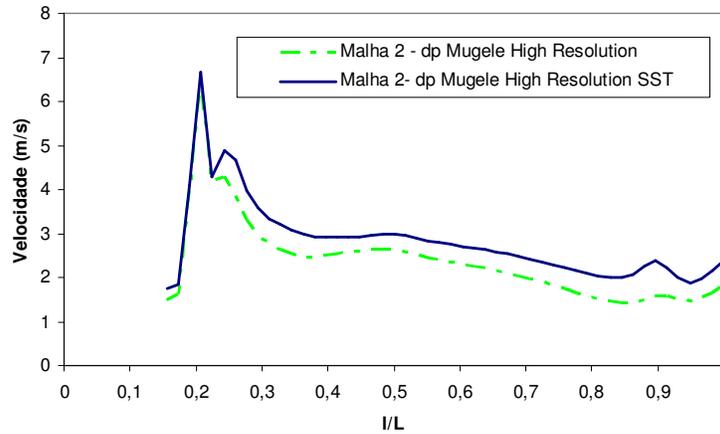


Figura 6.17: Velocidade do pseudo no vapor para diferentes modelos de turbulência.

As diferenças observadas não justificam o uso de um modelo de turbulência que emprega três equações (SST) a mais para o cálculo dos tensores turbulentos quando comparado com modelo k- ϵ padrão, diminuindo desta forma o tempo computacional envolvido. Desta forma, optou-se pelo modelo mais simples.

As regiões observadas com elevação da temperatura de vapor, considerando os valores médios da temperatura, como por exemplo na Figura 6.16 se justificam pela análise na Figura 6.18 (b), onde são identificados regiões para o escape do vapor.

O comportamento observado para a trajetória das gotas do spray empregado pode ser visualizado na Figura Figura 6.19 além da condição de contorno da parede, onde não existe a restituição das gotas para o domínio.

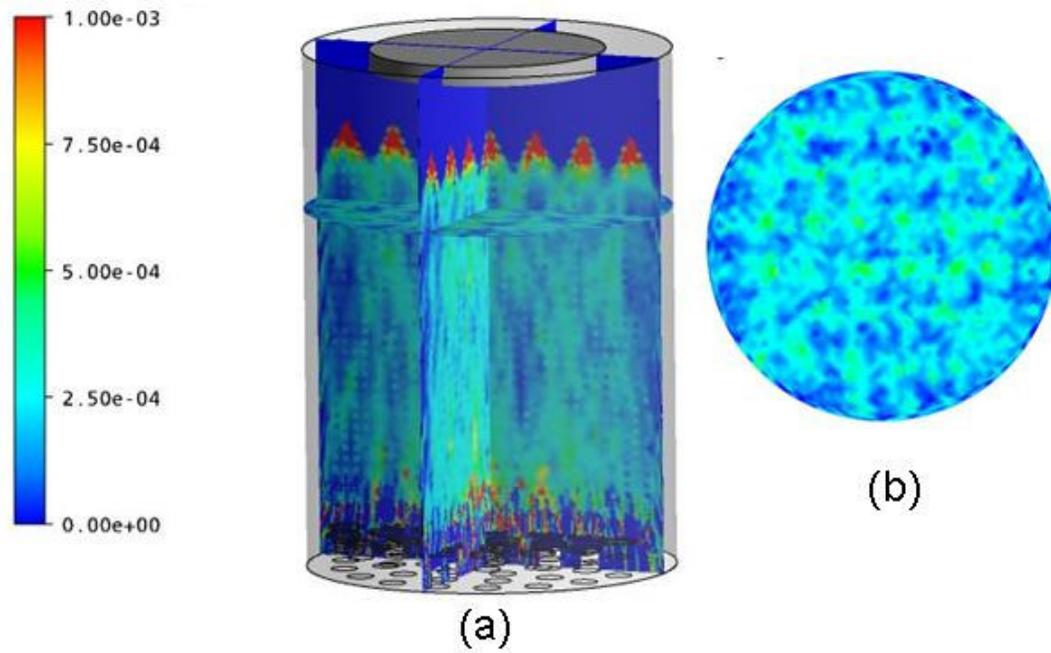


Figura 6.18: (a) Fração volumétrica média de líquido, (b) Plano de corte a 1 m do distribuidor spray.

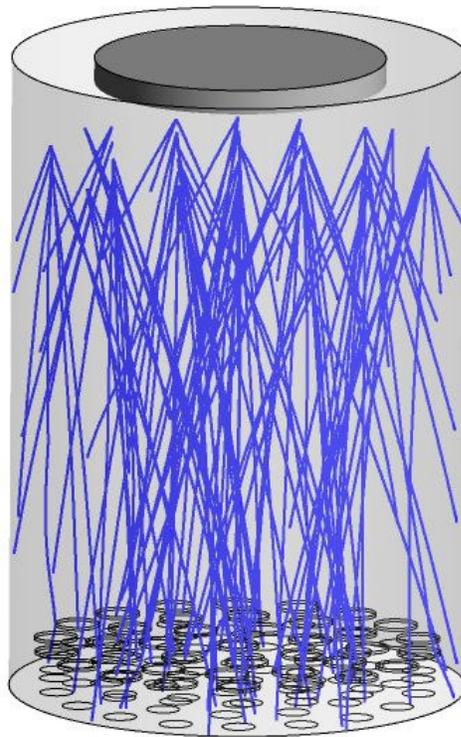


Figura 6.19: Trajetória das gotas.

6.2.5 Análise fluidodinâmica do escoamento

A apresentação do detalhamento para o estudo do comportamento fluidodinâmico da fase contínua e a interação entre as fases contínuas e dispersa foi discutido no item 3.5- Compreendendo a Fluidodinâmica do Escoamento.

Os resultados para a análise da fluidodinâmica na coluna de destilação a vácuo indicam que em função da entrada da vapor as regiões com maiores gradientes turbulentos são próximas a entrada do vapor e na região do distribuidor tipo *spray*, conforme Figura 6.20.

Durante a concepção de um projeto onde a interação entre as fases é primordial para a obtenção da maior eficiência para a troca de calor e massa, especial atenção deve ser dada a entrada da fase contínua, como o apresentado na Figura 6.21, onde os maiores valores para a dissipação da energia turbulenta são observados.

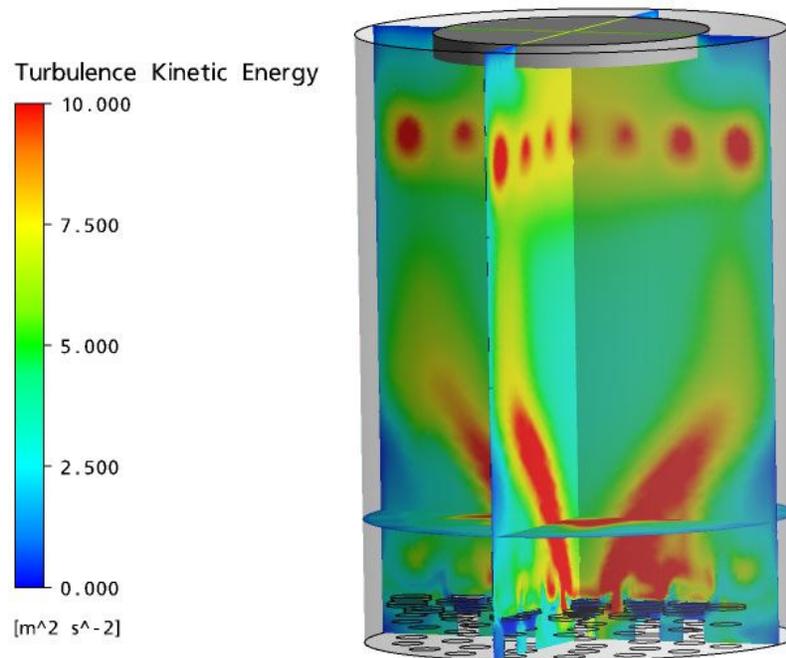


Figura 6.20: Energia cinética turbulenta para a fase contínua.

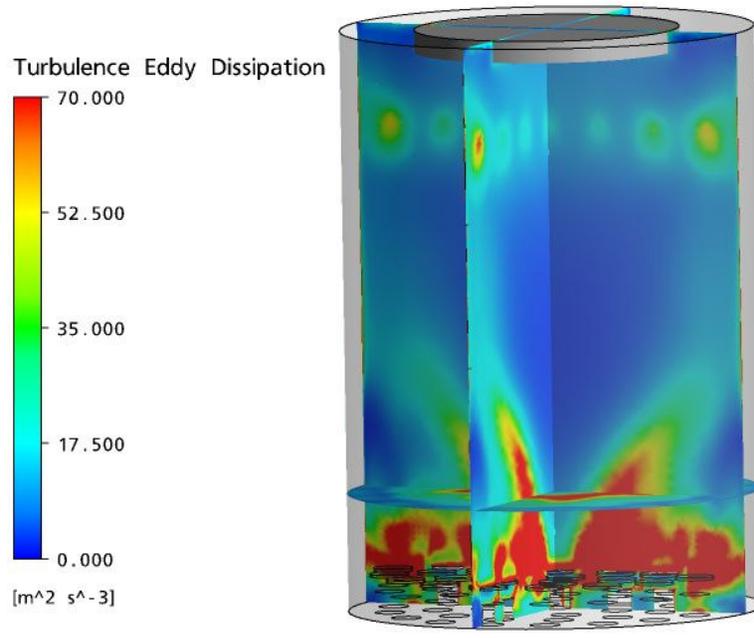


Figura 6.21: Taxa de dissipação de energia turbulenta.

Para a análise da relação do campo turbulento do vapor, duas escalas de tempo são usadas: a escala integral Euleriana de turbulência do fluido (t_c), Figura 6.22, e a escala dissipativa de Kolmogorov (t_k). Por se tratar de uma relação direta entre a razão da energia cinética turbulenta e a dissipação de energia turbulenta, os altos valores de t_c indicarão as regiões de maior turbulência. Para a coluna de destilação a vácuo as regiões de maior dissipação de energia turbulenta são observadas na região próxima a entrada do equipamento.

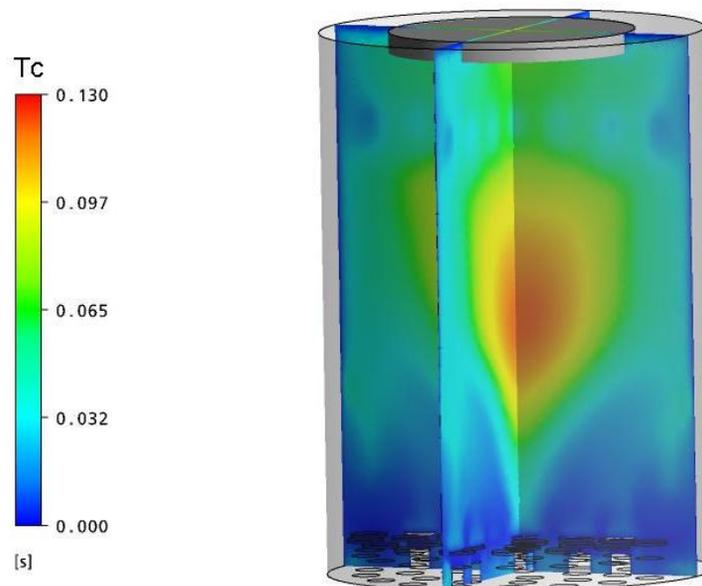


Figura 6.22: Escala integral Euleriana de turbulência do fluido (t_c).

A escala dissipativa de Kolmogorov indica as regiões onde se apresentam os menores vórtices dentro do escoamento; conseqüentemente, estas regiões apresentam maior dissipação de energia. Por se tratar da relação entre forças viscosas e a difusão turbulenta, regiões com valores superiores a 1 para t_k indicam o predomínio da difusão molecular, por outro lado regiões com valores de t_k inferiores a um existe o predomínio da turbulência no escoamento. Para o estudo da região de interesse na região próxima a entrada do vapor são observadas regiões com o predomínio dos efeitos turbulentos Figura 6.23. Tanto a escala de tempo T_c como T_k , levam em consideração para a influência, apenas, da fase vapor sobre o escoamento, a fase contínua não é considerada na análise destas variáveis.

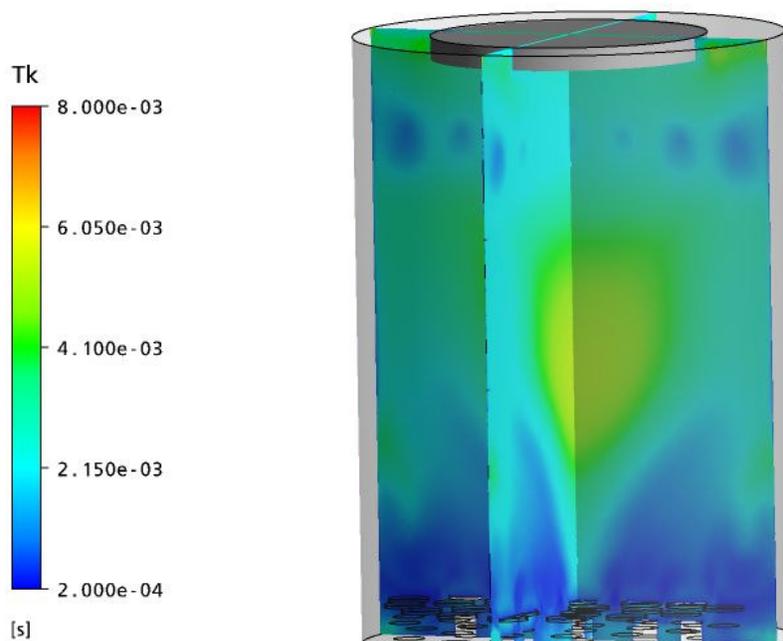


Figura 6.23: Escala dissipativa de Kolmogorov (t_k).

Para analisar as propriedades do escoamento da gota, as escalas de tempo de relaxação da gota (t_d) e a correlação turbulenta gota-vapor (t_{dg}) foram empregadas. Por se tratar da relação inversa com o coeficiente de arraste (C_D), regiões com os maiores valores para t_d indicarão a grande inércia da gota em relação à fase contínua. As gotas não dependem do campo de velocidade da fase contínua e conseqüentemente ocorrerá baixa troca efetiva de calor e massa nessas regiões. Na região próxima à base do equipamento, nota-se a existência de baixa inércia da gota, Figura 6.24, nesta região o comportamento deveria ser o contrário do observado.

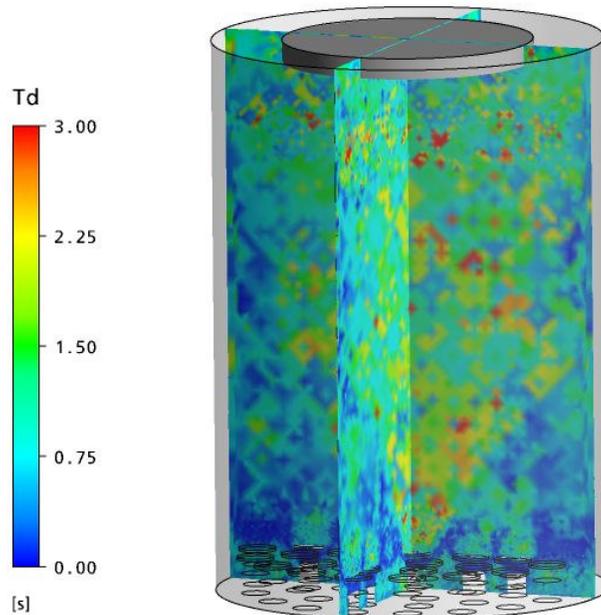


Figura 6.24: Tempo de relaxação da gota (t_d).

Na Figura 6.25 para a análise da correlação turbulenta gota-vapor (t_{dg}), os altos valores indicarão regiões com alta troca de calor e massa no escoamento, para a coluna de destilação de estudo. Tais regiões são observadas na região superior do equipamento, entretanto para uma condição otimizada de operação o ideal é que esta região esteja próxima à entrada do vapor.

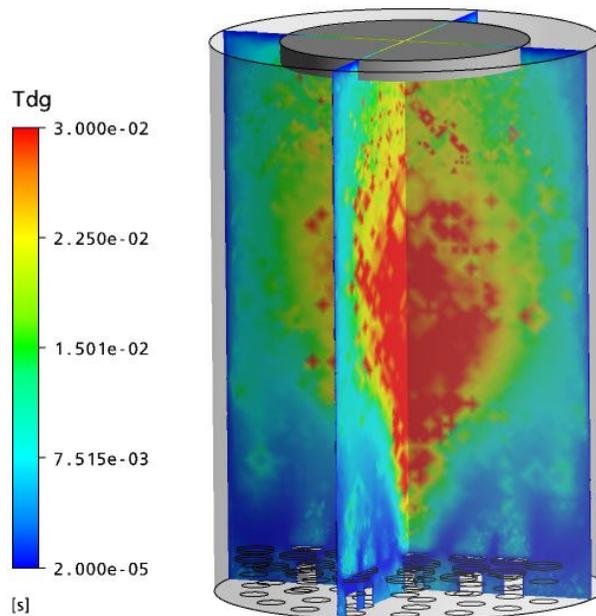


Figura 6.25: Correlação turbulenta gota-vapor (t_{dg}).

A análise de Stokes na escala de Kolmogorov (S_{tk}), por se tratar da razão entre o tempo de relaxação da gota (t_d) e a dissipação de Kolmogorov (t_k) indica que para regiões com valores de S_{tk} tendendo a zero, a velocidade da gota se aproxima da velocidade da fase contínua, ou seja, a gota tende a se comportar como a fase fluida. Para regiões com S_{tk} tendendo ao infinito a velocidade da gota tende a zero e, conseqüentemente, a velocidade da gota não é afetada pelo fluido. Regiões com valores de S_{tk} iguais a 1 indicam a possibilidade da ocorrência de agrupamentos (cluster) de gotas, podendo chegar à coalescência. Para o equipamento de estudo poucas regiões com possibilidades de coalescência foram observadas, Figura 6.26, indicando que o modelo empregado é adequado para as considerações feitas. Para cada estudo considerando a variação da velocidade de vapor e a distribuição do diâmetro de gotas é necessário um novo estudo das escalas de tempo.

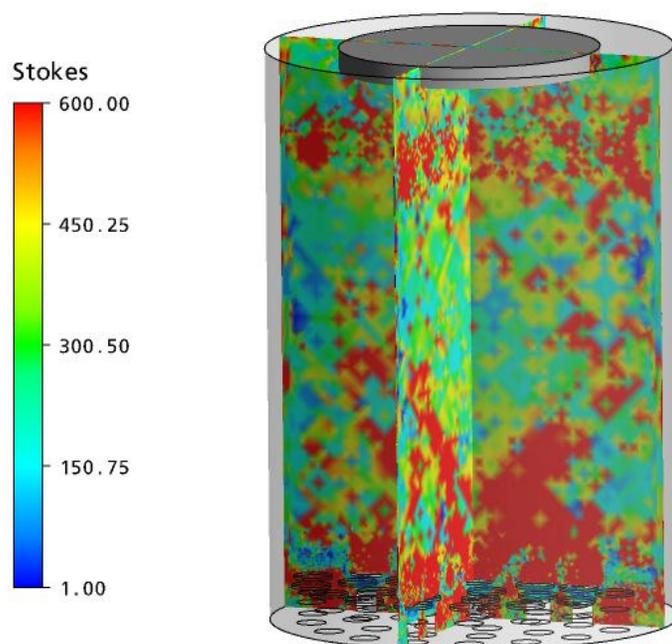


Figura 6.26: Stokes na escala de Kolmogorov (S_{tk}).

6.3 Validação do Modelo de CFD Empregado

Por se tratarem de informações internas da PETROBRAS, os resultados para validação do modelo empregado serão comparados em relação às diferenças globais obtidas entre os dados experimentais e o resultados obtidos com o modelo de CFD proposto considerando a malha 2 empregada (1.110.274 nós), para 200 trajetórias de gotas por ponto

de injeção no *spray*, com o modelo advectivo do tipo *high resolution* e modelo de turbulência k-ε. A Tabela 6.2 apresenta as diferenças entre os valores experimentais e os resultados obtidos com as simulações de CFD. Para validação do modelo foi considerada a diferença entre os valores para as fases vapor e líquido da propriedade analisada. Os valores iniciais para a diferença entre as propriedades são as mesmas já que as simulações foram realizadas considerando as mesmas características iniciais das correntes. Considerando este balanço global para validação dos resultados, nota-se boa concordância entre os resultados obtidos numericamente. Considerando a variação de 157 °C entre a corrente de vapor e líquido para a condição inicial do sistema a diferença de 13 °C observada entre estas correntes para a condição final, isto indica concordância entre os resultados. A análise para a composição dos pseudocomponentes também indica excelente concordância entre os resultados. Quando a troca térmica experimental é comparado com o valor observado com o modelo numérico adotado, a diferença de aproximadamente 14% observada consolida o modelo numérico empregado.

Tabela 6.2: Valores globais comparativos entre os resultados analisados para o vapor.

		Experimental	ANSYS CFX
Inicial	Temperatura (°C)	204	204
	Fração Mássica	0,872	0,872
Final	Temperatura (°C)	79	66
	Fração Mássica	0	0
Carga Térmica (kcal/h)		$5,4 \cdot 10^6$	$6,76 \cdot 10^6$

Duas metodologias foram empregadas para validação dos resultados obtidos, conforme discutido no Capítulo 5 – Aparato de Estudo. A abordagem da aleta reproduz o comportamento observado experimentalmente e as diferenças observadas considerando o diâmetro médio de Sauter e a distribuição de gotas segundo a correlação proposta por

Mugele apresentam diferenças insignificantes, chegando a ser imperceptível observar diferenças entre elas, como mostra a Figura 6.27. A metodologia considerando a variação da temperatura ao longo da elevação do equipamento não representa a tendência de perfil de temperatura observada experimentalmente, indicando existir uma forte tendência do costado do equipamento em reproduzir o comportamento observado em aletas.

A distribuição não uniforme de vapor em função das características da entrada do equipamento dificulta a validação dos resultados, além das inúmeras variáveis que podem exercer forte impacto no perfil de temperatura do equipamento e, conseqüentemente, na velocidade de ascensão do vapor, equilíbrio termodinâmico, entre outras. As próprias variações na entrada do líquido como o ângulo do *spray* e a distribuição de diâmetro das gotas impacta significativamente nos resultados. O total controle das variáveis mencionadas é difícil de ser garantido em uma unidade em operação.

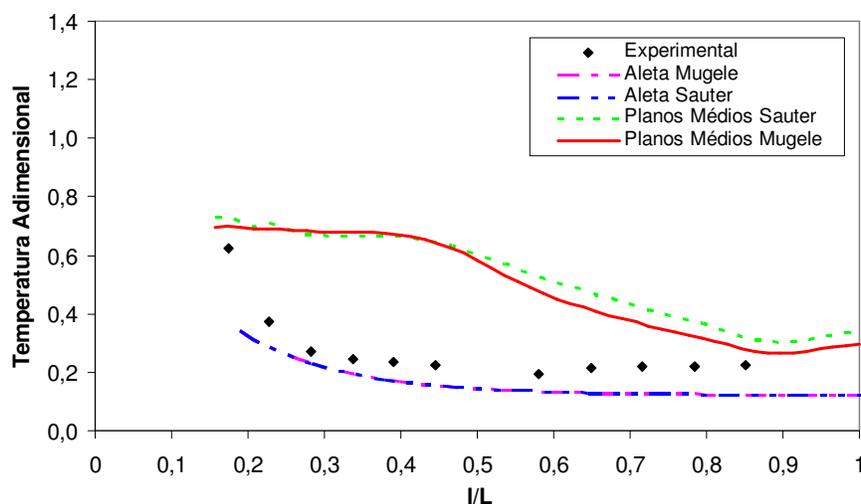


Figura 6.27: Validação do modelo empregado.

6.4 Análise de Sensibilidade Paramétrica

A partir da validação da metodologia empregada foram feitos estudos de otimização geométrica para a coluna de destilação a vácuo. Foi considerado o termo “otimização” para representar a condição ótima entre as escolhidas. Foram consideradas duas novas geometrias, uma delas representando 85,7% e a outra 71,4% da altura da geometria original. Todas as demais condições foram mantidas, com o mesmo nível de *spray* em

relação ao topo do equipamento e as características das correntes do equipamento. O objetivo desta análise é verificar se o equipamento com as mesmas características de disposição dos *sprays* e entrada de vapor, entretanto com menor altura mantém as mesmas características de temperatura e composição, isto implicará em menor custo de material para construção do equipamento além da alteração na concepção das linhas de transferência.

Foi verificado que através análise da fração mássica do pseudocomponente no vapor, Figura 6.28, que a composição do vapor na saída se mantém. Como na seção analisada o equilíbrio ocorre nos primeiros metros do equipamento e as alterações geométricas propostas não exercem impacto sobre esta variável analisada. Além da garantia de composição global se nota que o mesmo padrão de escoamento é mantido.

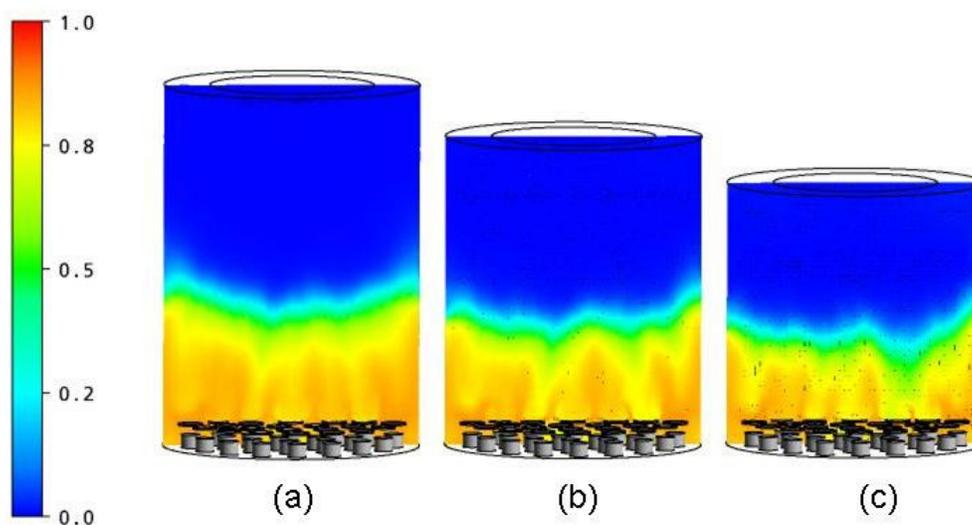


Figura 6.28: Perfil de fração mássica do pseudo para diferentes alturas do equipamento: (a) altura original, (b) 85,7% da altura original e (c) 71,4% da altura original.

Diferentemente do observado para a fração volumétrica, a temperatura do vapor sofre impacto mais relevante ao ser diminuída a elevação do equipamento, Figura 6.29. A redução na altura promove um acréscimo de 22% para a temperatura do vapor para a condição ilustrada na Figura 6.29 (b) e de 58% para a condição da Figura 6.29 (c) quando

comparadas com a altura real do equipamento. A região analisada considerou a média da temperatura na saída da coluna a vácuo, região do demister. Por se tratar de uma região de troca térmica a altura do equipamento será imprescindível.

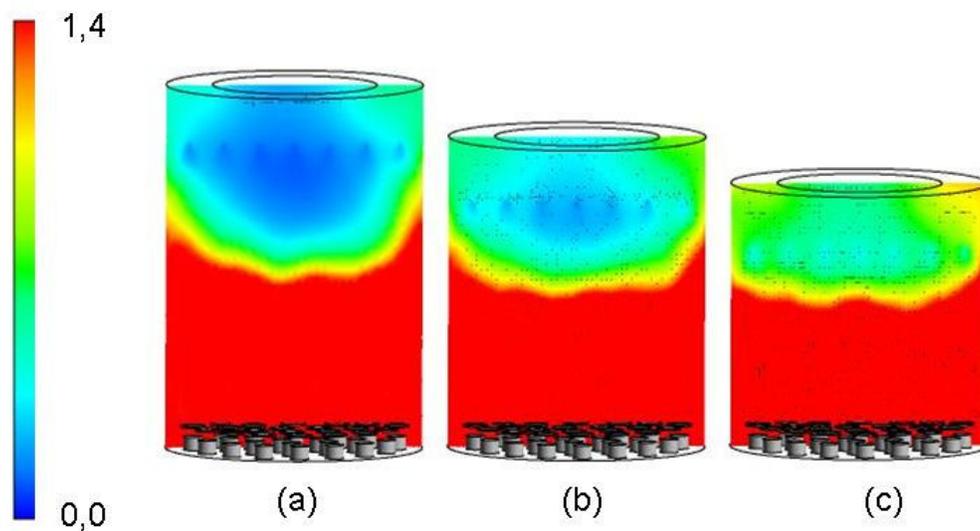


Figura 6.29: Perfil de temperatura do vapor para diferentes alturas do equipamento: (a) altura original, (b) 85,7% da altura original e (c) 71,4% da altura original.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O presente trabalho apresentou uma metodologia de estudo da fluidodinâmica em colunas de destilação a vácuo com distribuidores do tipo *sprays*, considerando o equilíbrio líquido-vapor representados através de uma abordagem Euleriana-Lagrangeana para a representação simultânea da transferência de calor e massa na seção de interesse.

Para a solução numérica foi empregado o *software* comercial de CFD chamado ANSYS CFX versão 11.0, o modelo de equilíbrio termodinâmico necessário foi implementado via sub-rotinas FORTRAN acopladas ao código comercial. Os resultados obtidos nas simulações foram validados com dados teóricos e experimentais, considerando análises globais e locais no sentido axial do equipamento.

A simplificação da análise considerando uma abordagem unidimensional empregada se mostrou capaz de fornecer noções das tendências de equilíbrio no sistema de estudo, além de ser uma metodologia rápida para identificação de possíveis falhas no modelo empregado servindo como solução referencial. No entanto, para compreensão da influência da fluidodinâmica do escoamento no funcionamento da coluna, o modelo 3D é fundamental e insubstituível.

O modelo 3D empregado demonstrou predizer de forma eficiente as tendências de comportamento observadas na prática, com bons resultados para os balanços globais quando comparados com os dados experimentais. Os resultados para o perfil de temperatura e composição no interior do equipamento apresentou boa concordância com os resultados observados experimentalmente. Contudo, os diversos fenômenos envolvidos na operação do aparato em questão fazem com que a completa certeza da representação fiel dos fenômenos envolvidos não tenha sido alcançada, principalmente pela falta de dados para validação mais completos e confiáveis.

O diâmetro de gota é parâmetro preponderante para a representação da transferência de calor e massa. O uso de valores de diâmetro obtidos com os *sprays* para água, mesmo considerando a correção da distribuição através de uma correlação (Mugele) se apresenta como, possivelmente, uma das maiores fontes de incerteza e de erro no modelo. A correção de diâmetro levando em consideração as propriedades do fluido de interesse causa uma redução do diâmetro de gota em relação ao diâmetro da água, fornecido pelo fabricante. Isto garante uma troca de calor e massa, possivelmente, mais conservativa da distribuição caso esta tenha sido feita com o fluido real.

A abordagem Euleriana-Lagrangeana se apresentou como adequada considerando o alto número de *sprays* envolvidos a serem discretizados, o que seria praticamente inviável de ser feito com um abordagem Euleriana-Euleriana, considerando o nível de detalhamento necessário para a correta representação dos distribuidores.

A malha numérica tetraédrica em coordenadas cartesianas, com 1.110.274 nós, além do número de 200 trajetórias de gotas por ponto de injeção empregada nas simulações apresentou-se adequada para a representação dos fenômenos de interesse.

A análise comparativa entre os modelos de turbulência k- ϵ e SST indicaram que, embora seja um modelo menos robusto, o modelo k- ϵ é capaz de prever o comportamento fluidodinâmico existente no equipamento, já que não foram observadas diferenças relevantes entre os resultados obtidos com ambos os modelos.

O uso das escalas de tempos permitiu a compreensão da influência do tipo de entrada de vapor no equipamento sobre o escoamento, além de identificar a necessidade de otimização para maior homogeneidade na distribuição da fase. As escalas de tempo se apresentam como metodologia extremamente útil para a compreensão dos fenômenos envolvidos, no entanto a sua aplicação em trabalhos de CFD não tem sido tão freqüente.

Apesar de terem sido revisados na literatura, questões importantes para a reprodução de escoamentos multifásicos (como a modelagem da quebra e coalescência) não foram investigados. O estudo se concentrou em investigar a necessidade da implementação dos modelos de quebra e coalescência através do uso das escalas de tempo. Foi constatado como

adequada a simplificação em desconsiderar estes fenômenos na modelagem deste caso de estudo.

A análise para a sensibilidade paramétrica estudada indicou que tanto na geometria representando 85,7% da altura real como o caso de 71,4% as características para a composição da corrente são mantidas, no entanto este fenômeno não é observado para a temperatura, já que a redução na altura implica no aumento da temperatura no topo da coluna.

A ferramenta computacional empregada na pesquisa, mostrou-se bastante eficaz e proveitosa para o estudo do escoamento vapor-líquido em uma coluna de destilação a vácuo. O *software* comercial agrega dentro de si uma grande quantidade de algoritmos prontos o que reduz substancialmente os esforços do pesquisador, sendo capaz de acoplar equações novas às já existentes, como por exemplo, neste caso de estudo do acoplamento do equilíbrio termodinâmico.

7.1 Principais dificuldades encontradas

Durante o desenvolvimento do estudo de transferência de calor e massa em colunas de destilação a vácuo as principais dificuldades encontradas foram as seguintes:

- o elevado número de nós implica na necessidade de simulações em paralelo. No entanto, o estudo de fenômenos cada vez mais complexos e de equipamentos simulados com maior detalhamento geométrico faz com que isto seja uma tendência natural:
- o uso de rotinas:
 - pouca documentação para a implementação:
 - por se tratar de uma abordagem E-L nem todas as variáveis Lagrangeanas estão disponíveis para o usuário:
- simulação extremamente sensível aos parâmetros de definição dos componentes para o cálculo do equilíbrio (entalpia de referência):
- elevado tempo computacional para o fechamento dos balanços:

- CFX-10: \cong 30 dias;
- CFX-11: \cong 20 dias.

7.2 Sugestões para trabalhos futuros

Em relação à metodologia aplicada para o estudo da transferência de massa e calor em colunas faz-se as seguintes sugestões:

- análise do equilíbrio em condições não ideais;
- aquisição de dados experimentais para os bicos *sprays*. A representação do diâmetro de gota é fundamental para a análise dos fenômenos envolvidos;
- aquisição de dados experimentais confiáveis de P, T e composição internas na torre.

Em relação à simulação para a representação de escoamentos multifásicos com maior realismo físico, é necessário que sejam analisados modelos mais precisos para os seguintes fenômenos.

- termos de troca de momento entre as fases. Ainda há muita divergência na literatura e, não existem bons modelos para a transferência da quantidade de momento e massa.
- turbulência em escoamentos multifásicos: este fenômeno é um dos principais responsáveis pela descrição do caminho do escoamento e, ainda não existe uma abordagem eficaz para este fenômeno;
- Inclusão de modelagem para prever a formação de filme líquido na parede.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABADIE, E. Relatório da Petrobrás sobre: *Processos de Refinação*, Rio de Janeiro – RJ, 2003.

ANSYS CFX. *ANSYS CFX – Solver Theory Guide. ANSYS CFX Release 11.0*, Canonsburg, PA, USA, 2007.

AZNAR, M. *Termodinâmica do Equilíbrio de fase*. Notas de aula, Curso de Mestrado da FEQ/Unicamp, 2002.

BABINSKY, E. and SOJKA, P. E. *Modelling drop size distributions*. *Progress in energy and Combustion Science*, v. 28, pp 303 – 329, 2002.

BECK, J. C., WATKINS, A. P. *The droplet number moments approach to spray modeling: The development of heat and mass transfer sub-models*. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 24, pp. 242 – 259, 2003.

BEJAM, A. *Advanced Enginnering Thermodynamics*. John Wiley & Sons, 1988.

BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. *Transport Phenomena*. 2 ed. John Wiley & Sons, 2002.

BOZORGI, Y., KESHAVARZ, P., TAHERI, M., FATHIKLJAH, J. *Simulation of a spray scrubber performance with Eulerian/Lagrangian approach in the aerosol removing process*. *Journal of Hazrdous Materials*, B137, pp. 509-517, 2006.

CALDAS, J. N., LACERDA, A. I., VELOSO, E., PASCHOAL, L.C. M. *Internos de Torres pratos & recheios*. 2 ed. Rio de Janeiro, Interciência: Petrobras, pp.393-412, 2007,.

CHAO, K. C., and SEADER, J. D. *A generalized correlation of vapor-liquid equilibria in hydrocarbon mixtures*, *AICHE J.*, v. 7(4), pp. 598-605, 1961.

CROWE, C. T., SOMMERFELD, M., TSUJI, Y. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press LLC, USA, 1998.

DAMIAN, R.B. *Acomplamento de balanço populacional à simulação computacional de escoamentos multifásicos polidispersos*. Dissertação de Mestrado apresentada à Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química, 2007.

ELGHOBASHI, S. *On predicting particle-laden turbulent flows*. Applied Scientific Research , v. 52, pp. 309-329, 1994.

FAETH, G. M. *Mixing, transport and combustion in sprays*. Process Energy Combustion Science, v. 13, pp. 293-345, 1987.

GRAYSON, H. G., and STREED, C. W. *Vapor-Liquid Equilibria for High Temperature, High Pressure Hydrocarbon-Hydrocarbon Systems*. 6th World Congress, Frankfurt am Main, June 19-26, 1963.

GUET, S., OOMS, G., OLIEMANS, R. V. A., MUDDE, R. F. *Bubble injector effect on the Gas lift efficiency*. Fluid Mechanics and Transport Phenomena. v. 49, pp. 2242-2252, 2003.

GUIDASPOW, D. *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. 2 ed. ed. San Diego: Academic Press, 1994.

GUNZBURGER, M. D., NICOLAIDES, R. A. *Incompressible computational fluid dynamics: trends and advances*. New York: Cambridge University, 1993.

HANSON, D. W., LIEBERMAN, N. P., LIEBERMAN, E. T. *De-entrainment and washing of flash-zone vapors in heavy oil fractionators*. Hydrocarbon Processing, pp. 55-60, July 1999.

HEDE, P. D., BACH, P., JENSEN, A. *Two-fluid spray atomization and pneumatic nozzles for fluid bed coating/agglomeration purposes: A review*. Chemical Engineering Science 63, pp. 3821-3842, 2008.

INCROPERA, Frank P.; Dewitt, David P. *Fundamentos da transferência de Calor e de Massa*. . LTC , 5 ed, Rio de Janeiro, RJ, 2003.

KIM, H., SUNG. *The effect of ambient pressure on the evaporating of a single droplet and a spray*. Combustion and Flame. v.135, pp. 261 – 270. 2003.

KISTER, H., Z. *Distillation Design*. McGraw-Hill, Inc. 1992.

LEFEBVRE, A. H. *Atomization and Sprays*. Taylor & Francis. Purdue University, West Lafayette, Indiana, 1989.

MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. LTC. 2 ed, Rio de Janeiro, 2004.

MASON, D.J., LEVY, A., *A comparison of one-dimensional and three-dimensional models for the simulation of gas-solids transport systems*. Applied Mathematical Modelling, v. 22, pp. 517-532, 1998.

MEIER, H. F., *Modelagem fenomenológica e simulação bidimensional de ciclones por técnicas da fluidodinâmica computacional*. Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 1998. Tese (Doutorado).

MEIER, H. F., ALVES, J. J. N., MORI, M. *Comparison between staggered and collocated grids in finite – volume method performance for single and multi – phase flows*. Computer and Chemical Engineering, v. 23, p 247 – 262, 1999.

MENTER, F. R. KUNTZ, M, LANGTRY, R. *Ten Years of Industrial Experience with the SST Turbulence Model*. Turbulence, Heat and Mass Transfer 4, begell House, Inc. 2003.

MEYER, M., HENDOU, M., PREVOST, M. *Simultaneous heat and mass transfer model for spray tower design: application on VOCs removal*. Computers chem.. Engng, v. 19, pp. S277 – S282, 1995.

MICHALSKI, J. *Aerodynamic characteristics of FGD spray towers*. Chem. Eng. Technol. v. 20, pp. 108-117, 1997.

MUDDE, R. F., SIMONIN, O. *Two-and three-dimensional simulations of a bubble plume using a two-fluid model*. Chem. Engineering Science, v. 54, pp. 5061 – 5069, 1999.

MUDDE, R. F., VAN DEN AKKER, H. E. A. *2D and 3D simulations of a internal airlift*

loop reactor on the basis of two-fluid model. Chem. Engineering Science, v. 56, pp. 6351 – 6358, 2001.

MUGELE, R. A and EVANS, H. D. *Droplet size distribution in sprays*. Industrial and Engineering Chemistry, v. 43, n° 6, pp. 1317 – 1324, june 1951.

NORILER, D. *Modelagem Matemática e Simulação Numérica do Escoamento Gás-Sólido num Prato de Destilação*. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas. São Paulo, 2003.

OLUJIC, Z. *Liquid distribution performance of multi-nozzle spray distribution*. Prepared for presentation in the Distillation Honors Session (John Kunesh Honoree) at the AIChE Annual Meeting, November 4-9, 2001

PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation. New York, 1980.

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, pp. 1787 – 1806. 1971.

PEIRANO, E., LECKNER, B. *Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion*. Department of Energy Conversion. Chalmers university of technology Göteborg, 1998.

PIGFORD R., PYLE, C. *Performance characteristics of spray type absorption equipment*, Ind. Eng. Chem. v. 43, pp. 1649–1662, 1951.

PRAKASH, C. and PATANKAR, S. V. *A Control Volume-Based Finite-Element Method for Solving the Navier-Stokes Equations Using Equal-Order Velocity-Pressure Interpolation*. Numerical Heat Transfer, v. 8, pp.259-280, 1985.

PRO - II 5.61 Reference Manual, 2002.

RHIE, C. M. and CHOW, W. L. *Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation*. American Institute of Aeronautics and Astronautics

Journal, 21(11):1525-1532, November 1983.

SANTANA, E. M. *Transferência de calor e massa em processos de borbulhamento*. Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 1994. Tese de Doutorado.

SCHNEIDER, G. E. and RAW, M. J. A Skewed, *Positive Influence Coefficient Upwinding Procedure for Control-Volume-Based Finite Element Convection-Difusion Computation*. Numerical Heat Transfer, v. 8. pp. 1-26, 1986.

SCHMEHL, R., ROSSKAMP, H., WILLMANN, M., WITTIG, S. *CFD analysis of spray propagation and evaporation including wall fill formation an spray/film interaction*. International Journal of Heat and Fluid Flow, v. 20, pp. 520-529, 1999.

SELLENS, R. W. and BRZUSTOWSKI, T. A. *A simplified prediction of droplet velocity distributions in a spray*. Combustion and flame, v. 65, pp. 273-279, 1986.

SHARMA, M. and MEHTA, K. *Mass transfer in spray towers*. Chem. Eng. v. 15, pp. 1440-1444, 1970.

SOVANI, S. D., SOJKA, P. E. and SIVATHANU, Y.R. *Prediction of drop size distributions from first principles: The influence of fluctuations in relative velocity and liquid physical properties*. Atomization and Sprays, v. 9, pp. 133-152, 1999.

SPIEGEL, L., MEIER, W. *Distillation columns with structured packings in the next decade*. Institution of Chemical Engineers (ICHEME), v. 81, Part A, January 2003.

TROMPIZ, C. J., FAIR, J. R. *Entrainment from spray distributors for packed columns*. Ind. Eng. Chem, v. 39, pp. 1797 – 1808, 2000.

VAN NESS, H. C., SMITH, J. M., ABBOTT, M. M. *Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química*. LTC. 5ed, Rio de Janeiro, 2000.

VERSTEEG, H. K. e MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method*. Longman Group Ltda. Longman, England. 1995.

WALAS S. M. *Phase Equilibria in Chemical Engineering*. Butterworth Publishers, EUA 1985.

WILCOX, D. C. *Turbulence Modelling for CFD*. DCW Industries, pp. 314, 2000.