

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**GABRIEL HENRIQUE JUSTI**

**APLICAÇÃO DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**  
**NA AVALIAÇÃO DA HIDRODINÂMICA DE ESTÁGIO**  
**EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO**

**SÃO CARLOS-SP**  
**26 de Março de 2012**

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**GABRIEL HENRIQUE JUSTI**

**APLICAÇÃO DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL  
NA AVALIAÇÃO DA HIDRODINÂMICA DE ESTÁGIO  
EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO**

**Dissertação de Mestrado apresentada ao  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia  
Química da Universidade Federal de São  
Carlos para a obtenção do título de Mestre em  
Engenharia Química.**

**Orientação: Prof. Dr. José Antônio Silveira  
Gonçalves.**

**SÃO CARLOS-SP**  
**26 de Março de 2012**

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da  
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

J96af

Justi, Gabriel Henrique.

Aplicação da fluidodinâmica computacional na avaliação da hidrodinâmica de estágio em colunas de destilação / Gabriel Henrique Justi. -- São Carlos : UFSCar, 2012. 118 f.

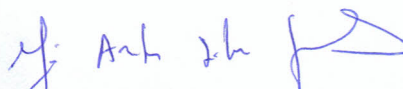
Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2012.

1. Engenharia química. 2. Fluidodinâmica computacional. 3. Destilação. 4. Simulação computacional. 5. Hidrodinâmica. I. Título.

CDD: 660 (20<sup>a</sup>)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE  
**GABRIEL HENRIQUE JUSTI** APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-  
GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE  
SÃO CARLOS, EM 26 DE MARÇO DE 2012.

BANCA EXAMINADORA:



José Antônio Silveira Gonçalves  
**Orientador, UFSCar**



Rodrigo Béttega  
**UFU**



Ronaldo Guimarães Corrêa  
**UFSCar**

Este trabalho foi desenvolvido no Departamento de Engenharia Química-DEQ pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química- PPGEQ da Universidade Federal de São Carlos-UFSCar.

Contou com o apoio financeiro do programa: **PRH-ANP/MCT Nº 44.**



*A minha família,  
pelo amor e por acreditar em mim...*

## AGRADECIMENTOS

Agradeço,

Primeiramente a Deus por me fazer acreditar e alcançar meus objetivos.

Aos meus Pais, Maria e Carlos, e aos meus Irmãos, Karla e Carlos, por terem me ajudado durante todos esses anos, com incentivos e de nunca deixarem de acreditar na minha capacidade, mesmo estando longe, confiaram no meu trabalho e na minha dedicação.

Aos meus Tios, Olírio e Silvina, por terem me ajudado e por todo o apoio dado durante esses anos, principalmente nos momentos de desânimos.

Ao Professor e Orientador Dr. José Antônio Silveira Gonçalves, pela amizade construída durante esses anos e por ter orientado este trabalho com muita atenção, dedicação e zelo. E também, por acreditar em mim e me apoiando nos momentos difíceis ao longo do Mestrado.

Aos amigos Carlos Eduardo Crestani e Vinícius Vescovi (República Auto Posto), pela amizade e pelo companheirismo durante esses anos de Mestrado. E também ao grande amigo Alfredo Weber.

Ao técnico de informática do DEQ, Eudoro Lemos, pelo auxílio na instalação do *software* e por ajudar a resolver alguns problemas no computador ao longo desses anos.

Aos companheiros e amigos da Pós-Graduação do DEQ, pela amizade feita ao longo desses dois anos.

À Agência Nacional do Petróleo – ANP – e à Financiadora de Estudos e Projetos – FINEP – que por meio do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo, Gás e Biocombustíveis – PRH-ANP/MCT, financia o PRH 44 - Formação de Pessoal em Biocombustíveis

*Gabriel Henrique Justi.*

*“Cada sonho que você deixa pra trás,  
é um pedaço do seu futuro que deixa de existir.”*  
**(Steve Jobs)**

*“Nossas dúvidas são traidoras e nos fazem perder o que,  
com frequência, poderíamos ganhar, por simples medo de arriscar.”*  
**(William Shakespeare)**



## RESUMO

O desenvolvimento de projetos de processos químicos tem recebido aperfeiçoamento cada vez maior, incorporando modelos matemáticos mais sofisticados, os quais possibilitam uma maior aproximação do seu comportamento real. A coluna de destilação é um dos equipamentos de separação mais empregados na indústria e por isso, o perfeito funcionamento e otimização são fatores economicamente cruciais. Deste modo, o estudo da hidrodinâmica de pratos perfurados em coluna de destilação vem crescendo ao longo dos anos, no intuito de otimizar os fluxos de escoamento, que tem uma grande importância sobre a eficiência na transferência de massa e energia. Com o desenvolvimento de poderosos computadores, avanços em métodos numéricos e aperfeiçoamento em modelos de fluxos multifásicos, é possível a investigação de problemas complexos de escoamentos. Uma das formas de investigar esses problemas é a utilização da Fluidodinâmica Computacional. Assim, neste trabalho foi utilizado um pacote comercial de CFD para prever a hidrodinâmica em um prato perfurado, tendo como objetivo principal avaliar os campos de velocidades e compará-los com o trabalho experimental de Solari e Bell (1986). Foi proposto um modelo de duas equações com abordagem Euleriana-Euleriana, tridimensional (3-D), estado estacionário e o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  padrão para um sistema ar/água a 1 atm. As equações da continuidade e de conservação de quantidade de movimento foram empregadas no modelo para descrever a fase líquida e a fase vapor. A geometria do prato perfurado foi baseada no trabalho experimental de Solari e Bell (1986), na qual foi incluída a região do *downcomer*. Uma nova geometria de prato foi proposta para observar a hidrodinâmica. Os resultados mostram os perfis de velocidades, frações volumétricas e zonas de recirculação de líquido no prato perfurado para várias combinações de vazões de líquido e vapor. A simulação indicou a presença de zonas de recirculação e estagnação. A simulação reproduziu satisfatoriamente os resultados experimentais de Solari e Bell (1986) e a nova geometria reduziu as zonas de recirculação de líquido no prato. A metodologia proposta neste trabalho foi adequada e a técnica da Fluidodinâmica Computacional mostrou-se uma ferramenta viável e importante no desenvolvimento e otimização de pratos perfurados.

**Palavras-chave:** Fluidodinâmica computacional. Prato perfurado. Hidrodinâmica. Destilação.

## ABSTRACT

The development of the design of chemical processes has received increasing improvement, incorporating sophisticated mathematical models, which allowed better simulation of its real behavior. The distillation column is one of the most widely used separation equipment in the industry and therefore, its perfect working and optimization are economically crucial factors. Thus, the study of the hydrodynamic in distillation column sieve trays has increased over the years with the purpose to optimize the flow patterns, which is of great importance on the mass and energy transfer efficient. Due to the development of powerful computers, advances in numerical methods and improvement in models of multiphase flows, the investigation of complex flow problems is possible. One way to investigate these problems is to use Computational Fluid Dynamics. Thus, in this work we used commercial package CFD software to predict the hydrodynamics in a sieve tray, with the main objective to evaluate the velocity fields and compare them with the experimental work of Solari and Bell (1986). We proposed a two-fluid model with Eulerian-Eulerian framework, three-dimensional (3D), steady-state and the standard  $k-\varepsilon$  turbulence model for air/water system at 1 atm. The continuity and momentum conservation equations were used to describe the gas and liquid phases. The simulated sieve tray geometry was based on experimental work of Solari e Bell (1986). The simulation domain included the downcomer region. New sieve tray geometry design was proposed to evaluate the hydrodynamics. The results show the velocity profiles, volume fractions and liquid recirculation zones on the sieve tray for several combination of liquid and gas flow rates. The simulation indicated the presence of recirculation and stagnation zones, and it reproduced satisfactorily the results of Solari e Bell (1986) and the new geometry design reduced the liquid recirculation zones on tray. The proposed methodology in this work proved to be appropriate and the Computational Fluid Dynamics (CFD) techniques presented to be an important tool in the design and optimization of sieve trays.

**Keywords:** Computation Fluid Dynamics. Sieve tray. Hydrodynamic. Distillation.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Esquema de uma unidade de destilação simples.....	24
Figura 2 – Escoamento caótico em um prato perfurado.....	25
Figura 3 – Diagrama de um estágio de equilíbrio. ....	26
Figura 4 – Definições das fases que escoam no estágio $n$ . ....	28
Figura 5 – Esquema da interface líquido-vapor.....	31
Figura 6 – Representação do modelo de um estágio $n$ de não equilíbrio. ....	31
Figura 7 – As diferentes disciplinas que compõe o CFD. ....	35
Figura 8 – Etapas da análise do código CFX. ....	37
Figura 9 – Visão geral das etapas do solver. ....	39
Figura 10 – Exemplo de malha ortogonal. ....	41
Figura 11 – Exemplo de malha não ortogonal.....	42
Figura 12 – Representação de uma malha bidimensional, estruturada e não ortogonal.....	43
Figura 13 – Representação dos índices nos nós das células para uma malha estruturada em 2-D. ....	43
Figura 14 – Representação dos índices nos nós das células para uma malha estruturada em 3-D. ....	44
Figura 15 – Malhas estruturadas: (a) Tipo-H; (b) Tipo-O; e (c) Tipo-C.....	44
Figura 16 – Malhas não-estruturadas: (a) Fluxo em torno de um duto circular; e (b) Escoamento em torno da asa de um avião (aproximadamente 17.740 células).....	45
Figura 17 – Representação de um VC associado a uma malha. ....	49
Figura 18 – Visão geral dos modelos de CFD em pratos perfurados de coluna de destilação. ....	56
Figura 19 – As etapas percorridas durante a simulação. ....	63
Figura 20 – Tela principal do <i>software</i> DesignModeler <sup>TM</sup> .....	64
Figura 21 – Geometrias e dimensões dos pratos: (a) Prato (1); e (b) Prato (2). ....	65
Figura 22 – Tela principal do <i>software</i> CFX-Mesh <sup>TM</sup> .....	66
Figura 23 – Malha numérica dos Pratos (1) e (2): (a) e (d) Perspectiva; (b) e (e) Vista frontal; e (c) e (f) Vista superior. ....	67
Figura 24 – Tela principal do <i>software</i> CFX-Pre. ....	69
Figura 25 – Regiões 2-D das condições de contorno utilizadas nas simulações: (a) Prato (1); (b) Prato (2). ....	76
Figura 26 – Tela principal do <i>software</i> CFX-Solver Manager.....	79
Figura 27 – Tela principal do <i>software</i> CFX-Post.....	79
Figura 28 – Regiões <i>upstream</i> e <i>downstream</i> do trabalho experimental de Solari e Bell (1986). ....	80

Figura 29 – Perfis de velocidades do líquido para as regiões <i>upstream</i> e <i>downstream</i> do Prato (1) para $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 1,015$ (Caso 1); e (b) $F_s = 1,464$ (Caso 2).....	83
Figura 30 – Perfis de velocidades do líquido para as regiões <i>upstream</i> e <i>downstream</i> do Prato (1) para $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 0,462$ (Caso 3); e (b) $F_s = 0,801$ (Caso 4).....	85
Figura 31 – Formação de zonas de estagnação e de recirculação de líquido no Prato (1). Mapa de contorno da componente $w$ da velocidade e vetores de velocidade do líquido para $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 1,015$ (Caso 1); e (b) $F_s = 1,464$ (Caso 2). ....	86
Figura 32 – Formação de zonas de estagnação e de recirculação de líquido no Prato (1). Mapa de contorno da componente $w$ da velocidade e vetores de velocidade do líquido para $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 0,462$ (Caso 3); e (b) $F_s = 0,801$ (Caso 4). ....	87
Figura 33 – Linhas de corrente do líquido e do vapor para o Prato (1): (a) Caso 1; e (b) Caso 2.....	88
Figura 34 – Linhas de corrente do líquido e do vapor para o Prato (1): (a) Caso 3; e (b) Caso 4.....	89
Figura 35 – Campos de frações volumétricas do líquido no Prato (1) para $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 1,015$ (Caso 1); e (b) $F_s = 1,464$ (Caso 2).....	90
Figura 36 – Campos de frações volumétricas do líquido no Prato (1) para $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 0,462$ (Caso 3); e (b) $F_s = 0,801$ (Caso 4).....	91
Figura 37 – Perfis de velocidades do líquido para as regiões <i>upstream</i> e <i>downstream</i> do Prato (2) para $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 1,015$ (Caso 1); e (b) $F_s = 1,464$ (Caso 2).....	93
Figura 38 – Perfis de velocidades do líquido para as regiões <i>upstream</i> e <i>downstream</i> do Prato (2) para $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 0,462$ (Caso 3); e (b) $F_s = 0,801$ (Caso 4).....	94
Figura 39 – Formação de zonas de estagnação e de recirculação de líquido no Prato (2). Mapa de contorno e vetores de velocidades da componente $w$ de líquido para $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 1,015$ (Caso 1); e (b) $F_s = 1,464$ (Caso 2). ....	96
Figura 40 – Formação de zonas de estagnação e de recirculação de líquido no Prato (2). Mapa de contorno e vetores de velocidades da componente $w$ de líquido para $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 0,462$ (Caso 3); e (b) $F_s = 0,801$ (Caso 4). ....	97
Figura 41 – Linhas de corrente do líquido e do vapor para o Prato (2): (a) Caso 1; e (b) Caso 2.....	98
Figura 42 – Linhas de corrente do líquido e do vapor para o Prato (2): (a) Caso 3; e (b) Caso 4.....	99
Figura 43 – Campos de frações volumétricas do líquido no Prato (2) para $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 1,015$ (Caso 1); e (b) $F_s = 1,464$ (Caso 2).....	100
Figura 44 – Campos de frações volumétricas do líquido no Prato (2) para $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a) $F_s = 0,462$ (Caso 3); e (b) $F_s = 0,801$ (Caso 4).....	101
Figura C1 – Casos 1 e 2: zonas de recirculação de líquido para os Pratos (1) e (2).....	117
Figura C2 – Casos 3 e 4: zonas de recirculação de líquido para os Pratos (1) e (2).....	118

## LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Variáveis que afetam a eficiência da coluna de destilação.....	30
Quadro 2 – Relação de pesquisas em pratos perfurados de coluna de destilação utilizando o CFD.....	58
Quadro 3 – Configurações da modelagem dos Pratos (1) e (2) utilizadas no CFX-Pre.....	69
Quadro 4 – Configurações adicionais declaradas no CFX-Pre. ....	78

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Detalhes geométricos do estudo de Colwell (1979). .....	51
Tabela 2 – Características da geometria do estudo experimental de Solari e Bell (1986). .....	54
Tabela 3 – Dimensões dos pratos perfurados utilizados na simulação. ....	66
Tabela 4 – Características e qualidade da malha para o Prato (1) e (2). ....	68
Tabela 5 – Propriedades termodinâmicas e propriedades de transporte dos fluidos utilizadas nas simulações. ....	70
Tabela 6 – Valores das constantes do modelo de turbulência $k-\epsilon$ padrão. ....	74
Tabela 7 – Condições operacionais utilizadas nas simulações. ....	78
Tabela A1 – Prato (1): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (1). ....	109
Tabela A2 – Prato (1): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (2). ....	110
Tabela A3 – Prato (1): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (3). ....	111
Tabela A4 – Prato (1): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (4). ....	112
Tabela B1 – Prato (2): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (1). ....	113
Tabela B2 – Prato (2): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (2). ....	114
Tabela B3 – Prato (2): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (3). ....	115
Tabela B4 – Prato (2): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (4). ....	116

## LISTA DE ABREVIATURA E SIGLAS

CHAM Concentration Heat and Momentum Limited

CFD Fluidodinâmica Computacional  
“*Computational Fluid Dynamics*”

MDF Método das Diferenças Finitas

MVF Método dos Volumes Finitos

## LISTA DE SÍMBOLOS

### *Símbolos*

$A_B$	Área de borbulhamento, [m <sup>2</sup> ];
$A_H$	Área total dos orifícios, [m <sup>2</sup> ];
$a$	Constante da Equação 19 (Bennett, Agrawal e Cook, 1986);
$C_D$	Coefficiente de arraste;
$C_d$	Coefficiente de represa;
$C_p$	Capacidade calorífica, [J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ];
$C_\mu, C_1, C_2$	Constantes do modelo de turbulência $k$ - $\varepsilon$ padrão;
$c_v$	Coefficiente de descarga;
$D$	Difusividade, [m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ];
$D_P$	Diâmetro do prato, [m];
$d_B$	Diâmetro das bolhas, [m];
$d_H$	Diâmetro do orifício, [m];
$E_{ML}, E_{ML}$	Eficiência de Murphree para as fases líquida e vapor;
$E_{OC}$	Eficiência global da coluna de destilação;
$F_s$	Fator $F$ , [m s <sup>-1</sup> (kg m <sup>-3</sup> ) <sup>0,5</sup> ];
$Fr$	Número de Froude;
$\mathbf{F}_\phi$	Fluxo difusivo da equação de conservação;
$f$	Fração volumétrica;
$\mathbf{g}$	Vetor aceleração da gravidade, [m s <sup>-2</sup> ];
$h_{cf}$	Altura da crista, [m];
$h_{cl}$	Altura de líquido claro, [m];
$h_d$	Altura do downcomer, [m];
$h_H$	Perda de carga devido a passagem de vapor pelos orifícios, [mmca];
$h_P$	Altura do prato perfurado, [m];
$h_T$	Perda de carga total do prato, [m];
$h_w$	Altura da represa, [m];
$h_\sigma$	Perda de carga devido as forças de tensão superficial, [mmca];
$h_1$	Altura de entrada de líquido no prato, [m];
$K_s$	Parâmetro da Equação 24 (Bennett, Agrawal e Cook, 1986);
$k$	Energia cinética turbulenta, [m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ];
$L$	Dimensões do prato perfurado utilizadas na simulação, [m];



$\mathbf{M}_L, \mathbf{M}_V$	Transferência de quantidade de movimento entre as fases por unidade de volume, [ $\text{N m}^{-3}$ ];
$N_F$	Número de fases;
$N_H$	Número total orifícios no prato;
$N_R$	Número de estágios teóricos ou ideais;
$N_T$	Número de estágios reais;
$\mathbf{n}$	Vetor normal;
$\mathbf{P}_k$	Produção de energia cinética turbulenta, [ $\text{J m}^{-3} \text{s}$ ];
$P$	Pressão, [Pa];
PM	Peso molecular, [ $\text{kg kgmol}^{-1}$ ];
$Q$	Vazão volumétrica, [ $\text{m}^3 \text{s}^{-1}$ ];
$R$	Raio do prato perfurado, [m];
$S_\phi$	Termo fonte da equação de conservação;
$\mathbf{T}$	Tensor tensão, [ $\text{N m}^{-2}$ ];
$T$	Temperatura, [ $^\circ\text{C}$ ];
$t$	Tempo, [s];
$u_s$	Velocidade superficial do gás/vapor, [ $\text{m s}^{-1}$ ];
$V_H$	Velocidade do gás/vapor nos orifícios do prato, [ $\text{m s}^{-1}$ ];
$\mathbf{v}$	Vetor velocidade, [ $\text{m s}^{-1}$ ];
$v_x, v_y, v_z$	Componentes do vetor velocidade, [ $\text{m s}^{-1}$ ];
$x$	Coordenada [m]; Fração molar da fase líquida;
$W$	Comprimento da represa, [m];
$y$	Coordenada, [m]; Fração molar da fase vapor;
$z$	Coordenada, [m].

### **Letras Gregas**

$\alpha$	Volatilidade relativa;
$\varepsilon$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, [ $\text{m}^2 \text{s}^{-3}$ ];
$\eta$	Parâmetro de densidade da espuma;
$\lambda$	Condutividade térmica, [ $\text{J s}^{-1} \text{m}^{-1} \text{K}^{-1}$ ];
$\mu$	Viscosidade dinâmica, [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ];
$\rho$	Massa específica [ $\text{kg m}^{-3}$ ];
$\sigma$	Tensão superficial, [ $\text{N m}^{-1}$ ];
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	Constantes do modelo de turbulência;
$\Phi$	Coefficiente de fugacidade;
$\phi$	Propriedades fluidodinâmicas.

**Subscritos**

F	Alimentação;
<i>i</i>	Componente genérico;
L	Fase líquida;
<i>n</i>	Estágio genérico da coluna de destilação;
<i>sim</i>	Região de simetria;
V	Fase vapor.

**Sobrescritos**

<i>in</i>	Região de entrada, “ <i>inlet</i> ”;
<i>out</i>	Região de saída, “ <i>outlet</i> ”;
T	Vetor transposto;
turb	Propriedade turbulenta;
*	Condição de equilíbrio;
–	Média da propriedade.

**Operadores**

$\partial$	Diferencial parcial;
$\nabla$	Condição de equilíbrio;
Log	Logaritmo na base 10.

## SUMÁRIO

<b>RESUMO.....</b>	<b>vii</b>
<b>ABSTRACT .....</b>	<b>viii</b>
<b>LISTA DE ILUSTRAÇÕES.....</b>	<b>ix</b>
<b>LISTA DE QUADROS.....</b>	<b>xi</b>
<b>LISTA DE TABELAS.....</b>	<b>xii</b>
<b>LISTA DE ABREVIATURA E SIGLAS .....</b>	<b>xiii</b>
<b>LISTA DE SÍMBOLOS .....</b>	<b>xiv</b>
<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>19</b>
1.1 Motivação pelo estudo .....	19
1.2 Objetivos .....	20
1.3 Desenvolvimento do trabalho.....	21
<b>2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>22</b>
2.1 Histórico sobre destilação .....	22
2.2 Coluna de destilação.....	23
2.3 Modelos de equilíbrio.....	25
2.3.1 Estágio de equilíbrio .....	25
2.3.2 Estágio de não equilíbrio.....	30
2.4 Fluidodinâmica computacional (CFD).....	33
2.4.1 Introdução .....	33
2.4.2 Código CFX .....	36
2.4.2.1 Pré-processamento .....	37
2.4.2.2 Solver .....	38
2.4.2.3 Pós-processamento.....	39
2.4.3 Malha numérica.....	40
2.4.3.1 Malha estruturada.....	42
2.4.3.2 Malha não-estruturada.....	45
2.5 Métodos numéricos .....	46
2.6 Estudos realizados em pratos perfurados de coluna de destilação .....	50
2.6.1 Estudos experimentais.....	50
2.6.2 Estudos aplicados à fluidodinâmica computacional (CFD).....	56
<b>3 METODOLOGIA.....</b>	<b>63</b>
3.1 <i>Hardware e software</i> .....	63
3.2 Domínio computacional .....	64
3.3 Malha numérica.....	66
3.4 Configuração da simulação .....	69
3.4.1 Equações do CFD.....	70

3.4.1.1 Equação da continuidade .....	70
3.4.1.2 Equação de quantidade de movimento.....	71
3.4.1.3 Equações de restrição .....	72
3.4.1.4 Equações de fechamento .....	73
3.4.1.4.1 Modelo de turbulência – $k-\varepsilon$ padrão.....	73
3.4.1.4.2 Transferência de momento na interface .....	75
3.4.2 Condições de contorno e de inicialização .....	76
3.5 Metodologia de análise.....	79
<b>4 RESULTADOS .....</b>	<b>82</b>
4.1 Análise do Prato (1).....	82
4.1.1 Perfis da componente $w$ do vetor velocidade do líquido .....	82
4.1.2 Mapas de contorno e vetores de velocidades .....	86
4.1.3 <i>Streamlines</i> .....	88
4.1.4 Campos de frações volumétricas.....	90
4.2 Análise do Prato (2).....	92
4.2.1 Perfis da componente $w$ do vetor velocidade do líquido .....	92
4.2.2 Mapas de contorno e vetores de velocidades .....	95
4.2.3 <i>Streamlines</i> .....	98
4.2.4 Campos de frações volumétricas.....	100
<b>CONCLUSÕES.....</b>	<b>102</b>
<b>SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....</b>	<b>104</b>
<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>105</b>
<b>APÊNDICE .....</b>	<b>109</b>
Apêndice A – Dados dos campos de velocidades do Prato (1).....	109
Apêndice B – Dados dos campos de velocidades do Prato (2) .....	113
Apêndice C – Regiões de recirculação e de estagnação de líquido .....	117

## 1 INTRODUÇÃO

O presente trabalho propõe um estudo fluidodinâmico em um estágio de coluna de destilação, observando os fenômenos de transporte de quantidade de movimento que ocorrem em seu interior. Um estudo detalhado destes fenômenos é importante nos projetos de coluna de destilação, visando a otimização do processo.

Neste capítulo, encontram-se descritos abaixo a motivação pelo estudo e os objetivos a serem cumpridos.

### 1.1 Motivação pelo estudo

Em um mercado cada vez mais competitivo, o desenvolvimento de projetos de processos químicos tem recebido aperfeiçoamento cada vez maior, incorporando modelos matemáticos e equações constitutivas mais sofisticadas, os quais possibilitaram uma maior aproximação do seu comportamento real pelos mais diversos tipos de simuladores computacionais.

Dentre as operações unitárias mais estudadas estão àquelas relacionadas com a transferência de massa e de calor e, em particular, a destilação, caracterizada pela condensação e evaporação parcial dos componentes constituintes da mistura.

A coluna de destilação é um dos equipamentos de separação mais empregados na indústria química e petroquímica, representando cerca de 80% do custo operacional energético em indústrias petroquímicas. Por isso o perfeito funcionamento e otimização destas unidades são fatores economicamente cruciais (TELEKEN, 2009).

Os processos de separação por destilação têm incorporado diversos conceitos na modelagem matemática no que diz respeito à representação fenomenológica, isto é, destacando-se os modelos de estágios de equilíbrio e de estágios de não equilíbrio. Por definição, o conceito de modelo de estágios de equilíbrio consiste na hipótese de estabelecimento do equilíbrio termodinâmico entre as correntes de líquido e de vapor que saem de um determinado estágio. Quando este conceito é utilizado, os balanços de massa e de energia no estágio estão baseados somente nas correntes de líquido e de vapor que entram e que saem do estágio. A descrição real é realizada introduzindo-se o conceito de eficiência de estágio.

O cálculo de eficiência global da destilação é a razão entre o número de estágios teóricos e o número de estágios reais. Este modelo simplificado da eficiência

proposto por Lewis (1922) sugere diversas hipóteses simplificadoras, tais como a suposição de mistura perfeita entre as fases, composição uniforme na superfície do prato e o conceito de equilíbrio termodinâmico entre as correntes que abandonam o estágio.

Com a finalidade de minimizar as limitações do conceito de estágio de equilíbrio, o modelo de estágio de não equilíbrio é caracterizado pela eliminação dessa consideração entre as correntes que deixam o prato e pela incorporação das equações de transporte escritas para cada fase. As condições operacionais e geométricas do prato e as propriedades físicas e químicas dos sistemas envolvidos são levadas em consideração na solução.

Com o surgimento de modelos mais complexos e computadores com alto desempenho numérico tornou-se possível a utilização de métodos para a solução desses modelos incorporando poucas simplificações. A Fluidodinâmica Computacional (CFD) tem sido empregada em aplicações industriais e de pesquisa acadêmica em busca de otimizar projetos. Portanto, ela envolve a solução numérica das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia. A aplicação desta ferramenta, em colunas de destilação, pode melhorar a descrição do comportamento hidrodinâmico em pratos perfurados.

Portanto, é dentro deste contexto que se desenvolveu a metodologia proposta neste trabalho, que visa aperfeiçoar o estudo em pratos perfurados de colunas de destilação, analisando os fenômenos de transferência de quantidade de movimento.

## **1.2 Objetivos**

Este trabalho teve como objetivo geral a aplicação da Fluidodinâmica Computacional na simulação de um prato perfurado de coluna de destilação.

Os objetivos específicos alcançados neste trabalho foram:

- Desenvolver um modelo para descrever a fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor, em um prato perfurado de uma coluna de destilação;
- Implantar modelos matemáticos com o intuito de descrever o escoamento real no prato perfurado no código comercial de CFD (CFX 12.0);
- Avaliar a hidrodinâmica em regiões próximas à parede do prato perfurado, em busca de um maior entendimento sobre a região de recirculação de líquido, para várias condições operacionais utilizadas;

- Propor novos modelos de geometria para o prato perfurado, no intuito de diminuir os fenômenos que prejudicam na transferência de calor e massa.

### **1.3 Desenvolvimento do trabalho**

Etapas do desenvolvimento:

- O modelo implementado no CFX 12.0 foi testado com o prato estudado por Solari e Bell (1986) cujos dados experimentais estão desenvolvidos;
- Após a validação e a observação de zonas de recirculação, uma nova geometria foi estudada a fim de verificar se a mesma produz distribuição mais uniforme de líquido;
- A nova geometria utilizada possui as mesmas dimensões principais (diâmetro do prato, diâmetro dos orifícios, espaçamento do prato, e entre outras) apresentadas por Solari e Bell (1986), na qual foi realizada apenas a mudança do formato da represa.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo tem como objetivo relatar alguns aspectos históricos e científicos sobre colunas de destilação e a utilização da técnica de Fluidodinâmica Computacional (CFD). São comparadas as vantagens e as desvantagens de um estágio de equilíbrio e de não equilíbrio. Por fim, é feito um levantamento de estudos científicos experimentais e de simulação através de CFD realizados em sistemas líquido-vapor em pratos perfurados de colunas de destilação.

### 2.1 Histórico sobre destilação

A destilação tem uma longa história e acredita-se que foram os chineses que a descobriram em meados da dinastia *Chou* (690 a 705 d.C.). Posteriormente, a produção de bebidas alcoólicas destiladas, conhecida assim como bebidas dos deuses, seguiu o processo da civilização (LOCKETT, 1986).

As torres de pratos com borbulhadores foram usados como dispositivos de contato pela primeira vez, de forma comercial, em 1818. Naquela época, e em alguns casos ainda hoje, o conhecimento era escasso, fazendo com que os métodos de cálculo gerassem equipamentos na maioria das vezes superdimensionados. Entretanto, estes pratos vêm entrando em considerável desuso devido ao seu preço e à alta queda de pressão. Outros tipos de pratos os vêm substituindo, como os perfurados e os valvulados (CALDAS, 2003).

Os pratos perfurados foram empregados pela primeira vez em 1832, e até o início de 1950 o seu uso era muito raro. Ele é considerado um dispositivo de contato de baixo custo e apresenta uma baixa perda de carga (LOCKETT, 1986).

O processo de separação por destilação é considerado um dos mais importantes na área de pesquisa e desenvolvimento. Com base nesta constatação, diversos métodos e modelos matemáticos para o projeto de colunas de destilação foram propostos e usados para estimar os parâmetros de grande relevância industrial. Sorel (1899) foi um dos primeiros a descrever os cálculos da coluna de destilação supondo o estabelecimento do equilíbrio termodinâmico no estágio. Por volta da década de 20, surgiram os métodos gráficos propostos por Ponchon (1921) e McCabe e Thiele (1925) que deram um novo impulso na interpretação do comportamento de colunas de destilação. O método de Ponchon-Savarit foi extensivamente substituído por métodos computacionais, mas até hoje o método de McCabe-



Thiele é utilizado nos cursos de Engenharia, pelo fato de ilustrar os conceitos dos processos de separação por estágios.

Com o surgimento dos computadores, novos métodos foram desenvolvidos, cujo objetivo é a solução numérica das equações dos modelos matemáticos. O cálculo das características dos equipamentos para as operações de destilação envolve a determinação do número de pratos e do tipo de prato que proporcionará maior eficiência do processo, parâmetro dependente da taxa de transferência de massa, tempo de contato, área de contato, intensidade de mistura, funções da geometria do prato e das taxas de escoamento das fases.

Na destilação, bem como na absorção, que são os processos normalmente empregados para a separação de produtos, a variedade de dispositivos de contato líquido-gás empregados é grande. Os principais internos destes casos são os pratos e os recheios. Atualmente, o projeto de torres de pratos fixa-se quase que exclusivamente em pratos perfurados e/ou valvulados (CALDAS, 2003).

## 2.2 Coluna de destilação

Na indústria química e petroquímica, a coluna de destilação é um dos equipamentos mais utilizados no processo de separação. A palavra “destilação” é originária do latim *distillare*, que significa “gotejar” e descreve o estágio final do processo, quando do gotejamento de um líquido de um condensador para um recipiente de coleta (FERREIRA; AQUINO NETO, 2005).

A diferença de volatilidade existente entre os componentes da mistura em uma destilação é a força motriz efetiva da separação neste processo, na qual o agente que promove esta separação é o calor, aliado aos internos do equipamento de separação (CALDAS, 2003).

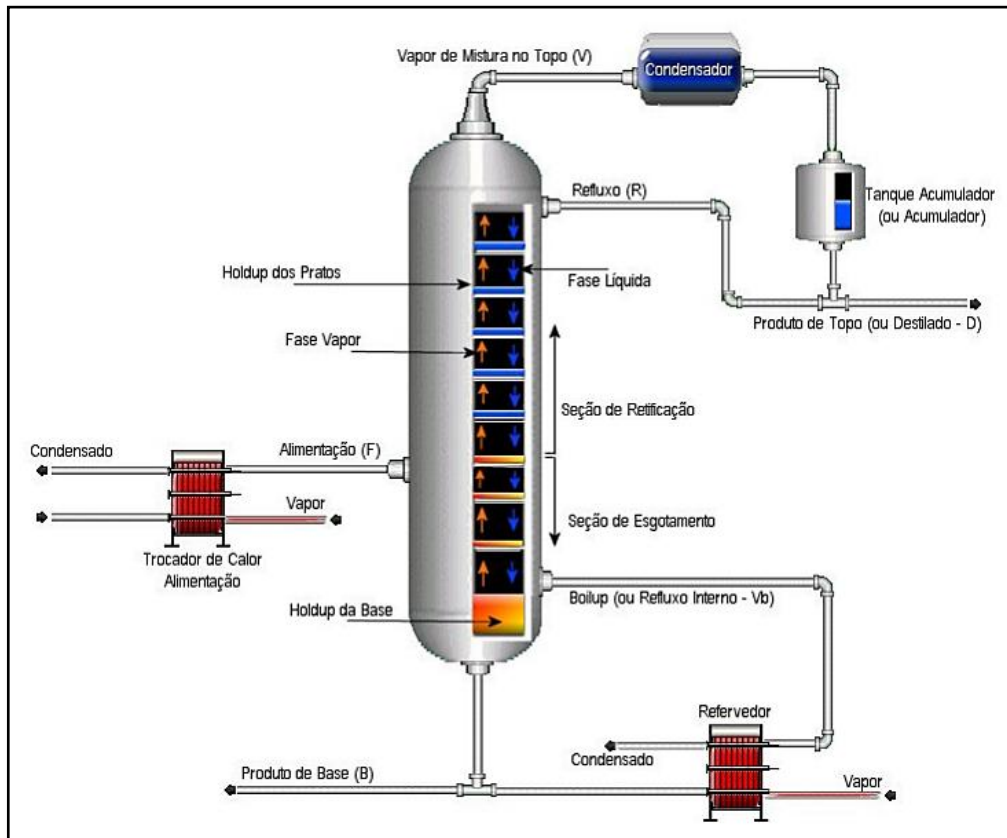
Podem-se ter os seguintes tipos de destilação:

- Destilação integral (ou *flash*);
- Destilação diferencial;
- Destilação fracionada;
- Destilação extrativa;
- Destilação azeotrópica.

Devido ao tema de trabalho, nesta seção será dado um enfoque para a destilação fracionada.

Uma unidade de destilação fracionada é constituída basicamente por um conjunto de pratos distribuídos ao longo da coluna, um retervedor, localizado na base da coluna, o qual tem como principal função produzir o vapor que ascende pela coluna, e um condensador, com a função de condensar os vapores que chegam ao topo da coluna. Uma unidade de destilação fracionada é apresentada abaixo pela Figura 1.

**Figura 1 – Esquema de uma unidade de destilação simples.**



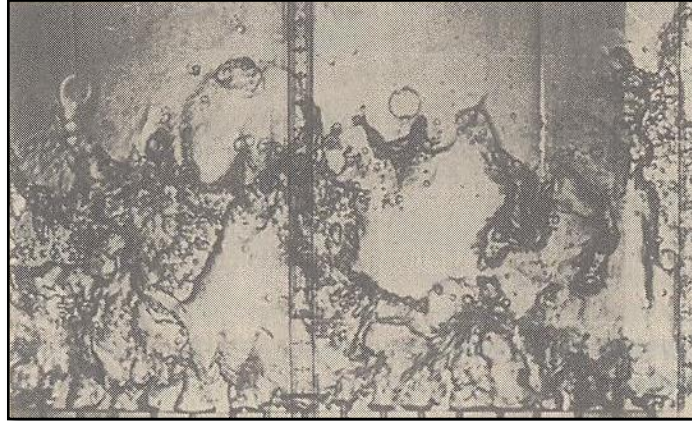
**Fonte: MARANGONI, 2005.**

No processo de destilação fracionada, existe a possibilidade de obtenção de produtos mais ricos em determinados componentes, através de uma repetição de estágios, ditos em equilíbrio. Nesses estágios, uma corrente de vapor cruza com uma corrente de líquido, trocando calor e massa. O vapor, à medida que percorre o equipamento, se enriquece em componentes voláteis, enquanto que os componentes pesados (menos voláteis) se encaminham para o líquido. Esses componentes podem ser obtidos através de retiradas laterais, de topo e de fundo da coluna (CALDAS, 2003).

A hidrodinâmica de uma coluna de destilação é complexa. Na base da coluna é gerado um vapor com uma pressão suficientemente elevada para vencer o peso da coluna de líquido em cada prato. Já para o topo da coluna em direção à base da coluna escoam o líquido,

na mesma direção do gradiente positivo de pressão, devido à diferença de densidade (FOUST *et al.*, 1982). A Figura 2 ilustra o escoamento caótico em um prato perfurado.

**Figura 2 – Escoamento caótico em um prato perfurado.**



**Fonte: LOCKETT, 1986.**

Gomide (1988) relata que a mudança de pressão na coluna deve ser suave, pois uma súbita diminuição da pressão provoca uma brusca vaporização do líquido no prato (*flashing*) e o aumento da vazão de vapor pode ocasionar uma formação excessiva de espuma.

### **2.3 Modelos de equilíbrio**

Atualmente, existem dois conceitos que descrevem a modelagem macroscópica de colunas de destilação. A primeira é caracterizada pelo equilíbrio termodinâmico entre as correntes que abandonam o prato, e é corrigida pela eficiência do prato (modelagem de estágio de equilíbrio). A segunda é caracterizada pela não existência de equilíbrio termodinâmico entre as correntes que abandonam o prato (modelagem de estágio de não equilíbrio), e apresenta explicitamente os fluxos de transferência de massa e calor entre as fases no modelo matemático.

#### **2.3.1 Estágio de equilíbrio**

Uma consideração básica empregada na modelagem de estágio de equilíbrio é que as correntes que abandonam o estágio estão em equilíbrio termodinâmico entre si. Por isso é necessário à introdução do conceito de eficiência para corrigir os desvios oriundos da consideração do equilíbrio termodinâmico, pois na prática, dificilmente as correntes que

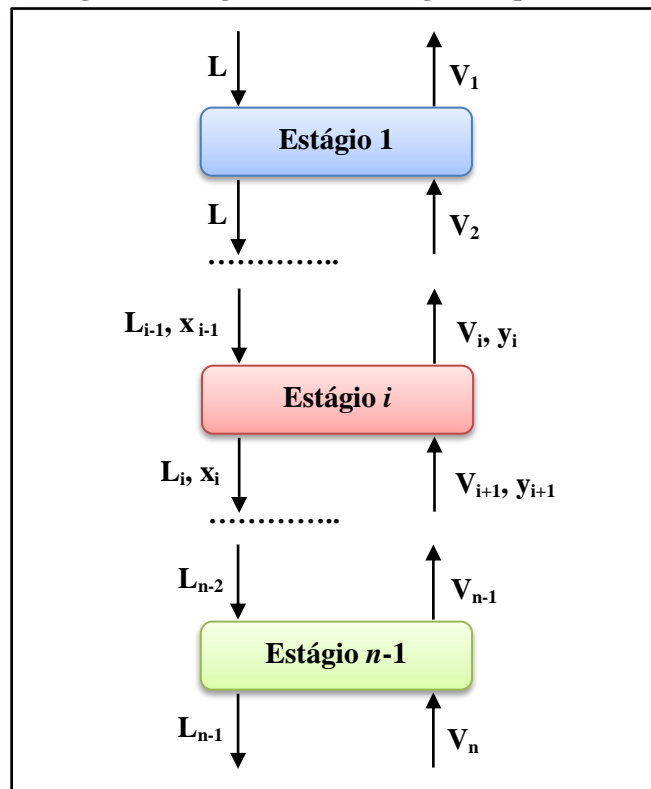
abandonam os estágios alcançam o equilíbrio termodinâmico entre as fases (PESCARINI, 1996).

Na seção 2.3.1.1 será abordada com mais detalhes a eficiência em estágios de coluna de destilação.

Para descrever o modelo matemático, é necessário estabelecer as equações do modelo de estágios de equilíbrio, que são denominadas como equações MESH (*Mass, Equilibrium, Sum and Heat*), M = equações do balanço de massa, E = equações do equilíbrio de fases; S = equações do somatório das frações e H = equações do balanço de energia (SOARES, 2005).

Na Figura 3, é mostrado um diagrama esquemático de um estágio de equilíbrio.

**Figura 3 – Diagrama de um estágio de equilíbrio.**



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Relacionando o número de estágios de equilíbrio com a eficiência da coluna, tem-se o número de estágios reais necessários para o processo. A eficiência dos pratos varia de 40 a 80%, sendo que os melhores percentuais de eficiência são alcançados em colunas de menor diâmetro devido à homogeneidade da mistura (SOARES, 2005).

Geralmente em modelos rigorosos e complexos, são feitas algumas considerações simplificadoras mais comuns, tais como:

- O líquido e o vapor estão idealmente misturados;
- A pressão e a temperatura nos pratos são uniformes;
- O arraste e o gotejamento de líquido são ignorados.

Naturalmente, uma maior precisão é obtida com modelos mais complexos, mas devido à maior dimensão do problema, ao maior custo computacional, a necessidade do fornecimento de dados de propriedades e o sistema envolvido, essas considerações simplificadoras são utilizadas (STAUDT, 2007).

- **Eficiência**

A eficiência é um fator que mede o desempenho da separação, permitindo a conversão do número de estágios ideais (estágios de equilíbrio) necessários à separação em número de estágios reais (PESCARINI, 1996).

A primeira equação constitutiva para o cálculo da eficiência global das colunas de destilação ( $E_{oc}$ ) foi proposta por Lewis (1922), onde a eficiência global das colunas de destilação é relacionada com o número de estágios teóricos ou ideais e o número de estágios reais para uma dada separação:

$$E_{oc} = \frac{N_T}{N_R} \quad (1)$$

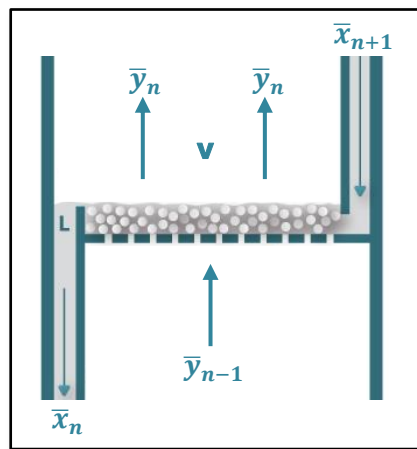
Onde:  $E_{oc}$  eficiência global das colunas de destilação;  
 $N_T$  número de estágios teóricos ou ideais;  
 $N_R$  número de estágios reais.

Standart (1965), Biddulph (1977) e Barros (1997) realizaram estudos comparativos entre colunas ideais e reais, cujas taxas de refluxo e concentrações dos produtos foram uniformemente mantidas para os dois tipos de colunas. Tais estudos revelaram enormes limitações matemáticas na aplicação prática do conceito da eficiência global. Essas limitações são predominantemente as principais razões para se considerar que a eficiência de pratos é mais abrangente quando comparada com a eficiência global, por não incluir os conceitos de balanços de massa e energia.

Alguns programas disponíveis no mercado para a simulação de colunas de destilação necessitam do conhecimento prévio da eficiência de cada prato. Existem diferentes definições para a eficiência do prato: Murphree (1925), Hausen (1953), Standart (1965) e Holland (1975) (CALDAS, 2003).

A eficiência de Murphree é definida para um estágio e não para toda a coluna. Conceitualmente, é diferente da eficiência global porque a sua definição se aplica a um estágio genérico  $n$ , no qual as vazões são as mesmas e as concentrações reais são comparadas com as de equilíbrio.

**Figura 4 – Definições das fases que escoam no estágio  $n$ .**



**Fonte: Elaborado pelo Autor.**

A Figura 4 ilustra as fases que escoam no estágio  $n$ . Para as fases vapor ( $E_{MV}^n$ ) e líquida ( $E_{ML}^n$ ), tem-se a eficiência de Murphree definida pelas Equações 2 e 3, respectivamente (LOCKETT, 1986).

$$E_{MV}^n = \frac{\bar{y}_n - \bar{y}_{n-1}}{y_n^* - \bar{y}_{n-1}} \quad (2)$$

$$E_{ML}^n = \frac{\bar{x}_n - \bar{x}_{n+1}}{x_n^* - \bar{x}_{n+1}} \quad (3)$$

Onde:  $E_{MV}^n$  eficiência de Murphree do estágio  $n$  para fase vapor;  
 $\bar{y}_n$  fração molar média do componente na fase vapor no estágio  $n$ ;  
 $\bar{y}_{n-1}$  fração molar média do componente na fase vapor no estágio  $n - 1$ ;  
 $y_n^*$  fração molar do componente na fase vapor em equilíbrio com a corrente de líquido que deixa o prato  $n$ ;  
 $E_{ML}^n$  eficiência de Murphree do estágio  $n$  para fase líquida;  
 $\bar{x}_n$  fração molar média do componente na fase líquida no estágio  $n$ ;  
 $\bar{x}_{n+1}$  fração molar média do componente na fase líquida no estágio  $n + 1$ ;

$x_n^*$  fração molar do componente na fase líquida em equilíbrio com a corrente de vapor que deixa o prato  $n$ .

As correlações empíricas e semi-empíricas mais citadas e usadas na literatura são apresentadas por Lockett (1986). Essas correlações permitem cálculos rápidos da eficiência global de colunas, pois só dependem das propriedades físicas medidas em condições fáceis de serem obtidas. As Equações 4, 5 e 6 apresentadas abaixo, são algumas correlações empíricas e semi-empíricas desenvolvidas por Drickamer e Bradford (1943), O'Connell (1946) e MacFarland, Sigmund e van Winkle (1972), respectivamente.

$$E_{oc} = 0,17 - 0,616 \text{ Log}(\mu_F) \quad (4)$$

$$E_{oc} = 9,06(\mu_L \alpha)^{-0,245} \quad (5)$$

$$E_{oc} = 6,8 \left( \frac{\sigma}{\mu_L u_s} \right)^{0,115} \left( \frac{\mu_L}{\rho_L D_L} \right)^{0,215} \left( \frac{h_w V_H \rho_V}{\mu_L} \right)^{0,1} \quad (6)$$

Onde:  $E_{oc}$  eficiência global das colunas de destilação;  
 $\mu_F$  viscosidade dinâmica da alimentação;  
 $\mu_L$  viscosidade dinâmica do líquido;  
 $\alpha$  volatilidade relativa;  
 $\sigma$  tensão superficial;  
 $u_s$  velocidade superficial de vapor baseado na área de borbulhamento do prato;  
 $\rho_L$  massa específica do líquido;  
 $D_L$  coeficiente de difusividade do líquido;  
 $h_w$  altura da represa;  
 $V_H$  velocidade do gás nos orifícios;  
 $\rho_V$  massa específica do vapor.

Barros (1997) propôs uma correlação (Equação 7) para o cálculo da eficiência, que utiliza além dos parâmetros de transferência de massa, os parâmetros de transferência de calor. Esta correlação foi preliminarmente denominada de correlação de “Barros & Wolf”:

$$E_{oc} = 38,5309 \left[ \frac{\bar{\lambda} \bar{\rho} D_{AB} \bar{P} \bar{M}}{\bar{C}_p \bar{\mu}^2} \right]^{-0,04516} \quad (7)$$

Onde:  $E_{oc}$  eficiência global das colunas de destilação;  
 $\bar{\lambda}$  condutividade térmica média da mistura;  
 $\bar{\rho}$  massa específica média da mistura;  
 $D_{AB}$  difusividade do componente A em B;  
 $\bar{P} \bar{M}$  peso molecular médio da mistura;  
 $\bar{C}_p$  capacidade calorífica média da mistura;  
 $\bar{\mu}$  viscosidade dinâmica média da mistura.

A Equação 7 não envolve as variáveis de projeto do prato e da coluna de destilação, como por exemplo, a geometria do prato, espaçamento entre pratos, e outras variáveis de projeto que também influenciam na eficiência.

Não existe consenso de qual é a mais útil. Ainda hoje, após tantas definições e críticas, a eficiência de Murphree (1925), definição que leva seu nome, é uma das mais empregadas nos cálculos que envolvem os processos de separação (CALDAS, 2003).

O Quadro 1, ilustra as variáveis envolvidas, citadas na literatura, que afetam a eficiência de um prato perfurado de uma coluna de destilação.

**Quadro 1 – Variáveis que afetam a eficiência da coluna de destilação.**

<i>Tipo de Variável</i>	<i>Prato Perfurado</i>
Operação	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Pressão</li> <li>✓ Razão de refluxo, L/V</li> <li>✓ Temperatura</li> </ul>
Sistema	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Densidade do líquido</li> <li>✓ Viscosidade do líquido</li> <li>✓ Tensões superficiais do líquido (temperatura de bolha)</li> <li>✓ Densidade do vapor</li> <li>✓ Viscosidade do vapor</li> <li>✓ Volatilidades relativas</li> </ul>
Projeto	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Área livre do prato</li> <li>✓ Diâmetro dos orifícios</li> <li>✓ Distribuição dos orifícios</li> <li>✓ Altura do vertedor</li> <li>✓ Altura da represa</li> </ul>
Coluna	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Espaçamento entre pratos</li> <li>✓ Formato do vertedor</li> </ul>

Fonte: Adaptado de BARROS, 1997.

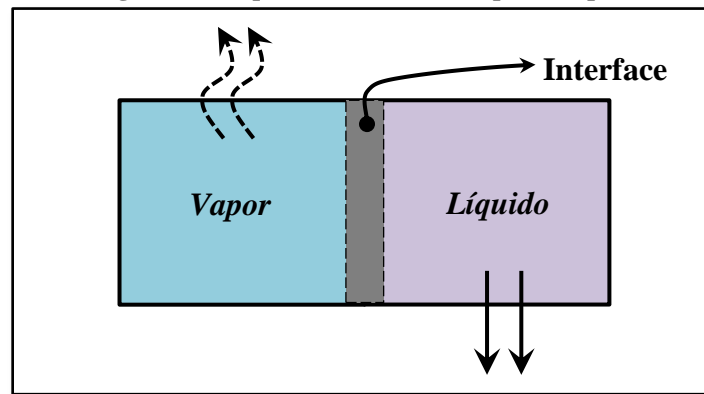
### 2.3.2 Estágio de não equilíbrio

Uma consideração básica da modelagem de estágios de não equilíbrio é a consideração da existência do não equilíbrio termodinâmico entre as fases, líquida e vapor, que deixam cada estágio de destilação, assumindo-se o equilíbrio termodinâmico somente na interface líquido-vapor, conforme ilustrado a seguir pela Figura 5.

As equações de conservação são escritas para cada fase independentemente e resolvidas juntamente com as equações de transporte que descrevem os fenômenos de transferência de massa e energia em misturas de multicomponentes.



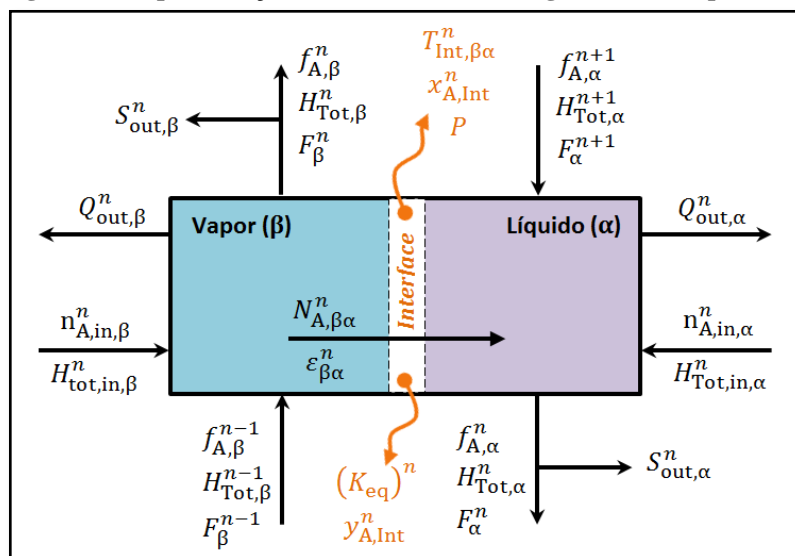
Figura 5 – Esquema da interface líquido-vapor.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Na Figura 6, considera-se um estágio  $n$  de uma coluna de destilação com escoamento em contracorrente e multicomponente, apresentando duas fases, líquido e vapor, que não estão em equilíbrio. Há, portanto, transferência de massa e energia através da interface (PESCARINI, 1996).

Figura 6 – Representação do modelo de um estágio  $n$  de não equilíbrio.



Fonte: Adaptado de NORILER, 2007.

Onde: $N_{A,\beta\alpha}$	fluxo total de transferência de massa entre as fases;
$\varepsilon_{\beta\alpha}$	fluxo total de transferência de calor entre as fases;
$S_{out,\beta\alpha}$	fluxo total na saída lateral das fases vapor e líquida;
$f_{A,\beta\alpha}$	fluxo molar do componente A das fases vapor e líquida;
$H_{Tot,\beta\alpha}$	entalpia total das fases vapor e líquida;
$Q_{out,\beta\alpha}$	calor removido das fases vapor e líquida;
$F_{\beta\alpha}$	fluxo molar total da fase vapor e da fase líquida;
$n_{A,in,\beta\alpha}$	fluxo do componente A na alimentação nas fases vapor e líquida;
$(K_{eq})$	constante de equilíbrio;

$x_{A,Int}$	fração molar do componente A de líquido na interface;
$y_{A,Int}$	fração molar do componente A de vapor na interface;
$T_{Int,\beta\alpha}$	temperatura das fases vapor e líquida na interface;
$P$	pressão;
$\alpha$ e $\beta$	representa a fase vapor e líquida; e o sobrescrito $n$ refere-se um prato genérico $n$ .

O estágio está em equilíbrio mecânico, ou seja, a pressão constante ( $P_{i,L} = P_{i,V} = P_{i,Interface}$ ). Com isso, pode-se dizer que a variação da quantidade de movimento pode ser negligenciada e, portanto, não há a necessidade de uma equação de conservação para a quantidade de movimento. Sem uma equação de conservação para a quantidade de movimento, são perdidas informações das variações espaciais no prato. No entanto, são consideradas as saídas e alimentações laterais de vapor e líquido e a adição ou a remoção de energia em cada estágio. Pescarini (1996) definiu a taxa positiva de transferência de calor e massa entre as fases na interface na direção do vapor para o líquido, ou seja, de  $\beta \rightarrow \alpha$ .

A modelagem apresentada na Figura 5 descrita por Pescarini (1996) incorpora no modelo de estágios de não equilíbrio os efeitos de resistência à transferência de calor e massa para o cálculo dos fluxos na interface, a partir de equações constitutivas para os coeficientes globais de transferência de calor e massa e de equações que relacionam o equilíbrio termodinâmico na interface líquido-vapor.

Diante das características das modelagens de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio descritas anteriormente, percebe-se que os modelos macroscópicos consideram somente os fenômenos de transferência de massa e de calor. A fluidodinâmica nestes modelos é avaliada mediante a utilização de correlações empíricas que fornecem estimativas de parâmetros globais, como queda de pressão, altura de líquido sobre o prato, vazão de líquido e de vapor, entre outros, relacionados no cálculo de eficiência da coluna de destilação.

Deste modo, podem-se destacar os seguintes aspectos relacionados à pesquisa e desenvolvimento na área de colunas de destilação (SOARES, 2005):

- Deficiência no entendimento do processo: o nível atual de entendimento da influência da geometria e detalhes do escoamento sobre a eficiência e o desempenho é inadequado;
- Necessidade de melhores simuladores e modelos para o projeto de colunas, com o intuito de se evitar o uso de parâmetros empíricos em projetos;
- Simulação global do processo: importância na simulação de colunas de destilação;

- Tipos de processos/equipamentos e aplicação das análises de fluidodinâmica computacional: pratos perfurados, pratos valvulados e leitos catalíticos (separação reativa).

A importância dos pacotes CFD tem crescido muito nos últimos anos devido à confiabilidade e à rapidez dos resultados assim obtidos e à economia frente a testes experimentais. Este fato se deve aos avanços em termos de modelagem dos fenômenos físicos, das técnicas numéricas para solucionar o problema e da capacidade computacional. Como consequência, a atualização das técnicas presentes nos códigos CFD e o desenvolvimento de novas metodologias numéricas e modelos físicos devem sempre ser pontos cruciais em CFD. Desta forma, é interessante que o usuário possa interagir com o pacote, possibilitando a extensão do código para aprimorar a ferramenta ou mesmo implementar novas formas de solucionar um problema específico.

## **2.4 Fluidodinâmica computacional (CFD)**

### **2.4.1 Introdução**

A fluidodinâmica computacional é a análise de sistemas que envolvem o fluxo de fluidos, transferência de calor, e fenômenos associados, tais como reações químicas, por meio da simulação computacional. A técnica de CFD é muito poderosa e abrange um amplo leque de áreas de aplicações industriais e não industriais, tais como (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007):

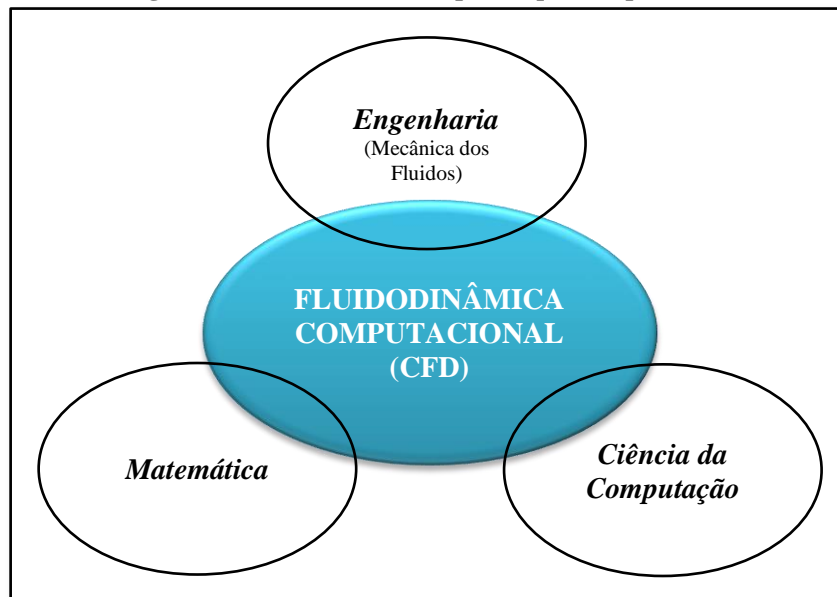
- Aerodinâmica de espaçonaves e veículos;
- Combustão em motores e turbinas a gás;
- Fluxo dentro de difusores;
- Engenharia de meio-ambiente: distribuição dos poluentes e efluentes;
- Engenharia biomédica: fluxo de sangue através de artérias e veias;
- Rotores de bombas visando à otimização da geometria;
- Reatores tanques agitados como modelo não ideal de reator para a previsão de zonas mortas e de circulação e dos efeitos das chicanas e dos agitadores nas condições de mistura;

- Trocadores de calor, com o intuito de se maximizar a troca térmica por análise dos efeitos da utilização de chicanas e aletas e de configurações geométricas alternativas;
- Ciclones das unidades de craqueamento catalítico de petróleo (FCC) com a finalidade de se desenvolver projetos com alta eficiência de coleta e reduzida queda de carga; entre outros;
- Esportes.

A Fluidodinâmica Computacional (do inglês “*Computational Fluid Dynamics*”, CFD) tem sido empregada em aplicações industriais e em pesquisa acadêmica. No início, este campo de estudo foi limitado principalmente às áreas de alta tecnologia de engenharia de aeronáutica, mas agora é uma técnica amplamente adotada para resolver problemas complexos em muitos campos da engenharia moderna. CFD vem sendo utilizada em processos químicos, civil e na engenharia ambiental. A Fluidodinâmica Computacional vem sendo empregada no intuito de criar novos projetos e otimizar equipamentos existentes através de simulações computacionais que resultem em maior eficiência e menores custos operacionais (TU; YEOH; LIU, 2008).

O CFD tornou-se certamente um novo ramo da ciência, integrando não só as disciplinas de mecânica dos fluidos com a matemática, mas também com a informática. Além disso, as características físicas do movimento dos fluidos pode geralmente ser descrito através de equações matemáticas fundamentais, geralmente em forma de equações diferenciais parciais, em um domínio de interesse. Estas equações parciais são convertidas em equações algébricas utilizando linguagens de programação de computador ou de pacotes de *software* (TU; YEOH; LIU, 2008). A Figura 7 a seguir esquematiza as diferentes áreas que compõe a Fluidodinâmica Computacional.

**Figura 7 – As diferentes disciplinas que compõe o CFD.**



**Fonte: Adaptado de TU; YEOH; LIU, 2008.**

Aplicações industriais desta técnica de análise e simulação de processos iniciaram na década de 70 pela empresa CHAM (“*Concentration Heat and Momentum Limited*”). Seu principal pacote industrial é o *software* PHOENICS, lançado em 1981 é pioneiro no ramo (CHAM, 2011).

Algumas das principais vantagens da aplicação das técnicas de CFD são (TU; YEOH; LIU, 2008):

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

A aplicação da fluidodinâmica computacional envolve a divisão da geometria espacial de interesse em um determinado número de células computacionais. As células podem possuir uma variedade de formas. As formas triangular e quadrilateral são, geralmente,

utilizadas para problemas bidimensionais (2-D), no qual o escoamento depende somente de duas coordenadas espaciais. Em problemas tridimensionais (3-D), onde o escoamento depende de três coordenadas espaciais, formas hexaédricas, tetraédricas, piramidais e prismáticas podem ser usadas (SOARES, 2005).

Existem muitos pacotes comerciais, tais como o CFX e o FLUENT da ANSYS Inc., PHOENICS, entre outros, destinados a resolver problemas de CFD. O método numérico mais aplicado para resolução das equações de conservação baseia-se no Método dos Volumes Finitos (MVF).

Para o desenvolvimento desta pesquisa, o código comercial de Fluidodinâmica Computacional CFX 12.0 da ANSYS Inc. foi empregado.

#### **2.4.2 Código CFX**

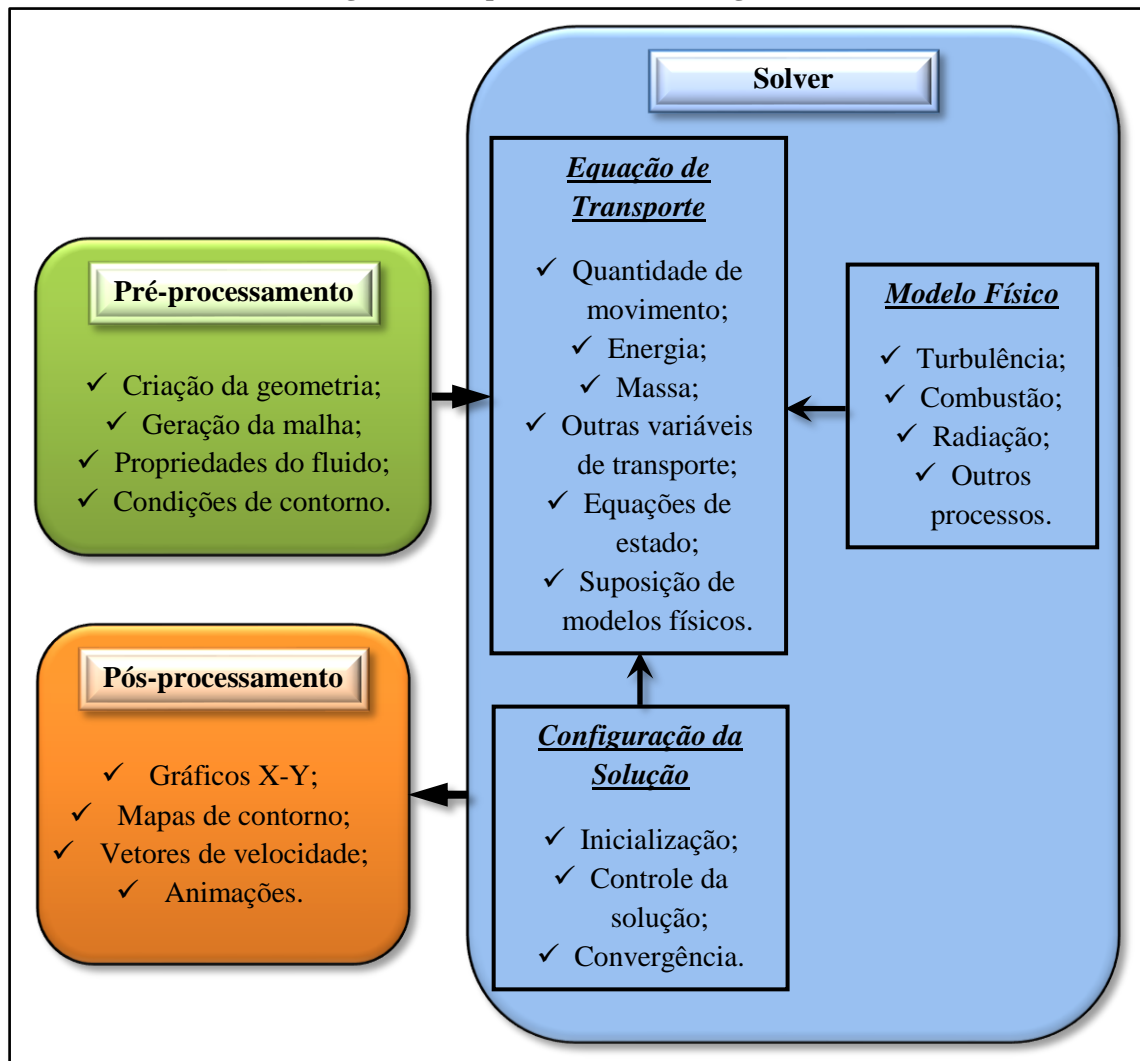
Os códigos de CFD são estruturados em torno de algoritmos numéricos que podem resolver problemas de fluidodinâmica. A maioria dos pacotes comerciais de CFD incluem sofisticadas interfaces para o usuário, na qual caberá ao usuário definir os parâmetros do problema e por fim examinar os resultados obtidos (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

Análogo aos pacotes comerciais de CFD existentes, o CFX é composto por três elementos principais (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007):

- Pré-processamento;
- Solver;
- Pós-processamento.

A função de cada uma desses elementos será examinada brevemente a seguir. A Figura 8 a seguir ilustra os três principais elementos da análise do código CFX.

Figura 8 – Etapas da análise do código CFX.



Fonte: Adaptado de TU; YEOH; LIU, 2008.

#### 2.4.2.1 Pré-processamento

A etapa de pré-processamento consiste na formulação do problema, na qual é definido e modelado fisicamente. Esta etapa envolve:

- Criação da geometria de interesse (domínio computacional);
- Geração da malha (subdivisão do domínio computacional). Essas subdivisões do domínio são, geralmente, chamadas de células, elementos ou volumes de controle;
- Seleção dos fenômenos físicos e químicos envolvidos que precisam ser modelados;
- Fornecimento das propriedades do fluido envolvido no problema;
- Especificação das condições de contorno apropriadas.

A solução das variáveis (velocidade, temperatura, pressão, etc.), se dá nos “nós” que compõe a malha numérica. Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), a qualidade da solução é governada pelo número e tamanho de células. Portanto, quanto maior o número de células e menor seu tamanho, melhor a solução a ser obtida. Porém necessitará de maior tempo computacional na solução do problema, o que demanda investimento em computadores de alto desempenho.

A criação da geometria e da malha exige muita habilidade do usuário de CFD para projetá-la. Cabe ao usuário um compromisso entre o custo e a precisão desejada da solução.

#### **2.4.2.2 Solver**

A etapa do solver dá ao usuário o acesso às bibliotecas das propriedades de alguns fluidos e um mecanismo para chamar modelos físicos e químicos (por exemplo, modelos de turbulência, transferência de calor por radiação, modelos de combustão, e outros), juntamente com as equações de transferência de quantidade de movimento, energia e massa.

O uso apropriado de qualquer código de CFD requer a compreensão dos aspectos numéricos dentro do solver. Os procedimentos que compõem o solver são a inicialização, controle da solução, monitoramento da solução, cálculo de CFD e a convergência da solução (TU; YEOH; LIU, 2008). Os procedimentos descritos nesta etapa são apresentados a seguir pela Figura 9.

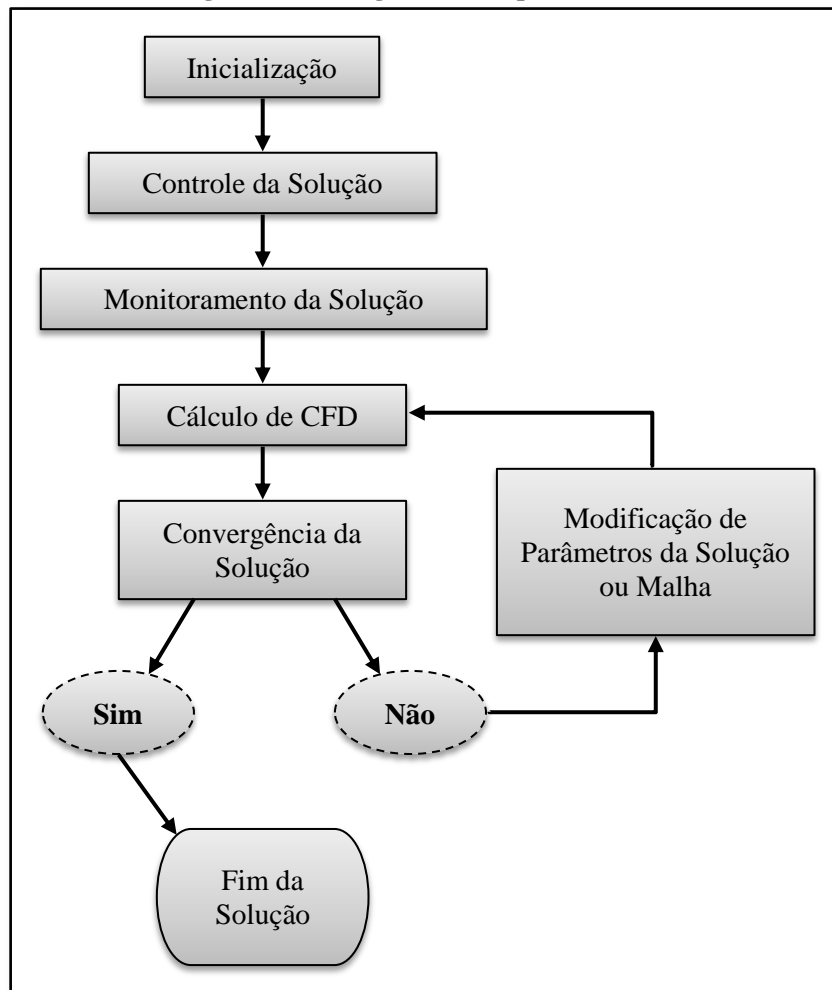
O usuário de CFD deve-se capacitar a perceber e conhecer o funcionamento destes procedimentos, a fim de utilizar os recursos do solver corretamente e entender melhor as operações "caixa preta" que residem em muitos códigos de CFD (TU; YEOH; LIU, 2008).

De forma geral, os algoritmos numéricos contidos nos código de CFD resolvem o problema percorrendo três etapas (SOARES, 2005):

- Aproximação das variáveis do problema em funções simples;
- Discretização das equações que governam o problema e a manipulação matemática;
- Solução algébrica das equações.



**Figura 9 – Visão geral das etapas do solver.**



**Fonte: Adaptado de TU; YEOH; LIU, 2008.**

O primeiro passo, a integração do volume de controle, distingue o método de volumes finitos de todas as outras técnicas de CFD. As expressões resultantes desta etapa mantêm a conservação das propriedades para cada célula. Essa relação entre o algoritmo numérico e o princípio físico de conservação constitui uma das principais atrações do Método dos Volumes Finitos, tornando seus conceitos muito mais simples de entender por engenheiros do que o de Elementos Finitos (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

#### **2.4.2.3 Pós-processamento**

Na etapa do pós-processamento é permitida a visualização gráfica dos resultados obtidos na etapa anterior (solver) em diversos pontos do domínio computacional (SOARES, 2005).

Os principais pacotes de CFD estão equipados com poderosas ferramentas de visualização gráfica dos resultados gerados da simulação. Esses resultados podem ser representados por (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007):

- Gráficos X-Y;
- Visualização da geometria e da malha;
- Vetores de velocidade;
- Linhas de corrente;
- Mapas de contorno;
- Gráficos de superfície em 2-D e 3-D;
- Manipulação gráfica da geometria (rotação, translação, etc.);
- Geração de animações dinâmicas dos resultados.

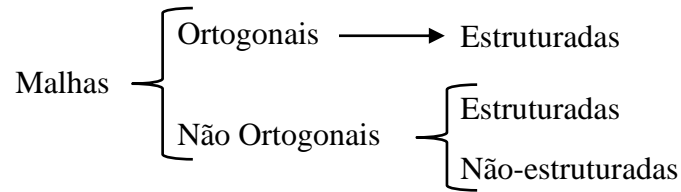
### **2.4.3 Malha numérica**

A geração da malha numérica consiste em um passo muito importante durante a etapa de pré-processamento, após a definição do domínio geométrico (TU; YEOH; LIU, 2008).

O CFD exige a subdivisão do domínio em um número finito de subdomínios, a fim de resolver as variáveis dentro da geometria de domínio que foi criado. Isso resulta na geração de uma malha (ou grade) de células (elementos ou volumes de controle) sobrepondo toda a geometria do domínio (FERZIGER; PERIĆ, 2002).

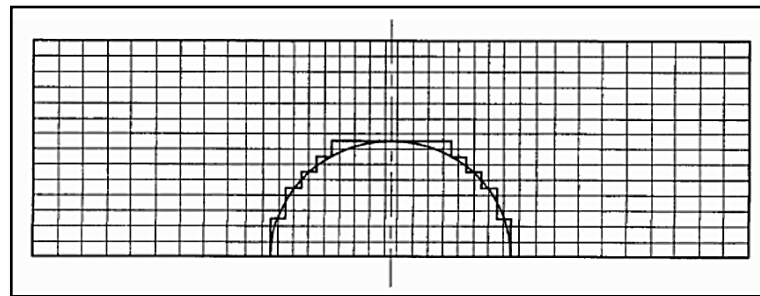
Os fluxos descritos em cada uma das células são geralmente resolvidos numericamente de modo que os valores das propriedades de fluxo como velocidade, pressão, temperatura e outros parâmetros de interesse são determinados. Para um caso em estudo de CFD a precisão da solução pode ser determinada pelo número de células que compõe o domínio computacional. Entretanto, a precisão de uma solução é fortemente dependente das limitações do custo computacional e pelo número de operações efetuadas (TU; YEOH; LIU, 2008).

As malhas podem ser representadas de acordo com a sua estrutura em um domínio geométrico, conforme apresentado a seguir (FERZIGER; PERIĆ, 2002):



Os métodos de reologia computacional baseados em sistemas de coordenadas ortogonais (ou cartesianos) ou cilíndricos apresentam diversas limitações em geometrias irregulares. Dado que a geometria de problemas reais pode ser complexa, sendo frequentemente irregular, o uso de malhas ortogonais, limita o mapeamento de acordo com o ilustrado na Figura 10 abaixo (GONÇALVES, 2007).

**Figura 10 – Exemplo de malha ortogonal.**

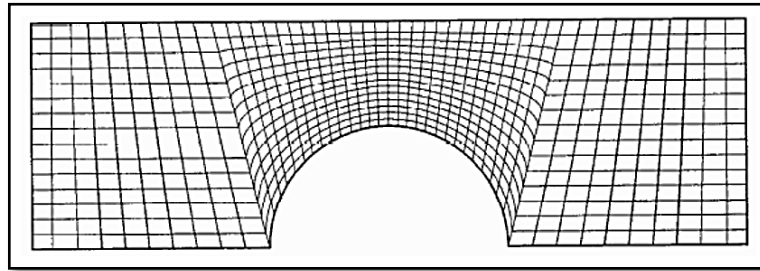


**Fonte: FERZIGER; PERIĆ, 2002.**

Para calcular o fluxo que passa em torno do cilindro da Figura 10, utilizando malhas ortogonais, a fronteira poderá ser representada por uma aproximação e as células localizadas no interior da parte sólida do cilindro não são consideradas no cálculo. Este fato apresenta desvantagens consideráveis, desde dificuldades associadas à descrição da aproximação da fronteira até à existência de erros inerentes a esta aproximação, como o cálculo da força exercida na parede. Outra desvantagem da utilização de sistemas de coordenadas ortogonais é o desperdício de recursos de armazenamento, pois a introdução de uma malha ortogonal fina numa região de interesse particular implica o desnecessário refinamento de outra região de interesse mínimo (GONÇALVES, 2007).

Os métodos de adaptação das malhas aos sólidos ou sistemas de malhas não ortogonais foram desenvolvidos para superar as limitações referidas anteriormente e são cada vez mais utilizadas nos códigos atuais de CFD. A Figura 11 mostra uma malha não ortogonal adaptada a um cilindro (GONÇALVES, 2007).

**Figura 11 – Exemplo de malha não ortogonal.**



**Fonte: FERZIGER; PERIĆ, 2002.**

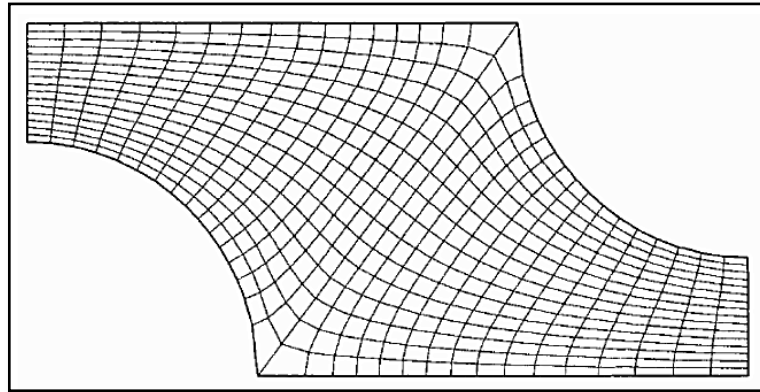
A flexibilidade geométrica oferecida por técnicas de adaptação de malhas a sólidos é útil na modelagem de problemas práticos, envolvendo geometrias irregulares, porque todos os detalhes geométricos podem ser incorporados de uma forma precisa e as propriedades da malha podem ser controladas para captar características úteis em regiões de interesse. As equações governantes com malhas não ortogonais são, contudo, muito mais complexas do que as suas malhas ortogonais equivalentes. Mesmo assim, nos códigos de reologia computacional, o recurso a malhas não ortogonais é cada vez mais preferível, dados os requisitos de armazenamento adicionais associados às malhas ortogonais. Contudo, as malhas não ortogonais requerem procedimentos especiais para assegurarem o cálculo correto da fluidodinâmica e o acoplamento pressão-velocidade, evitando campos de pressão irrealistas (GONÇALVES, 2007).

As malhas não ortogonais podem dividir-se em dois grupos: malhas estruturadas e malhas não-estruturadas. Esta classificação está relacionada com a disposição relativa dos diferentes elementos.

#### **2.4.3.1 Malha estruturada**

As malhas estruturadas (ou regulares) são constituídas por famílias de linhas com a propriedade de que os membros de uma mesma família não se cruzam entre si e se cruzam com um membro de outra família apenas uma vez, permitindo que as linhas de um determinado conjunto possam ser numeradas consecutivamente. Na Figura 12 ilustra uma malha estruturada (FERZIGER; PERIĆ, 2002).

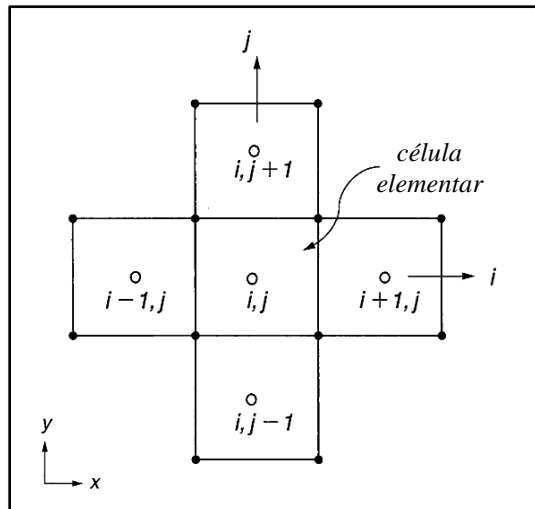
**Figura 12 – Representação de uma malha bidimensional, estruturada e não ortogonal.**



Fonte: FERZIGER; PERIĆ, 2002.

A posição de qualquer ponto da malha (ou volume de controle) dentro do domínio é identificado por um conjunto de dois índices ( $i, j$ ), em 2-D, ou por três índices ( $i, j, k$ ), em 3-D, conforme apresentados a seguir pelas Figuras 13 e 14 (TU; YEOH; LIU, 2008).

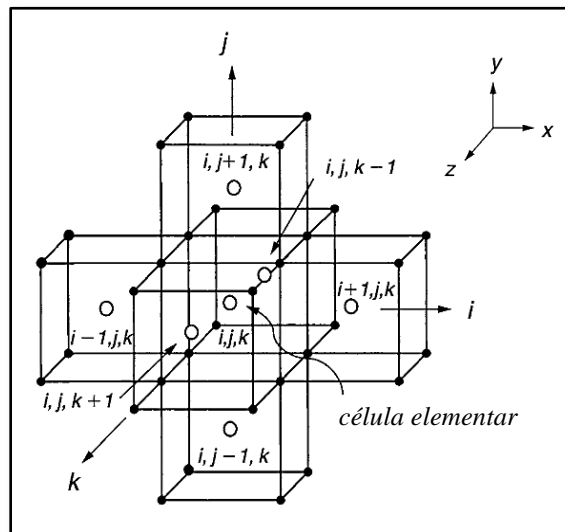
**Figura 13 – Representação dos índices nos nós das células para uma malha estruturada em 2-D.**



Fonte: Adaptado de TU; YEOH; LIU, 2008.

Na Figura 13, em duas dimensões (2-D), a célula central está conectada com quatro células vizinhas. E para uma malha tridimensional (Figura 14), a célula central está conectada com seis células vizinhas (TU; YEOH; LIU, 2008).

**Figura 14 – Representação dos índices nos nós das células para uma malha estruturada em 3-D.**

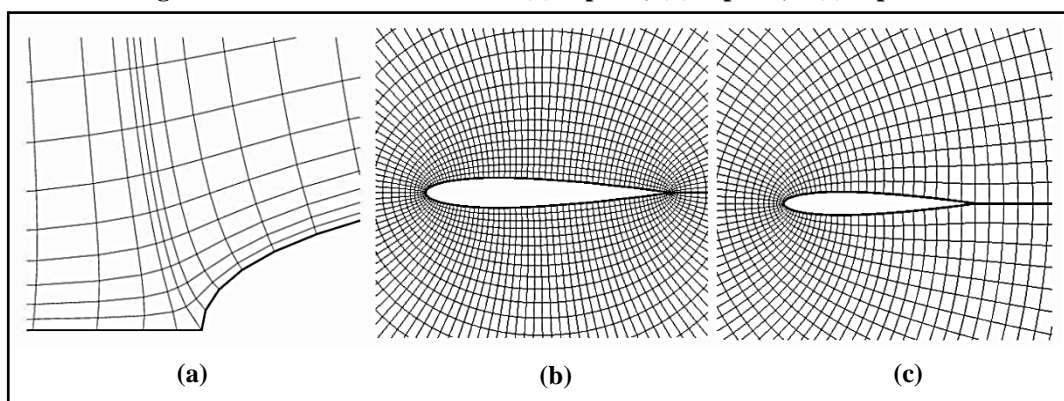


Fonte: Adaptado de TU; YEOH; LIU, 2008.

A desvantagem de uma malha estruturada é que ela pode ser usada somente para a solução de geometrias simples, podendo ser difícil de controlar os pontos de distribuição na malha. Este problema é maior em simulações tridimensionais (3-D) (FERZIGER; PERIĆ, 2002).

As malhas estruturadas podem ser do tipo-H, tipo-O ou do tipo-C; os nomes são derivados da forma das linhas da malha. A Figura 15 mostra as malhas do tipo H, tipo-O e do tipo-C (FERZIGER; PERIĆ, 2002).

**Figura 15 – Malhas estruturadas: (a) Tipo-H; (b) Tipo-O; e (c) Tipo-C.**



Fonte: GONÇALVES, 2007.

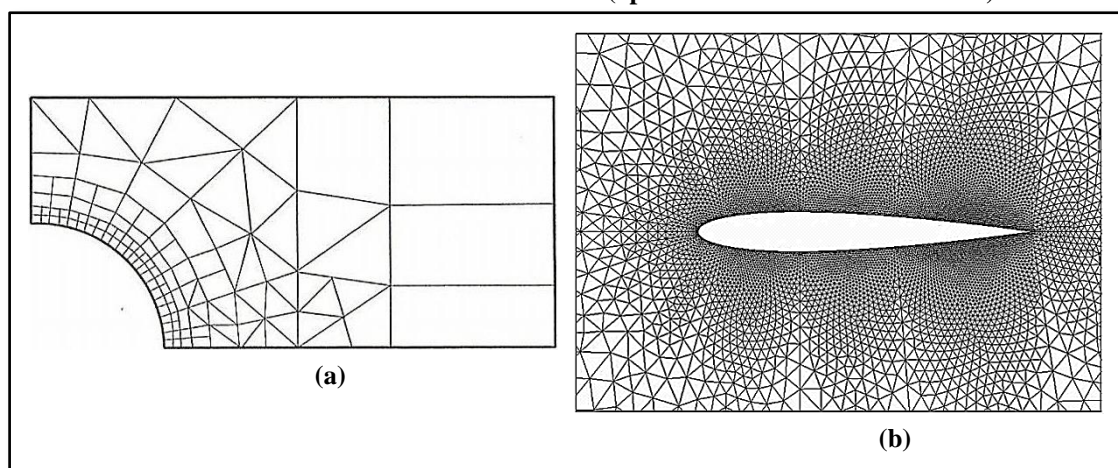
A Figura 15a representa uma malha tipo-H, que quando projetada tem diferentes fronteiras lógicas: leste, oeste, norte e sul. Na malha com estrutura tipo-O, Figura 15b, um conjunto de linhas da malha é “ilimitado”, se as linhas da malha forem tratadas como linhas de coordenadas e se seguirmos as coordenadas em torno do cilindro, estas irão crescer

indefinidamente. Para se contornar este problema, deve-se introduzir um “corte” artificial no qual as coordenadas do ponto saltam de um valor finito para zero. Neste corte, a malha pode ser de fronteira, mas os pontos da vizinhança têm de ser tratados como sendo pontos do interior da malha, em contraste ao tratamento aplicado às fronteiras de uma malha do tipo-H. Em malhas do tipo-C, Figura 15c, pontos em porções de uma das linhas da malha coincidem, requerendo a introdução de um corte similar ao encontrado nas malhas do tipo-O. Este tipo de malhas é muitas vezes encontrado em sólidos com arestas pontiagudas, permitindo assim promover uma boa precisão de cálculo (GONÇALVES, 2007).

#### 2.4.3.2 Malha não-estruturada

As malhas não-estruturadas são utilizadas geralmente para geometrias complexas, um tipo de estrutura flexível que pode caber em um domínio arbitrário da solução. Dependendo da geometria, as malhas não-estruturadas são as melhores adaptadas ao Método dos Volumes Finitos e abordagens de Elementos Finitos. O volume de controle pode ter qualquer forma, e não há restrição para número de elementos vizinhos ou nós. A Figura 16 ilustra uma malha não-estruturada (FERZIGER; PERIĆ, 2002).

**Figura 16 – Malhas não-estruturadas: (a) Fluxo em torno de um duto circular; e (b) Escoamento em torno da asa de um avião (aproximadamente 17.740 células).**



**Fonte: FERZIGER; PERIĆ, 2002.**

Códigos de CFD para malhas não-estruturadas são mais flexíveis. Eles não precisam ser alterados quando a grade é refinada localmente, ou quando os elementos ou volumes de controle de formas diferentes são utilizados. No entanto, os procedimentos de criação da geometria e a geração da malha são geralmente mais difíceis.

## 2.5 Métodos numéricos

A aplicação de métodos numéricos teve grande avanço nas últimas três décadas, impulsionada pelo avanço da microeletrônica. O desenvolvimento de computadores com alto desempenho numérico tornou possível a utilização de métodos para a solução de modelos complexos e com poucas simplificações (NORILER, 2007).

Algumas das técnicas básicas computacionais que são necessárias para resolver as equações de transporte são empregadas para obter uma solução aproximada. O processo de obtenção da solução computacional consiste em duas etapas (TU; YEOH; LIU, 2008):

- A primeira etapa envolve a conversão das equações diferenciais parciais e auxiliares (condições de contorno e inicial) em um sistema de equações algébricas. Esta primeira etapa é conhecida como a etapa de discretização;
- A segunda etapa do processo de solução envolve a implementação de métodos numéricos para fornecer uma solução para o sistema de equações algébricas.

No princípio, entre os diversos métodos propostos para a solução das equações de conservação, destacaram-se dois: o Método de Diferenças Finitas (MDF) e o Método dos Elementos Finitos (MEF). No desenvolvimento do MDF, os problemas de interesse estavam relacionados à mecânica dos fluidos, onde as não-linearidades oriundas do termo convectivo, dificultavam a implementação de geometrias complexas. Paralelamente, o MEF foi desenvolvido para solucionar problemas elásticos, com ausência no modelo das não-linearidades dos termos convectivos. A principal vantagem do MEF é a utilização de malhas não estruturadas que permitem a análise de problemas com geometrias complexas. No início da década de 70 existiam, portanto, dois métodos capazes de resolver as equações de Navier-Stokes, ambos com suas vantagens e desvantagens. Suas fragilidades começaram a ser eliminadas com a adoção do método de Galerkin e dos resíduos ponderados para o MEF, e a utilização de sistemas adaptáveis à geometria arbitrária do domínio de cálculo para o MDF (SOUZA<sup>1</sup>, 2000 *apud* NORILER, 2007, p. 79).

O método dos volumes finitos (MVF) foi originalmente desenvolvido como uma formulação especial do método das diferenças finitas (MDF). Este método é o foco

---

<sup>1</sup> SOUZA, D. P. **Aplicação das equações fundamentais para a solução do escoamento em ciclones e hidrociclones**. 105 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC, Florianópolis, Santa Catarina-SC, 2000.



central dos principais códigos de CFD, na qual o algoritmo numérico consiste nos seguintes passos (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007):

- Integração formal das equações de conservação do escoamento do fluido ao longo dos volumes de controle, no domínio da solução;
- Discretização envolvendo a substituição de uma variedade de aproximações por termos na equação integrada, representando os mecanismos de transferência por convecção e difusão, além de termos fonte. Nesta etapa, convertem-se as equações da forma integral para um sistema de equações algébricas;
- Solução das equações algébricas aplicando um método iterativo.

Em comparação com o MDF, que é matematicamente derivado da série de Taylor, o MVF garante que a propriedade é conservada e este significado físico se mantém ao longo do processo de diferenciação. Quase todos os códigos CFD adotam a discretização por volumes finitos da equação de Navier-Stokes para obter soluções numéricas para problemas complexos de fluxo de fluidos (TU; YEOH; LIU, 2008).

A desvantagem do MVF comparado ao MDF é que diferenciais superiores a de segunda ordem são mais difíceis de desenvolver em 3-D. Isto é devido ao fato de que a abordagem do MVF requer três níveis de aproximação: interpolação, diferenciação e integração (FERZIGER; PERIĆ, 2002). Tratando-se em equações de fenômenos de transporte, as equações diferenciais são no máximo de segunda ordem, como por exemplo o termo difusivo da equação da quantidade de movimento.

- **Método dos volumes finitos (MVF)**

O conceito utilizado na formulação do Método dos Volumes Finitos (MVF) é o princípio de conservação de uma determinada quantidade física expressa pelas equações governantes sobre qualquer volume finito, também denominado volume de controle. O domínio é discretizado num conjunto de volumes de controle não sobrepostos, que podem ser irregulares no tamanho e na forma (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

Os valores de uma variável  $\phi$  são armazenados no centróide dos volumes de controle. As equações discretizadas da variável dependente  $\phi$  são obtidas integrando a equação governativa sobre cada um dos volumes de controle no domínio. O processo de discretização torna-se mais conveniente reconhecendo-se o fato que todas as equações

governativas relevantes possuem uma forma comum, isto é, a forma da equação geral do transporte (GONÇALVES, 2007).

A equação geral da conservação, na forma conservativa e monofásica é apresentada abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) = -\nabla \cdot \mathbf{F}_\phi + S_\phi \quad (8)$$

Onde:  $t$  tempo;  
 $\rho$  massa específica;  
 $\phi$  propriedade fluidodinâmica;  
 $\mathbf{v}$  vetor velocidade;  
 $\mathbf{F}_\phi$  fluxo difusivo;  
 $S_\phi$  termo fonte.

Fazendo-se a integração formal da equação acima, tem-se:

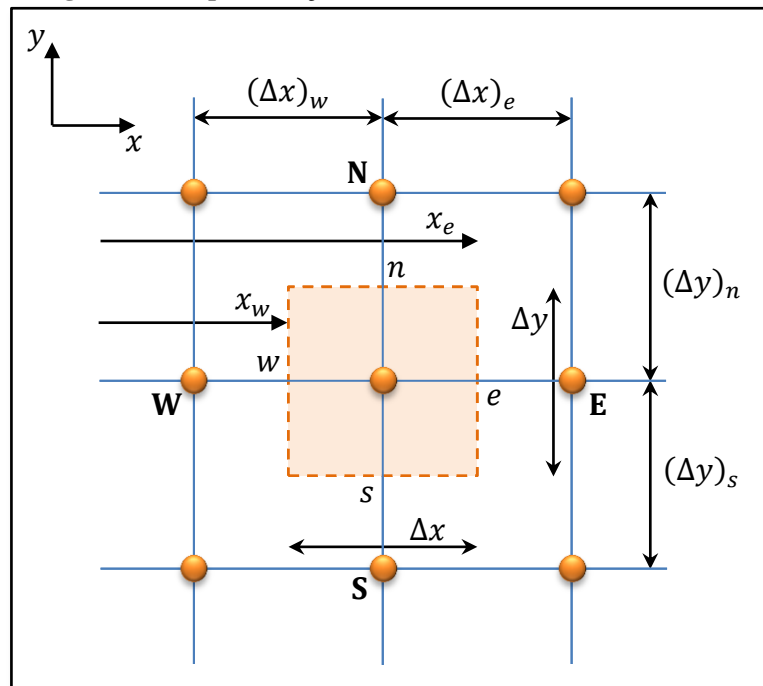
$$\iiint_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)dV + \iiint_V \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi)dV = - \iiint_V \nabla \cdot \mathbf{F}_\phi dV + \iiint_V S_\phi dV \quad (9)$$

Aplicando o teorema da divergência de Gauss, tem-se:

$$\iiint_{tV} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)dV + \iint_A (\rho\mathbf{v}\phi \cdot \mathbf{n})dA = - \iint_A (\mathbf{F}_\phi \cdot \mathbf{n})dA + \iiint_V S_\phi dV \quad (10)$$

Pode-se realizar a integração da Equação 10 em um volume de controle (VC) genérico, conforme apresentado a seguir pela Figura 17 (FERZIGER; PERIĆ, 2002). A Figura 17 a seguir apresenta um volume de controle em duas dimensões para que a compreensão da estrutura de integração seja facilitada.

Figura 17 – Representação de um VC associado a uma malha.



Fonte: Adaptado de FERZIGER; PERIĆ, 2002.

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

A partir da Equação 10, integrando-a no tempo e fazendo-se a integração sobre o volume elementar de controle, conforme apresentado pela Figura 17, num intervalo de tempo de  $t$  até  $t+\Delta t$ , a Equação 10 fica,

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \begin{aligned} & \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) - S_\phi \right]_P \Delta V - (\rho v_x \phi - F_{\phi x})_w A_w + \\ & (\rho v_x \phi - F_{\phi x})_e A_e - (\rho v_y \phi - F_{\phi y})_s A_s + \\ & (\rho v_y \phi - F_{\phi y})_n A_n - (\rho v_z \phi - F_{\phi z})_t A_t + (\rho v_z \phi - F_{\phi z})_b A_b \end{aligned} \right\} dt = 0 \quad (11)$$

Onde  $A_w, A_e, A_s, A_t$  e  $A_b$  representam as áreas em suas respectivas faces, como apresentado pela Figura 17.

Para a linearização do termo fonte ( $S_\phi$ ) é adotada uma aproximação numérica para que a solução iterativa do sistema de equações atinja a convergência. Obtendo-se assim (MALISKA<sup>2</sup>, 1995 *apud* NORILER, 2007, p. 83):

$$(S_\phi)\Delta V = S_P\phi_P + S_C \quad (12)$$

Onde  $S_P$  e  $S_C$  representam o coeficiente angular e o coeficiente linear da linearização, respectivamente.

Os fenômenos físicos fundamentais, entretanto, são extremamente complexos e não-lineares, o que sugere um método de solução iterativo. O procedimento de solução mais utilizado é o linha-por-linha TDMA para a solução das equações algébricas, e o algoritmo “SIMPLE” para assegurar o acoplamento pressão-velocidade (FERZIGER; PERIĆ, 2002).

## 2.6 Estudos realizados em pratos perfurados de coluna de destilação

A descrição da fluidodinâmica de pratos perfurados é de grande importância na prática industrial. Para uma série de condições operacionais (vazões de líquido e vapor), de geometrias do prato (diâmetro da coluna, altura da represa, comprimento da represa, diâmetro dos orifícios, fração de área perfurada, área ativa de borbulhamento, área de descida do líquido) e de propriedades do sistema, é necessário prever o regime de escoamento que prevalece sobre o prato, como o “*holdup*” do líquido, a altura de líquido claro, a densidade da espuma, a área interfacial, a queda de pressão, o tempo de residência da fase líquida e da fase vapor e os coeficientes de transferência de massa em cada uma das fases. Há muitos trabalhos publicados na literatura sobre este assunto (KISTER, 1992; LOCKETT, 1986).

Nas seções 2.6.1 e 2.6.2 serão apresentados alguns estudos experimentais e estudos utilizando as técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD), aplicados em pratos perfurados de colunas de destilação.

### 2.6.1 Estudos experimentais

Nas décadas de 1970 e 1980, estudos experimentais surgiram em busca de uma melhoria na eficiência em pratos perfurados. Muitos pesquisadores, com destaque para

---

<sup>2</sup> MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: Editora LTC, 1995.

Colwell (1979), Bennett, Agrawal e Cook (1983) e Solari e Bell (1986) estudaram o comportamento hidrodinâmico em pratos perfurados.

Estudos experimentais e correlações empíricas conduzem a predições primárias da fluidodinâmica em pratos, descrevendo as características fenomenológicas em colunas de destilação. Estas predições produzem resultados aceitáveis em inúmeros casos, mas apresentam suas limitações, principalmente nos casos de ampliação de escala (escala comercial). A incapacidade de se modelar a fluidodinâmica limita a confiabilidade das predições em equipamentos de larga escala empregando dados de eficiência medidos em equipamento de pequena escala. Nos estudos experimentais utilizavam-se um sistema ar/água para representar o escoamento líquido-vapor, pois o sistema ar/água não interferia na aquisição de dados.

Os trabalhos experimentais clássicos de Colwell (1979) e Bennett, Agrawal e Cook (1983), apresentaram regressão de parâmetros para a obtenção de correlações empíricas que descrevem a altura de líquido claro, associada à perda de carga, e altura da dispersão.

Colwell (1979) propôs uma correlação através de uma análise experimental do escoamento gás-líquido em um prato perfurado, associando-a aos dados apresentados na literatura de perda de carga e de fração volumétrica média de líquido na dispersão (densidade da espuma). A Tabela 1 mostra os detalhes geométricos do prato perfurado utilizado por Colwell (1979).

**Tabela 1 – Detalhes geométricos do estudo de Colwell (1979).**

Diâmetro do prato, [m]	1,22
Espaçamento do prato, [m]	0,61
Diâmetro do orifício, [m]	0,013
Área de borbulhamento do prato, [m <sup>2</sup> ]	0,868
% Área perfurada do prato	9,4
Altura da represa, [m]	0,051
Comprimento da represa, [m]	0,95
Espessura do prato, [m]	0,0032

**Fonte: Adaptado de COLWELL, 1979.**

Dois sistemas foram utilizados pelo autor: ar/água e ar/óleo Isopar-M. Os dados experimentais obtidos foram incorporados aos da literatura, para o desenvolvimento e avaliação das equações semi-empíricas baseadas na equação de Francis (Equação 12).

$$h_{cl} = h_w + 6,65 \left( \frac{Q_L}{W} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (12)$$

As equações proposta por Colwell (1979) para o cálculo da altura de líquido claro,  $h_{cl}$ , e da fração volumétrica média de líquido,  $f_L^{médio}$ , são apresentadas abaixo pelas as Equações 13 e 15:

$$h_{cl} = f_L^{médio} h_w + 7,8 \left[ \left( f_L^{médio} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{Q_L}{C_d W} \right]^{\frac{2}{3}} \quad (13)$$

$$\begin{cases} C_d = 0,61 + 0,08 \frac{h_{cf}}{h_w}, & \frac{h_{cf}}{h_w} \leq 8,135 \\ C_d = 1,06 \left( 1 + \frac{h_{cf}}{h_w} \right)^{1,5} & \frac{h_{cf}}{h_w} > 8,135 \end{cases} \quad (14)$$

Onde:  $Q_L$  vazão volumétrica de líquido;  
 $C_d$  coeficiente de represa;  
 $W$  comprimento da represa;  
 $h_{cf}$  altura da crista.

$$f_L^{médio} = \frac{1}{\eta + 1} \quad (15)$$

$$\eta = 12,6 (Fr)^{0,4} \left( \frac{A_H}{A_B} \right)^{-0,25} \quad (16)$$

Onde:  $\eta$  parâmetro de densidade de espuma;  
 $Fr$  número de Froude;  
 $A_H$  área total dos orifícios;  
 $A_B$  área efetiva de borbulhamento.

O número de Froude é definido como:

$$Fr = \frac{\rho_V u_s^2}{(\rho_L - \rho_V) g h_{cl}} \quad (17)$$

Colwell (1979) verificou que os erros absolutos da equação de altura de líquido claro foram de 7% e para fração volumétrica de 8% para pratos de seção retangular. Para pratos perfurados de seção cilíndrica, as equações não apresentaram bons resultados em função do comprimento da represa em relação à largura do prato e seus efeitos no perfil de velocidade, na entrada de líquido, na qual promove aumento na altura de líquido claro. No entanto, estes efeitos diminuem com o aumento do diâmetro do prato. É válido ressaltar que as correlações propostas pelo autor incorporam parâmetros geométricos (altura da represa,

largura da represa e razão entre a área perfurada e a área de borbulhamento) possibilitando identificar o impacto destes parâmetros sobre o comportamento do prato.

Bennett, Agrawal e Cook (1983) realizaram um estudo experimental em um prato perfurado de destilação, onde propuseram uma correlação que descreve a altura do líquido claro, associada à perda de carga e a altura da dispersão. Eles destacaram a não inclusão da tensão superficial sobre a perda de carga nas correlações já desenvolvidas até o momento. Os autores comentam a importância da inclusão na modelagem matemática, a perda de carga devido aos efeitos de tensão superficial. Foram utilizados dois sistemas no estudo experimental: ar/água e ar/solução aquosa de etileno glicol 80%.

Bennett, Agrawal e Cook (1983) sugeriram que esta medida deva ser realizada por inferência da perda de carga total do prato,  $h_T$ , apresentada abaixo:

$$h_T = h_{cl} + h_H + h_\sigma \quad (18)$$

Onde  $h_{cl}$  é a perda de carga devido a altura de líquido,  $h_H$  é a perda de carga devido a passagem do vapor pelos orifícios e  $h_\sigma$  é a perda de carga devido as forças de tensão superficial.

Os autores sugeriram equações para os dois últimos termos da Equação 18:

$$h_H = \frac{a}{c_v^2} \frac{\rho_V V_H^2}{\rho_L g} \quad (19)$$

$$h_\sigma = \frac{6\sigma^{\frac{2}{3}}}{1,27g^{\frac{2}{3}}\rho_L} \sqrt[3]{\frac{(\rho_L - \rho_V)}{d_H}} \quad (20)$$

Onde:  $a$  constante da Equação 19;  
 $c_v$  coeficiente de descarga;  
 $d_H$  diâmetro do orifício.

É importante ressaltar, que a equação proposta para a altura de líquido claro é, assim como a correlação de Colwell (1979), baseada na equação de Francis e dependente da fração volumétrica média de líquido. As correlações para o cálculo da altura de líquido claro e da fração volumétrica média de líquido são apresentadas abaixo (Equações 21 e 23).

$$h_{cl} = f_L^{médio} \left[ h_w + C \left( \frac{Q_L}{f_L^{médio} W} \right) \right] \quad (21)$$

$$C = 0,50 + 0,438 \exp(-137,8h_w) \quad (22)$$

$$f_L^{m\u00e9dio} = \exp[-12,55(K_s)^{0,91}] \quad (23)$$

$$K_s = u_s \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L - \rho_V}} \quad (24)$$

Onde:  $K_s$  par\u00e2metro da Equa\u00e7\u00e3o 24.

Bennett, Agrawal e Cook (1983) observaram que a perda de carga, devido \u00e0 tens\u00e3o superficial, \u00e9 independente da velocidade nos orif\u00edcios e levemente dependente da altura de l\u00edquido claro. Os autores observaram tamb\u00e9m que, a perda de carga por efeitos de tens\u00e3o superficial \u00e9 inversamente proporcional a raiz c\u00fabica do di\u00e2metro dos furos. Assim, os autores concluíram que a correla\u00e7\u00e3o proposta descreve a perda de carga no prato com maior efic\u00e1cia quando comparados com a correla\u00e7\u00e3o de Colwell (1979).

Solari e Bell (1986) realizaram um estudo experimental em uma coluna de destila\u00e7\u00e3o constitu\u00edda por 5 pratos perfurados, onde as fases l\u00edquida e vapor foram representadas pelo sistema ar/\u00e1gua operando a 1 atm. Neste estudo, os autores observaram o tempo de resid\u00eancia do l\u00edquido e a distribui\u00e7\u00e3o de velocidade no prato perfurado, para identificar alguns fatores hidrodin\u00e2micos (distribui\u00e7\u00e3o de velocidade n\u00e3o uniforme, zonas de estagna\u00e7\u00e3o e recircula\u00e7\u00e3o de l\u00edquido) que afetam a efici\u00eancia do prato perfurado.

A Tabela 2 a seguir apresenta as caracter\u00edsticas geom\u00e9tricas do estudo experimental de Solari e Bell (1986).

**Tabela 2 – Caracter\u00edsticas da geometria do estudo experimental de Solari e Bell (1986).**

Di\u00e2metro do prato, [m]	1,213
Espa\u00e7amento do prato, [m]	0,61
Comprimento da represa, [m]	0,925
Altura da represa, [m]	0,05
Comprimento do <i>downcomer</i> , [m]	0,572
Di\u00e2metro e espa\u00e7amento do orif\u00edcio, [m]	0,0127 x 0,05 $\Delta$ *
% \u00c1rea de borbulhamento do prato	76
% \u00c1rea perfurada do prato	5
% \u00c1rea do <i>downcomer</i>	12,5

\* O “delta”,  $\Delta$ , significa que os orif\u00edcios do prato perfurado foram espa\u00e7ados em forma de tri\u00e2ngulo equil\u00e1tero com 0,05 m de dist\u00e2ncia.

**Fonte: Adaptado de SOLARI; BELL, 1986.**



Os autores realizaram dois tipos de experimentos. O primeiro foi para mensurar a distribuição do tempo de residência no prato, e o segundo foi para avaliar a velocidade linear do líquido que atravessa o prato perfurado, na qual utilizaram um corante fluorescente onde era detectado pelos sensores distribuídos ao longo do prato.

Solari e Bell (1986) observaram o efeito das vazões de líquido e de vapor sobre o tempo de residência de líquido no prato. Em uma das análises, fixaram a vazão de líquido e variaram as vazões de vapor (fator  $F$ ,  $F_s = 0,462; 0,801; 1,015$  e  $1,464$  [ $\text{m s}^{-1} (\text{kg m}^{-3})^{0,5}$ ]).

A definição do fator  $F$  é apresentada abaixo:

$$F_s = u_s \sqrt{\rho_V} \quad (25)$$

Os autores notaram que, o tempo de residência de líquido tende a aumentar do centro até próximo à parede do prato para valores baixos de  $F_s$ , onde pode ocorrer a formação de zonas de estagnação ou de recirculação de líquido. Esse tempo de residência pode diminuir com o aumento do valor de  $F_s$ , pois esse aumento destrói essas regiões de líquido estagnado, assim produzindo uma mistura mais uniforme dos fluidos. Em outra análise realizada por eles, fixaram as vazões de vapor e variaram as vazões de líquido. Eles observaram que, o tempo de residência do líquido diminui drasticamente com vazão de líquido, onde o tempo de residência de líquido é relacionado inversamente à vazão de líquido e diretamente proporcional a altura de líquido claro.

O segundo experimento foi para avaliar a distribuição de velocidade de líquido no prato. Solari e Bell (1986) observaram que com o aumento das vazões de líquido e de vapor, reduzem-se os efeitos de distribuição de velocidade não uniforme, mas não elimina-os completamente. A partir dos resultados do estudo experimental da hidrodinâmica, os autores predisseram a eficiência do prato.

O estudo experimental de Solari e Bell (1986) é utilizado até hoje como referência na validação de simulações de pratos perfurados em CFD.

Além dos trabalhos experimentais clássicos desenvolvidos por Colwell (1979), Bennett, Agrawal e Cook (1983) e Solari e Bell (1986), há também estudos recentes em pratos perfurados e colunas de bolhas, destacando-se os trabalhos de Krishna *et al.* (1999a) e Noriler *et al.* (2010).

## 2.6.2 Estudos aplicados à fluidodinâmica computacional (CFD)


O desenvolvimento de modelos mais detalhados foi impulsionado pelo crescimento, tanto acadêmico quanto industrial, de uso da Fluidodinâmica Computacional na modelagem de fenômenos de transporte e também pelos avanços obtidos na área de simulação numérica de escoamentos.

Progressos consideráveis foram obtidos na modelagem fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados e ciclones. Os primeiros trabalhos no campo de coluna de bolhas iniciaram com a simulação de plantas nucleares, onde os modelos unidimensionais, mais simples, foram usados. Neste estágio inicial, a mistura líquido-gás era tratada como uma mistura quase homogênea. A velocidade da fase gasosa era calculada através de uma relação algébrica, e um fator de fricção bifásico turbulento foi introduzido na modelagem matemática (SOARES, 2005).

A complexidade do fenômeno físico envolvido, os recursos computacionais existentes e a dificuldade de incorporar modelos matemáticos em pacotes de CFD são fatores muito importantes e que devem ser levados em conta. A Figura 18 abaixo apresenta uma visão geral da complexidade da modelagem matemática em pratos perfurados de destilação em CFD.

Figura 18 – Visão geral dos modelos de CFD em pratos perfurados de coluna de destilação.

<b><u>Equações de Conservação:</u></b>	Quantidade de Movimento	Quantidade de Movimento + Energia + Espécies Químicas
<b><u>Número de Fase:</u></b>	1 Fase: Líquido (1 Equação)	2 Fases: Líquido e Vapor (2 Equações)
<b><u>Geometria:</u></b>	2-D	3-D
<b><u>Regime:</u></b>	Estacionário	Transiente
<b><u>Turbulência:</u></b>	Eqs. Algébricas	$k-\varepsilon$ padrão (2 equações diferenciais)


  
**Complexidade do Modelo**  
*Maior Recurso Computacional*  
*Maior Tempo e Dificuldade de Implantação*

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Simulações em CFD envolvendo pratos perfurados de coluna de destilação tiveram seu início em torno da década de 1990, onde autores iniciaram simulações desde um estudo da hidrodinâmica (campos de velocidades, altura de líquido claro, entre outros) até a predição da eficiência (incorporando os três fenômenos de transporte).

O Quadro 2 a seguir traz alguns estudos em CFD de pratos perfurados de coluna de destilação, indicando seus autores, ano de publicação do artigo e algumas características da simulação.

Quadro 2 – Relação de pesquisas em pratos perfurados de coluna de destilação utilizando o CFD.

Autores	Ano	Regime		Modelo de Equações		Geometria		Equações de Conservação		
		Estacionário	Transiente	1 Equação	2 Equações	2-D	3-D	Quantidade de Movimento	Energia	Espécies Químicas
Fischer e Quarini	1998		X		X		X	X		
Mehta, Chuang e Nandakumar	1998	X		X			X	X		
Krishna <i>et al.</i>	1999b		X		X		X	X		
Liu <i>et al.</i>	2000	X		X		X		X		
van Baten e Krishna	2000		X		X		X	X		
Gesit, Nandakumar e Chuang.	2003	X	X		X		X	X		
Wang <i>et al.</i>	2004	X		X			X	X		X
Rahimi <i>et al.</i>	2006	X			X		X	X	X	X
Noriler <i>et al.</i>	2008		X		X		X	X	X	
Noriler <i>et al.</i>	2010		X		X		X	X	X	X

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Fischer e Quarini (1998) propuseram um modelo para um prato perfurado retangular para um sistema ar/água a 1 atm. Os autores assumiram um coeficiente de arraste constante ( $C_D = 0,44$ ), que é apropriado para o escoamento borbulhante uniforme e concluíram que este valor constante para o coeficiente de arraste não é adequado para pratos operando no regime de espuma ou “*spray*”.

Mehta, Chuang e Nandakumar (1998) desenvolveram um modelo descrevendo apenas a fase líquida para um prato perfurado circular ( $D_P = 1,23$  m) para um sistema ar/água a 1 atm. As interações com a fase “vapor” foram consideradas a partir do uso de coeficientes de transferência de quantidade de movimento na interface, determinados a partir de correlações empíricas proposta por Colwell (1979). O modelo prediz os campos de velocidade, apresentando um erro percentual entre 10,9% a 54,5% em comparação com os resultados experimentais de Solari e Bell (1986).

Krishna *et al.* (1999b) propuseram um modelo matemático utilizando o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  padrão (apenas para fase líquida) para um prato perfurado retangular (0,39x0,12x0,22 m) para um sistema ar/água a 1 atm. O termo que descreve a transferência de quantidade de movimento na interface foi estimado pelas correlações de Krishna *et al.* (1999c) e Bennett, Agrawal e Cook (1983). Foi construída uma malha estruturada com 82.368 células (5 mm). Os autores apresentaram um estudo experimental e numérico, onde os resultados da simulação foram comparados com algumas correlações fornecidas pela literatura e com o estudo experimental. A altura do líquido claro variou entre 0,05 m e 0,09 m, apresentando um ótimo desempenho na previsão de parâmetros como campos de frações volumétricas e velocidades.

Liu *et al.* (2000) desenvolveram uma modelagem descrevendo apenas a fase líquida e modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  padrão para um prato perfurado circular ( $D_P = 1,2$  m) para um sistema ar/água a 1 atm. Os autores apresentaram um estudo experimental e numérico, descrevendo o escoamento da fase líquida sobre o prato, considerando a resistência e o efeito do borbulhamento criados pela fase “vapor”. Foram atribuídas na modelagem algumas correlações empíricas para prever a hidrodinâmica do prato. O modelo prediz a distribuição de velocidade de líquido no prato e a direção de fluxo do líquido. Liu *et al.* (2000) compararam as velocidades simuladas com o estudo experimental. O modelo apresentou um erro de 16% e uma zona de recirculação de líquido próximo a parede do prato, cuja a área foi de 15% do prato. O modelo proposto provou ser adequado para simular fluxo bidimensional em pratos de destilação, especialmente no caso de ter circulação de líquido (fluxo reverso).

van Baten e Krishna (2000) propuseram um modelo de duas equações, tridimensional (3-D), regime transiente, descrevendo as fases líquida e vapor, utilizando as equações da continuidade e de conservação de quantidade de movimento e modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  padrão (apenas para fase líquida) para um prato perfurado circular ( $D_p = 0,30$  m) para um sistema ar/água a 1 atm. O termo que descreve a transferência de quantidade de movimento na interface foi estimado pelas correlações de Krishna *et al.* (1999c) e Bennett, Agrawal e Cook (1983). Os autores construíram uma malha estruturada constituída por 69.120 células (5 mm). O modelo prediz a altura de líquido claro, as frações de líquido e os campos de velocidade no prato. Os resultados da simulação da altura de líquido claro foram comparados com a correlação de Bennett, Agrawal e Cook (1983) e o trabalho experimental de Krishna *et al.* (1999b). A altura do líquido claro variou entre 0,05 m a 0,08 m. A principal conclusão dos autores faz referência à alta confiabilidade do modelo na predição da fluidodinâmica de um prato de destilação.

Gesit, Nandakumar e Chuang (2003) propuseram um modelo utilizando o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  padrão para um sistema ar/água a 1 atm. Neste estudo, os autores apresentaram dois tipos de simulação, uma em regime transiente e outra em regime estacionário, obtidas de versões de pacotes comerciais de CFD (CFX 4.4 e CFX 5.5) comparando-os com os dados experimentais de Solari e Bell (1986). O termo que descreve a transferência de quantidade de movimento na interface foi estimado pelas correlações de Krishna *et al.* (1999c), Bennett, Agrawal e Cook (1983) e Colwell (1979). Os autores utilizaram um prato perfurado circular ( $D_p = 1,22$  m), incluindo a região do *downcomer*. Foram construídas uma malha estruturada e outra não estruturada considerando a condição de simetria no centro do prato. O modelo de Gesit, Nandakumar e Chuang (2003) prediz a hidrodinâmica do prato, onde os campos de velocidades foram comparados com as velocidades experimentais de Solari e Bell (1986) e a altura do líquido claro variou entre 0,06 m a 0,08 m. Os autores concluíram que as predições realizadas pelo modelo mostraram uma boa concordância com os dados experimentais e que a Fluidodinâmica Computacional é uma ferramenta muito importante para se compreender melhor os fenômenos envolvidos no escoamento em pratos de destilação.

Wang *et al.* (2004) desenvolveram um modelo utilizando o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  padrão, descrevendo apenas a fase líquida. Para as equações de fechamento do modelo, Wang *et al.* (2004) utilizaram a correlação de Colwell (1979) para o termo de transferência de quantidade de movimento na interface. Foi construída uma malha estruturada para o prato perfurado circular ( $D_p = 1,22$  m) na qual foram realizadas duas simulações: a

primeira em um único prato em um sistema ar/água a 1 atm comparando com as velocidades experimentais de Solari e Bell (1986), e a segunda para uma coluna de destilação constituída de 10 pratos em um sistema ciclohexano/*n*-heptano a 164 kPa comparando com dados de concentrações e eficiências de Sakata e Yanagi (1979). O modelo prediz a hidrodinâmica, a distribuição de concentração e a eficiência global.

Rahimi *et al.* (2006) apresentaram um trabalho numérico utilizando o modelo de turbulência *k-ε* padrão, onde foram realizados dois tipos de simulação, a primeira para um prato perfurado retangular de Dribika e Biddulph (1986) (1,067x0,89 m) e a segunda para um prato circular de Yanagi e Sakata (1982) ( $D_p = 1,2$  m) para os sistemas MeOH/*n*-PrOH e EtOH/*n*-PrOH a 1 atm para predizer a hidrodinâmica, os perfis de temperatura e de concentração no prato. Correlações da literatura foram utilizadas para as equações de fechamento de transferência de quantidade de movimento (KRISHNA *et al.*, 1999c, BENNETT; AGRAWAL; COOK, 1983), energia e das espécies químicas na interface. O desempenho do modelo de Rahimi *et al.* (2006) mostrou que para o prato perfurado retangular a eficiência variou entre 76,7% a 78% e para o prato perfurado circular variou entre 45% a 92%. Os autores concluíram que os resultados dos modelos de CFD são dependentes das equações de fechamento e que trabalhos futuros devem ser desenvolvidos para aprimorar as equações de transferência de quantidade de movimento, energia e de massa na interface.

Noriler *et al.* (2008) propuseram um modelo numérico para um sistema ar/água a 1 atm utilizando correlações de Krishna *et al.* (1999c) e Bennett, Agrawal e Cook (1983) para as equações de fechamento e modelo de turbulência *k-ε* padrão (apenas para fase líquida) para um prato perfurado circular ( $D_p = 0,30$  m). A simulação foi realizada para o estudo do comportamento dos fluidos em dois modelos diferentes de geometria, simplificada e estendida. Os autores construíram uma malha estruturada (5 mm) e utilizaram o algoritmo SIMPLEC para o acoplamento pressão-velocidade. A simulação foi realizada no pacote comercial CFX 4.4, levando 10 dias para simular 20 segundos da hidrodinâmica do prato, com um incremento de tempo de 0,002 segundos. Neste estudo, o modelo de Noriler *et al.* (2008) não prevê a eficiência do prato, apenas a hidrodinâmica e a distribuição de temperatura no prato. A altura do líquido claro foi comparada com as correlações citadas anteriormente. Eles observaram que a altura do líquido claro foi menor na geometria estendida do que na simplificada, com um desvio de 4%, apresentando boa concordância com os resultados comparados. Para a distribuição de temperatura no prato, perto da região de entrada do líquido e próximo ao vertedor, observou-se um movimento caótico (regiões de recirculação e de estagnação do líquido) similar aos perfis de velocidade e de fração de líquido, mas com menor

intensidade. Noriler *et al.* (2008) concluíram que são necessários modelos matemáticos mais eficientes para as equações constitutivas que se refere aos fenômenos transferência de quantidade de movimento, energia e massa na interface, afim de minimizar os erros derivados da utilização de correlações empíricas nas simulações.

Noriler *et al.* (2010) propuseram um modelo experimental isotérmico para prever a altura do líquido claro para um prato perfurado de uma coluna de destilação operando com sistema ar/água a 1 atm e um modelo de CFD para um sistema etanol/água a 1 atm para prever a fração de volume, velocidade, pressão, temperatura e concentração para as duas fases e a eficiência do prato perfurado. Sub-rotinas em linguagem FORTRAN foram utilizadas para as equações de fechamento do modelo, onde empregaram modelos termodinâmicos como o procedimento gamma-phi para o equilíbrio líquido-vapor, na qual foi considerada a fase vapor ideal ( $\Phi = 1$ ) e o coeficiente de atividade não ideal (UNIQUAC). Noriler *et al.* (2010) construíram uma malha estruturada constituída de 70.000 células (5 mm) para um prato perfurado circular de ( $D_p = 0,30$  m). A hidrodinâmica do modelo de CFD foi comparada com o estudo experimental isotérmico, apresentando um erro médio da altura do líquido claro de 8,9% e a eficiência do prato perfurado foi de 64,14%, mostrando que o modelo obteve um bom resultado, permitindo concluir que as técnicas de CFD podem ser usadas para otimizar projetos de pratos perfurados e condições operacionais nos processos industriais.



### 3 METODOLOGIA

Neste capítulo será apresentada a metodologia envolvida na simulação do prato perfurado de uma coluna de destilação, isto é, a criação do domínio geométrico, a construção da malha numérica, as configurações da simulação e as condições iniciais e de contorno. A Figura 19 indica os passos percorridos na simulação.

**Figura 19 – As etapas percorridas durante a simulação.**



**Fonte: Elaborado pelo Autor.**

Uma análise das condições operacionais será realizada, variando as condições de fluxo de entrada e de saída de líquido e de vapor<sup>3</sup>, e também alterando algumas características geométricas do prato perfurado, observando a distribuição de fluxo em um escoamento líquido-vapor isotérmico. Os fluidos utilizados na simulação foram a água e o ar, para representar a fase líquida e a fase vapor, respectivamente.

#### 3.1 Hardware e software

O computador utilizado foi um *laptop* Sony<sup>®</sup> Vaio com as seguintes características:

- Sistema Operacional Windows<sup>®</sup> 7 Professional (x64);
- Processador Intel<sup>®</sup> Core<sup>™</sup> i7 Q-740;
- Memória de Vídeo de 1 GB: NVIDIA<sup>®</sup> GeForce GT 425M;

<sup>3</sup> A palavra “vapor” utilizada neste contexto refere-se ao fluido ar, na qual é interpretado como a fase vapor em um sistema líquido-vapor.

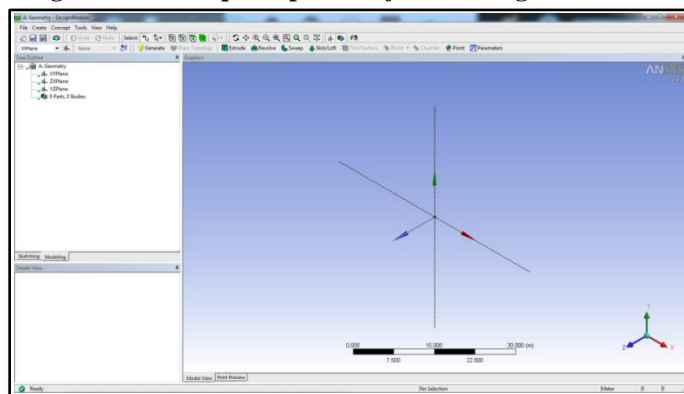
- Memória RAM 6 GB;
- Capacidade de armazenagem de 640 GB.

O *software* de fluidodinâmica computacional utilizado nas simulações numéricas conduzidas neste trabalho foi o pacote comercial ANSYS 12.0.

### 3.2 Domínio computacional

Nesta etapa, a criação do volume de controle estudado foi realizada utilizando o *software* DesignModeler™ (versão 12.0) do pacote comercial de CFD da ANSYS Inc., conforme ilustrado pela Figura 20.

**Figura 20 – Tela principal do *software* DesignModeler™.**

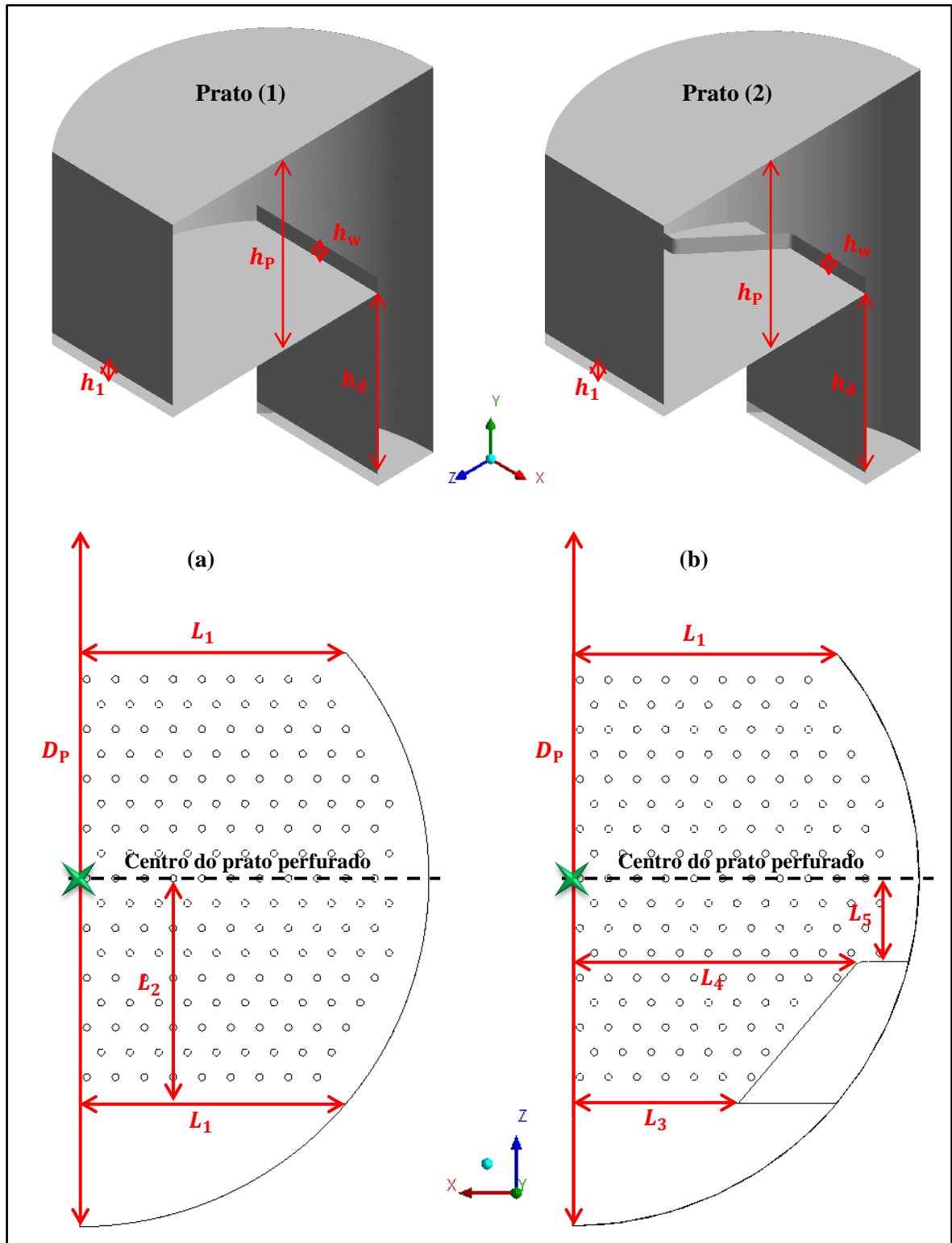


**Fonte: Elaborado pelo Autor.**

O volume de controle estudado, também chamado de geometria devido a sua semelhança com a configuração real dos equipamentos e acessórios físicos envolvidos, foi um estágio de coluna de destilação. Foram construídos duas geometrias de pratos perfurados para observar o estudo da hidrodinâmica.

A Figura 21 a seguir apresenta os dois modelos de geometria de prato perfurado, o primeiro prato, “Prato (1)”, foi baseado nas características geométricas do trabalho de Solari e Bell (1986) e o segundo prato, “Prato (2)”, foi construído alterando algumas características geométricas, como por exemplo, a represa. Esta alteração na geometria teve como objetivo diminuir as zonas recirculação no prato. As Figuras 21a e 21b ilustram as dimensões dos pratos no Plano ZX. Como orientação do domínio computacional, a origem está localizada no centro do prato perfurado (“X” na cor verde).

Figura 21 – Geometrias e dimensões dos pratos: (a) Prato (1); e (b) Prato (2).



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Duas importantes características das simulações realizadas neste trabalho foram a inclusão da região do *downcomer* no domínio computacional e a consideração de simetria do prato perfurado. Esta última foi de grande importância na modelagem do domínio,

visando um menor tempo computacional na solução e pelo formato da geometria permitir a condição de simetria. A Tabela 3 apresenta as principais dimensões utilizadas na construção dos pratos perfurados, conforme apresentado anteriormente pela Figura 21.

**Tabela 3 – Dimensões dos pratos perfurados utilizados na simulação.**

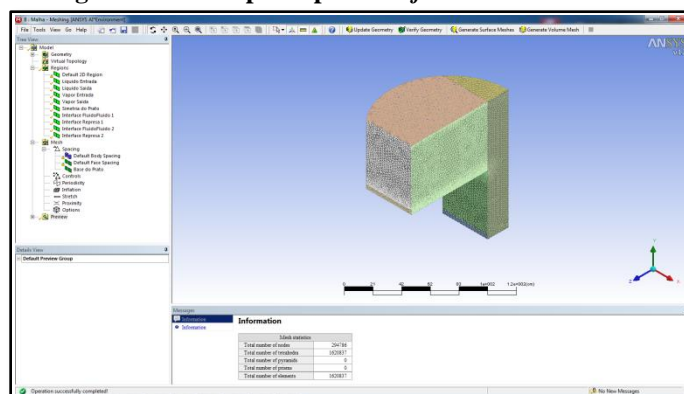
Dimensões	Prato (1)	Prato (2)
Comprimento, $L_2$ [cm]	39,235	-----
Comprimento, $L_3$ [cm]	-----	29,0
Comprimento, $L_4$ [cm]	-----	50,0
Comprimento, $L_5$ [cm]	-----	14,5
Número de orifícios da simetria, $N_{H,sim}$	175	166
Área de borbulhamento, [m <sup>2</sup> ]	0,88049	0,80987
Diâmetro do prato, $D_p$ [m]	1,213	
Diâmetro do orifício, $d_H$ [mm]	12,7	
Espaçamento do prato, $h_p$ [cm]	61,0	
Altura do <i>downcomer</i> , $h_d$ [cm]	57,2	
Altura da represa, $h_w$ [cm]	5,0	
Altura de entrada de líquido, $h_1$ [cm]	3,8	
Comprimento, $L_1$ [cm]	46,25	

Fonte: Elaborado pelo Autor.

### 3.3 Malha numérica

Após a criação da geometria, foi utilizado o *software* CFX-Mesh<sup>TM</sup> (versão 12.0) do pacote comercial de CFD da ANSYS Inc., para gerar a malha computacional, conforme apresentado na Figura 22.

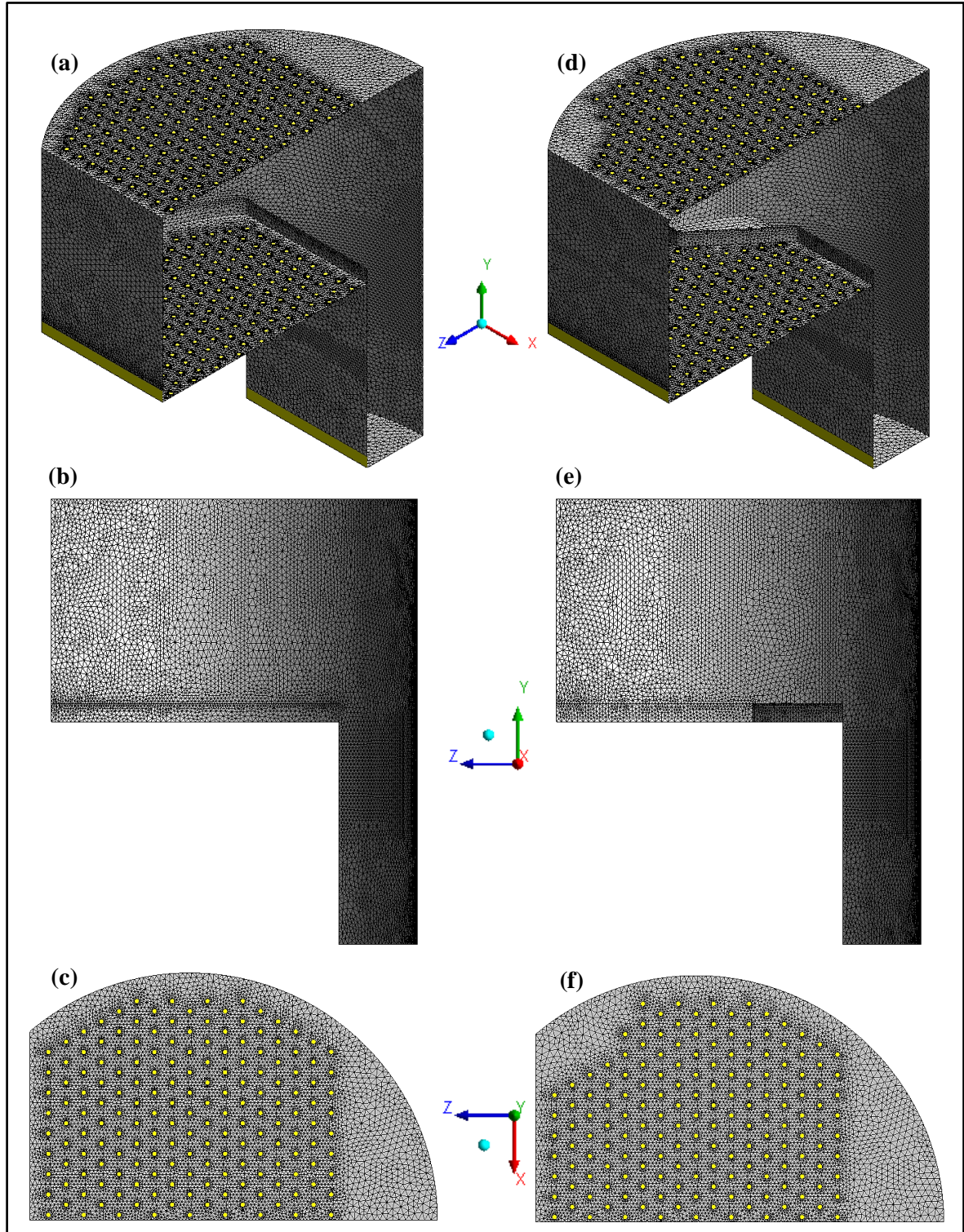
**Figura 22 – Tela principal do *software* CFX-Mesh<sup>TM</sup>.**



Fonte: Elaborado pelo Autor.

A Figura 23 ilustra a malha numérica utilizada na simulação em suas diferentes vistas para os Pratos (1) e (2).

**Figura 23 – Malha numérica dos Pratos (1) e (2): (a) e (d) Perspectiva; (b) e (e) Vista frontal; e (c) e (f) Vista superior.**



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Com o volume de controle definido, realizou-se um melhoramento da malha. O melhoramento consistiu em refinar a região de borbulhamento do prato (base do prato), por ser uma região de maior interesse do estudo e também para detectar qualquer eventual alteração nas propriedades que podem mudar completamente os resultados das simulações. Sendo assim, todo o domínio foi refinado alterando-se apenas o tamanho máximo e mínimo dos elementos (*sizing*), dividindo-o em elementos pequenos de 0,65 a 1,4 cm de aresta.

Uma maneira simples e rápida de se analisar preliminarmente a qualidade da malha gerada é através do *element quality*, *aspect ratio*, e *skewness*. Para cada um deles é reportado um valor mínimo (Min), máximo (Máx), médio (Méd) e o seu desvio padrão (DP) (ANSYS Inc., 2009a).

O *element quality* calcula para cada elemento da malha um fator de qualidade, podendo variar de 0 a 1. O valor 1 indica um cubo perfeito ou um quadrado, enquanto que o valor 0 (zero) indica que o elemento tem um volume zero ou negativo (ANSYS Inc., 2009a).

O *aspect ratio* relaciona as dimensões características dos elementos, quanto mais proporcional melhor. Aconselha-se que a maioria dos elementos não ultrapasse o intervalo de 20 a 50 (ANSYS Inc., 2009a).

O *skewness* determina o quão perto do ideal uma face ou célula de uma malha está, podendo variar seu valor de 0 a 1. De acordo com a definição, um valor 0 (zero) indica uma célula equilátera (célula de melhor qualidade), enquanto que o valor 1 indica uma célula altamente assimétrica (célula de pior qualidade) (ANSYS Inc., 2009a).

A Tabela 4 apresenta algumas informações da malha para os Pratos (1) e (2).

**Tabela 4 – Características e qualidade da malha para o Prato (1) e (2).**

<b>Dimensões</b>	<b>Prato (1)</b>				<b>Prato (2)</b>			
Elementos	2.140.625				1.997.406			
Nós	383.029				358.070			
	<b>Min</b>	<b>Máx</b>	<b>Méd</b>	<b>DP</b>	<b>Min</b>	<b>Máx</b>	<b>Méd</b>	<b>DP</b>
<i>Element quality</i>	0,108	0,999	0,788	0,135	0,145	0,999	0,788	0,136
<i>Aspect ratio</i>	1,162	12,17	2,032	0,701	1,162	11,99	2,029	0,699
<i>Skewness</i>	$9 \times 10^{-5}$	0,980	0,319	0,199	$1 \times 10^{-4}$	0,977	0,318	0,200

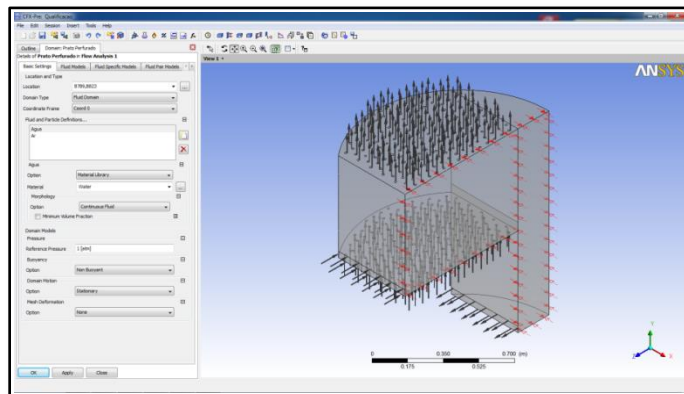
Fonte: Elaborado pelo Autor.

As malhas construídas para os Pratos (1) e (2) são do tipo não estruturadas e formadas por elementos tetraédricos.

### 3.4 Configuração da simulação

Nesta etapa da simulação, foi utilizado o *software* CFX-Pre (versão 12.0) do pacote comercial de CFD da ANSYS Inc. para caracterizar a simulação de interesse, isto é, indicar quais fluidos estão envolvidos no domínio, as condições iniciais e de contorno e entre outras configurações, conforme citado brevemente na seção 2.4.2.1 (pré-processamento). A tela principal do CFX-Pre é apresentada a seguir na Figura 24.

**Figura 24 – Tela principal do *software* CFX-Pre.**



**Fonte: Elaborado pelo Autor.**

Assim como qualquer simulação computacional, faz-se necessário especificar algumas informações acerca do processo e da forma como este será tratado, resolvido e analisado. Neste quesito, o primeiro passo é informar para o programa qual será o regime estudado, ou seja, se a análise deverá ser transiente (propriedades do sistema que variam ao longo do tempo) ou estacionária (as propriedades do sistema que são constantes ao longo do tempo), dentre outras informações.

O modelo matemático e as propriedades dos fluidos proposto neste trabalho para os Pratos (1) e (2) apresenta as seguintes características, conforme mostrado abaixo pelo Quadro 3 e Tabela 6, respectivamente:

**Quadro 3 – Configurações da modelagem dos Pratos (1) e (2) utilizadas no CFX-Pre.**

<b>Modelagem</b>	<b>Pratos (1) e (2)</b>
Tipo de escoamento	Multifásico (2 fases: líquida e vapor)
Modelo	2 Equações
Regime	Estacionário
Geometria	Tridimensional (3-D)
Modelo de turbulência	$k-\varepsilon$ padrão (ambas as fases)

**Fonte: Elaborado pelo Autor.**

**Tabela 5 – Propriedades termodinâmicas e propriedades de transporte dos fluidos utilizadas nas simulações.**

Propriedades	Fluidos	
	Água	Ar*
Massa molar, [kg kmol <sup>-1</sup> ]	18,02	28,96
Densidade, [kg m <sup>-3</sup> ]	997	1,185
Viscosidade dinâmica, [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	8,899x10 <sup>-4</sup>	1,831x10 <sup>-5</sup>

\* Propriedades do Ar a 25°C e 1 atm.

**Fonte: Elaborado pelo Autor.**

### 3.4.1 Equações do CFD

O CFD é fundamentalmente baseado nas equações governativas (*governing equations*) da fluidodinâmica (conhecidas como equações de Navier-Stokes), ou seja, nas leis físicas da conservação. Obviamente, inúmeras outras equações não fundamentais estão implementadas nos *softwares* de CFD. Equações de turbulência, de estado, correlações, etc. são essenciais para auxiliarem na resolução da grande maioria de problemas de mecânica dos fluidos.

As equações utilizadas do *software* de CFD para resolver a fluidodinâmica do escoamento nos pratos perfurados são apresentadas a seguir:

#### 3.4.1.1 Equação da continuidade

A equação da continuidade está relacionada com a conservação da massa, a qual não pode ser criada nem destruída, a massa do fluido é conservada. As Equações 26 e 27 a seguir apresentam as equações da continuidade para o escoamento multifásico, onde os subscritos “L” e “V” representam a fase líquida e vapor, respectivamente (ANSYS Inc., 2009b).

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_L \rho_L) + \nabla \cdot (f_L \rho_L \mathbf{v}_L) = \mathbf{S}_{MS,L} + \sum_{V=1}^{N_F} \Gamma_{LV} \quad (26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_V \rho_V) + \nabla \cdot (f_V \rho_V \mathbf{v}_V) = \mathbf{S}_{MS,V} + \sum_{L=1}^{N_F} \Gamma_{VL} \quad (27)$$



Onde:  $f$  fração volumétrica;  
 $\rho$  massa específica;  
 $\mathbf{v}$  vetor velocidade;  
 $\mathbf{S}_{MS}$  fonte de massa;  
 $\Gamma_{LV}$  taxa de transferência de massa por unidade de volume da fase líquida para a fase vapor.

### 3.4.1.2 Equação de quantidade de movimento

A equação da quantidade de movimento é decorrente da segunda de lei de Newton, a qual diz que a taxa de troca de momento é igual à soma das forças agindo sobre o fluido. As Equações 28 e 29 apresentam as equações de quantidade de movimento para o escoamento multifásico, onde os subscritos “L” e “V” representam a fase líquida e vapor, respectivamente (ANSYS Inc., 2009b).

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (f_L \rho_L \mathbf{v}_L) + \nabla \cdot [f_L (\rho_L \mathbf{v}_L \otimes \mathbf{v}_L)] \\ &= -f_L \nabla P_L + \nabla \cdot (f_L \mathbf{T}_L^{\text{eff}}) + \sum_{V=1}^{N_F} (\Gamma_{LV}^+ \mathbf{v}_V - \Gamma_{VL}^+ \mathbf{v}_L) + \mathbf{S}_{M,L} + \mathbf{M}_L \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (f_V \rho_V \mathbf{v}_V) + \nabla \cdot [f_V (\rho_V \mathbf{v}_V \otimes \mathbf{v}_V)] \\ &= -f_V \nabla P_V + \nabla \cdot (f_V \mathbf{T}_V^{\text{eff}}) + \sum_{L=1}^{N_F} (\Gamma_{VL}^+ \mathbf{v}_L - \Gamma_{LV}^+ \mathbf{v}_V) + \mathbf{S}_{M,V} + \mathbf{M}_V \end{aligned} \quad (29)$$

Onde:  $P$  pressão;  
 $\mathbf{T}^{\text{eff}}$  tensor efetivo;  
 $(\Gamma_{LV}^+ \mathbf{v}_V - \Gamma_{VL}^+ \mathbf{v}_L)$  transferência de quantidade de movimento induzida pela transferência de massa entre as fases;  
 $\mathbf{S}_M$  fontes de quantidade de movimento devido as forças externas agindo sobre o fluido;  
 $\mathbf{M}_L$  e  $\mathbf{M}_V$  forças de interface atuando sobre a fase líquida devido a presença da fase vapor e forças de interface atuando sobre a fase vapor devido a presença da fase líquida, respectivamente

O tensor efetivo,  $\mathbf{T}^{\text{eff}}$ , relaciona a difusão e a dispersão das propriedades devido aos efeitos de turbulência, podendo assim, ser escrito como uma combinação entre o fluxo difusivo e o fluxo turbulento, onde o sobrescrito “turb” representa o fluxo turbulento, conforme apresentado nas Equações 30 e 31 a seguir:

$$\mathbf{T}_L^{\text{eff}} = \mathbf{T}_L + \mathbf{T}_L^{\text{turb}} \quad (30)$$

$$\mathbf{T}_V^{\text{eff}} = \mathbf{T}_V + \mathbf{T}_V^{\text{turb}} \quad (31)$$

Considerando os fluidos como Newtoniano e a hipótese da viscosidade turbulenta, o tensor efetivo das Equações 30 e 31 podem ser escritos como,

$$\mathbf{T}_L^{\text{eff}} = -\mu_L^{\text{eff}}[\nabla\mathbf{v}_L + (\nabla\mathbf{v}_L)^T] \quad (32)$$

$$\mathbf{T}_V^{\text{eff}} = -\mu_V^{\text{eff}}[\nabla\mathbf{v}_V + (\nabla\mathbf{v}_V)^T] \quad (33)$$

A viscosidade efetiva,  $\mu^{\text{eff}}$ , pode ser combinada entre a viscosidade molecular,  $\mu$ , e a viscosidade turbulenta devido aos efeitos de turbulência,  $\mu^{\text{turb}}$ , ficando assim:

$$\mu_L^{\text{eff}} = \mu_L + \mu_L^{\text{turb}} \quad (34)$$

$$\mu_V^{\text{eff}} = \mu_V + \mu_V^{\text{turb}} \quad (35)$$

Para representar a modelagem da viscosidade turbulenta e da transferência de quantidade de movimento na interface,  $\mu^{\text{turb}}$  e  $\mathbf{M}$ , no prato perfurado, são apresentadas na seção 3.4.1.4 as equação de fechamento para esses termos.

O termo  $\mathbf{S}_M$  da equação de quantidade de movimento refere-se às forças externas atuando sobre o fluido, e sua modelagem é apresentada abaixo para ambas as fases.

$$\mathbf{S}_{M,L} = f_L \rho_L \mathbf{g} \quad (36)$$

$$\mathbf{S}_{M,V} = f_V \rho_V \mathbf{g} \quad (37)$$

Onde:  $\mathbf{g}$  vetor aceleração da gravidade.

### 3.4.1.3 Equações de restrição

As equações de restrição de pressão e de volume descritas a seguir descrevem qualquer tipo de escoamento multifásico (ANSYS Inc., 2009b):

- Restrição de pressão: todas as fases compartilham o mesmo campo de pressão;

$$P_L = P_V = P \quad (38)$$

- Restrição de volume: As frações volumétricas de líquido e vapor,  $f_L$  e  $f_V$ , estão relacionadas pela equação de restrição.

$$f_L + f_V = 1 \quad (39)$$

### 3.4.1.4 Equações de fechamento

Para o fechamento do modelo das equações apresentadas acima, que possibilita uma solução numérica, é necessário definir alguns termos apresentados no modelo geral por equações constitutivas. Estes termos estão diretamente relacionados às transferências de massa e de quantidade de movimento na interface e modelos de turbulência. Desta maneira, apresentam-se a abaixo as equações constitutivas para cada um destes termos.

#### 3.4.1.4.1 Modelo de turbulência – $k$ - $\varepsilon$ padrão

Turbulência ocorre quando as forças de inércia no fluido tornam-se significativas em comparação com as forças viscosas, e é caracterizada por um número de Reynolds elevado. Modelos de turbulência de duas equações (exemplo,  $k$ - $\varepsilon$  e  $k$ - $\omega$ ) são amplamente utilizados, pois oferecem um bom compromisso entre o esforço numérico e a precisão computacional (ANSYS Inc., 2009b).

No presente trabalho, foi utilizado o modelo de turbulência  $k$ - $\varepsilon$  padrão nas simulações para ambas as fases. A viscosidade turbulenta,  $\mu^{\text{turb}}$ , das Equações 34 e 35, pode ser modelada, conforme apresentado abaixo:

$$\mu_L^{\text{turb}} = C_\mu \rho_L \left( \frac{k_L^2}{\varepsilon_L} \right) \quad (40)$$

$$\mu_V^{\text{turb}} = C_\mu \rho_V \left( \frac{k_V^2}{\varepsilon_V} \right) \quad (41)$$

Onde:  $C_\mu$  constante do modelo de turbulência  $k$ - $\varepsilon$  padrão;  
 $k$  energia cinética turbulenta;  
 $\varepsilon$  taxa de dissipação de energia cinética turbulenta.

Os valores de  $k$  e  $\varepsilon$  vêm diretamente das equações diferenciais de transporte, nas quais se faz necessário mais duas equações para cada fase.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_L \rho_L k_L) + \nabla \cdot \left\{ f_L \left[ f_L \rho_L \mathbf{v}_L k_L - \left( \mu_L + \frac{\mu_L^{\text{turb}}}{\sigma_k} \right) \nabla k_L \right] \right\} \\ = f_L (\mathbf{P}_k + P_{kb} - \rho_L \varepsilon_L) \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_L \rho_L \varepsilon_L) + \nabla \cdot \left\{ f_L \left[ \rho_L \mathbf{v}_L \varepsilon_L - \left( \mu_L + \frac{\mu_L^{\text{turb}}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_L \right] \right\} \\ = f_L \frac{\varepsilon_L}{k_L} (C_{\varepsilon 1} (\mathbf{P}_k + P_{\varepsilon b}) - C_{\varepsilon 2} \rho_L \varepsilon_L) \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_V \rho_V k_V) + \nabla \cdot \left\{ f_V \left[ f_V \rho_V \mathbf{v}_V k_V - \left( \mu_V + \frac{\mu_V^{\text{turb}}}{\sigma_k} \right) \nabla k_V \right] \right\} \\ = f_V (\mathbf{P}_k + P_{kb} - \rho_V \varepsilon_V) \end{aligned} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_V \rho_V \varepsilon_V) + \nabla \cdot \left\{ f_V \left[ \rho_V \mathbf{v}_V \varepsilon_V - \left( \mu_V + \frac{\mu_V^{\text{turb}}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_V \right] \right\} \\ = f_V \frac{\varepsilon_V}{k_V} (C_{\varepsilon 1} (\mathbf{P}_k + P_{\varepsilon b}) - C_{\varepsilon 2} \rho_V \varepsilon_V) \end{aligned} \quad (45)$$

Onde  $P_{kb}$  e  $P_{\varepsilon b}$  representam a influência das forças de flutuação.  $\mathbf{P}_k$  é a produção de turbulência devido às forças viscosas, que é definida como (ANSYS Inc., 2009b):

$$\mathbf{P}_k = \mu_L^{\text{turb}} \nabla \mathbf{v}_L \cdot (\nabla \mathbf{v}_L + \nabla \mathbf{v}_L^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_L (3\mu_L^{\text{turb}} \nabla \cdot \mathbf{v}_L + \rho_L k_L) \quad (46)$$

Para escoamento incompressível,  $\nabla \cdot \mathbf{v}_L$  é muito pequeno e o segundo termo do lado direito da Equação 46 não contribui significativamente para a produção de turbulência. Os valores das constantes do modelo de turbulência são apresentados abaixo pela Tabela 6.

**Tabela 6 – Valores das constantes do modelo de turbulência  $k$ - $\varepsilon$  padrão.**

Constante	$C_\mu$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$	$C_1$	$C_2$
Valor	1,92	1,00	1,30	0,09	1,44

Fonte: Adaptado de WILCOX, 2004.

Tu, Yeoh e Liu (2008) relataram que o modelo de turbulência  $k$ - $\varepsilon$  padrão é o modelo mais utilizado e validado contra uma série de situações, sem a necessidade de ajustar as suas constantes.

### 3.4.1.4.2 Transferência de quantidade de movimento na interface

Os termos  $\mathbf{M}_{LV}$  e  $\mathbf{M}_{VL}$ , que se referem à transferência de quantidade de movimento na interface, ocorre devido às forças de interface atuando sobre a fase líquida, devido à presença da outra fase vapor. A força total exercida sobre a fase líquida e sobre a fase vapor devido à interação com outras fases é simbolizada por  $\mathbf{M}_L$  e  $\mathbf{M}_V$  e são representadas por (ANSYS Inc., 2009b):

$$\mathbf{M}_L = \sum_{V \neq L} \mathbf{M}_{LV} \quad (47)$$

$$\mathbf{M}_V = \sum_{L \neq V} \mathbf{M}_{VL} \quad (48)$$

Note que, as forças de interface entre as fases são iguais e opostas, de modo que a soma das forças de interface é zero (ANSYS Inc., 2009b):

$$\mathbf{M}_{LV} = -\mathbf{M}_{VL} \quad \Rightarrow \quad \sum_L \mathbf{M}_L = 0 \quad (49)$$

A força de interface total atuando entre as duas fases pode surgir a partir de vários efeitos físicos independentes. Têm-se:

$$\mathbf{M}_{LV} = -\mathbf{M}_{VL} = \mathbf{M}_{LV}^D + \mathbf{M}_{LV}^L + \mathbf{M}_{LV}^{LUB} + \mathbf{M}_{LV}^{VM} + \mathbf{M}_{LV}^{TD} + \mathbf{M}_S \quad (50)$$

Onde  $\mathbf{M}_{LV}^D$ ,  $\mathbf{M}_{LV}^L$ ,  $\mathbf{M}_{LV}^{LUB}$ ,  $\mathbf{M}_{LV}^{VM}$ ,  $\mathbf{M}_{LV}^{TD}$  e  $\mathbf{M}_S$  representam a força de interface devido ao arraste, força de sustentação, força de lubrificação, força de massa virtual, força de dispersão turbulenta e força de pressão dos sólidos, respectivamente.

Em escoamento líquido-vapor em pratos perfurados de coluna de destilação, a força de arraste destaca-se por possuir maior importância nos fenômenos de transferência de quantidade de movimento na interface.

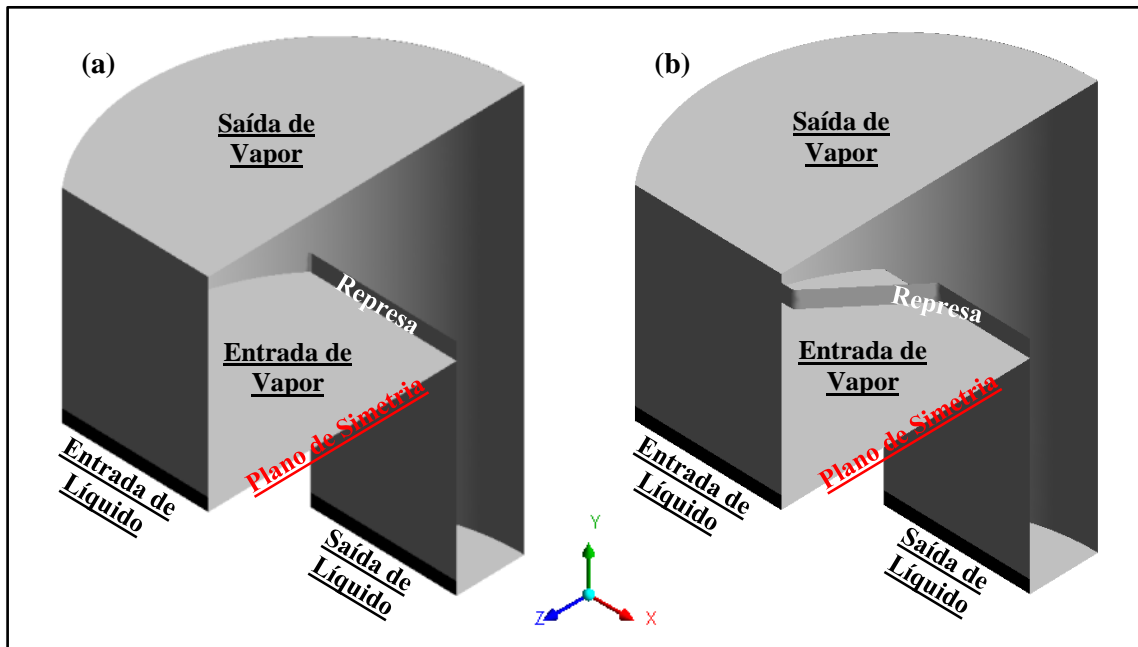
No presente trabalho, foi assumido um valor constante para o coeficiente de arraste ( $C_D = 0,44$ ), que é apropriado para o escoamento borbulhante uniforme, conforme citado por Fischer e Quarini (1998).

### 3.4.2 Condições de contorno e de inicialização

Para se resolver as equações numéricas envolvidas nas simulações, faz-se necessário a determinação das condições de contorno. Uma forma de determinar isto é associar cada face externa da geometria com uma condição de contorno (*boundary*). Isto é, cada região 2-D deve ser definida como uma *inlet*, *outlet*, *opening*, *symmetry plane* ou *wall* (entrada, saída, abertura, plano de simetria ou parede).

Para o problema em questão devem ser estabelecidas as condições de contorno para as regiões conforme apresentada a seguir pela Figura 25.

Figura 25 – Regiões 2-D das condições de contorno utilizadas nas simulações: (a) Prato (1); (b) Prato (2).



Fonte: Elaborado pelo Autor.

**Entrada de líquido:** na região de “*Entrada de Líquido*”, foi adotado um perfil de velocidade uniforme. A Equação 51 apresenta o perfil de velocidade de líquido na entrada,  $v_{z,L}^{in}$ , utilizado na simulação:

$$v_{z,L}^{in} = \frac{Q_L}{A_L^{in}} \quad (51)$$

Com,

$$A_L^{in} = 2h_1L_1 \quad (52)$$

Onde  $A_L^{in}$  representa área da região de entrada de líquido no prato.

A fração volumétrica de líquido na região “*Entrada de Líquido*” foi considerada igual a 1. Esta consideração não é uma aproximação ruim, já que a quantidade de arraste de vapor é pequena.

**Entrada de vapor:** a velocidade do vapor que entra nos orifícios,  $v_{y,V}^{in}$ , foi calculada de tal forma que, a vazão mássica que entra através de cada orifício é a mesma, portanto,

$$v_{y,V}^{in} = \frac{u_s A_B}{N_H A_{H,i}} \quad (53)$$

Onde  $N_H$  é o número total de orifícios no prato e  $A_{H,i}$  é área de um orifício.

A fração volumétrica de vapor na região “*Entrada de Vapor*” foi considerada igual a 1. Esta consideração não é uma aproximação ruim, já que a quantidade de arraste de líquido é pequena.

**Saída de líquido:** para a região “*Saída de Líquido*”, foi adotada a condição de vazão mássica.

**Saída de vapor:** para a região “*Saída de Vapor*”, foi adotada uma condição de pressão ( $P^{out} = 0$  atm – pressão relativa).

**Paredes:** a condição de não deslizamento na parede ( $\mathbf{v} = 0$  m s<sup>-1</sup>) para ambas as fases foi imposta para todo o domínio computacional.

**Plano de simetria:** Foi modelado apenas metade do prato perfurado (condição de simetria). Esta consideração foi de grande importância na modelagem, visando um menor tempo computacional na solução do problema.

**Inicialização do domínio:** o prato perfurado foi preenchimento com água até a altura da represa, isto é, a 5 cm da base do prato, e acima da represa com ar. Gesit, Nandakumar e Chuang (2003), Noriler (2007) e Teleken *et al.* (2009) destacam com grande importância essa condição de inicialização no intuito de evitar problemas de instabilidade numérica no início da simulação.

Outras configurações ainda foram escolhidas e inseridas no *software* CFX-Pre, entre outras informações necessárias. Essas informações adicionais utilizadas nas simulações são ilustradas a seguir no Quadro 4.

**Quadro 4 – Configurações adicionais declaradas no CFX-Pre.**

<b>Configurações</b>	<b>Pratos (1) e (2)</b>
Morfologia dos Fluidos	Fluido Contínuo
Regime de escoamento	Subsônico
Pressão de Referência	1 atm
Intensidade da Turbulência na <i>Entrada de Líquido e Entrada de Vapor</i>	<i>Medium</i> (Intensity = 5%)
Método de Discretização	<i>High Resolution</i>
Discretização da Turbulência	<i>High Resolution</i>
Escala de Tempo	<i>Auto Timescale</i>
Critério de Convergência	RMS (Raiz do Desvio Quadrático Médio)
Resíduo para Convergência	$1 \times 10^{-4}$
Número Máximo de Iterações	750

Fonte: Elaborado pelo Autor.

As condições operacionais utilizadas nas simulações dos Pratos (1) e (2) são apresentados a seguir pela Tabela 7.

**Tabela 7 – Condições operacionais utilizadas nas simulações.**

<b>Simulação</b>	<b>Condições Operacionais</b>	
	$Q_L$ [ $m^3 s^{-1}$ ]	$F_s$ [ $m s^{-1} (kg m^{-3})^{0,5}$ ]
<i>Caso 1</i>	$6,94 \times 10^{-3}$	1,015
<i>Caso 2</i>		1,464
<i>Caso 3</i>	$17,8 \times 10^{-3}$	0,462
<i>Caso 4</i>		0,801

Fonte: Elaborado pelo Autor.

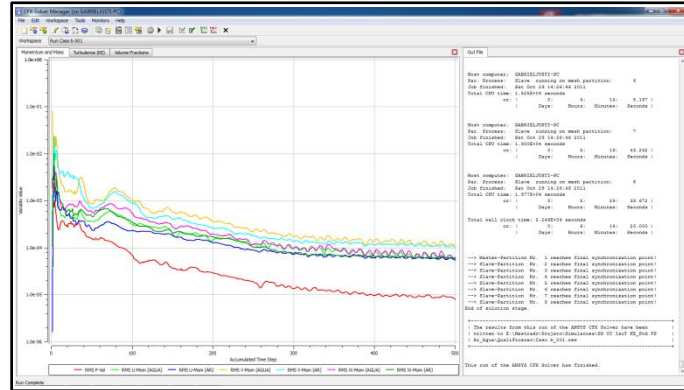
Essas condições operacionais apresentadas acima na Tabela 7 coincidem com os casos utilizados por Solari e Bell (1986) e visa permitir comparar os resultados da simulação do Prato (1) com os dados experimentais dos autores.

Os cálculos da simulação foram realizados com o *software* CFX-Solver Manager (versão 12.0) do pacote comercial de CFD da ANSYS Inc.. Cada simulação necessitou de 15 a 18 horas para simular o prato em regime estacionário, sendo utilizados 8



núcleos de processamento, em um processador Intel® Core™ i7. A Figura 26 apresenta a tela principal do *software* CFX-Solver Manager.

Figura 26 – Tela principal do *software* CFX-Solver Manager.

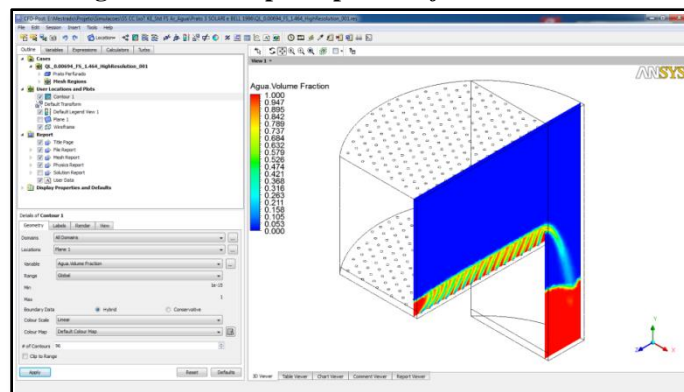


Fonte: Elaborado pelo Autor.

### 3.5 Metodologia de análise

Após o término da resolução da simulação, foi utilizado o *software* CFX-Post (versão 12.0) do pacote comercial de CFD da ANSYS Inc., para a visualização gráfica dos resultados obtidos na etapa anterior. A Figura 27 a seguir apresenta a tela principal do *software*.

Figura 27 – Tela principal do *software* CFX-Post.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Com o propósito de qualificar e quantificar os resultados obtidos foram realizadas análises distintas baseadas em imagens de renderização de volume, perfis de velocidades, contornos e vetores de velocidades.

O *volume rendering* é uma técnica utilizada para projetar em 2-D um conjunto de dados 3-D obtido através dos resultados. Tais dados são resultados de simulações

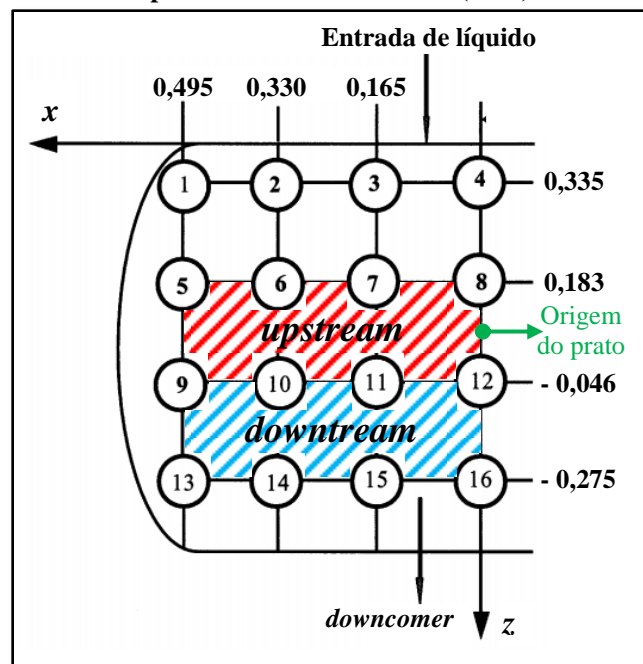
computacionais. As técnicas de visualização volumétrica mostram informações do interior dos volumes, e não apenas das suas superfícies (CODICES, 2011). Nesta etapa de análise, utilizou-se o *software* CFX-Post do pacote comercial de CFD ANSYS 13.0.

Os mapas de contorno tratam da representação de uma dada propriedade em um plano, no qual os valores desta propriedade são expressos através de nuances distintas de cores.

As *streamlines* (ou linhas de correntes) podem ser entendidas como um caminho que uma pequena partícula ou uma porção de fluido de massa nula levaria através do domínio impulsionada por um campo vetorial.

O *software* utilizado para a geração dos perfis de velocidades do líquido foi o OriginPro 8. Os perfis obtidos foram à variação da componente  $w$  de velocidade do líquido,  $v_{z,L}$ , ao longo do eixo  $x$ . Na medição dos campos de velocidades, o prato perfurado foi dividido em duas regiões, “*upstream*” e “*downstream*”, conforme apresentado abaixo pela Figura 28, onde todas as medidas estão em metros.

**Figura 28 – Regiões *upstream* e *downstream* do trabalho experimental de Solari e Bell (1986).**



Fonte: Adaptado de MALVIN; CHAN; LAU, 2010.

A região *upstream* (rachurada em vermelho) está situada entre os sensores 5 a 8 ( $z = 0,183$  m) e 9 a 12 ( $z = -0,046$  m), e *downstream* (rachurada em azul) entre os sensores 9 a 12 ( $z = -0,046$  m) e 13 a 16 ( $z = -0,275$  m), ambas situadas no plano ZX ( $y = 0,038$  m) acima

da base do prato. A partir dos pontos obtidos dos campos de velocidades medidos ao longo do eixo  $x$  no prato foram realizados ajustes polinomiais (ordem 6).

Os vetores de velocidade são conjuntos de vetores que apontam para as direções de escoamento conforme o movimento do fluido selecionado, e quantificam as velocidades através das cores.

## 4 RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados os resultados e discussões do estudo da hidrodinâmica em um estágio de destilação dos Pratos (1) e (2) para várias condições operacionais, conforme apresentados na Tabela 6, para um sistema ar/água a 1 atm.

### 4.1 Análise do Prato (1)

#### 4.1.1 Perfis da componente $w$ do vetor velocidade do líquido

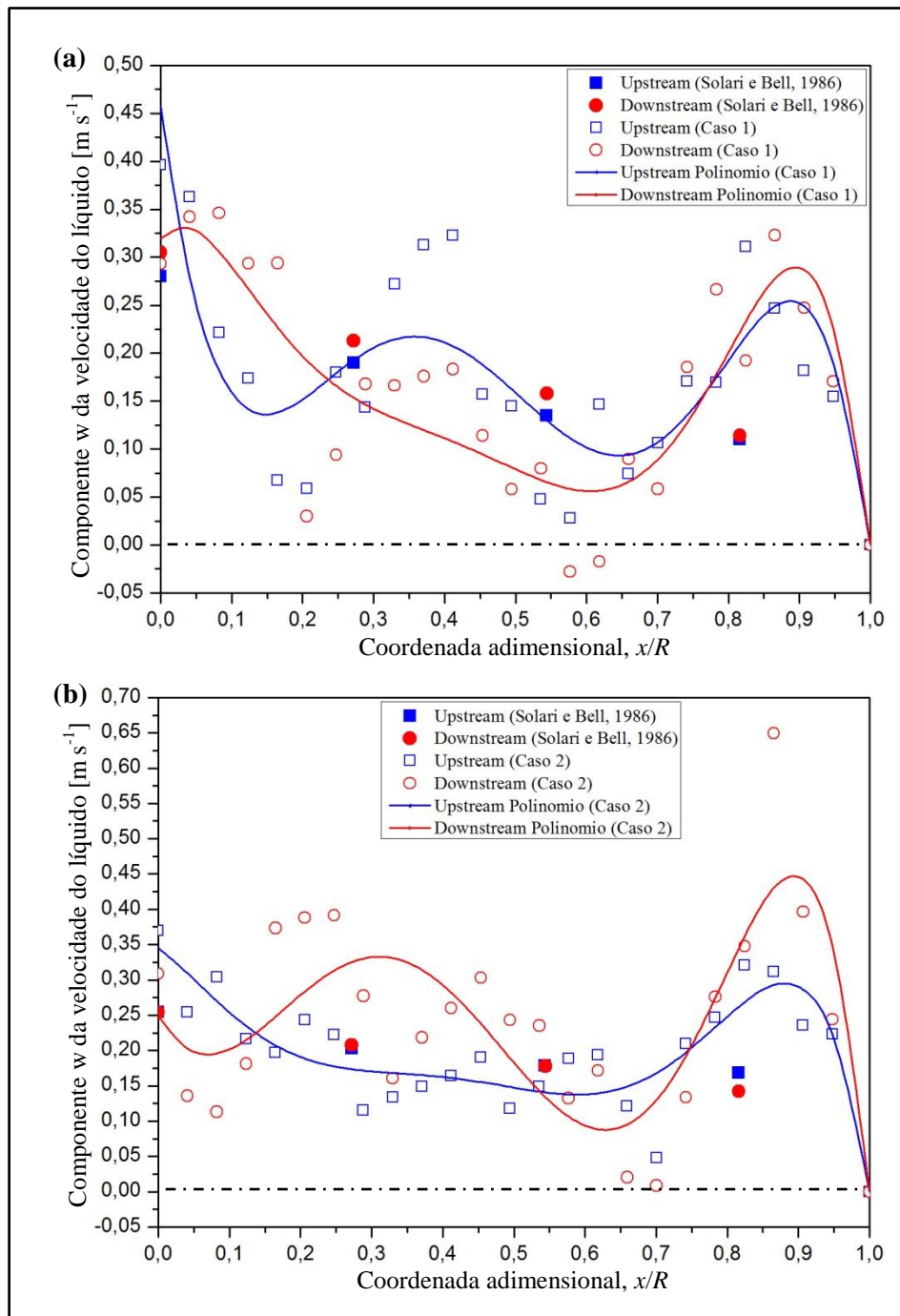
Os resultados obtidos para a validação do modelo na simulação do Prato (1) foram comparados com os campos de velocidades do trabalho experimental de Solari e Bell (1986). A Figura 29 a seguir apresenta os perfis de velocidades da componente  $w$  do vetor velocidade do líquido para as regiões *upstream* e *downstream* em função da coordenada adimensional (eixo  $x$ ),  $x/R$ , para os Casos 1 e 2. Os valores da coordenada adimensional variam de 0 a 1, onde o valor 0 é o centro do prato e 1 é a parede do prato.

Observando-se os pontos dispersos, tanto o “*upstream* (Caso 1)” quanto o “*downstream* (Caso 1)” do item (a) da Figura 29, eles ilustram o comportamento caótico da velocidade do líquido no prato perfurado. A componente  $w$  da velocidade do líquido tem um valor máximo no centro do prato, e quando se afasta um pouco do centro, essas velocidades tendem a sofrer uma “leve” oscilação. Próximo à parede, essas velocidades sofreram uma brusca desaceleração onde os valores tendem a 0. No intervalo entre 0,55 e 0,65 da coordenada adimensional, é possível observar valores negativos ou próximos de 0 da componente  $w$  da velocidade do líquido. Esses valores são devido à formação de zonas de estagnação e recirculação de líquido. Esses fenômenos podem ser visualizados com maiores detalhes pelo item (a) da Figura 31.

Ainda na Figura 29, observando-se os pontos dispersos, tanto o “*upstream* (Caso 2)” quanto o “*downstream* (Caso 2)” do item (b), eles ilustram o comportamento caótico da velocidade do líquido no prato perfurado, uma hidrodinâmica similar ao item (a). A componente da velocidade  $w$  do líquido tem um valor máximo no centro do prato. Note-se que, o perfil de velocidade “*upstream* (Caso 2)” teve decaimento quase que constante quando se caminha à parede do prato. Ao se aproximar dela teve um ganho significativo na velocidade, e por fim, essa velocidade sofreu uma brusca desaceleração onde os valores tendem a 0. O perfil de velocidade “*downstream* (Caso 2)” teve um comportamento

semelhante ao do “*upstream* (Caso 2)” ao longo da coordenada adimensional,  $x/R$ , mas apresentou uma “leve” oscilação. No intervalo entre 0,65 e 0,75 da coordenada adimensional, é possível observar valores próximos de 0 da componente  $w$  da velocidade do líquido. Esses valores são devido à formação de zonas de estagnação e recirculação de líquido. Esses fenômenos podem ser visualizados com maiores detalhes pelo item (b) da Figura 31.

**Figura 29 – Perfis de velocidades do líquido para as regiões *upstream* e *downstream* do Prato (1) para  $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 1,015$  (Caso 1); e (b)  $F_s = 1,464$  (Caso 2).**



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Os dados dos campos de velocidades da simulação dos Casos (1) e (2) estão apresentados no APÊNDICE A (vide Tabelas A1 e A2). As regiões *upstream* e *downstream* dos Casos 1 e 2 apresentaram uma boa concordância qualitativamente com as velocidades do trabalho de Solari e Bell (1986).

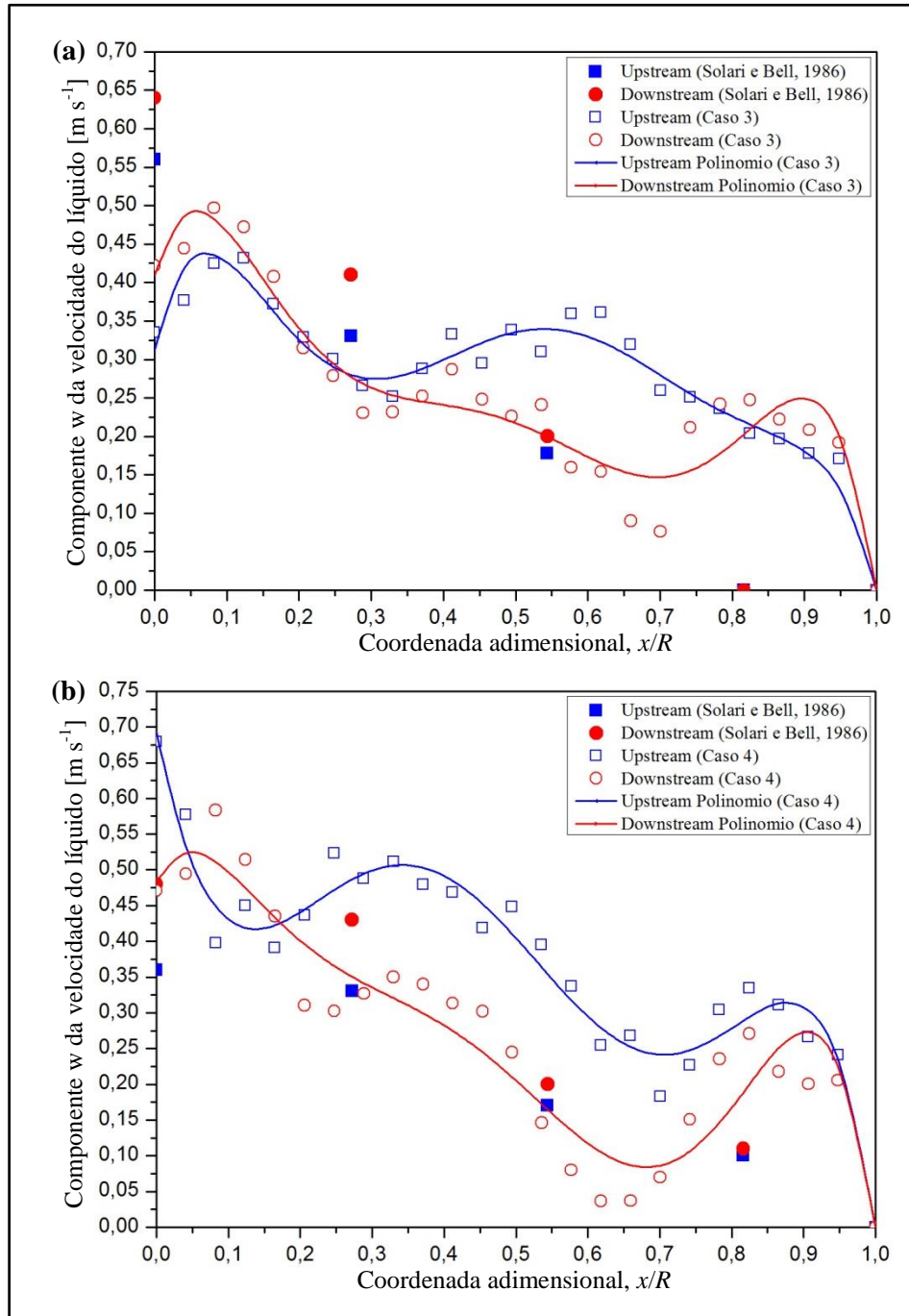
É interessante observar que, para ambos os Casos, os perfis de velocidades da componente  $w$  do vetor de velocidade do líquido apresentaram um comportamento similar, alterando-se os perfis devido aos valores  $F_s$  (fluxo de vapor nos orifícios do prato).

A Figura 30 a seguir apresenta os perfis de velocidades da componente  $w$  do vetor de velocidade do líquido para as regiões *upstream* e *downstream* em função da coordenada adimensional (eixo  $x$ ),  $x/R$ , para os Casos 3 e 4.

Observando-se os pontos dispersos, tanto o “*upstream* (Caso 3)” quanto o “*downstream* (Caso 3)” do item (a) da Figura 30, eles apresentam um comportamento dos perfis de velocidades semelhantes dos Casos 1 e 2 (Figura 29). A componente  $w$  da velocidade do líquido tem um valor máximo no centro do prato, e quando se afasta um pouco do centro, essas velocidades tendem a sofrer uma “leve” oscilação. Ao se caminhar um pouco mais na direção da parede, essas velocidades sofreram uma brusca desaceleração onde os valores tendem a 0. De acordo com o item (a) da Figura 30, nota-se que para as condições operacionais utilizadas na simulação, a hidrodinâmica não apresentou regiões de formação de zonas de estagnação e recirculação de líquido. Esses fenômenos podem ser visualizados com maiores detalhes pelo item (a) da Figura 32.

Ainda na Figura 30, observando-se os pontos dispersos, tanto o “*upstream* (Caso 4)” quanto o “*downstream* (Caso 4)” do item (b), ilustram o comportamento caótico do prato. A componente  $w$  da velocidade do líquido tem um valor máximo no centro do prato. O perfil de velocidade “*upstream* (Caso 4)” teve um comportamento semelhante ao do “*upstream* (Caso 3)” ao longo da coordenada adimensional, mas apresentou uma “leve” oscilação. No intervalo entre 0,60 e 0,70 da coordenada adimensional, é possível observar valores próximos de 0 da componente  $w$  da velocidade do líquido. Esses valores são devido à formação de zonas de estagnação e recirculação de líquido. Esses fenômenos podem ser visualizados com maiores detalhes pelo item (b) da Figura 32. Note-se que, o perfil de velocidade “*downstream* (Caso 4)” teve decaimento quase que constante quando se caminha ao longo da direção da parede do prato. Ao se aproximar dela teve um ganho na velocidade, e por fim, essas velocidades sofreram uma brusca desaceleração onde os valores tendem a 0.

**Figura 30 – Perfis de velocidades do líquido para as regiões *upstream* e *downstream* do Prato (1) para  $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 0,462$  (Caso 3); e (b)  $F_s = 0,801$  (Caso 4).**



**Fonte: Elaborada pelo Autor.**

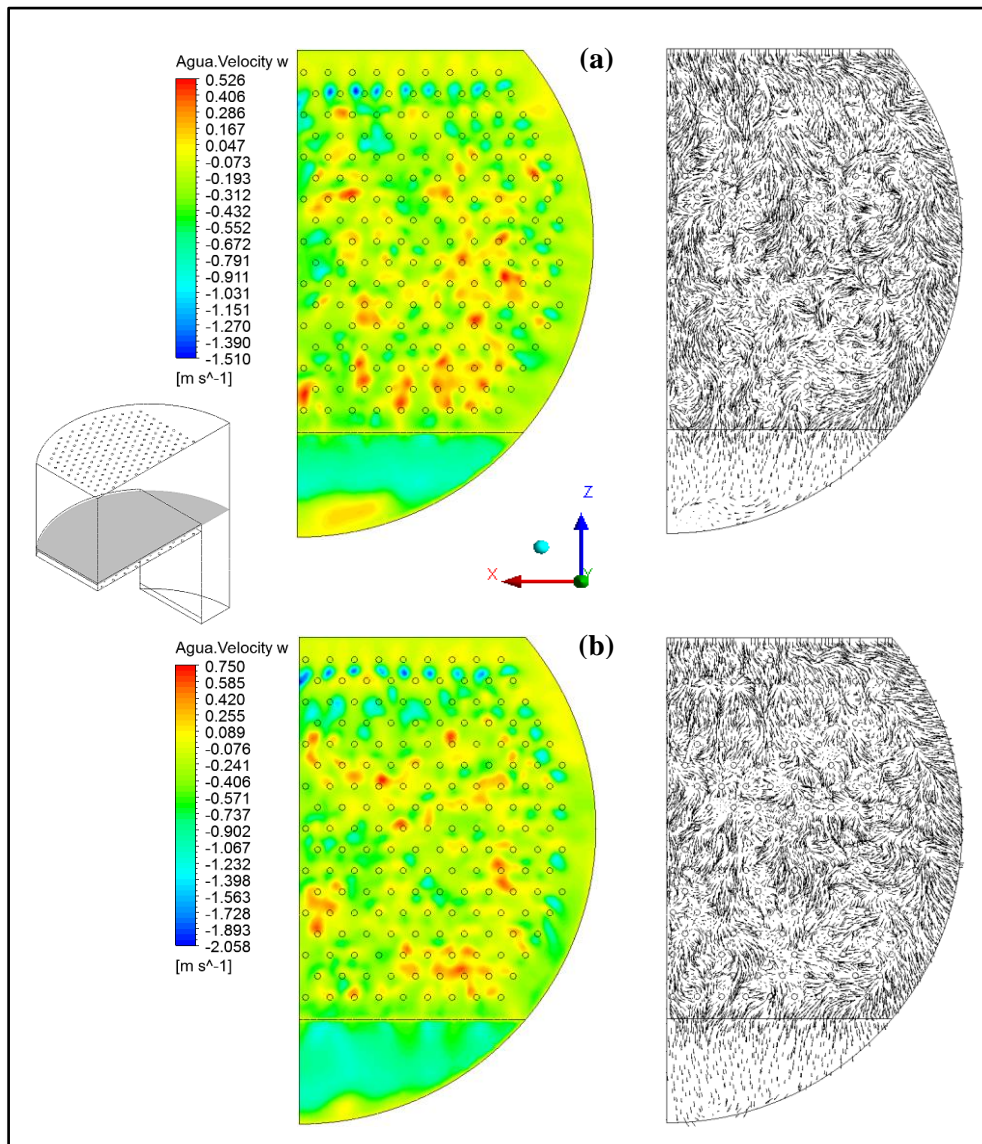
Os dados dos campos de velocidades da simulação dos Casos (3) e (4) estão apresentados no APÊNDICE A (vide Tabelas A3 e A4). As regiões *upstream* e *downstream* dos Casos 3 e 4 apresentaram uma boa concordância com as velocidades do trabalho de Solari e Bell (1986), isto é, os perfis da componente  $w$  da velocidade do líquido acompanharam os pontos experimentais do trabalho de Solari e Bell (1986).

É interessante observar que, para ambos os Casos, os perfis de velocidade da componente  $w$  do vetor velocidade do líquido apresentaram um comportamento similar e esperado devido aos valores  $F_s$  (fluxo de vapor nos orifícios) utilizados nas simulações.

#### 4.1.2 Mapas de contorno e vetores de velocidades

A Figura 31 ilustra os mapas de contorno da componente  $w$  da velocidade e os vetores velocidade do líquido para os Casos 1 e 2, situados no plano ZX ( $y = 0,038$  m) acima da base do prato perfurado.

**Figura 31 – Formação de zonas de estagnação e de recirculação de líquido no Prato (1). Mapa de contorno da componente  $w$  da velocidade e vetores de velocidade do líquido para  $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 1,015$  (Caso 1); e (b)  $F_s = 1,464$  (Caso 2).**



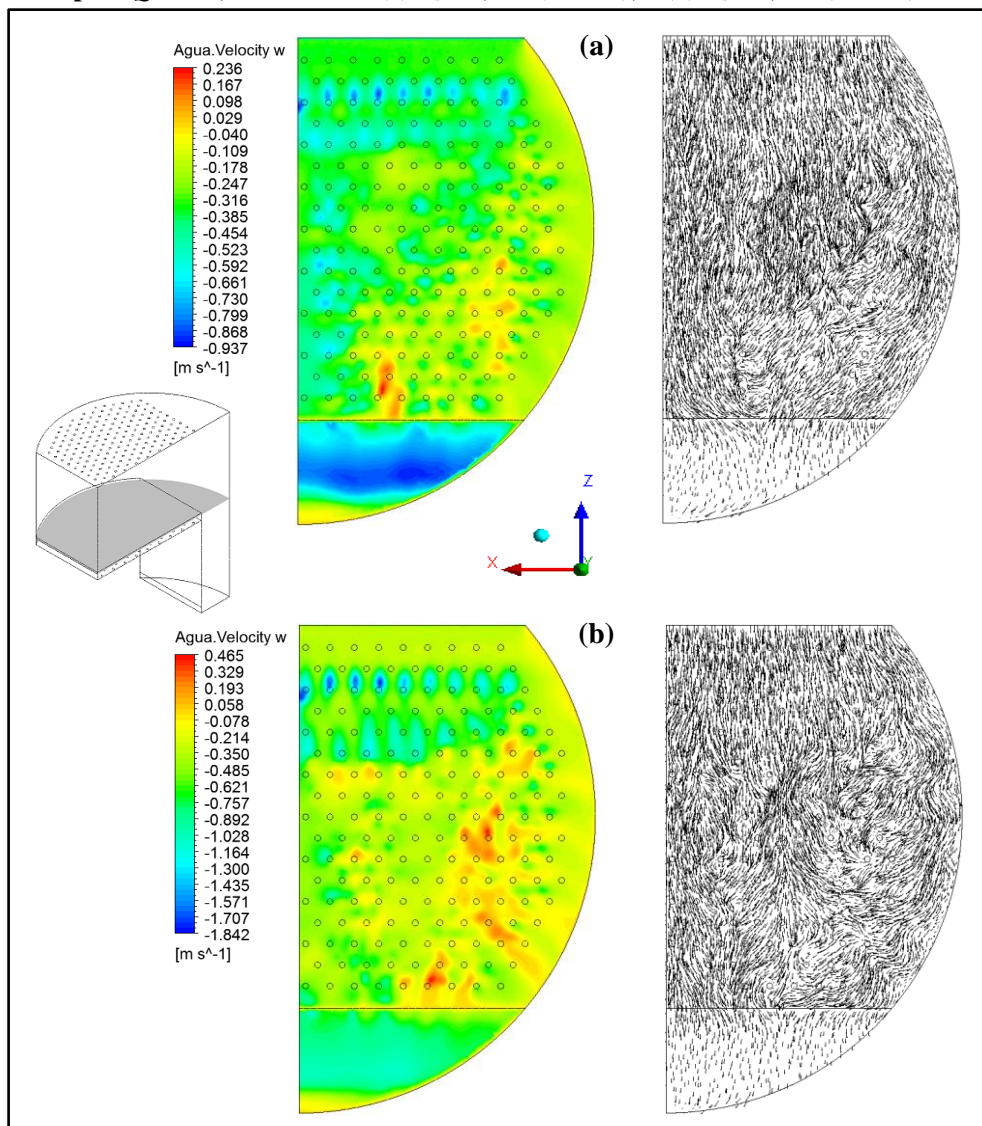
Fonte: Elaborada pelo Autor.



As regiões “em amarelo” ilustram zonas de velocidade baixa de líquido. As regiões “em alaranjado para vermelho” indicam fluxos de líquido no sentido contrário do prato. Portanto, fica evidente a formação de recirculação e de estagnação de líquido em algumas regiões do prato. Isso se deu nas condições operacionais utilizadas na simulação.

A Figura 32 ilustra os mapas de contorno e os vetores de velocidades da componente w do líquido para os Casos 3 e 4, situados no plano ZX ( $y = 0,038$  m) acima da base do prato perfurado.

**Figura 32 – Formação de zonas de estagnação e de recirculação de líquido no Prato (1). Mapa de contorno da componente w da velocidade e vetores de velocidade do líquido para  $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 0,462$  (Caso 3); e (b)  $F_s = 0,801$  (Caso 4).**



**Fonte: Elaborada pelo Autor.**

As regiões “em amarelo” ilustram zonas de velocidade baixa de líquido e as regiões “em alaranjado para vermelho” indicam fluxos de líquido no sentido contrário do

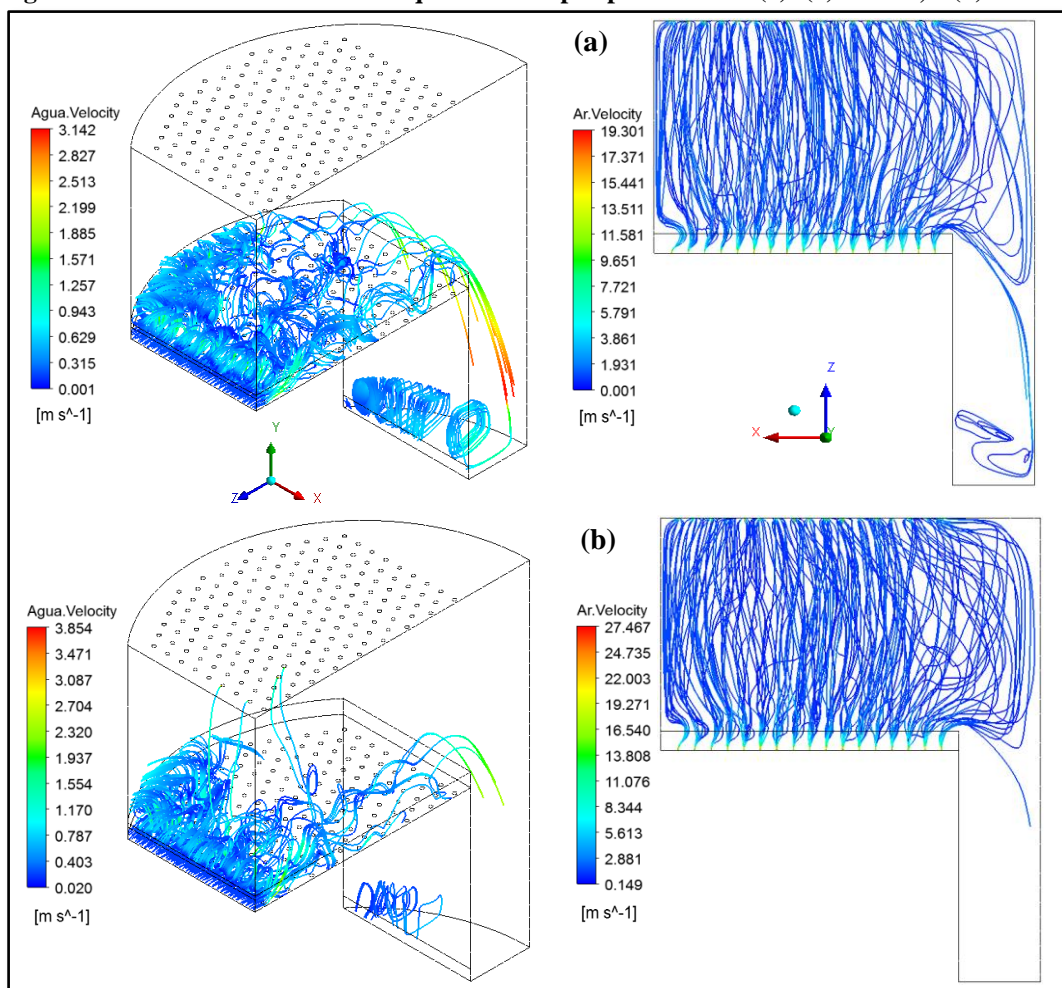
prato, situação análoga ao da Figura 31. Devido à condição operacional utilizada, as simulações dos Casos 3 e 4 apresentaram poucas regiões de recirculação e de estagnação de líquido no prato perfurado.

Observando-se os Casos 1, 2, 3 e 4, apresentados anteriormente pelas Figuras 31 e 32, notou-se que para a vazão de líquido  $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ , a hidrodinâmica apresentou um comportamento desordenado, com regiões de recirculação e estagnação de líquido em maior proporção do que para um valor de  $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ . Deve-se levar em conta que, esse comportamento desordenado teve influência dos altos valores de  $F_s$ .

#### 4.1.3 Streamlines

A Figura 33 apresenta as linhas de correntes (“streamlines”) para as condições operacionais dos Casos 1 e 2.

**Figura 33 – Linhas de corrente do líquido e do vapor para o Prato (1): (a) Caso 1; e (b) Caso 2.**

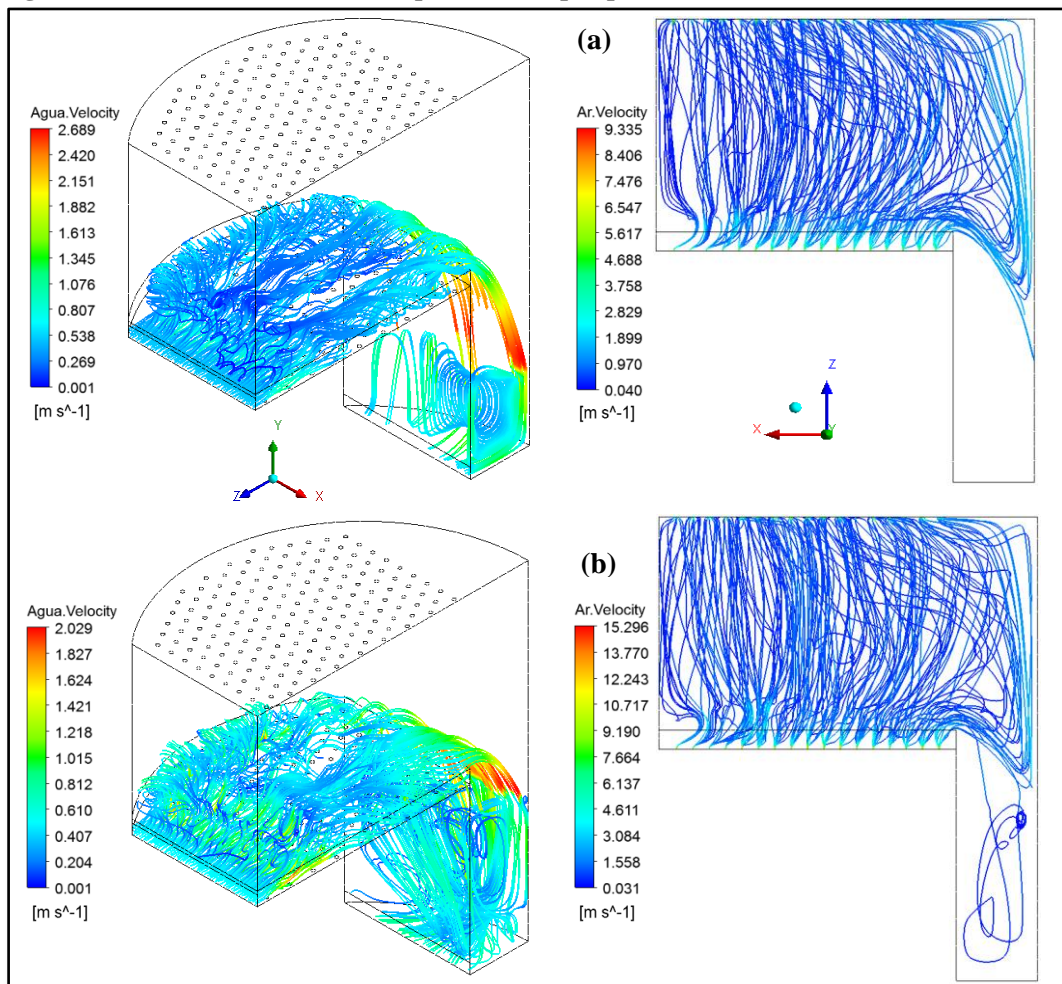


Fonte: Elaborada pelo Autor.

De acordo com a Figura 33, fica evidente a hidrodinâmica caótica ilustrando a trajetória do líquido no prato, desde sua entrada até sua saída de líquido no prato perfurado. Os itens (a) e (b) mostram que a velocidade do vapor teve um efeito significativo na turbulência devido à vazão utilizada nas simulações. Observa-se que no item (b) da Figura 33, devido o valor de velocidade do vapor na entrada do prato ser maior que a do item (a), há um arraste de líquido pelo vapor no prato (vide a Figura 33). O prato perfurado, item (b) da Figura 33, não ilustra muitas linhas de corrente de líquido ao longo da área efetiva de borbulhamento. Isso se dá devido ao alto valor de velocidade de vapor nos orifícios de entrada, formando uma grande região de espuma (vide o item (b) da Figura 35).

A Figura 34 apresenta as linhas de correntes para os Casos 3 e 4.

**Figura 34 – Linhas de corrente do líquido e do vapor para o Prato (1): (a) Caso 3; e (b) Caso 4.**



**Fonte: Elaborada pelo Autor.**

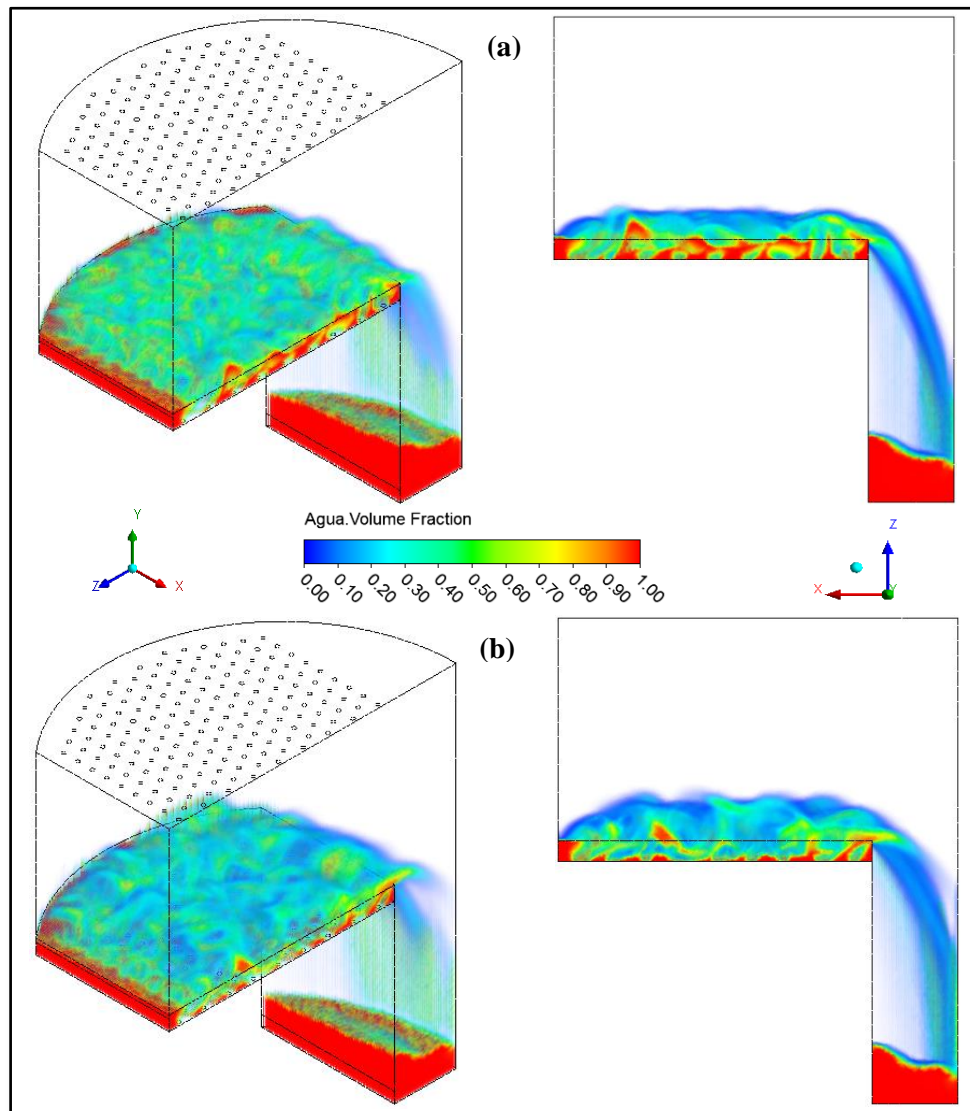
A Figura 34 ilustra uma trajetória de líquido no prato mais contínua, isso se dá pela vazão de líquido ser maior e também pela influência das vazões de vapor ( $F_s$ ) utilizadas,

dos que apresentados nos Casos 1 e 2. Os itens (a) e (b) da Figura 34 mostram que a velocidade do vapor não teve um efeito significativo na turbulência. Nota-se que devido ao valor da vazão de líquido utilizado nos Casos 3 e 4, houve um arraste de vapor pelo líquido para a região de *downcomer* (vide a Figura 34).

#### 4.1.4 Campos de frações volumétricas

Outra forma de visualização da hidrodinâmica é a distribuição das frações volumétricas no prato. A Figura 35 apresenta a distribuição das frações volumétricas do líquido, utilizando o *volume rendering* para os Casos 1 e 2.

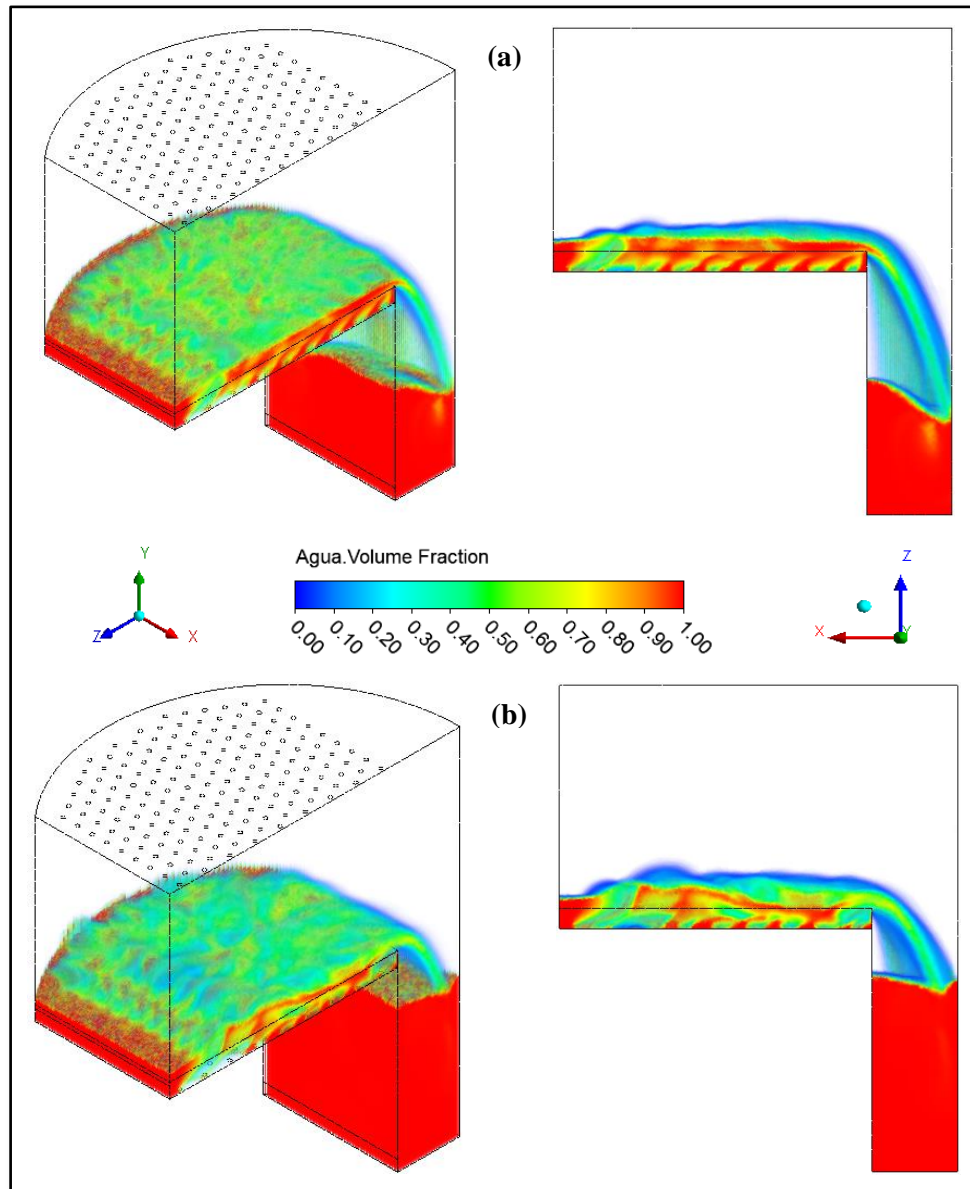
**Figura 35 – Campos de frações volumétricas do líquido no Prato (1) para  $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 1,015$  (Caso 1); e (b)  $F_s = 1,464$  (Caso 2).**



Fonte: Elaborada pelo Autor.

A Figura 36 apresenta a distribuição das frações volumétricas do líquido, utilizando o *volume rendering*, para os Casos 3 e 4.

**Figura 36 – Campos de frações volumétricas do líquido no Prato (1) para  $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 0,462$  (Caso 3); e (b)  $F_s = 0,801$  (Caso 4).**



**Fonte: Elaborada pelo Autor.**

Observando-se as Figuras 35 e 36, percebe-se que na base do prato a concentração de líquido é maior, e vai diminuindo até formar uma zona de mistura (ar/água) que depois termina no limite da região de borbulhamento. É importante notar que, a hidrodinâmica do prato é completamente caótica, apresentando fenômenos de arraste de pequenas porções de líquido pelo vapor, que por sua vez, caem sobre a emulsão quando seu peso se torna maior que o arraste. A presença destes fenômenos de arraste faz com que o

contato líquido/vapor diminua, tendo como efeito o surgimento de problemas de transferência de calor e massa entre as fases. Uma análise interessante a se fazer é comparar a Figura 35 (item b) com a Figura 2 (seção 2.2), mostrando que a simulação apresentou aspectos reais do comportamento hidrodinâmico no prato.

## 4.2 Análise do Prato (2)

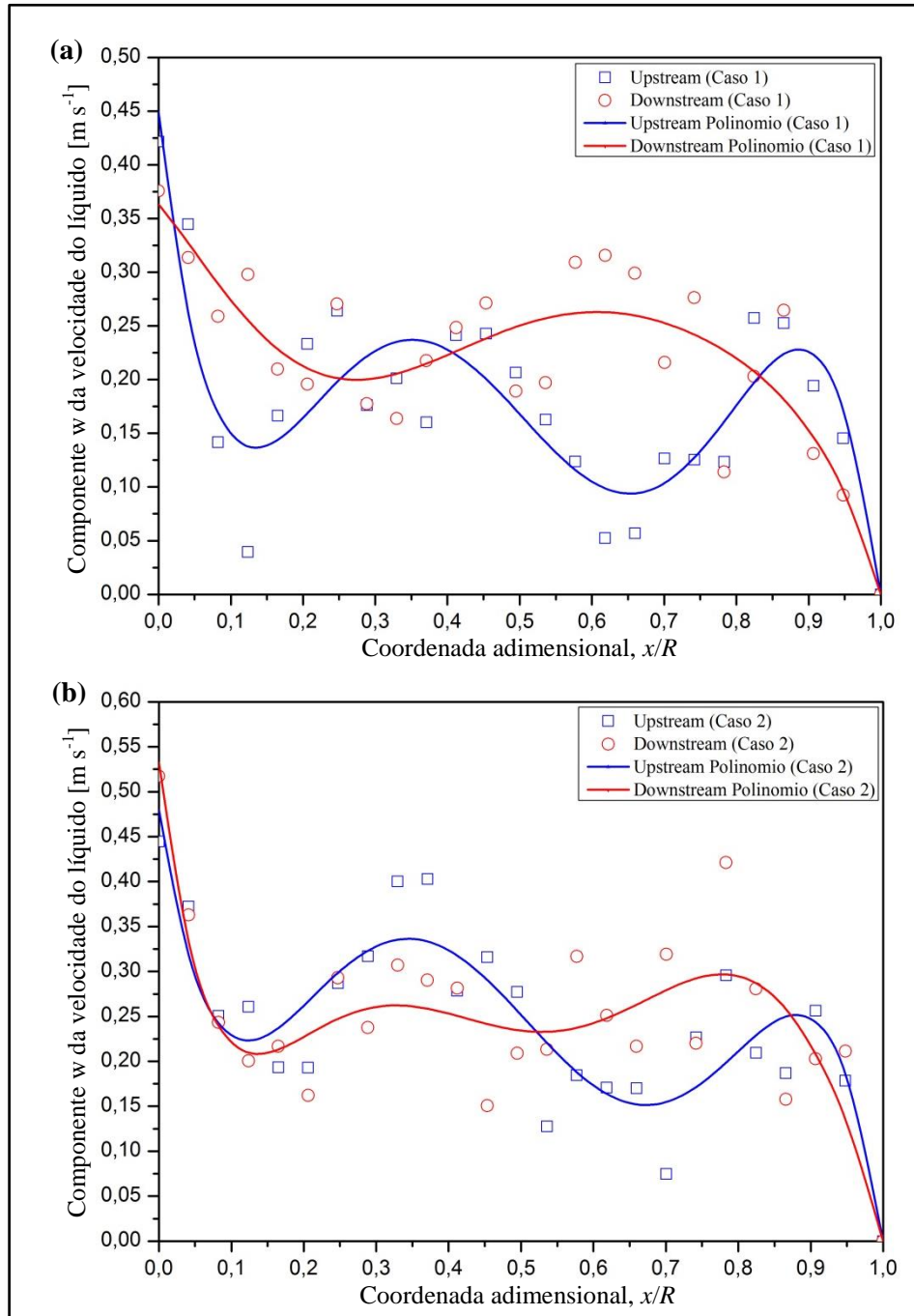
### 4.2.1 Perfis da componente $w$ do vetor velocidade do líquido

Os resultados obtidos dos perfis de velocidade do Prato (2) são apresentados a seguir pela Figura 37, para as regiões *upstream* e *downstream* em função da coordenada adimensional (eixo  $x$ ),  $x/R$ , para os Casos 1 e 2. Os valores da coordenada adimensional variam de 0 a 1, onde o valor 0 é o centro do prato e 1 é a parede do prato.

Observando-se os pontos dispersos, tanto o “*upstream* (Caso 1)” quanto o “*downstream* (Caso 1)” do item (a) da Figura 37, eles ilustram o comportamento caótico do prato. A componente  $w$  de velocidade do líquido tem um valor máximo no centro do prato, e quando se afasta um pouco do centro, essas velocidades tendem a sofrer uma “leve” oscilação. Ao se caminhar um pouco mais próximo à parede, essas velocidades sofreram uma brusca desaceleração onde os valores tendem a 0. Os valores entre 0,60 e 0,70 da coordenada adimensional, apresentou valores próximos de 0 da componente da velocidade  $w$  do vetor velocidade do líquido. Essas regiões de baixa velocidade são devido à formação de zonas de estagnação e recirculação de líquido. Esses fenômenos podem ser visualizados com maiores detalhes pelo item (a) da Figura 39.

Ainda na Figura 37, os pontos dispersos, tanto o “*upstream* (Caso 2)” quanto o “*downstream* (Caso 2)” do item (b), ilustram o comportamento caótico do prato perfurado, com uma hidrodinâmica similar ao item (a). A componente  $w$  da velocidade do líquido tem um valor máximo no centro do prato. Note-se que, as velocidades para as duas regiões de interesse sofreram uma brusca desaceleração próximo a parede do prato, onde os valores tenderam a 0. Ambos os perfis de velocidades ao longo da coordenada adimensional, apresentaram uma “leve” oscilação. É possível observar valores próximos de 0 da velocidade da componente  $w$  do vetor velocidade do líquido na coordenada adimensional próximo a 0,70. Esses valores são indícios de formação de zonas de estagnação e recirculação de líquido. Esses fenômenos podem ser visualizados com maiores detalhes pelo item (b) da Figura 39.

**Figura 37 – Perfis de velocidades do líquido para as regiões *upstream* e *downstream* do Prato (2) para  $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 1,015$  (Caso 1); e (b)  $F_s = 1,464$  (Caso 2).**



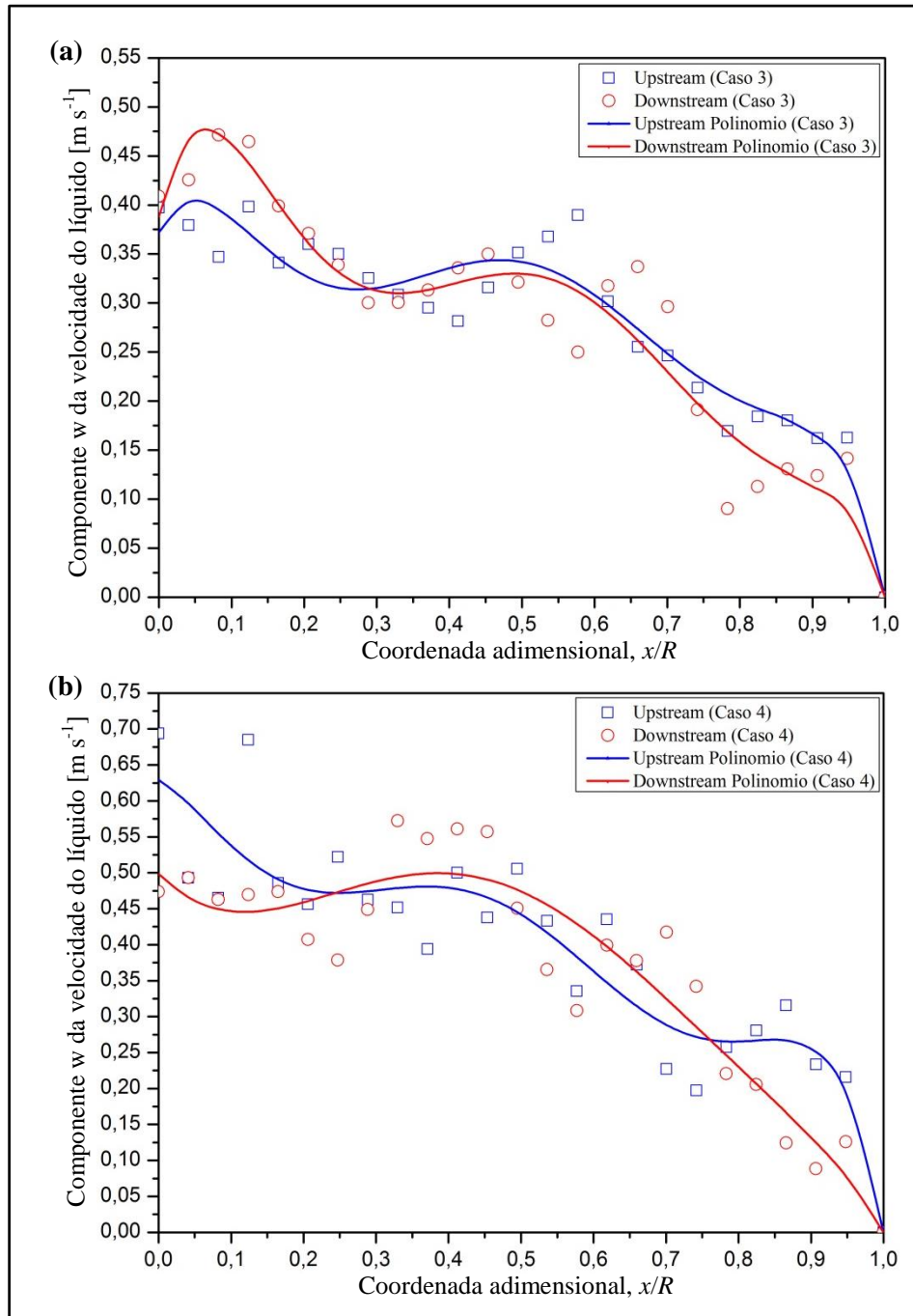
**Fonte: Elaborada pelo Autor.**

Os dados dos campos de velocidades da simulação dos Casos (1) e (2) estão apresentados no APÊNDICE B (vide Tabelas B1 e B2).

Os perfis de velocidades da componente  $w$  do vetor velocidade do líquido, para ambos os Casos, apresentaram um comportamento similar, alterando-se os perfis de velocidade devido aos valores  $F_s$ .

A Figura 38 a seguir apresenta os perfis de velocidades da componente  $w$  do vetor velocidade do líquido para as regiões *upstream* e *downstream* em função da coordenada adimensional (eixo  $x$ ),  $x/R$ , para os Casos 3 e 4.

**Figura 38 – Perfis de velocidades do líquido para as regiões *upstream* e *downstream* do Prato (2) para  $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 0,462$  (Caso 3); e (b)  $F_s = 0,801$  (Caso 4).**



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Os dados dos campos de velocidades da simulação dos Casos (3) e (4) estão apresentados no APÊNDICE B (vide Tabelas B3 e B4).



Observando-se os pontos dispersos, tanto o “*upstream* (Caso 3)” quanto o “*downstream* (Caso 3)” do item (a) da Figura 38, apresentam um comportamento dos perfis de velocidades semelhantes aos Casos 3 e 4 (Figura 30). A componente  $w$  da velocidade do líquido tem um valor máximo no centro do prato. Ao se caminhar um pouco mais próximo à parede, essas velocidades sofreram uma brusca desaceleração onde os valores tendem a 0. De acordo com o item (a) da Figura 30, nota-se que para as condições operacionais utilizadas na simulação, a hidrodinâmica não apresentou regiões de formação de zonas de estagnação e recirculação de líquido. Esses fenômenos podem ser visualizados com maiores detalhes pelo item (a) da Figura 40.

Ainda na Figura 38, observando-se os pontos dispersos, tanto o “*upstream* (Caso 4)” quanto o “*downstream* (Caso 4)” do item (b), eles ilustram um comportamento mais “suave” nos campos de velocidades se compararmos com as mesmas condições operacionais apresentadas pelo item (b) da Figura 30. Analogamente, o Caso 4 não apresentou regiões significativas de formação de zonas de estagnação e de recirculação de líquido. Isto pode ser observado detalhadamente pelo item (b) da Figura 40.

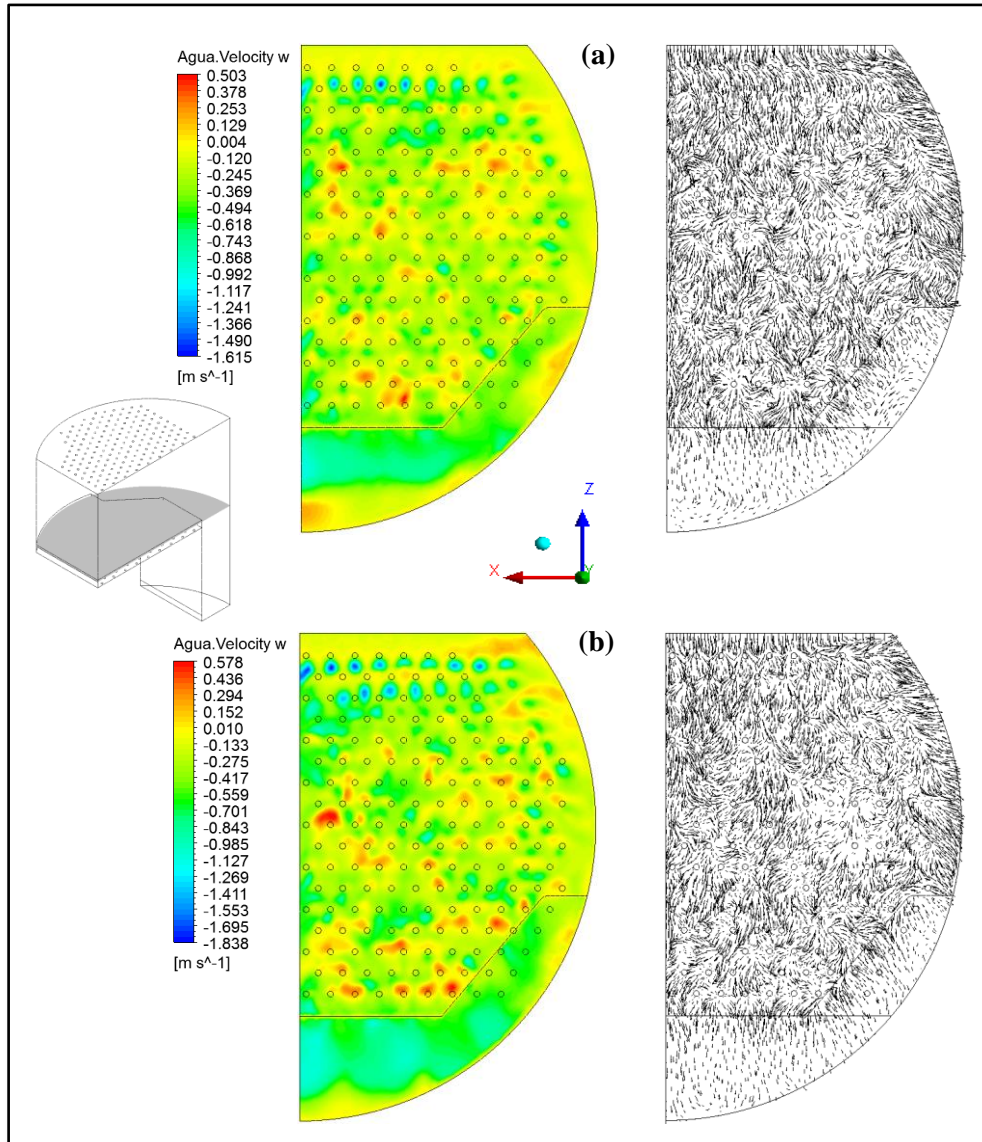
É importante ressaltar que, uma simples mudança no formato da represa do prato perfurado, por exemplo, a hidrodinâmica apresentou um perfil de velocidade mais “suave” para todos os casos apresentados anteriormente.

#### **4.2.2 Mapas de contorno e vetores de velocidades**

A Figura 39 ilustra os mapas de contorno e os vetores de velocidades da componente  $w$  do vetor velocidade do líquido para os Casos 1 e 2, situados no plano ZX ( $y = 0,038$  m) acima da base do prato perfurado.

As regiões “em amarelo” ilustram zonas de velocidade baixa de líquido. As regiões “em alaranjado para vermelho” indicam fluxos de líquido no sentido contrário do escoamento no prato. Portanto, fica evidente a formação de recirculação e de estagnação de líquido em algumas regiões do prato.

**Figura 39 – Formação de zonas de estagnação e de recirculação de líquido no Prato (2). Mapa de contorno e vetores de velocidades da componente w de líquido para  $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 1,015$  (Caso 1); e (b)  $F_s = 1,464$  (Caso 2).**



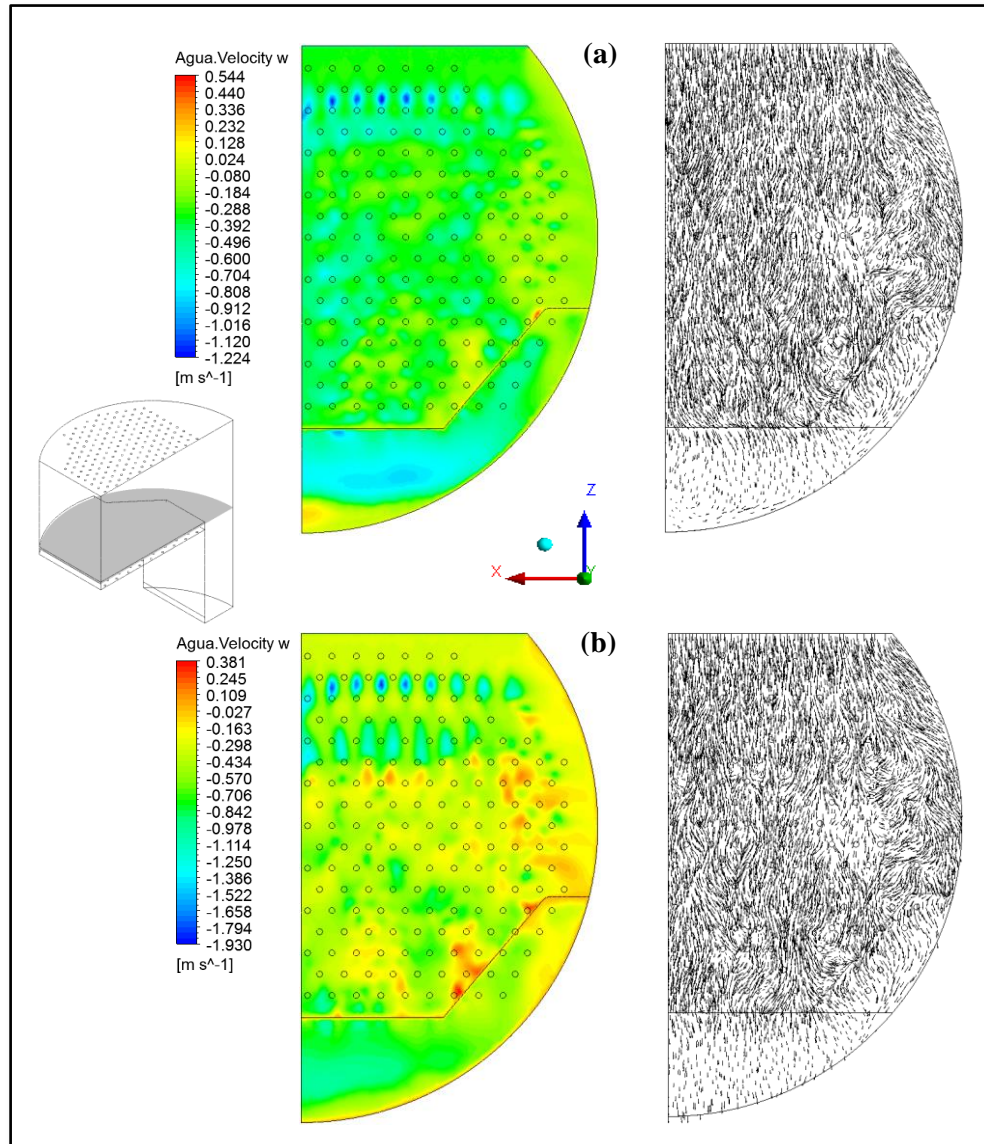
**Fonte: Elaborada pelo Autor.**

A Figura C1 (vide APÊNDICE C) compara as regiões de formação de zonas de recirculação e de estagnação de líquido dos Casos 1 e 2 para os dois pratos simulados. Nota-se o quanto foi reduzido às áreas de recirculação de líquido devido a uma simples mudança na geometria da represa.

A Figura 40 ilustra os mapas de contorno e os vetores de velocidades da componente w do vetor velocidade do líquido para os Casos 3 e 4, situados no plano ZX ( $y = 0,038 \text{ m}$ ) acima da base do prato perfurado. As regiões “em amarelo” ilustram zonas de velocidade baixa de líquido. As regiões “em alaranjado para vermelho” indicam fluxos de

líquido no sentido contrário do escoamento no prato. Portanto, há poucas regiões de formação de recirculação e de estagnação de líquido no prato perfurado.

**Figura 40 – Formação de zonas de estagnação e de recirculação de líquido no Prato (2).**  
**Mapa de contorno e vetores de velocidades da componente w de líquido para  $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 0,462$  (Caso 3); e (b)  $F_s = 0,801$  (Caso 4).**



**Fonte: Elaborada pelo Autor.**

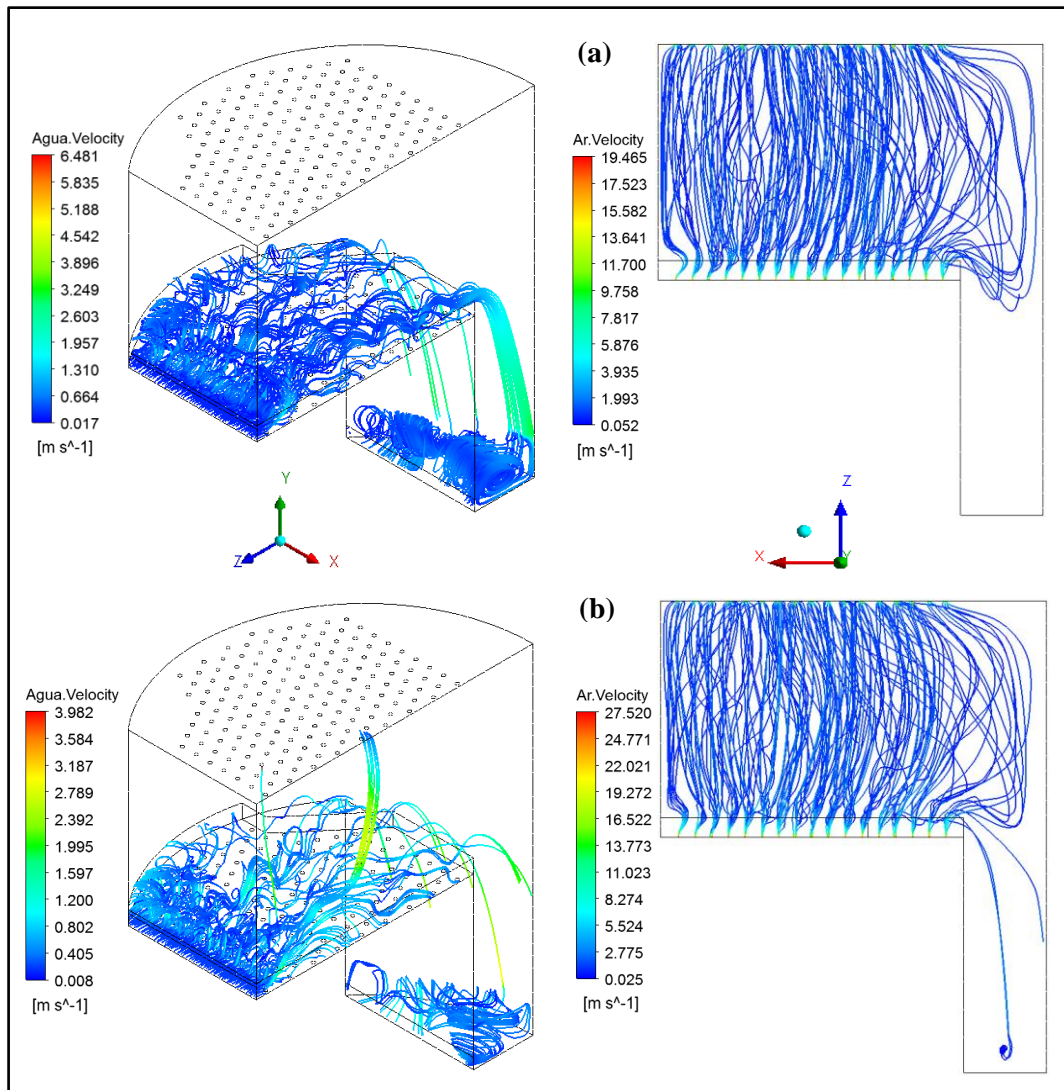
A Figura C2 (vide APÊNDICE C) compara as regiões de formação de zonas de recirculação e de estagnação de líquido dos Casos 3 e 4 para os dois pratos simulados.

Observando-se os Casos 1, 2, 3 e 4, apresentados anteriormente pelas Figuras 39 e 40, notou-se que para a vazão de líquido  $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ , a hidrodinâmica apresentou um comportamento desordenado, com regiões de recirculação e estagnação de líquido em maior proporção do que para um valor de  $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ .

### 4.2.3 Streamlines

A Figura 41 apresenta as linhas de correntes (“*streamlines*”) para as condições operacionais dos Casos 1 e 2.

**Figura 41 – Linhas de corrente do líquido e do vapor para o Prato (2): (a) Caso 1; e (b) Caso 2.**

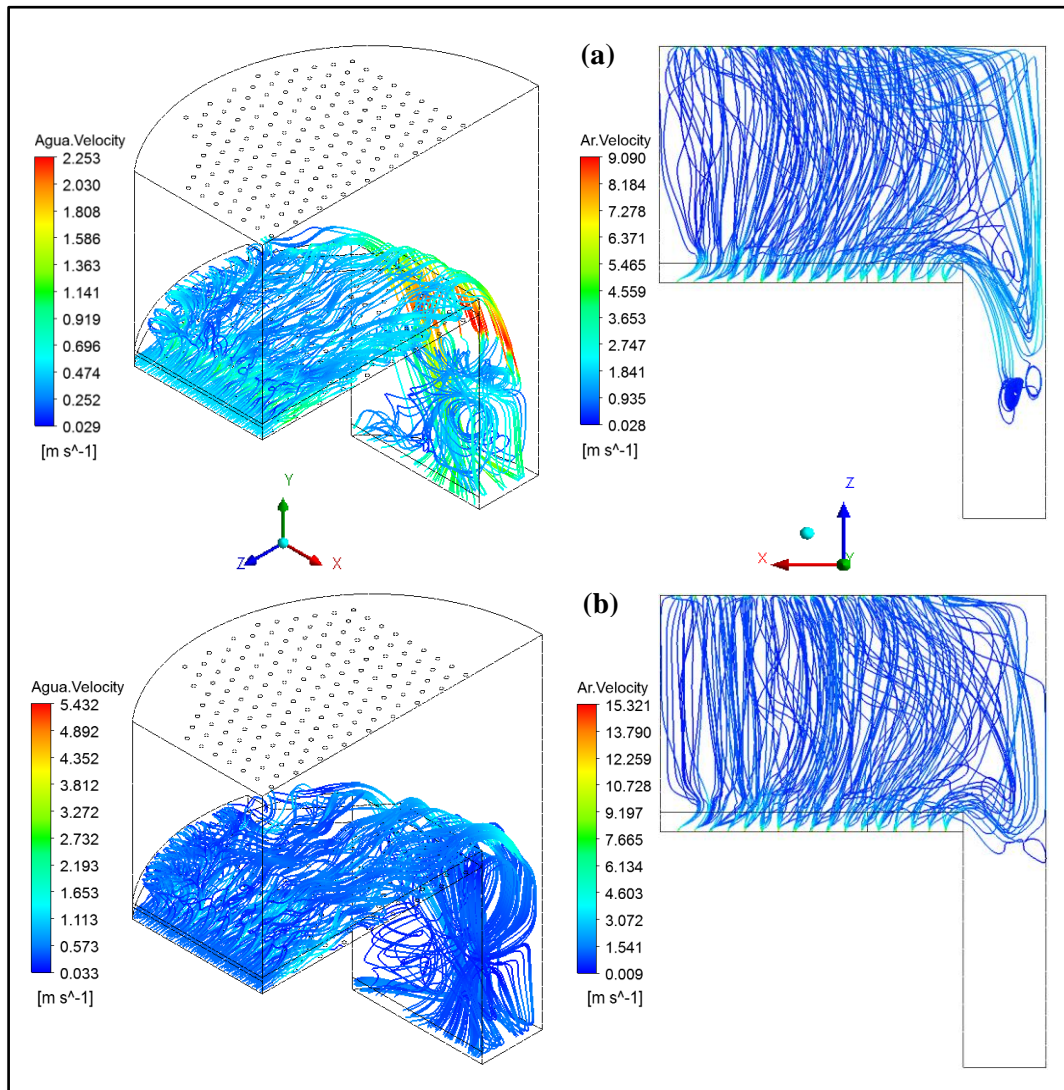


Fonte: Elaborada pelo Autor.

De acordo com a Figura 41, fica evidente a hidrodinâmica caótica ilustrando a trajetória do líquido no prato, desde sua entrada até sua saída pelo *downcomer*. Os itens (a) e (b) mostram que a velocidade do vapor teve um efeito significativo na turbulência devido à vazão utilizada nas simulações. Observa-se que no item (b) da Figura 41, devido o valor de velocidade de vapor nos orifícios de entrada no prato ser maior que a do item (a), há um arraste de líquido pelo vapor no prato.

A Figura 42 apresenta as linhas de correntes para as condições operacionais dos Casos 3 e 4.

**Figura 42 – Linhas de corrente do líquido e do vapor para o Prato (2): (a) Caso 3; e (b) Caso 4.**



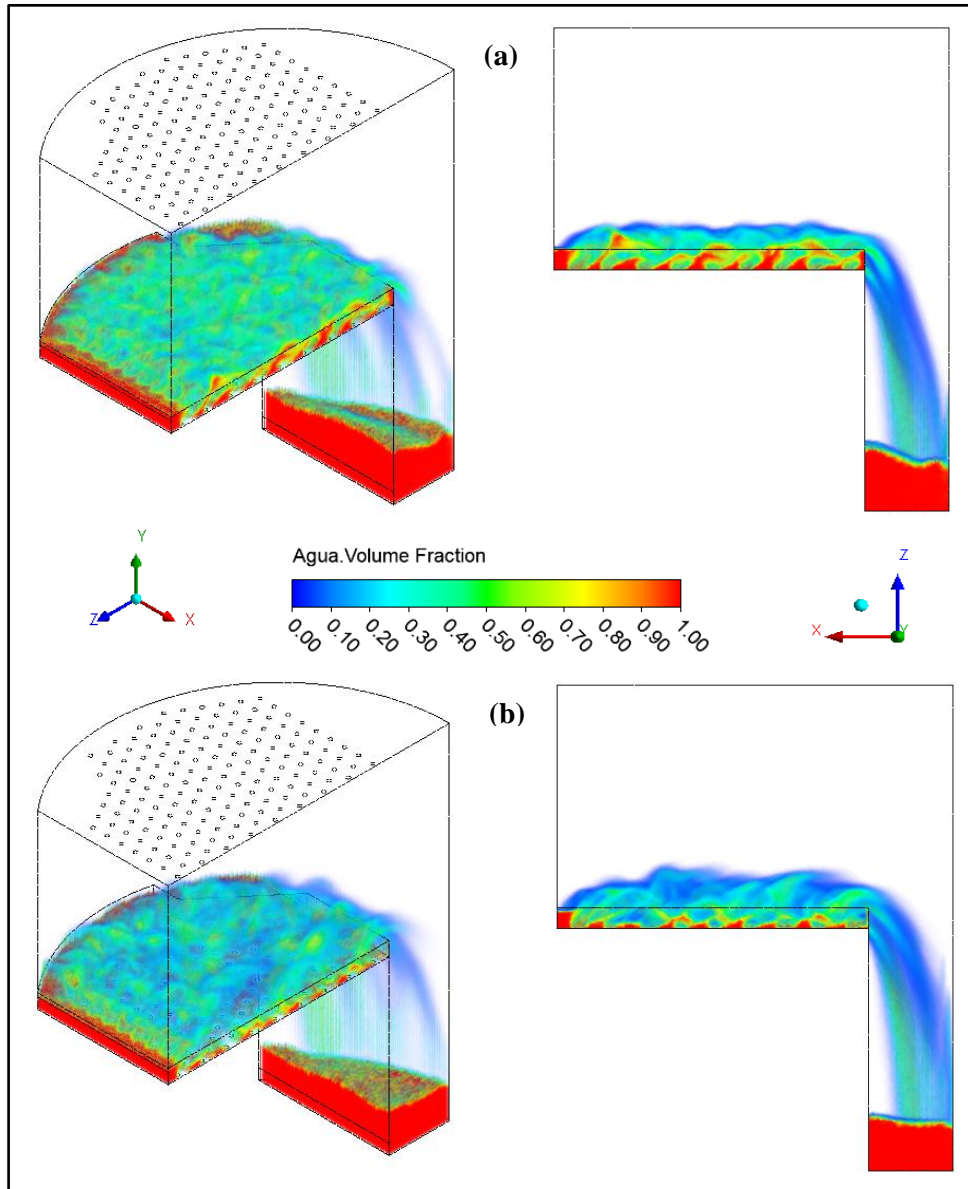
**Fonte: Elaborada pelo Autor.**

A Figura 42 ilustra uma trajetória de líquido no prato menos perturbada, isso se dá pela vazão de líquido ser maior do que nos Casos 1 e 2. Os itens (a) e (b) da Figura 42 mostram que a velocidade do vapor não teve um efeito significativo na turbulência. Nota-se que devido ao valor da vazão de líquido utilizado nos Casos 3 e 4, houve um arraste de vapor pelo líquido para a região de *downcomer*.

#### 4.2.4 Campos de frações volumétricas

A Figura 43 apresenta a distribuição das frações volumétricas do líquido, utilizando o *volume rendering*, dos Casos 1 e 2 para a nova geometria proposta.

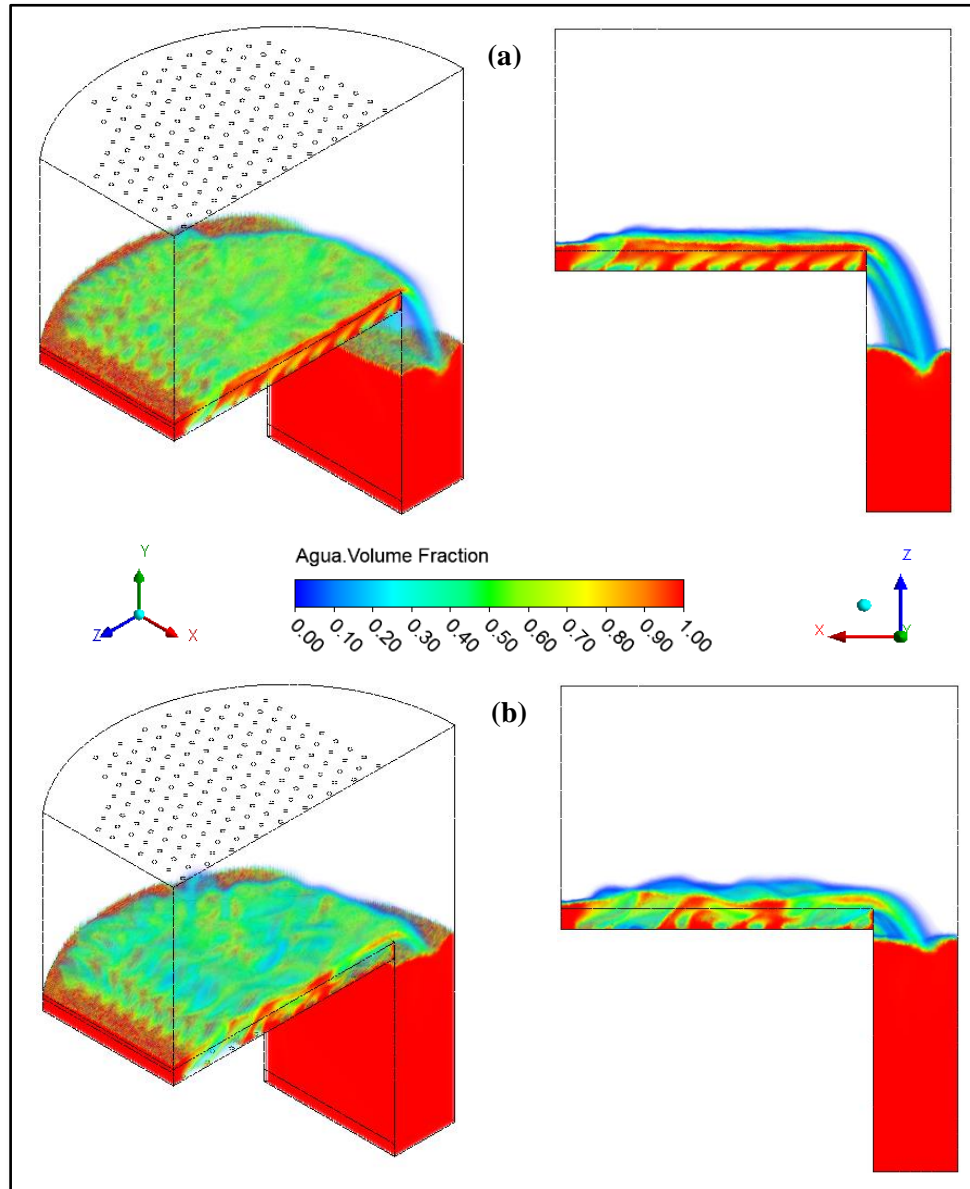
**Figura 43 – Campos de frações volumétricas do líquido no Prato (2) para  $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 1,015$  (Caso 1); e (b)  $F_s = 1,464$  (Caso 2).**



Fonte: Elaborada pelo Autor.

A Figura 44 apresenta a distribuição das frações volumétricas do líquido, utilizando o *volume rendering*, para os Casos 3 e 4.

Figura 44 – Campos de frações volumétricas do líquido no Prato (2) para  $Q_L = 17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ : (a)  $F_s = 0,462$  (Caso 3); e (b)  $F_s = 0,801$  (Caso 4).



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Análogo ao Prato (1), das Figuras 43 e 44, percebe-se que na base do prato a concentração de líquido é maior, e vai diminuindo até formar uma zona de mistura (ar/água) que depois termina no limite da região de borbulhamento. É importante notar que, a hidrodinâmica do prato é completamente caótica, apresentando fenômenos de arraste de pequenas porções de líquido pelo vapor, que por sua vez, caem sobre a emulsão quando seu peso se torna maior que o arraste.

## CONCLUSÕES

Com base nos resultados numéricos obtidos neste trabalho e do levantamento teórico presente na revisão bibliográfica, conclui-se que:

- A metodologia numérica adotada para o desenvolvimento deste trabalho permitiu a análise do escoamento líquido-vapor para o sistema ar/água utilizando as técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD) sobre o prato perfurado;
- O modelo conseguiu representar de forma razoável as zonas de estagnação e de recirculação de líquido no prato;
- A hidrodinâmica na superfície do prato é menos caótica a baixas vazões de vapor, tornando-se mais caótica e desordenada à medida que se aumenta a velocidade da fase vapor, tornando-se o regime altamente turbulento;
- As condições geométricas e operacionais foram de grande influência na hidrodinâmica do prato. Foi de fundamental importância conhecer o comportamento fluidodinâmico para identificar os fenômenos que afetam a eficiência de transferência de calor e massa em colunas de destilação;
- Os campos de velocidades encontrados no Prato (1), para todos os Casos observados, apresentaram um comportamento semelhante ao proposto por Solari e Bell (1986);
- A geometria alternativa proposta, Prato (2), apresentou um perfil de velocidade de líquido mais uniforme, quando comparado com o Prato (1). A mudança do formato da represa teve grande influência na hidrodinâmica, diminuindo as regiões de recirculação e de estagnação de líquido no prato;
- A técnica da Fluidodinâmica Computacional (CFD) mostrou-se uma ferramenta importante para a predição da hidrodinâmica do prato perfurado em regime turbulento, podendo ser utilizada na otimização de projetos de colunas de destilação, para a definição de estratégias de condições operacionais e, principalmente, em estudos de eficiência de pratos.



Este trabalho gerou algumas publicações em congressos internacionais e nacionais na forma de pôsteres, com publicações de trabalhos completos e resumidos. As referências destes trabalhos são apresentadas abaixo:

1. Trabalhos completos em fase de submissão em congressos:

JUSTI, G. H.; GONCALVES, J. A. S. Turbulence models applied in multiphase flow using computational to study of hydrodynamics on distillation sieve tray. In: INTERNATIONAL CONGRESS OF CHEMICAL AND PROCESS ENGINEERING – CHISA, 20., 2012, Praga (República Tcheca), 2012. **Proceedings...** Em fase de submissão.

2. Trabalhos completos publicados em anais de congressos:

JUSTI, G. H.; GONCALVES, J. A. S. Estudo da hidrodinâmica de um estágio de destilação utilizando as técnicas da fluidodinâmica computacional. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE SISTEMAS PARTICULADOS – ENEMP, 35., 2011, Vassouras-RJ. **Anais...** Vassouras: UFRRJ; Universidade Severino Sombra, 2011.

3. Trabalhos resumidos publicados em anais de congressos:

JUSTI, G. H.; GONCALVES, J. A. S. Application of CFD techniques on a distillation sieve tray for hydrodynamic predictions. In: BRAZILIAN BIOENERGY SCIENCE AND TECHNOLOGY CONFERENCE – BBEST, 1., 2011, Campos do Jordão-SP. **Resumos...** Campos do Jordão: BBEST, 2011. 1 CD-ROM.

4. Premiação:

JUSTI, G. H.; GONCALVES, J. A. S. Application of CFD techniques on a distillation sieve tray for hydrodynamic predictions. In: BRAZILIAN BIOENERGY SCIENCE AND TECHNOLOGY CONFERENCE – BBEST, 1., 2011, Campos do Jordão-SP. **Resumos...** Campos do Jordão: BBEST, 2011. 1 CD-ROM.

O pôster apresentado no Congresso foi premiado como menção honrosa durante o evento.

## SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de pesquisas em pratos perfurados de coluna de destilação para descrever com maior profundidade os fenômenos que envolvem escoamentos líquido-vapor. As seguintes sugestões são indicadas para o avanço no conhecimento nos processos de destilação:

- Estudar e analisar a influência dos modelos de turbulência em sistemas multifásicos, a maioria dos autores utilizam o modelo  $k-\varepsilon$  padrão;
- Estudar e elaborar a otimização de geometrias objetivando minimizar os fenômenos que influenciam na transferência de massa e energia;
- Implementar no modelo as equações de conservação de massa e energia, para se determinar de fato a eficiência do prato. Nesta mesma linha, incorporar as equações que descrevem a transferência de quantidade de movimento, energia e das espécies químicas na interface líquido-vapor;
- Calcular a eficiência do prato perfurado a partir das equações de conservação incorporadas. Sendo assim, testar novos tipos de pratos (pratos valvulados e pratos com campânulas) e comparar suas eficiências.

## REFERÊNCIAS

ANSYS Inc. **Meshing help**. Canonsburg, 2009a. 228 p. Apostila.

ANSYS Inc. **ANSYS CFX-Solver Theory Guide**. Canonsburg, 2009b. 274 p. Apostila.

BARROS, A. A. C. **Desenvolvimento de modelo de estágio de não equilíbrio e proposição de correlações para processos de destilação convencional e extrativa**. 1997. 243 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 1998.

BENNETT, D. L.; AGRAWAL, R.; COOK, P. J. New pressure drop correlation for sieve tray distillation columns. **AIChE Journal**, v. 29, n. 3, p. 434-442, 1983.

BIDDULPH, M. W. Tray efficiency is not constant. **Hydrocarbon Processing**, v. 56, n. 10, p. 145, 1977.

CALDAS, J. N. **Internos de torres: pratos & recheios**. Rio de Janeiro: EdUERJ, 2003. (Coleção Tecnologia Brasileira).

CONCENTRATION HEAT AND MOMENTUM LTD – CHAM. **Welcome to CHAM and PHOENICS**. Disponível em: <<http://www.cham.co.uk>>. Acesso em: setembro 2011.

CODICES, N. R. R. **Percepção volumétrica instantânea com order-independent volume rendering**. Disponível em: <<http://ctp.di.fct.unl.pt/~alopes/taaa/paper07.pdf>>. Acesso em: janeiro 2012.

COLWELL, C. J. Clear liquid height and froth density on sieve tray. **Industrial Engineering Chemistry Process Design Development**, v. 20, n. 2, p. 298–307, 1979.

DRIBIKA, M. M.; BIDDULPH, M. W. Distillation efficiencies on a large sieve plate with small-diameter holes. **AIChE Journal**, v. 32, p. 1383-1388, 1986.

DRICKAMER, H. G.; BRADFORD, J. R. The overall plate efficiency of commercial hydrocarbon fractionating columns as a function of viscosity. **Transactions of the American Institute of Chemical Engineers**, v. 39, p. 319, 1943.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. **Computational methods for fluid dynamics**. Berlin: Springer, 2002.

FERREIRA, A. A.; AQUINO NETO, F. R. A destilação simulada na indústria do petróleo. **Revista Química Nova**, v. 28, n. 3, p. 478-482, 2005.

FISCHER, C. H.; QUARINI, G. L. Three-dimensional heterogeneous modelling of distillation tray hydraulics, In: AIChE Annual Meeting, 1998, Miami Beach. **Proceedings...** Miami Beach: AIChE, 1998.

FOUST, A. S. *et al.* **Princípios das operações unitárias**. 2. ed. Rio de Janeiro: Editora LTC, 1982.

GESIT, G.; NANDAKUMAR, K.; CHUANG, K. T. CFD modeling of flow patterns and hydraulics of commercial-scale sieve trays. **AIChE Journal**, v. 49, p. 910-924, 2003.

GOMIDE, R. **Operações unitárias**. Edição do Autor. São Paulo: Reynaldo Gomide, 1988. v. 4.

GONÇALVES, N. D. F. **Método dos volumes finitos em malhas não-estruturadas**. 2007. 71 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Matemática) – Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, Porto - Portugal, 2007.

HAUSEN, H. A definition of exchange efficiency of rectifying plates for binary and ternary mixtures. **Chemie Ingenieur Technik**, v. 25, p. 595, 1953.

HOLLAND, C. D. **Fundamentals and modeling of separation process**. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1975.

KISTER, H. Z. **Distillation design**. New York: McGraw-Hill, 1992.

KRISHNA, R. *et al.* CFD simulations of sieve tray hydrodynamics. **Transactions IChemE**, v. 77, p. 639-646, 1999b.

KRISHNA, R. *et al.* Influence of scale on the hydrodynamics of bubble columns operating in the churn-turbulent regime: experiments vs. Eulerian simulations. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 4903-4911, 1999a.

KRISHNA, R. *et al.* Rise velocity of a swarm of large gas bubbles in liquid. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 171-183, 1999c.

LEWIS, W. K. The efficiency and design of rectifying columns for binary mixtures. **Journal Industrial Engineering Chemistry**, v. 14, n. 6, p. 492-497, 1922.

LIU, C. *et al.* A fluid-dynamic model for flow pattern on a distillation tray. **Chemical Engineering Science**, v. 55, p. 2287-2294, 2000.

LOCKETT, M. J. **Distillation tray fundamentals**. Cambridge: Cambridge University Press, 1986.

MacFARLAND, S. A.; SIGMUND, P. M.; VAN WINKLE, M. Predict distillation efficiency. **Hydrocarbon Processing**, v. 51, n. 7, p. 111-114, 1972.

MALVIN, A.; CHAN, A.; LAU, P. L. Large eddy simulation of distillation sieve tray hydrodynamics using volume-of-fluid (VOF) multiphase model. **Engineering and Computer Science**, v. 2, 2010.

MARANGONI, C. **Implementação de uma estratégia de controle com ação distribuída em uma coluna de destilação**. 2005. 151 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC, Florianópolis-SC, 2005.

McCABE, W. L.; THIELE, E. W. Graphical design of fractionating columns. **Industrial Engineering Chemistry**, v. 17, n. 6, p. 605-611, 1925.

MEHTA, B.; CHUANG, K. T.; NANDAKUMAR, K. Model for liquid phase flow on sieve trays. **Transactions IChemE**, v. 76, p. 843-848, 1998.

MURPHREE, E. V. Rectifying column calculations: with particular reference to n component mixtures. **Industrial Engineering Chemistry**, v. 17, n. 7, p. 747-750, 1925.

NORILER, D. **Modelagem matemática multifásica e simulação tridimensional e transiente para sistemas gás-líquido: o caso do escoamento líquido-vapor em colunas de destilação**. 2007. 185 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 2007.

NORILER, D. *et al.* Simultaneous momentum, mass, and energy transfer analysis of a distillation sieve tray using CFD techniques: prediction of efficiencies. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 14, p. 6599-6611, 2010.

NORILER, D. *et al.* Thermal fluid dynamics analysis of gas-liquid flow on a distillation sieve tray. **Chemical Engineering Journal**, v. 136, p. 133-143, 2008.

O'CONNELL, H. E. Plate efficiency of fractionating columns and absorbers. **Transactions of the American Institute of Chemical Engineers**, v. 42, p. 741, 1946.

PESCARINI, M. H. **Desenvolvimento de um algoritmo para simulação de coluna de destilação multicomponentes em estado estacionário utilizando a modelagem de estágio de não equilíbrio**. 1996. 220 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, Campinas-SP, 1996.

PONCHON, M. Application of graphs to the study of commercial fractional distillation. **Technique Moderne**, v. 13, p. 55, 1921.

RAHIMI, R. *et al.* M. Efficiencies of sieve tray distillation columns by CFD simulation. **Chemical Engineering Technology**, v. 29, n. 3, p. 326-335, 2006.

SAKATA, M.; YANAGI, T. Performance of a commercial scale sieve tray. **Institution of Chemical Engineers Symposium Series**, v. 56, p. 21, 1979.

SOARES, C. **Desenvolvimento de uma metodologia para avaliação numérica e experimental do escoamento líquido/vapor em colunas de destilação.** 2005. 212 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química). – Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 2005.

SOLARI, R. B.; BELL, R. L. Fluid flow patterns and velocity distribution on commercial-scale sieve trays. **AIChE Journal**, v. 32, p. 640-649, 1986.

SOREL, E. **Distillation et rectification industrielle.** Paris: Carré and Naud, 1899. Disponível em: <<http://archive.org/stream/distillationetr00soregoog#page/n5/mode/2up>>. Acesso em: setembro 2011.

STANDART, G. L. Studies on distillation: generalized definition of a theoretical plate or stage contacting equipment. **Chemical Engineering Science**, v. 20, p. 611-622, 1965.

STAUDT, P. B. **Modelagem e simulação dinâmica de colunas de destilação.** 2007. 124 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, Porto Alegre-RS, 2007.

TELEKEN, J. G. **Análise da fluidodinâmica do prato perfurado de uma unidade piloto de destilação.** 2009. 108 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC, Florianópolis-SC, 2009.

TELEKEN, J. G. *et al.* CFD simulation of multiphase flow in a sieve tray of a distillation column. **Brazilian Journal of Petroleum and Gas**, v. 3, n. 3, p. 93-102, 2009.

TU, J.; YEOH, G. H.; LIU, C. **Computational fluid dynamics: a practical approach.** Oxford: Butterworth-Heinemann, 2008.

van BATEN, J. M.; KRISHNA, R. Modelling sieve tray hydraulics using computational fluid dynamics. **Chemical Engineering Journal**, v. 77, p. 143-151, 2000.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method.** 2. ed. New York: Prentice Hall, 2007.

WANG, X. L. *et al.* Computational fluid dynamics simulation of three-dimensional liquid flow and mass transfer on distillation column trays. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 43, p. 2556-2567, 2004.

WILCOX, D. C. **Turbulence modeling for CFD.** 2. ed. California: DCW Industries, 2004.

YANAGI, T.; SAKATA, M. Performance of a commercial scale 14% hole area sieve tray. **Industrial Engineering Chemistry Process Design Development**, v. 21, p. 712-717, 1982.

## APÊNDICES

## Apêndice A – Dados dos campos de velocidades do Prato (1)

Tabela A1 – Prato (1): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (1).

Coordenada Adimensional, $x/R$	Velocidade da componente $w$ do líquido [ $m\ s^{-1}$ ]			
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>	<i>Upstream</i> Polinômio	<i>Downstream</i> Polinômio
0,000	0,39618	0,29324	0,45770	0,45770
0,041	0,36279	0,34212	0,27888	0,27888
0,082	0,22104	0,34587	0,18159	0,18159
0,124	0,17400	0,29334	0,14151	0,14151
0,165	0,06754	0,29387	0,13819	0,13819
0,206	0,05841	0,03003	0,15498	0,15498
0,247	0,17973	0,09410	0,17898	0,17898
0,289	0,14358	0,16793	0,20081	0,20081
0,330	0,27156	0,16614	0,21440	0,21440
0,371	0,31277	0,17571	0,21671	0,21671
0,412	0,32259	0,18332	0,20734	0,20734
0,453	0,15708	0,11400	0,18809	0,18809
0,495	0,14477	0,05797	0,16249	0,16249
0,536	0,04744	0,07987	0,13524	0,13524
0,577	0,02755	-0,02793	0,11155	0,11155
0,618	0,14643	-0,01742	0,09650	0,09650
0,660	0,07436	0,08957	0,09426	0,09426
0,701	0,10605	0,05847	0,10727	0,10727
0,742	0,17061	0,18530	0,13535	0,13535
0,783	0,16940	0,26630	0,17479	0,17479
0,824	0,31053	0,19218	0,21729	0,21729
0,866	0,24654	0,32283	0,24890	0,24890
0,907	0,18197	0,24713	0,24889	0,24889
0,948	0,15458	0,17072	0,18853	0,18853
1,000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000

Fonte: Elaborada pelo Autor.

Tabela A2 – Prato (1): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (2).

Coordenada Adimensional, $x/R$	Velocidade da componente $w$ do líquido [ $m s^{-1}$ ]			
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>	<i>Upstream</i> Polinômio	<i>Downstream</i> Polinômio
0,000	0,36954	0,30899	0,34590	0,24930
0,041	0,25402	0,13587	0,30953	0,20315
0,082	0,30358	0,11306	0,26983	0,19607
0,124	0,21596	0,18113	0,23457	0,21513
0,165	0,19684	0,37346	0,20735	0,24799
0,206	0,24303	0,38812	0,18881	0,28372
0,247	0,22248	0,39126	0,17769	0,31335
0,289	0,11482	0,27753	0,17171	0,33039
0,330	0,13334	0,16066	0,16833	0,33106
0,371	0,14913	0,21855	0,16533	0,31436
0,412	0,16358	0,26016	0,16119	0,28204
0,453	0,18998	0,30311	0,15538	0,23827
0,495	0,11757	0,24339	0,14841	0,18924
0,536	0,14923	0,23543	0,14184	0,14255
0,577	0,18827	0,13232	0,13799	0,10637
0,618	0,19322	0,17150	0,13955	0,08851
0,660	0,12109	0,02010	0,14910	0,09528
0,701	0,04762	0,00834	0,16833	0,13011
0,742	0,20976	0,13363	0,19722	0,19210
0,783	0,24621	0,27590	0,23299	0,27432
0,824	0,32104	0,34793	0,26893	0,36197
0,866	0,31112	0,64945	0,29304	0,43033
0,907	0,23601	0,39632	0,28652	0,44254
0,948	0,22285	0,24409	0,22213	0,34728
1,000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000

Fonte: Elaborada pelo Autor.



Tabela A3 – Prato (1): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (3).

Coordenada Adimensional, $x/R$	Velocidade da componente $w$ do líquido [ $m s^{-1}$ ]			
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>	<i>Upstream</i> Polinômio	<i>Downstream</i> Polinômio
0,000	0,33526	0,42174	0,31220	0,40950
0,041	0,37713	0,44430	0,41832	0,48602
0,082	0,42481	0,49685	0,43533	0,48206
0,124	0,43159	0,47233	0,40676	0,43919
0,165	0,37164	0,40779	0,36223	0,38453
0,206	0,32890	0,31503	0,32019	0,33393
0,247	0,30064	0,27861	0,29042	0,29482
0,289	0,26577	0,23046	0,27630	0,26875
0,330	0,25172	0,23141	0,27676	0,25355
0,371	0,28817	0,25227	0,28796	0,24510
0,412	0,33244	0,28721	0,30475	0,23889
0,453	0,29498	0,24803	0,32180	0,23108
0,495	0,33807	0,22591	0,33452	0,21930
0,536	0,31017	0,24096	0,33968	0,20309
0,577	0,35951	0,15952	0,33574	0,18400
0,618	0,36080	0,15424	0,32296	0,16530
0,660	0,31902	0,09001	0,30321	0,15142
0,701	0,25948	0,07633	0,27953	0,14695
0,742	0,25084	0,21138	0,25537	0,15540
0,783	0,23605	0,24188	0,23366	0,17752
0,824	0,20328	0,24738	0,21549	0,20931
0,866	0,19678	0,22217	0,19865	0,23972
0,907	0,17764	0,20844	0,17578	0,24795
0,948	0,17034	0,19187	0,13231	0,20040
1,000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000

Fonte: Elaborada pelo Autor.

Tabela A4 – Prato (1): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (4).

Coordenada Adimensional, $x/R$	Velocidade da componente $w$ do líquido [ $m s^{-1}$ ]			
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>	<i>Upstream</i> Polinômio	<i>Downstream</i> Polinômio
0,000	0,67948	0,47075	0,69240	0,48320
0,041	0,57746	0,49455	0,53267	0,52340
0,082	0,39767	0,58356	0,44879	0,51082
0,124	0,45020	0,51413	0,41852	0,47488
0,165	0,39061	0,43499	0,42254	0,43352
0,206	0,43669	0,31069	0,44465	0,39606
0,247	0,52341	0,30234	0,47189	0,36566
0,289	0,48804	0,32676	0,49455	0,34151
0,330	0,51169	0,35026	0,50611	0,32065
0,371	0,47908	0,34016	0,50308	0,29946
0,412	0,46869	0,31341	0,48472	0,27483
0,453	0,41883	0,30229	0,45272	0,24502
0,495	0,44790	0,24482	0,41074	0,21012
0,536	0,39544	0,14623	0,36386	0,17227
0,577	0,33740	0,08011	0,31798	0,13545
0,618	0,25464	0,03652	0,27908	0,10502
0,660	0,26832	0,03714	0,25242	0,08687
0,701	0,18250	0,06986	0,24161	0,08628
0,742	0,22663	0,15092	0,24763	0,10643
0,783	0,30412	0,23548	0,26771	0,14654
0,824	0,33427	0,27076	0,29419	0,19978
0,866	0,31100	0,21778	0,31319	0,25074
0,907	0,26633	0,20071	0,30326	0,27258
0,948	0,24132	0,20550	0,23392	0,22398
1,000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000

Fonte: Elaborada pelo Autor.

**Apêndice B – Dados dos campos de velocidades do Prato (2)**

**Tabela B1 – Prato (2): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (1).**

Coordenada Adimensional, $x/R$	Velocidade da componente $w$ do líquido [ $m\ s^{-1}$ ]			
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>	<i>Upstream</i> Polinômio	<i>Downstream</i> Polinômio
0,000	0,42160	0,37585	0,44900	0,36330
0,041	0,34460	0,31371	0,26275	0,32735
0,082	0,14175	0,25889	0,16922	0,28933
0,124	0,03949	0,29804	0,13781	0,25521
0,165	0,16639	0,20991	0,14394	0,22844
0,206	0,23317	0,19584	0,16861	0,21053
0,247	0,26394	0,27049	0,19779	0,20150
0,289	0,17626	0,17741	0,22190	0,20037
0,330	0,20129	0,16364	0,23528	0,20550
0,371	0,16031	0,21778	0,23556	0,21489
0,412	0,24132	0,24845	0,22315	0,22651
0,453	0,24280	0,27112	0,20055	0,23844
0,495	0,20672	0,18936	0,17182	0,24906
0,536	0,16266	0,19726	0,14189	0,25713
0,577	0,12381	0,30906	0,11594	0,26180
0,618	0,05238	0,31561	0,09875	0,26266
0,660	0,05695	0,29911	0,09402	0,25958
0,701	0,12661	0,21600	0,10369	0,25263
0,742	0,12533	0,27629	0,12724	0,24187
0,783	0,12350	0,11400	0,16096	0,22712
0,824	0,25743	0,20313	0,19727	0,20761
0,866	0,25263	0,26460	0,22392	0,18168
0,907	0,19418	0,13108	0,22328	0,14630
0,948	0,14531	0,09237	0,17155	0,09666
1,000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000

**Fonte: Elaborada pelo Autor.**

Tabela B2 – Prato (2): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (2).

Coordenada Adimensional, $x/R$	Velocidade da componente $w$ do líquido [ $m s^{-1}$ ]			
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>	<i>Upstream</i> Polinômio	<i>Downstream</i> Polinômio
0,000	0,44451	0,51710	0,48020	0,53260
0,041	0,37214	0,36297	0,31861	0,33343
0,082	0,25055	0,24327	0,24255	0,23978
0,124	0,26058	0,20038	0,22316	0,20971
0,165	0,19340	0,21666	0,23724	0,21318
0,206	0,19296	0,16218	0,26674	0,22988
0,247	0,28719	0,29300	0,29835	0,24725
0,289	0,31691	0,23773	0,32300	0,25876
0,330	0,40013	0,30707	0,33538	0,26228
0,371	0,40295	0,29033	0,33336	0,25868
0,412	0,27874	0,28145	0,31751	0,25063
0,453	0,31581	0,15047	0,29049	0,24156
0,495	0,27719	0,20895	0,25647	0,23480
0,536	0,12770	0,21331	0,22054	0,23295
0,577	0,18451	0,31670	0,18804	0,23740
0,618	0,17081	0,25102	0,16393	0,24802
0,660	0,16989	0,21686	0,15211	0,26308
0,701	0,07486	0,31890	0,15472	0,27933
0,742	0,22665	0,22002	0,17142	0,29226
0,783	0,29565	0,42117	0,19866	0,29659
0,824	0,20933	0,28089	0,22889	0,28687
0,866	0,18699	0,15755	0,24983	0,25834
0,907	0,25632	0,20294	0,24359	0,20790
0,948	0,17856	0,21125	0,18590	0,13539
1,000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000

Fonte: Elaborada pelo Autor.

Tabela B3 – Prato (2): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (3).

Coordenada Adimensional, $x/R$	Velocidade da componente $w$ do líquido [ $m s^{-1}$ ]			
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>	<i>Upstream</i> Polinômio	<i>Downstream</i> Polinômio
0,000	0,39729	0,40905	0,37210	0,38800
0,041	0,37959	0,42560	0,40296	0,46580
0,082	0,34688	0,47120	0,39524	0,47229
0,124	0,39830	0,46452	0,37134	0,44260
0,165	0,34116	0,39907	0,34558	0,40054
0,206	0,36004	0,37090	0,32591	0,36092
0,247	0,35019	0,33887	0,31556	0,33152
0,289	0,32548	0,30029	0,31438	0,31488
0,330	0,30832	0,30063	0,32004	0,30993
0,371	0,29523	0,31325	0,32913	0,31336
0,412	0,28156	0,33585	0,33794	0,32076
0,453	0,31569	0,34989	0,34317	0,32761
0,495	0,35145	0,32136	0,34240	0,32998
0,536	0,36768	0,28239	0,33439	0,32511
0,577	0,38956	0,24987	0,31921	0,31169
0,618	0,30148	0,31740	0,29818	0,28998
0,660	0,25538	0,33709	0,27360	0,26172
0,701	0,24635	0,29622	0,24840	0,22976
0,742	0,21378	0,19138	0,22544	0,19760
0,783	0,16952	0,09024	0,20679	0,16858
0,824	0,18424	0,11270	0,19272	0,14497
0,866	0,18017	0,13067	0,18059	0,12679
0,907	0,16194	0,12374	0,16348	0,11040
0,948	0,16266	0,14146	0,12868	0,08698
1,000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000

Fonte: Elaborada pelo Autor.

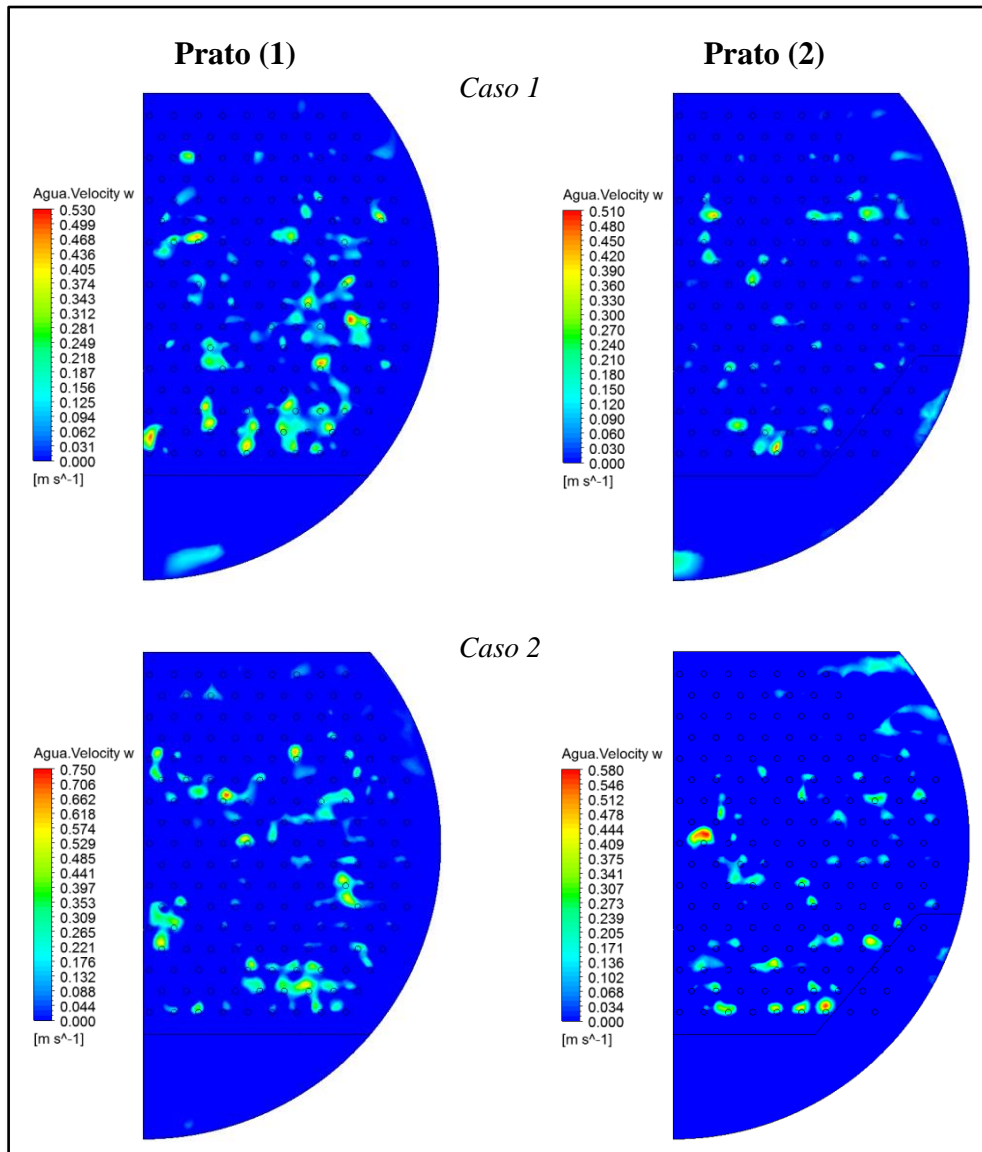
Tabela B4 – Prato (2): dados dos campos de velocidades da simulação do Caso (4).

Coordenada Adimensional, $x/R$	Velocidade da componente $w$ do líquido [ $m s^{-1}$ ]			
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>	<i>Upstream</i> Polinômio	<i>Downstream</i> Polinômio
0,000	0,69367	0,47387	0,62940	0,49830
0,041	0,49283	0,49304	0,59664	0,46607
0,082	0,46517	0,46272	0,55515	0,44973
0,124	0,68494	0,46947	0,51784	0,44572
0,165	0,48603	0,47373	0,49107	0,45051
0,206	0,45645	0,40714	0,47636	0,46069
0,247	0,52197	0,37865	0,47199	0,47316
0,289	0,46260	0,44876	0,47428	0,48518
0,330	0,45173	0,57254	0,47874	0,49447
0,371	0,39415	0,54762	0,48098	0,49923
0,412	0,50027	0,56095	0,47741	0,49820
0,453	0,43793	0,55748	0,46575	0,49065
0,495	0,50554	0,45086	0,44527	0,47637
0,536	0,43328	0,36550	0,41694	0,45561
0,577	0,33565	0,30844	0,38321	0,42902
0,618	0,43527	0,39931	0,34774	0,39756
0,660	0,37212	0,37758	0,31479	0,36240
0,701	0,22713	0,41748	0,28850	0,32476
0,742	0,19734	0,34205	0,27187	0,28578
0,783	0,25752	0,22057	0,26562	0,24631
0,824	0,28068	0,20577	0,26677	0,20670
0,866	0,31574	0,12405	0,26705	0,16660
0,907	0,23348	0,08869	0,25106	0,12469
0,948	0,21575	0,12592	0,19431	0,07838
1,000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000

Fonte: Elaborada pelo Autor.

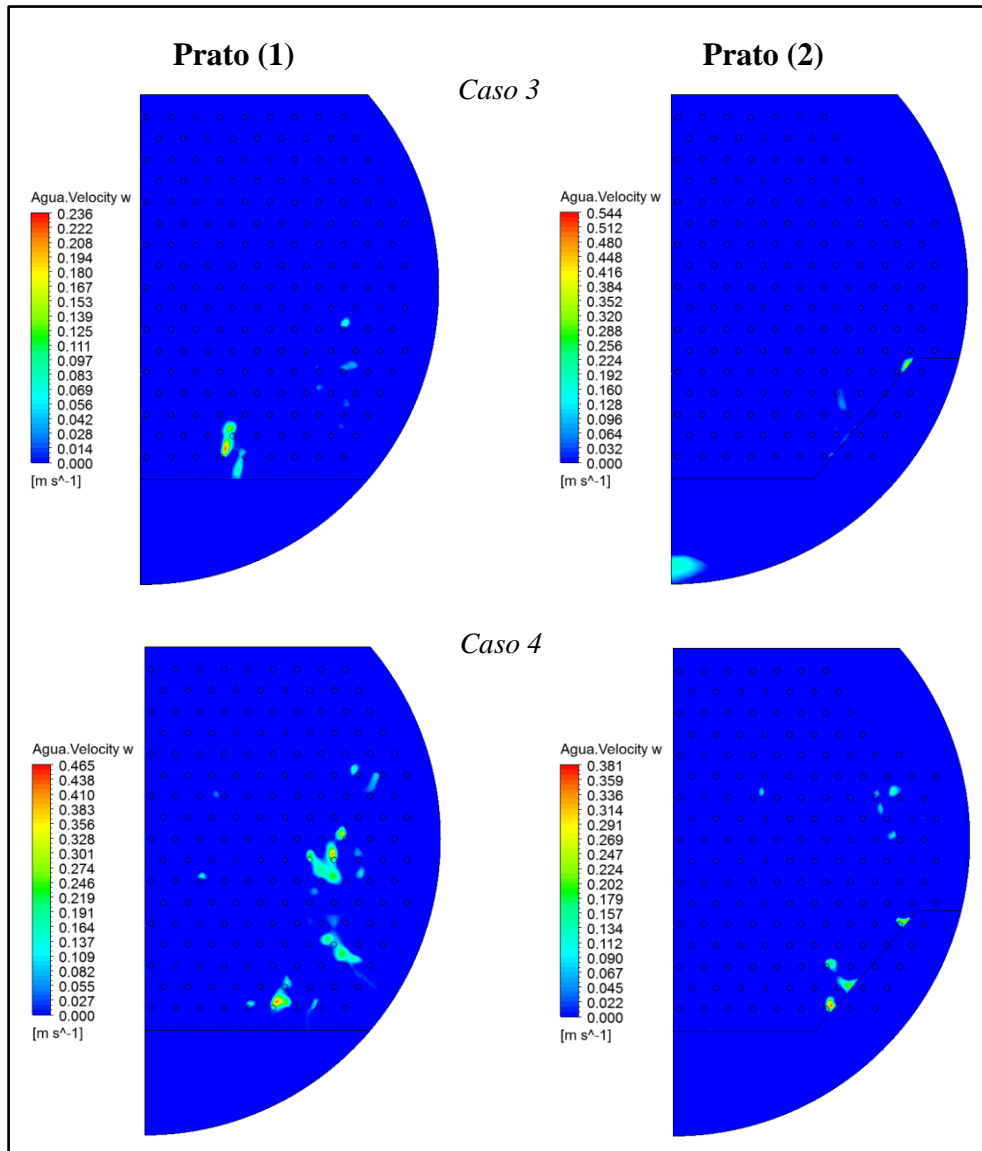
## Apêndice C – Regiões de recirculação e de estagnação de líquido

Figura C1 – Casos 1 e 2: zonas de recirculação de líquido para os Pratos (1) e (2).



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Figura C2 – Casos 3 e 4: zonas de recirculação de líquido para os Pratos (1) e (2).



Fonte: Elaborada pelo Autor.