

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

GLADSON CINTRA DE OLIVEIRA

**APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE CFD NO ESTUDO DA EFICIÊNCIA DE ESTÁGIO
EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO PARA PRODUÇÃO DE ETANOL**

SÃO CARLOS - SP

MARÇO DE 2014

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

GLADSON CINTRA DE OLIVEIRA

**APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE CFD NO ESTUDO DA EFICIÊNCIA DE ESTÁGIO
EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO PARA PRODUÇÃO DE ETANOL**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como requisito para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Orientação: Prof. Dr. José Antônio Silveira Gonçalves.

SÃO CARLOS - SP

MARÇO DE 2014

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

O48at

Oliveira, Gladson Cintra de.

Aplicação de técnicas de CFD no estudo da eficiência de estágio em colunas de destilação para produção de etanol / Gladson Cintra de Oliveira. -- São Carlos : UFSCar, 2014. 146 f.

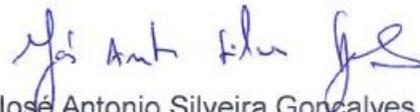
Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2014.

1. Engenharia química. 2. Fluidodinâmica computacional. 3. Destilação. 4. Pratos perfurados. 5. Eficiência. I. Título.

CDD: 660 (20^a)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE **GLADSON CINTRA DE OLIVEIRA** APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 17 DE MARÇO DE 2014.

BANCA EXAMINADORA:



José Antonio Silveira Gonçalves
Orientador, UFSCar



Thiago Fagion de Pádua
UFSCar



Nicolau Spogis
ESSS

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 de bolsas de Mestrado da quota do PPGEQ, sendo a bolsa oferecida pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq.



AGRADECIMENTOS

Ao Professor e Orientador Dr. José Antônio Silveira Gonçalves pelo seu paciente trabalho de orientação e dedicação.

Aos Professores do DEQ - UFSCar que, mais uma vez, foram fundamentais à minha formação intelectual, pessoal e profissional.

Aos amigos de área, pela amizade e companheirismo durante esses anos de Mestrado além do apoio e cumplicidade na implantação e aprofundamento das técnicas em CFD.

Aos companheiros e amigos da Pós-Graduação do DEQ-UFSCar, pela amizade feita e pelos bons momentos juntos ao longo dessa jornada.

A minha família, pelo apoio, amor e carinho.

A Patrícia por sua paciência, apoio e eterno companheirismo.

“It never gets easier. You just get better.”

Autor desconhecido

RESUMO

A destilação é uma das mais importantes técnicas de separação de componentes empregada a nível industrial nos mais diversos processos. Sua suma importância dá-se na capacidade de purificar componentes de uma mistura utilizando a diferença de volatilidade entre eles como força motriz. Entretanto, trata-se de uma técnica que representa cerca de 40% da energia consumida em uma planta industrial. Atualmente, com a necessidade de se repensar o uso energético, com as novas políticas de emissão de poluentes, da preocupação com o ambiente e a concorrência de mercado; o aperfeiçoamento do processo de destilação tem se tornado essencial para as refinarias, petroquímicas e diversos setores da indústria. Estudos empíricos sobre o escoamento em colunas de destilação são raros, em parte devido às grandes dimensões destes aparelhos e ao alto investimento em equipamentos e instrumentos de medição. Esta carência de dados experimentais dificulta o entendimento adequado dos mecanismos que ocorrem neste equipamento, como os padrões de escoamento e o grau de separação, assim como a relação entre estes dois. Contudo, para que se possa melhorar o processo destilatório, é necessário conhecer a fundo a dinâmica do escoamento multifásico existente em cada prato da coluna, onde de fato ocorre o contato íntimo entre as fases. Neste estudo, foi proposta a simulação computacional de pratos perfurados de colunas de destilação usando ferramentas de CFD (*Computational Fluid Dynamics*). O principal objetivo foi conceber um modelo capaz de prever a hidrodinâmica do prato e a transferência do componente mais volátil entre o líquido e o vapor. Além do mais, foram apontadas as regiões no prato que possivelmente interferem na obtenção de maiores eficiências de estágio. Para isso, foram usados modelos 3D, transientes e multifásicos com abordagem Euler-Euler. Os principais resultados mostram os perfis de velocidade, fração volumétrica, altura de líquido claro, fração mássica e eficiência, os quais apresentaram concordância quando comparados com a literatura. Em geral, os resultados fluidodinâmicos obtidos neste estudo ressaltam a importância da aplicação de modelos que representem o complexo comportamento encontrado em pratos perfurados, já que estes influenciam decisivamente no grau de separação do processo. CFD demonstrou ser uma ferramenta valiosa para estudar o fluxo em internos de torres de destilação e pode ser aplicado para projeto e otimização destes equipamentos.

Palavras-chave: Destilação; Pratos perfurados; Eficiência; Fluidodinâmica computacional (CFD).

ABSTRACT

Distillation is one of the most important and used separation techniques of components at industrial level, applied in a wide range of processes. Its great importance is due to the capacity of purify components of a mixture using the volatility difference among them as driving force. However, this technique represents 40% of the total energy consumption of an industrial facility. Nowadays, with the necessity of rethink the energetic use owing to the massive usage of natural resources, new regulations of pollutant emissions, environmental issues and market competition; the enhancement of the distillation process has become essential to the refineries, petrochemicals and a variety of other sectors of the industry. Empirical studies about the flow dynamics in distillation columns are rare due to the large dimensions of this equipment and the high investment, including measurement instrumentation. This lack of experimental data makes difficult the appropriate understanding of the mechanisms that occur in this equipment, as flow patterns and degree of separation, as well as the relation between both. Nevertheless, to improve the distillation process performance is necessary to deeply know the dynamics of the multiphase flow existing on each tray of the column, where the contact between the phases indeed happens. In this study, was proposed the computational simulation of sieve trays of distillation columns using CFD's tools (Computational Fluid Dynamics). The main aim was to conceive a model capable to predict the hydrodynamics and the more volatile component transfer between the liquid and the vapor. Furthermore, the regions that possibly interfere on obtaining higher efficiencies were pointed out. For that, tridimensional, transient and multiphase models with the Euler-Euler framework were used. The main results show liquid velocity profiles, volumetric fraction, clear liquid height, mass fraction and efficiency. The results presented agreement with the literature. In general, the fluid dynamics results obtained here highlight the significance of the application of models that represent the complex behavior existing on sieve trays, since this crucially influence in the separation degree of the process. The CFD evidenced to be and valuable tool to study this sort of flow on columns internals and can be applied in the design and optimization of those equipment.

Keywords: Distillation; Sieve trays; Efficiency; Computational Fluid Dynamics (CFD).

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 3.1 - Torre de destilação industrial e a representação dos estágios em seu interior.	Erro!
Indicador não definido.	
Figura 3.2 - Características de um prato perfurado e do escoamento sobre este interno.....	29
Figura 3.3 - Linha do tempo do desenvolvimento dos trabalhos relativos ao estudo de colunas de bolhas.....	34
Figura 3.4 - Linha do tempo do desenvolvimento dos trabalhos relativos ao estudo de pratos de destilação.	37
Figura 4.1 - Etapas da análise CFD empregada.....	49
Figura 4.2 - Características e dimensões geométricas do prato perfurado simulado.....	50
Figura 4.3 - Representação da estrutura de blocos adotadas para a adaptação da malha.	53
Figura 4.4 - Malhas utilizadas para a realização do teste de independência de malha com destaque para os principais blocos.....	54
Figura 4.5 - Regiões e medidores do experimento de Solari e Bell (1986).	57
Figura 4.6 – Regiões e linhas utilizadas para medição da velocidade do líquido.	57
Figura 4.7 - Esquema representativo de avaliação da eficiência em um prato de destilação...	60
Figura 5.1 - Esquema da transferência de massa multicomponente entre fases.....	80
Figura 5.2 - Ilustração das regiões nas quais são aplicadas as condições de contorno.....	93
Figura 5.3 - Representação dos pontos de referência para cálculo da pressão de saída do líquido.	95
Figura 7.1 – Altura de líquido claro no prato em função da quantidade de elementos das malhas no instante de 20 s.....	104
Figura 7.2 - Tempo de processamento em função da quantidade de elementos da malha para 20 s de tempo real de escoamento.	104
Figura 7.3 - Componente w da velocidade do líquido em função da quantidade de elementos das malhas nas regiões <i>upstream</i> e <i>downstream</i> avaliada em um plano ZX ($y = 0,038$ m) para diferentes coordenadas adimensionais (x/R) no instante de 20 s.	106
Figura 7.4 - Altura de líquido claro em função do tempo.....	107
Figura 7.5 - Comparação entre as alturas de líquido claro simulada e obtidas da literatura. .	108
Figura 7.6 - Variação temporal da média da componente w da velocidade do líquido aferida em três diferentes coordenadas adimensionais x/R para as regiões <i>upstream</i> e <i>downstream</i> .	111

Figura 7.7 - Perfil da componente w do vetor velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) para a região <i>downstream</i>	112
Figura 7.8 - Perfil da componente w do vetor velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) para a região <i>upstream</i>	113
Figura 7.9 - Mapas de contornos da componente w da velocidade do líquido ao longo do tempo em um plano ZX ($y = 0,038$ m).	116
Figura 7.10 - Mapas de vetores do líquido no prato em um plano ZX ($y = 0,038$ m).	117
Figura 7.11 - Linhas de corrente do líquido (esq.) e do gás (dir.) pelo domínio do prato.	119
Figura 7.12 - Distribuição das frações volumétricas de líquido pelo prato em um plano YZ ($x = 0$ m).	121
Figura 7.13 - Distribuição das frações volumétricas de líquido pelo prato por imagens de renderização.	122
Figura 7.14 - Mapas de contornos da fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano ZX ($y = 0,038$ m).	124
Figura 7.15 - Variação da fração mássica de etanol média para as fases líquida e vapor ao longo do tempo, medidas nas saídas do domínio.	125
Figura 7.16 - Perfis de fração mássica de etanol para as fases e a fração mássica de etanol no vapor que estaria em equilíbrio com a fase líquida em função do comprimento do prato. ...	127
Figura 7.17 - Eficiências pontuais avaliadas ao longo do comprimento z do prato para diferentes coordenadas x	128
Figura 7.18 - Variação temporal da eficiência de Murphree no prato.	130
Figura 7.19 - Comparação entre a eficiência de Murphree simulada com a literatura e correlações empíricas.	130

LISTA DE QUADROS

Quadro 3.1 – Variáveis que afetam a eficiência de separação em pratos de destilação.	31
Quadro 3.2 - Relação de pesquisas em pratos perfurados de coluna de destilação que aplicaram a metodologia do CFD.	41
Quadro 3.3 – Características do prato e do sistema utilizados nos principais trabalhos da literatura.	42
Quadro 4.1 - Características e configurações das simulações realizadas.....	55
Quadro 5.1 - Informações complementares para a especificação do modelo e condições de contorno.....	96

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 - Dimensões geométricas do prato perfurado simulado.....	51
Tabela 4.2 - Características das malhas utilizadas no teste de independência de malha.	53
Tabela A1 - Integrais de colisão para cálculo da difusividade.	143
Tabela B1 - Dados experimentais de Solari e Bell (1986) para os campos de velocidade de líquido.	144
Tabela C1 - Médias da componente w das velocidades de líquido obtidas por simulações CFD.....	145

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

2D, 3D	Duas Dimensões e Três Dimensões;
AIChE	<i>American Institute of Chemical Engineers;</i>
BSL	<i>The Baseline</i> (turbulência);
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i> (fluidodinâmica computacional);
FRI	<i>Fractionation Research Inc.;</i>
LES	<i>Large Eddy Simulations</i> (turbulência);
LRR	<i>Launder-Reece-Rodi</i> (turbulência);
LU	<i>Lower and Upper;</i>
MVF	Método dos Volumes Finitos;
RMS	<i>Root Mean Square</i> (raiz quadrada da média);
RNG	<i>Renormalization Group</i> (turbulência);
RSM	<i>Reynolds Stress Model</i> (turbulência);
SRS	<i>Surface Renewal Stretch</i> (modelo de transferência de massa);
SSG	<i>Speziale-Sarkar-Gatski</i> (turbulência);
SST	<i>The Shear Stress Transport</i> (turbulência);
UNIQUAC	<i>Universal Quase-Chemical.</i>

NOMENCLATURA

Símbolos

A_{DB} : área de estabilização de fluxo no prato;

A , A_{LV} : área ou área interfacial e área interfacial por unidade de volume;

A_B : área de borbulhamento;

A_C : secção transversal da coluna de destilação;

A_H : área de orifício;

A_p : área projetada pela partícula na direção do escoamento;

B : constante numérica;

$c^{(d)}$: coeficiente volumétrico de transferência de quantidade de movimento;

C : concentração molar ou constante numérica;

C_μ , C_ε : constantes de modelo de turbulência;

C_D : coeficiente de arraste;

d , d_b : diâmetro da partícula e diâmetro de bolha;

d_H : diâmetro dos orifícios (*holes*);

D : difusividade ou magnitude da força de arraste;

D_p : diâmetro do prato;

Dg : número de tensão superficial;

E_{MV} : eficiência de prato de Murphree;

E_{OG} : eficiência pontual;

f : fração volumétrica;

\mathbf{F} : forças interfaciais;

F_S : fator de vazão do vapor;

FA : fração de área perfurada;

F_1, F_2 : funções de combinação (*blending*);

\mathbf{g} : vetor aceleração gravitacional;

h : entalpia;

h_p : espaçamento entre pratos;

h_1 : altura da entrada e saída de líquido;

h_D : altura do *downcomer*;

h_w : altura do vertedor (*wier*);

h_b : altura dos blocos da geometria;

h_{cl} : altura de líquido claro;

k^c : coeficiente de transferência de espécies químicas/massa;

k : energia cinética turbulenta ou constante de Boltzman;

K, K^C, K^y : constante de equilíbrio;

L/V : razão do fluxo;

L_w : razão entre a vazão volumétrica de líquido e a largura média da bandeja;

L_1, L_2 : dimensões do prato;

m : taxa mássica;

\dot{m} : taxa mássica por unidade de área interfacial;

M : transferência de quantidade de movimento entre as fases por unidade de volume;

n : taxa molar;

nb : número de blocos da geometria;

n_p : número de partículas por unidade de volume;

N_C : número de componentes;

N_F : número de fases;

N_H : número de orifícios (*holes*);

p : *pitch* da distribuição dos furos no prato;

P_k, P_ϵ : influência das forças de flutuação;

PM : peso molecular;

P : pressão;

\mathbf{P} : produção de energia cinética turbulenta;

Q : vazão volumétrica;

r, r_{12} : comprimento característico do componente e diâmetro de colisão;

R : raio do prato;

Re : número de Reynolds;

\mathbf{S} : termo fonte das equações de conservação;

S : medida invariante da taxa de tensão;

Sc : número de Schmidt;

S_k : fluxo de uma propriedade;

t : tempo;

T : temperatura;

\mathbf{T} : tensor tensão;

\mathbf{v} : vetor velocidade;

v_x, v_y, v_z : componentes do vetor velocidade;

v_R : velocidade média de ascensão das bolhas;

v_S : velocidade superficial do vapor;

V_p : volume da partícula;

V_b : volume molar no ponto normal de ebulição;

x, y, z : coordenadas cartesianas;

x : Fração molar ou parâmetro de associação;

y : Fração mássica ou distância da parede;

\mathbf{Y} : Taxa volumétrica de transferência de espécies químicas entre as fases.

$W^{(1)}_{(1)}$: integral de colisão para difusão.

Letras Gregas

α : representa a fase contínua ou constante turbulenta;

β, β' : representa a fase dispersa ou constante turbulenta;

γ : coeficiente de atividade ou multiplicação de ρ por g ;

ρ : massa específica, densidade ou concentração mássica;

ε : dissipação turbulenta ou energia de atração;

ω : frequência turbulenta;

ϕ : propriedade genérica conservável;

Φ : coeficiente de fugacidade;

θ : tempo de contato na região de espuma;

σ : tensão superficial ou constante turbulenta;

ν : viscosidade cinemática;

μ : viscosidade;

Γ : termo difusivo;

Δ : termo de correção;

π : constante matemática de valor aproximado de 3,14.

Operadores

\tanh : função tangente hiperbólica;

\sum : somatório;

\otimes : multiplicação de tensores;

Δ , *grad* : operador gradiente;

∇ , *div* : operador divergência;

∂ : diferencial parcial.

Subscritos

1, 2 : soluto e solvente;

A : componente genérico;

E : etanol;

i : componente genérico ou índice de prato;

j : componente genérico ou fase genérica;

k : fase genérica;

L : fase líquida;

MS : fonte de massa;

M : fonte de *momentum*;

p : partícula;

S : pressão de sólidos ou avaliação na interface;

slip : escorregamento;

V : fase vapor ou gasosa;

W : água (*water*).

Sobrescritos

* : condição de equilíbrio;

$^-$, *medio* : média da propriedade;

+ : indica taxa positiva;

D : arraste (*drag*);

eff : propriedade efetiva;

in : entrada;

L : sustentação (*lift*);

LUB : lubrificação;

out : saída;

turb : propriedade turbulenta;

T : vetor transposto;

TD : dispersão turbulenta;

vol : volumétrico;

VM : massa virtual (*virtual mass*).

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	24
2. OBJETIVOS DE ESTUDO	26
2.1. Objetivos Específicos.....	26
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	27
3.1. Destilação	27
3.2. Colunas de Bolhas	31
3.3. Pratos de Destilação.....	36
3.3.1. Investigações Experimentais	36
3.3.2. Experimentações por Fluidodinâmica Computacional	39
3.4. Aspectos de Investigação	48
4. METODOLOGIA	49
4.1. <i>Hardware e Software</i>	49
4.2. Configuração Geométrica	50
4.3. Malha Numérica	52
4.4. Configurações das Simulações	55
4.5. Metodologia de Análise	56
5. MODELAGEM MATEMÁTICA	62
5.1. Considerações.....	62
5.2. Equações de Transporte	65
5.3. Equações de Restrição	68
5.4. Fechamento do Modelo.....	69
5.4.1. Transferência de Quantidade de Movimento na Interface	70
5.4.2. Transferência de Massa na Interface	76
5.4.3. Transferência de Espécies Químicas Entre Fases.....	77

5.4.4.	Equações Constitutivas da Turbulência	85
5.4.4.1.	Modelo k- ϵ Padrão.....	86
5.4.4.2.	Modelo k- ω	88
5.4.4.3.	Modelo SST (<i>Shear Stress Transport</i>) Baseado em k- ω	89
5.4.5.	Condições de Contorno e de Inicialização	92
6.	PROCEDIMENTO NUMÉRICO	97
6.1.	Modelo Matemático	97
6.2.	Método de Discretização.....	98
6.3.	Sistema de Coordenadas e Base de Vetores.....	98
6.4.	Malha Numérica	99
6.5.	Aproximações Finitas	99
6.6.	Método de Resolução.....	101
6.7.	Critério de Convergência	102
7.	RESULTADOS	103
7.1.	Teste de Independência de Malha	103
7.2.	Verificação do Modelo.....	107
7.2.1.	Altura de Líquido Claro	107
7.2.2.	Perfis da Média Linear da Componente w do Vetor Velocidade do Líquido ..	109
7.2.3.	Mapas de Contornos de Velocidades.....	115
7.2.4.	Vetores Velocidades	117
7.2.5.	Linhas de Fluxo	118
7.2.6.	Campos de Frações Volumétricas	120
7.3.	Transferência de Espécies Químicas	123
7.3.1.	Campos de Frações Mássicas	123
7.3.2.	Perfis de Frações Mássicas.....	125
7.3.3.	Eficiência.....	127
8.	CONCLUSÕES.....	132

9. SUGESTÕES.....	133
REFERÊNCIAS.....	134
APÊNDICES	143
Apêndice A – Dados das integrais de colisão para determinar a difusividade por correlações empíricas.....	143
Apêndice B – Dados dos campos de velocidade extraídos dos trabalhos de Solari e Bell (1986).....	144
Apêndice C – Dados dos campos de velocidade média de líquido obtidos pela experimentação numérica.....	145

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A indústria alcooleira brasileira vem encarando grandes dificuldades para enfrentar um mercado cada vez mais competitivo. Além da grande concorrência com *players* mundiais, o setor depara-se com rígidas regulamentações ambientais, processo de produção desatualizado, endividamentos e poucos incentivos governamentais. Por outro lado, um dos grandes debates mundiais é a questão do uso de combustíveis fósseis e seus danos ao meio ambiente. Uma das principais formas de diminuir a emissão de gases poluentes é a utilização de biocombustíveis como substitutos aos combustíveis fósseis. Logo, com a necessidade de tornar a matriz energética global menos dependente do petróleo e seus derivados – fonte não renovável e ambientalmente agressiva –, o etanol ganha destaque como alternativa promissora e combustível renovável mais limpo.

Neste contexto, o desenvolvimento de processos químicos e equipamentos cada vez mais eficientes se faz essencial para o crescimento e desenvolvimento sustentável do setor. Segundo Sousa, Scur e Souza (2012), dentro da cadeia produtiva do etanol, o aprimoramento de processos é um desafio recorrente no setor e visa aumentar a produtividade das usinas, a qualidade do etanol e a eficiência de destilação.

A destilaria em usinas é composta por várias colunas de destilação, sendo na coluna de retificação onde os componentes da flegma – mistura impura de álcool e água – são separados para obter álcool hidratado como produto destilado. As colunas de destilação usuais são normalmente formadas por vários pratos devido à baixa eficiência de seus internos, aumentando os custos de fabricação do aparato.

O desempenho de torres de pratos está intimamente relacionado ao comportamento hidrodinâmico das fases no equipamento de separação. De acordo com Kister (1989), os seguintes fatores influenciam na performance do prato e conseqüentemente, no *layout* do prato: regime de escoamento, mecanismos de restrição de capacidade, corrosão, incrustação, faixa de operação, complexidade geométrica, entre outros. Portanto, o *design* de internos deve levar em consideração tais itens, principalmente o comportamento fluidodinâmico.

Por outro lado, o estudo da hidrodinâmica, assim como os fenômenos de transferência de massa e calor presentes nos internos de torres, é possível apenas com plantas pilotos ou onerosos estudos experimentais. Além disso, avaliar o comportamento dos fluidos em colunas industriais ainda representa um desafio em virtude das grandes dimensões destes equipamentos.

A fluidodinâmica computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*) vem sendo então amplamente empregada na análise e previsão do comportamento fluidodinâmico desse tipo de escoamento. De acordo com a definição de Versteeg e Malalasekera (1995), a fluidodinâmica computacional é a análise de sistemas que envolvem escoamento de fluido, transferência de calor e fenômenos associados, como reações químicas, por meio de simulações por computadores. Portanto, o uso do CFD permite obter distribuições de velocidade, pressão, temperatura e concentração na região do escoamento. Com esses dados, é possível otimizar projetos, reduzindo os custos operacionais e melhorando o desempenho do item desenhado (FORTUNA, 2000).

Deste modo, a modelagem por CFD apresenta-se como uma ferramenta promissora para suprir a carência no que tange os estudos do complexo comportamento fluidodinâmico em pratos de colunas de destilação. Como uma unidade típica de destilação opera com grandes volumes de misturas, tais estudos permitem uma melhor compreensão da hidrodinâmica e auxilia projetos de melhor desempenho, gerando benefícios consideráveis para a destilaria.

Neste contexto, foi proposta a simulação de um prato perfurado de coluna de destilação industrial usando ferramentas de CFD. O foco deu-se na indústria alcooleira em virtude da forte presença em território nacional, o que confere aplicabilidade aos estudos apresentados. As simulações realizadas permitiram avaliar os fenômenos do escoamento multifásico existente sob estes internos e apontar regiões que devem ser bem avaliadas, pois possivelmente afetam a obtenção de graus maiores de separação. Trata-se de uma importante etapa na busca de melhores dispositivos de separação e, conseqüentemente, geração de economia de processos/energia.

CAPÍTULO 2

OBJETIVOS DE ESTUDO

É notória a grande investida em avaliar apenas a hidrodinâmica do fluxo das fases em pratos de destilação, ausentando a transferência de massa e energia. Entretanto, muitos aspectos ainda são incipientes para uma compreensão satisfatória dos fenômenos inerentes ao complexo escoamento nestes dispositivos de separação. Outra lacuna de destaque se dá em relação à busca por melhores dispositivos de separação, que envoltos em interesses comerciais são de propriedades confidenciais e de difícil acesso.

Na busca de explorar os estudos já existentes e contribuir na investigação por melhorias industriais, este trabalho de pesquisa em nível de Mestrado tem como objetivo geral estudar os mecanismos de transferência de *momentum* e espécies químicas que ocorrem em um prato perfurado de uma coluna de destilação de dimensões industriais. As análises foram conduzidas mediante a aplicação das técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD).

2.1. Objetivos Específicos

Os objetivos específicos propostos nesta investigação foram:

- Desenvolver um modelo CFD para descrever a fluidodinâmica e a transferência da espécie mais volátil presente no escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de uma coluna de destilação;
- Utilizar o binário água-etanol como mistura a ser destilada;
- Avaliar a eficiência de separação - principal parâmetro para caracterizar um processo de separação - obtida no estágio de destilação sob análise;
- Indicar regiões que afetam negativamente a eficiência, onde alterações geométricas devem ser ponderadas visando ganhos no grau de separação, resultando em avanço tecnológico expressivo.

CAPÍTULO 3

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

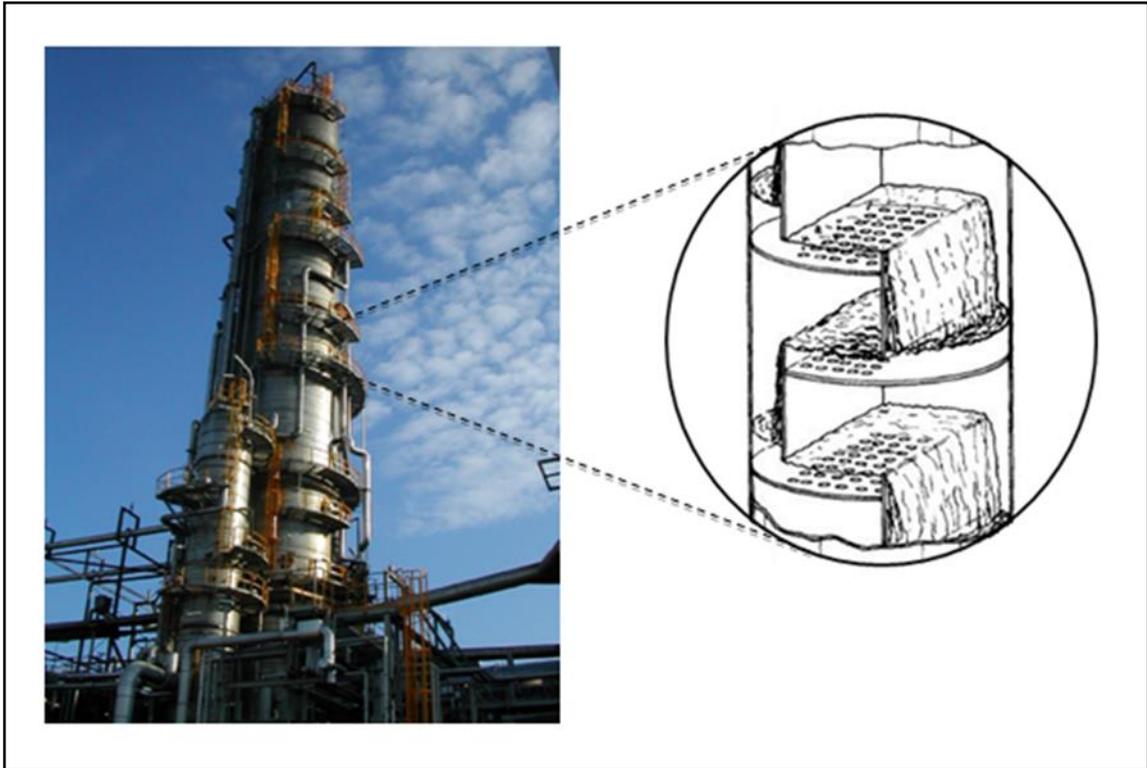
É apresentada uma descrição sobre destilação e o estado da arte relacionado à fluidodinâmica de escoamentos multifásicos, dando ênfase ao sistema gás-líquido encontrado em colunas de bolhas e pratos de destilação.

3.1. Destilação

A destilação é uma das mais antigas operações unitárias de separação física de uma mistura, utilizando a diferença de volatilidade existente entre os componentes como força motriz efetiva de separação. O calor e os internos do equipamento são os responsáveis por promoverem a separação (CALDAS et al., 2007). Além de ser empregada na produção de etanol, esta técnica também é muito utilizada na indústria de processos químicos, abrangendo cerca de 90 a 95% das separações (WANKAT, 2007). Em virtude de sua grande aplicabilidade, o conhecimento adequado dos fenômenos intrínsecos a esta técnica faz-se extremamente importante para fins de projeto e otimização de processos. Este procedimento de separação representa uma ampla porção do capital investido na indústria e o maior consumo de energia também (STICHLMAIR; FAIR, 1998). Entretanto, segundo Petlyuk (2004), a destilação é a operação de maior relação custo/benefício e por isso, pode ser aplicada para misturas com as mais diversas propriedades.

A coluna de destilação é o equipamento mais comum, sendo a coluna de pratos amplamente empregada em muitos processos industriais. É descrita basicamente como uma coluna cilíndrica estruturada internamente por pratos, de forma que nestes estágios os inventários de líquido e vapor fiquem em contato íntimo, transferindo calor e massa. Desta forma, o vapor, à medida que percorre o equipamento, enriquece-se em componentes voláteis, enquanto que os componentes pesados (menos voláteis) se encaminham para o líquido (CALDAS et al., 2007).

A **Erro! Fonte de referência não encontrada.** apresenta uma imagem de uma unidade de destilação típica dos processos de separação de misturas e o detalhe ilustra a operação desta coluna sob uma visão interna do equipamento.



Fonte: Adaptado de CARVALHO, 2013 e TPUB, 2013.

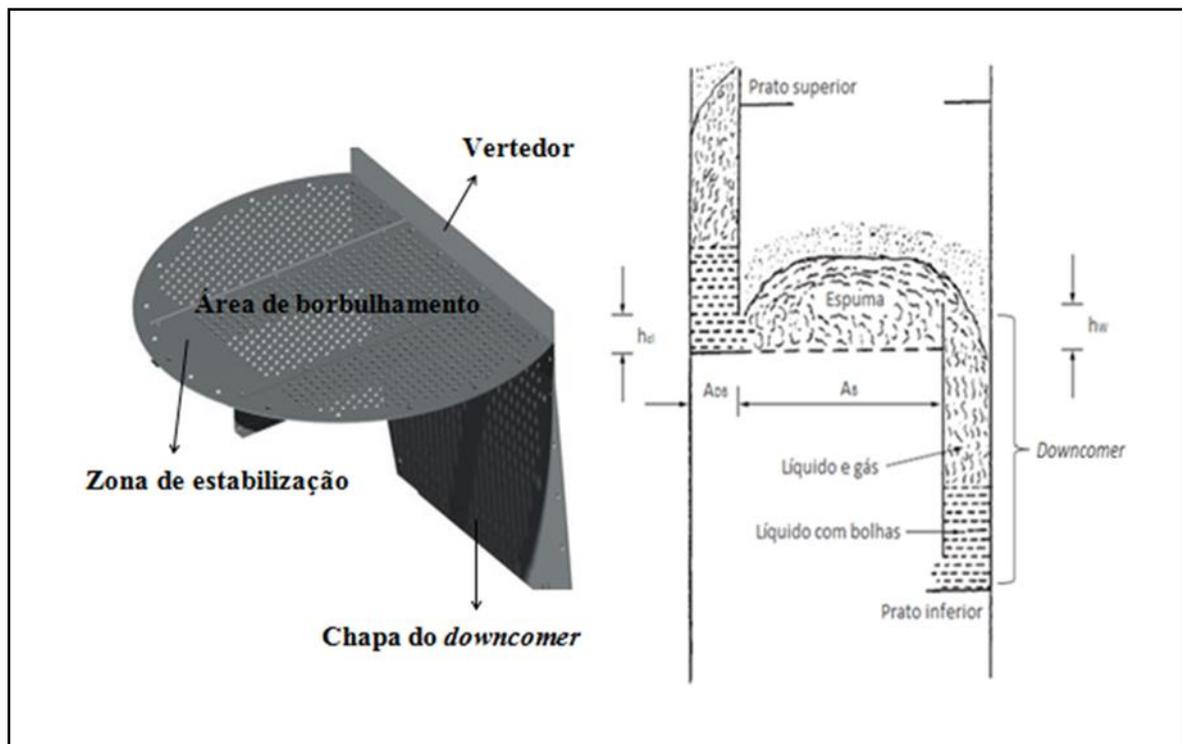
Segundo Caldas et al. (2007), estes equipamentos podem ser classificados quanto ao modo de fluxo das correntes em contracorrente ou fluxo cruzado, diferenciados entre si pelo uso do vertedor de descarga. O modo mais comum é o fluxo cruzado, o qual apresenta maior faixa de operação e maior transferência de massa e calor. A maioria dos modelos de pratos em corrente cruzada emprega perfurações para dispersar o vapor no líquido sobre o prato - constituindo a área de borbulhamento -, sendo os orifícios redondos ou valvulados.

O emprego de internos - dispositivos colocados no interior das torres de separação - tem por finalidade garantir o bom funcionamento das mesmas, aumentando a área efetiva de contato entre as fases líquida e vapor. Há inúmeros tipos de internos que vão desde simples pratos perfurados até pratos valvulados ou recheios estruturados. O exemplar de interno de

torres mais simples e mais comum é o prato perfurado, em virtude da facilidade de fabricação, versatilidade e baixo custo. Segundo Barros et al. (1994), um prato perfurado pode operar com um fluxo cruzado a uma pequena taxa de escoamento de vapor até o ponto em que o líquido comece a drenar através dos orifícios e a dispersão do gás fica inadequada para apresentar uma boa eficiência. Pratos são geralmente empregados para colunas de grandes diâmetros (por exemplo, maiores que um metro) e vários *downcomers* (regiões que permitem a descida do líquido de um prato superior ao inferior) são às vezes necessários.

A Figura 3.1 apresenta um típico prato perfurado e um esboço do comportamento dos fluidos durante a operação.

Figura 3.1 - Características de um prato perfurado e do escoamento neste interno.



Fonte: Adaptado de SULZER, 2013 e GREEN E PERRY, 2008.

Observando a Figura 3.1 é possível perceber que o líquido, ao entrar no prato, cruza a zona de estabilização de área A_{DB} , que tem como finalidade abrandar o fluxo líquido proveniente do prato superior e uniformizar o escoamento pela área de borbulhamento (A_B) – chamada também de área ativa, onde há o encontro com a fase gasosa. Em seguida o líquido transpõe o vertedor de altura h_w e atinge a região do *downcomer*, por onde o líquido flui em

direção ao prato inferior. Como parte do gás é arrastada junto com o líquido durante a descida, formando uma mistura de líquido com gás e líquido com bolhas, o *downcomer* tem como principal função garantir que a carga gasosa arrastada seja recuperada e não atinja o estágio de baixo. A altura clara de líquido (h_{cl}), que representa a altura de líquido desareado no prato, ou seja, a altura que a carga líquida ocuparia se não houvesse a injeção de gás, trata-se de um parâmetro hidráulico muito utilizado no projeto de pratos e na validação de estudos numéricos.

A principal forma de avaliar a qualidade de um processo de destilação dá-se através da capacidade de extrair o componente mais volátil. Sendo assim, aparece a designação de eficiência de separação. O conceito de eficiência de prato, o qual leva em conta a não idealidade existente no estágio, é um parâmetro decisivo no projeto de internos. O número de pratos ideais é igual ao número de estágios reais multiplicado pela eficiência (KISTER, 1992). Segundo Soares (2005), a eficiência de pratos bem projetados varia de 40 a 80%, sendo o valor mais elevado atingido em torres de menor diâmetro devido à melhor homogeneidade da mistura. A eficiência de prato de Murphree (MURPHREE, 1925) é definida pela comparação entre um prato real e um prato ideal mediante o grau de contato entre o líquido e o vapor, admitindo-se que o líquido esteja completamente homogeneizado sobre o prato. Trata-se da definição mais bem aceita e difundida na literatura.

Entretanto, para ampliar a abrangência da equação de Murphree, os autores West, Gilbert e Shimizu (1952) sugeriram o conceito de eficiência local, servindo como base para minimizar as limitações da equação de Murphree. Este conceito aplica-se para um ponto particular do prato com uma determinada composição líquida.

Em termos gerais, a eficiência depende da transferência de massa entre a fase líquida e a fase vapor, sendo que o aumento neste parâmetro tem sido obtido com longos períodos de contato (SAGHATOLESLAMI et al., 2011).

Barros (1997) abordou amplamente o conceito de eficiência e suas mais variadas formas. O autor enumera diversas variáveis que afetam a eficiência de destilação, as quais estão sumarizadas no Quadro 3.1.

Portanto, fica evidente que entre as diversas influências observadas, diversas variáveis que envolvem a geometria (variáveis do projeto do prato e variáveis de coluna) destacam-se significativamente na busca por pratos mais eficientes.

Quadro 3.1 – Variáveis que afetam a eficiência de separação em pratos de destilação.

Tipo de Variável			
Variáveis de Operação	Variáveis do Sistema	Variáveis do Projeto do Prato	Variáveis da Coluna
Temperatura	Densidade do Líquido	Área Livre do Prato	Espaçamento entre Pratos
Pressão	Viscosidade do Líquido	Diâmetro da Perfuração	Área do Vertedor
Razão do Fluxo, L/V	Tensões Superficiais do Líquido (na temp. bolha)	Altura do Vertedor	Arranjo do Vertedor
Razão do Fluxo Vapor	Densidade do Vapor	Altura da Represa	
Razão de Refluxo	Viscosidade do Vapor	Distância da Represa em Relação às Perfurações	
	Volatilidades Relativas dos Componentes	Modelo do Fluxo	

Fonte: Adaptado de BARROS, 1997.

3.2. Colunas de Bolhas

Uma grande gama de material bibliográfico sobre escoamentos líquido-gás está disponível na literatura, principalmente no que tange às colunas de bolhas, apresentado na Figura 3.2. As características fenomenológicas presentes em colunas de bolhas se assemelham significativamente àquelas presentes em pratos perfurados de colunas de destilação. Por este motivo, apresenta-se uma revisão introdutória que abrange os principais trabalhos que aplicaram o CFD na modelagem de colunas de bolhas. Os estudos de sistemas multifásicos nestes equipamentos desenvolveram-se sinergicamente com a modelagem de pratos de destilação.

As colunas de bolhas são comumente utilizadas em indústrias bioquímicas e petroquímicas para um importante número de processos. O seu funcionamento básico é dado pela injeção de um gás na base da coluna em um meio líquido através de distribuidores, os quais podem ser do tipo prato perfurado. A fluidodinâmica envolvida nestas colunas é complicada e os modelos mais complexos que descrevem o comportamento do escoamento são os que aplicam as técnicas da fluidodinâmica computacional.

Delnoij, Kuipers e van Swaaij (1999) desenvolveram um modelo CFD transiente 3D com abordagem Euleriana-Lagrangeana para uma coluna de bolhas. A hidrodinâmica da fase líquida foi descrita pelas equações de conservação de massa e quantidade de movimento para escoamento laminar, enquanto que o acoplamento entre as fases deu-se pela transferência de *momentum* em duas vias, isto é, do líquido para as bolhas e das bolhas para o líquido. Os autores observaram a complexa natureza do comportamento bifásico na coluna, significativamente tridimensional, o que se tornou ainda mais evidente com o aumento do *aspect ratio*, revelando estruturas de vórtices.

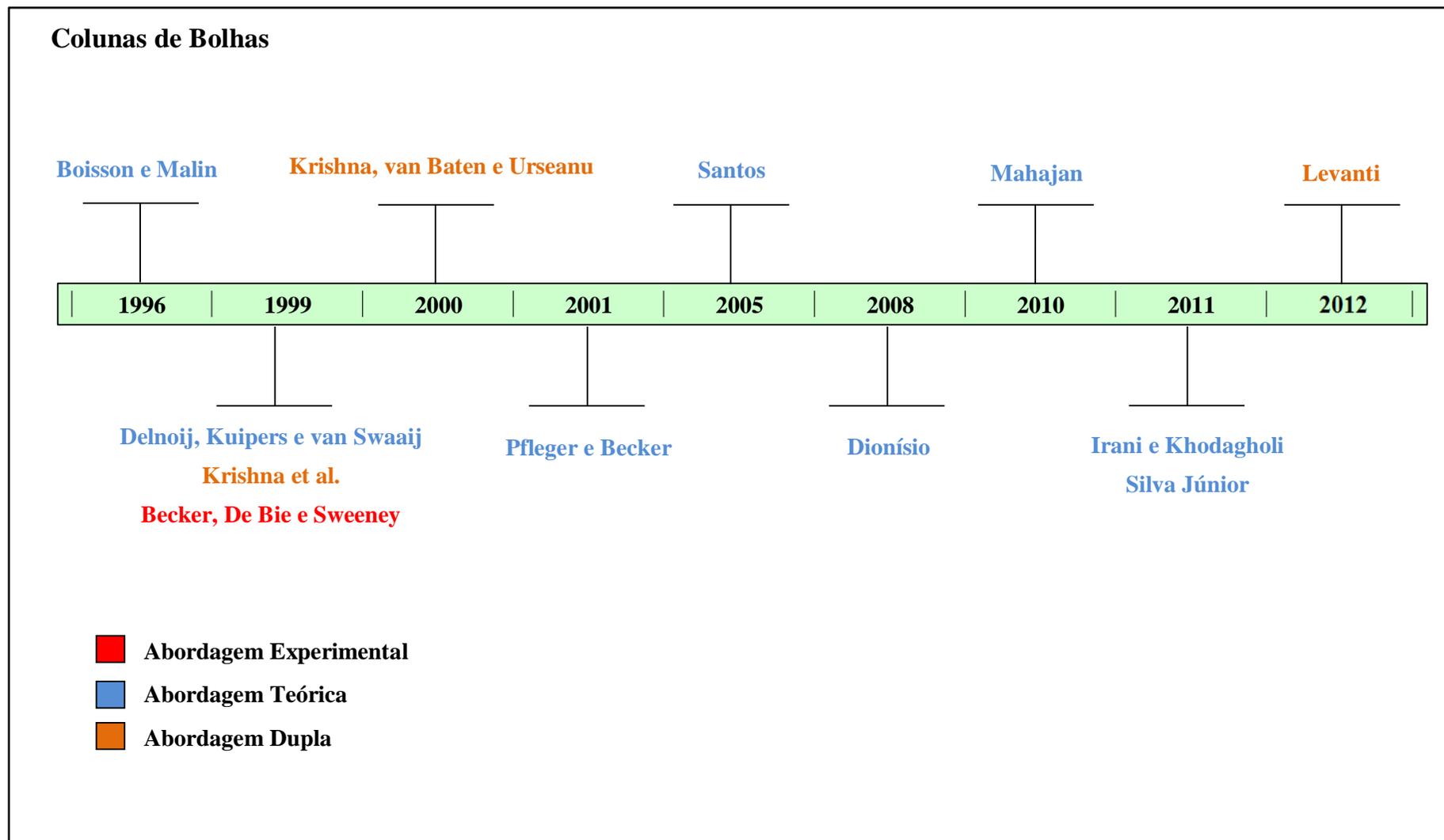
Já Pflieger e Becker (2001) utilizaram uma abordagem Euleriana-Euleriana para descrever o comportamento hidrodinâmico de uma coluna de bolhas. O modelo de turbulência utilizado foi o $k - \varepsilon$ padrão, negligenciando-se os termos de coalescência e quebra de bolhas. Entretanto, o coeficiente de arraste e o diâmetro da bolha foram considerados constantes e iguais a 0,44 e 4 mm, respectivamente. Os autores concluíram que a adição de turbulência gerada pela interação gás-líquido ao modelo proporciona melhoria aos resultados dos perfis de velocidades axial e radial, além de prever o comportamento das frações locais do gás e do líquido com bastante precisão.

Na mesma linha de pesquisa, Dionísio (2008) definiu o coeficiente de arraste pelo modelo Ishii-Zuber, sendo a força de arraste a única força interfacial considerada. As conclusões apontam que a abordagem Euleriana-Euleriana apresenta uma boa aproximação para os sistemas estudados e a metodologia utilizada é adequada e capaz de prever comportamentos nos equipamentos em questão.

Através de um modelo de três fases: fase líquida (contínua) e fase gás dispersa em pequenas e grandes bolhas, Krishna et al. (1999a) e Krishna, van Baten e Urseanu (2000) avaliaram a fluidodinâmica por experimentações físicas e numéricas. A interação entre as fases foi tomada em termos de força interfacial de arraste, na qual a velocidade de subida das

bolhas foi definida de acordo com o tamanho. As previsões mostraram concordância quando comparadas aos dados experimentais.

Figura 3.2 - Linha do tempo do desenvolvimento dos trabalhos relativos ao estudo de colunas de bolhas.



Fonte: Acervo pessoal.

Boisson e Malin (1996) incorporaram modelos interfaciais para a transferência de *momentum* e a adição dos efeitos da força de arraste, de pressão, de ascensão e de aceleração de massa aparente na fronteira da fase contínua e nas imediações da fase dispersa; através de suas equações constitutivas. O modelo de turbulência utilizado foi o $k-\varepsilon$ modificado, aplicado para considerar a produção induzida de bolhas. Os autores concluíram que as forças adicionais permitem a corroboração do modelo por comparação com os dados experimentais de forma satisfatória.

Santos (2005) verificou a influência dos modelos de Grace, Ishii-Zuber e Schiller-Naumann. O modelo de Ishii-Zuber promoveu maior arraste do que o modelo de Grace, que por sua vez, maior do que o de Schiller-Naumann. Sendo que os dois modelos que contemplam a deformação das bolhas (Grace e Ishii-Zuber) demonstraram melhor concordância com os dados experimentais.

Diferentemente de muitos trabalhos da literatura que desconsideraram algumas forças interfaciais e avaliaram apenas um modelo de turbulência, Silva Júnior (2011) elaborou um modelo CFD tridimensional e fechou-o com a análise de quatro modelos de turbulência distintos para a fase contínua ($k-\varepsilon$, RNG $k-\varepsilon$, LRR-RSM e SSG-RSM), bem como diferentes correlações para a verificação do efeito das forças interfaciais envolvidas no escoamento. Os resultados indicam que as forças de sustentação e dispersão turbulenta adicionadas ao arraste mostraram efeitos significativos nos padrões fluidodinâmicos, enquanto que a força de massa virtual pôde ser negligenciada. Além disso, o autor verificou que alguns modelos de turbulência são melhores para regiões distintas da coluna, entretanto o modelo $k-\varepsilon$ conseguiu prever o comportamento da velocidade axial média do líquido.

Levanti (2013) também se destaca pelo emprego de dois modelos de turbulência distintos: o SST e o LES, além da consideração das forças de arraste, sustentação e massa virtual. Destas forças, a massa virtual não se mostrou substancial. O modelo LES, segundo o autor, levou a uma melhor concordância em relação ao experimental, enquanto que o SST não conseguiu prever boa parte das complexas características turbulentas na coluna.

Incorporando mais um mecanismo de transferência, Mahajan (2010) utilizou um modelo de espécies químicas para calcular a transferência de oxigênio do gás para a água. O autor acredita que a hipótese de taxa constante de transferência de massa não seja totalmente adequada devido às discrepâncias observadas entre os resultados numéricos e experimentais da literatura.

3.3. Pratos de Destilação

Nesta seção são apresentados os principais estudos sobre o escoamento presente em pratos de destilação, com maior enfoque aos pratos perfurados. O panorama geral é apresentado na Figura 3.3, na qual se observa a evolução das pesquisas. É importante ressaltar que o progresso da informática e a melhoria dos recursos computacionais possibilitaram um aumento significativo na gama de trabalhos publicados e na complexidade dos mesmos.

3.3.1. Investigações Experimentais

Inicialmente, introduzem-se algumas investigações experimentais realizadas em pratos de destilação. Destes trabalhos, desenvolveram-se expressões empíricas que correlacionam os fundamentais parâmetros do escoamento aos sistemas químicos e às condições operacionais da coluna.

Colwell (1981) apresentou uma correlação semiempírica para prever a altura de líquido claro e outra para a altura da dispersão em pratos perfurados. O autor concluiu que os erros absolutos da equação de altura de líquido claro para pratos de secção retangular eram de 7%, enquanto que para a equação de fração volumétrica eram de 8%. No entanto, as equações não apresentaram bons resultados para pratos perfurados de secção cilíndrica em função da contração do comprimento da represa em relação à largura do prato e seus efeitos no perfil de velocidade na entrada de líquido que, por sua vez, promoveram aumento na altura de líquido.

Já Bennett, Agrawal e Cook (1983) desenvolveram uma correlação de perda de carga para colunas de pratos perfurados e outra de densidade relativa efetiva da espuma, utilizada amplamente para estimar a retenção volumétrica média de líquido na dispersão efetiva (*hold-up*). O diferencial dá-se pelo fato da equação proposta para perda de carga não demandar medidas experimentais de altura de dispersão, e assim, não introduzir os erros experimentais que, por serem obtidos por inspeção visual, seriam grandes. É então definida a fração volumétrica média de líquido na dispersão como uma função de grupos adimensionais que levam em consideração as condições operacionais e geométricas, além das propriedades físicas do sistema. Concluíram que a correlação proposta descreve a perda de carga em um prato perfurado de destilação com maior eficácia quando comparados com a correlação de Colwell (1981), com erros absolutos duas vezes menores.

Focados também na hidrodinâmica do prato e buscando determinar o desempenho destes, Bell e Solari (1974) estudaram o efeito da não uniformidade na distribuição dos vetores de velocidade e o efeito dos fluxos retrógrados na eficiência de Murphree. O estudo, conduzido em geometria retangular, mostrou que a presença de ambos os fenômenos ou cada um por si só, podem inferir na redução da eficiência de separação nos pratos. Foram estudados os perfis parabólico invertido, linear e parabólico. Os resultados foram comparados com o método do AIChE (*American Institute of Chemical Engineers*) e verificou-se expressivos desvios em relação a estes. Em trabalho posterior, Solari e Bell (1986) dotados de um simulador experimental de cinco pratos com dimensões de 1,22 m de diâmetro, utilizaram técnicas de fluorimetria para determinar o tempo de residência e a distribuição das velocidades do líquido nestes pratos de escala comercial. Os autores exploraram também o mesmo procedimento realizado no trabalho anterior e analisaram a eficiência do prato através da distribuição de velocidades do líquido. Este estudo fornece um conjunto de dados experimentais muito utilizados por inúmeros outros autores como verificação de seus modelos teóricos.

Seguindo a evolução nas pesquisas, Kaeser e Pritchard (2006) utilizaram um prato não adiabático e determinaram experimentalmente a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) e também os coeficientes de transferência de calor. O artigo é focado no impacto da transferência de calor no desempenho do prato perfurado, e para isso variaram o fluxo de calor e a carga de vapor. A transferência de aproximadamente 40 kW m^{-2} da área ativa do prato levou a um aumento do E_{MV} em 7%, independentemente da taxa de gás. De forma analogamente contrária, uma remoção de 90 kW m^{-2} causou uma redução entre 3 a 18%, o qual foi diretamente relacionado a carga de vapor. Segundo os autores, a alteração da eficiência é atribuída à mudança na altura de espuma.

Visando avaliar melhorias geométricas nos pratos, Yanagi e Sakata (1982) obtiveram dados experimentais - pelo FRI (*Fractionation Research, Inc.*) - de capacidade, queda de pressão, eficiência de prato e arrastamento em uma coluna de 1,2 m de diâmetro com 14% de área perfurada. O artigo ressalta que o prato com 14% de área perfurada demonstrou um pequeno aumento de 5 a 10% na capacidade de vapor em relação ao prato de 8% utilizado em trabalho anterior dos autores (SAKATA; YANAGI, 1979¹ apud YANAGI; SAKATA, 1982). Adicionalmente, as perdas de carga foram menores - na ordem de 1 a 3 kPa

¹ SAKATA, M.; YANAGI, T. Performance of a commercial scale sieve tray. *ICHEME Symp. Ser.*, n. 56, v. 1, p. 3.2-21, 1979.

- e o carregamento também foi menor para os pratos de área de maior orifício. Em relação à eficiência, esta foi menor em aproximadamente 10% para o prato de 14% de área perfurada.

Muitos trabalhos buscaram estudar principalmente a fluidodinâmica nos pratos perfurados e alguns os efeitos de transferência de massa e energia por meio de experimentos. Trata-se de metodologias bem realísticas, no entanto, em virtude da dificuldade na construção de modelos físicos, na singularidade da validade intrínseca as condições utilizadas (dificuldades no *scale-up*), no dispêndio de tempo e financeiro requeridos, juntamente com o fato do desenvolvimento de computadores cada vez mais potentes; o estudo de pratos de destilação passou para níveis maiores de complexidade, aplicando principalmente as técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD).

3.3.2. Experimentações por Fluidodinâmica Computacional

Esta seção apresenta os principais trabalhos numéricos sobre o comportamento fenomenológico em pratos perfurados de destilação, destacando-se o uso das técnicas de CFD no aumento da complexidade dos modelos.

O Quadro 3.2 traz alguns dos principais trabalhos em CFD de pratos perfurados de coluna de destilação, indicando seus autores, ano de publicação do trabalho e algumas características importantes presentes nos modelos formulados. Enquanto que o Quadro 3.3 aborda os aspectos geométricos dos pratos e as substâncias utilizadas por cada autor e colaboradores em seus respectivos trabalhos.

Liu et al. (2000) previram o escoamento turbulento do líquido em um prato de destilação através de um modelo com enfoque Euleriano, 2D e monofásico. Entretanto, a variação da direção do fluxo de gás ao longo da altura de dispersão foi ignorada. A força resistiva gerada pelo borbulhamento do gás na fase líquida foi considerada através de uma correlação empírica, assim como a altura de líquido sobre o prato e a perda de carga. O modelo de turbulência utilizado foi o $k - \varepsilon$ padrão incrementado por um termo de geração de turbulência proveniente do borbulhamento. Os autores concluíram que os resultados foram representativos para o escoamento do líquido em um prato de destilação, especialmente em casos onde se verifica a existência de áreas de recirculação.

Mehta, Chuang e Nandakumar (1998) também analisaram apenas o fluxo da fase líquida em prato perfurado. As interações com o vapor foram consideradas através do coeficiente de transferência de *momentum* pela interface, o qual foi determinado por correlações empíricas. O avanço na modelagem deu-se na adoção de um modelo tridimensional. Ao invés de utilizarem modelos convencionais de turbulência, os autores aplicaram o número de turbulência de Schmidt e o modelo de previsão do coeficiente de difusão proposto por Zuiderweg (1982). Observaram variações significativas no fluxo através da área ativa do prato assim como na direção vertical através da espuma e os resultados também sugerem efeitos consideráveis do fluxo de gás no fluxo de líquido. Portanto, um modelo monofásico não é totalmente adequado para estudos mais complexos de pratos de destilação.

Diferentemente dos trabalhos anteriores, Fischer e Quarini (1998) assumiram um coeficiente de arraste (C_D) constante de 0,44 - adequado para escoamentos borbulhantes uniformes - e concluíram que este valor não é adequado para pratos operando no regime de espuma ou *spray*. Isto mostra o porquê o coeficiente de arraste é um dos parâmetros mais dúbios e debatidos na modelagem de pratos de destilação.

Assim, contornando as dificuldades observadas anteriormente, Krishna et al. (1999b) e van Baten e Krishna (2000) desenvolveram um modelo CFD transiente em três dimensões e de duas equações, sendo o coeficiente de transferência de *momentum* na interface estimado com base na correlação de Krishna et al. (1999c), enquanto que a correlação de Bennett, Agrawal e Cook (1983) foi utilizada para a fração volumétrica média de gás. Para a fase contínua, a contribuição turbulenta foi avaliada através do modelo $k - \varepsilon$ padrão. Para a fase dispersa gasosa, nenhum modelo de turbulência foi utilizado. Evidenciaram a natureza totalmente caótica e tridimensional da hidrodinâmica, com zonas de recirculação de líquido tanto na direção horizontal quanto na vertical. Entretanto, Krishna et al. (1999b) verificaram uma tendência do modelo CFD em superestimar as alturas de líquido claro. Tal discrepância foi relacionada à correlação de Bennett, Agrawal e Cook (1983), utilizada para estimar a velocidade de escorregamento aparente das fases, uma vez que essa correlação é apropriada apenas para sistemas sem qualquer impureza inibidora de coalescência ou agente ativos de superfície. O uso da correlação de Krishna et al. (1999c) foi um diferencial deste trabalho, adotando-se tal abordagem nesta dissertação.

Quadro 3.2 - Relação de pesquisas em pratos perfurados de coluna de destilação que aplicaram a metodologia do CFD.

Autor (es)	Ano	Regime	Modelo de Equações		Geometria		Equações de Conservação			Turbulência	
			1 Equação	2 Equações	2D	3D	Quantidade de Movimento	Energia	Espécies Químicas	Fase Contínua	Fase Dispersa
Mehta, Chuang e Nandakumar	1998	Estacionário	X			X	X			Nº de Schmidt e coeficiente de difusão	
Yu et al.	1999	Estacionário		X	X		X			$k - \varepsilon$	-
Krishna et al.	1999b	Transiente		X		X	X			$k - \varepsilon$	-
Liu et al.	2000	Estacionário	X		X		X			$k - \varepsilon$	-
van Baten e Krishna	2000	Transiente		X		X	X			$k - \varepsilon$	-
Gesit, Nandakumar e Chuang	2003	Estacionário e Transiente		X		X	X			$k - \varepsilon$	-
Wang et al.	2004	Estacionário	X			X	X		X	$k - \varepsilon$	-
Rahimi et al.	2006a	Estacionário		X		X	X	X	X	$k - \varepsilon$	-
	2006b			X		X	X	X	X	$k - \varepsilon$	-
Noriler et al.	2008	Transiente		X		X	X	X		$k - \varepsilon$	-
Teleken et al.	2009	Transiente		X		X	X			$k - \varepsilon$	$k - \varepsilon$
	2010			X		X	X	X	X	$k - \varepsilon$	-
Noriler et al.	2010	Transiente		X		X	X	X	X	$k - \varepsilon$	-
Malvin, Chan e Lau	2010	Transiente		X		X	X			LES	
Rahimi e Karimi	2010	Transiente		X		X	X			$k - \varepsilon$	-
Rahimi, Ameri e Setoodeh	2011	Transiente		X		X	X			$k - \varepsilon$	-
Justi	2012	Estacionário		X		X	X			$k - \varepsilon$	*
Rahimi, Sotoodeh e Bahramifar	2012	Estacionário		X		X	X		X	$k - \varepsilon$	-
Zarei, Hosseini e Rahimi	2013a	Transiente		X		X	X			$k - \varepsilon$	$k - \varepsilon$
	2013b			X		X	X			$k - \varepsilon$	$k - \varepsilon$

Fonte: Acervo pessoal.

* Ambas as fases foram consideradas como contínuas pelo autor.

Quadro 3.3 – Características do prato e do sistema utilizados nos principais trabalhos da literatura.

Autor (es)	Ano	Tipo de Prato	Dimensões (m)	Simetria	Área Perfurada do Prato (m ²)	Altura do Vertedor (m)	Downcomer		Sistema
							Entrada	Saída	
Mehta, Chuang e Nandakumar	1998	Circular	Ø 1,213	X	Não Disponível	0,05		X	Água-Ar
Yu et al.	1999	Circular	Ø 1,2	X	0,04464 **	0,025 e 0,05			Água-Ar
Krishna et al.	1999b	Retangular	0,22 x 0,39		0,00540	0,06 a 0,10			Água-Ar
Liu et al.	2000	Circular	Ø 1,2	X	0,04464 **	0,025 e 0,05			Água-Ar
van Baten e Krishna	2000	Circular	Ø 0,3		0,00414	0,06 a 0,10			Água-Ar
Gesit, Nandakumar e Chuang	2003	Circular	Ø 1,213	X	0,05085	0,05		X	Água-Ar
Wang et al.	2004	Circular	Ø 1,22	X	Não Disponível	0,05			Água-Ar
Rahimi et al.	2006a	Circular e Retangular	0,083 x 0,991 e Ø 1,2	Apenas prato circular	Retangular: 0,0756**	Retangular: 0,025		X	Metanol-nPropanol e Etanol-nPropanol
	2006b				Circular: 0,118	Circular: 0,0254		X	
Noriler et al.	2008	Circular	Ø 0,3		0,00414	0,08			Etanol-Água
Teleken et al.	2009	Circular	Ø 0,21		0,00133	0,03	Pratos consecutivos		Água-Ar
	2010								Etanol-Água
Noriler et al.	2010	Circular	Ø 0,35		0,00414	0,06			Etanol-Água
Malvin, Chan e Lau	2010	Circular	Ø 1,213	X	0,04434	0,05		X	Água-Ar
Rahimi e Karimi	2010								
Rahimi, Ameri e Setoodeh	2011	Circular	Ø 1,213	X	0,04560	0,05	X	X	Água-Ar
Justi	2012	Circular	Ø 1,213	X	0,04434 e 0,04206	0,05		X	Água-Ar
Rahimi, Sotoodeh e Bahramifar	2012	Retangular	0,083 x 0,991		0,00583 e 0,00627	0,025		X	Metanol-nPropanol
Zarei, Hosseini e Rahimi	2013a	Retangular	0,63 x 1,2	X	0,04155	0,05		X	Água-Ar
	2013b	Circular	Ø 1,22		0,07094				

Fonte: Acervo pessoal.

** Inferido pelos dados extraídos do trabalho.

Gesit, Nandakumar e Chuang (2003) apresentam uma modelagem em CFD semelhante aos últimos autores, porém avaliaram dois perfis de velocidade de entrada do líquido, sendo os perfis uniforme e parabólico. Para $Fs = 1,015$, os resultados dos dois perfis são comparáveis entre si, e o perfil adotado pode ter efeitos significativos na evolução do fluxo de líquido pelo prato.

A contribuição dos trabalhos de Rahimi, Ameri e Setoodeh (2011) deram-se em relação ao efeito da presença do *downcomer* de entrada do prato nos parâmetros hidrodinâmicos através de análises CFD, de modo a não ser necessário adotar um perfil de líquido na entrada do prato em análise. Com a mesma modelagem matemática adotada pelos últimos trabalhos, os autores concluíram que a maioria dos parâmetros analisados foi mais condizente com os dados experimentais de Solari e Bell (1986) do que trabalhos de outros autores que não consideraram o efeito do *downcomer* de entrada, caso de Gesit, Nandakumar e Chuang (2003). Mais uma vez, observaram-se zonas de líquido estagnado próximas à parede da coluna.

Sem grandes modificações na modelagem geral, Zarei, Hosseini e Rahimi (2013a) elaboraram um modelo tridimensional de um domínio formado por duas regiões, considerando simetria de um prato retangular com espessura e *downcomer* de saída. A principal diferença é que no espaço superior foi utilizado a correlação de arraste segundo Krishna et al. (1999c), enquanto na parte inferior foi utilizado o modelo de arraste de Grace. A grande contribuição desse trabalho foi a possibilidade de estudar o fenômeno de gotejamento, o qual é prejudicial à eficiência e pode ser ampliado se as condições de operação da coluna forem mal especificadas. Os resultados demonstraram boa compatibilidade com os dados experimentais, principalmente em relação ao parâmetro altura de líquido claro. Os autores observaram que o gotejamento é um fenômeno não uniforme ao longo do prato, entretanto o CFD demonstrou potencial para avaliar tal ocorrência.

Com a necessidade de aprofundar as pesquisas sobre os fenômenos que podem ocorrer nos pratos de destilação, Zarei, Hosseini e Rahimi (2013b) ampliaram os estudos sobre o gotejamento em pratos de destilação. Partiram para análises em pratos perfurados circulares através de abordagens teórica e experimental. Os resultados numéricos demonstraram compatibilidade no quesito queda de pressão e também em relação ao gotejamento do líquido em posições distintas ao longo do prato. Os autores elucidaram a

necessidade de uma investigação mais profunda sobre o tema, que ainda é incipiente e recente.

Os trabalhos foram ficando cada vez mais robustos e completos, inserindo-se os mecanismos de transferência de massa e/ou calor, os quais possuem parcela significativa no comportamento do escoamento sobre o prato de destilação e principalmente na eficiência de separação. Apesar de ainda incipientes, os estudos com os fenômenos de transferência de espécies químicas e calor possibilitaram a avaliação do desempenho dos pratos de destilação através da quantificação da eficiência de separação.

Kler e Lavin (1988) formularam um modelo matemático constituído pelas equações de continuidade, quantidade de movimento e concentração de espécies. O modelo tem capacidade de avaliar o desempenho da transferência de massa baseando-se em uma eficiência pontual assumida. Concluíram que a diminuição do comprimento do vertedor no prato resulta na redução da eficiência pontual calculada, em virtude da ampliação das áreas de líquido estagnado.

Wang et al. (2004) apresentaram um modelo fluidodinâmico computacional tridimensional para descrever o fluxo e a distribuição de concentrações da fase líquida em um prato perfurado circular de destilação. Na modelagem, os autores aplicaram a correlação de Colwell (1981) para avaliar a altura de espuma, de líquido claro e coeficiente de arraste. Quanto a transferência de massa, o termo fonte de transferência de massa foi deduzido a partir de Wang (2003)² apud Wang et al. (2004); aplicando-se a relação de Higbie (1935)³ apud Rahimi et al. (2006a) para relacionar a área interfacial com os parâmetros hidrodinâmicos. O coeficiente de transferência de massa do líquido foi estimado pela fórmula empírica de Lockett (1986) para pratos valvulados. Os autores observaram claramente a recirculação de líquido próxima às paredes do prato.

Noriler et al. (2008) objetivaram a aplicação de um modelo CFD para prever os campos de fração volumétrica, velocidade, pressão e temperatura. A transferência de *momentum* entre as fases deu-se pela correlação de Krishna et al. (1999c) para o coeficiente de arraste e correlação de Bennett, Agrawal e Cook (1983) para a fração volumétrica média

² WANG, X. L. **Three-dimension of fluid field and mass transfer simulation on distillation trays**. Ph.D. Dissertation, Tianjin University, Tianjin, China, 2003.

³ HIGBIE, R. The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure. **Transactions AIChE**, v. 31, p. 365-389, 1935.

de gás; enquanto que para a transferência de energia aplicou-se a definição do coeficiente global de transferência de calor segundo Bird, Stewart e Lighfoot (1960). Também determinaram o número de Nusselt pela equação de Ranz e Marshall. Observaram o comportamento caótico das propriedades, o qual foi intensificado com o aumento da velocidade superficial do gás. O estudo aponta o modelo como adequado para descrever o comportamento dinâmico e térmico em prato de destilação.

Rahimi et al. (2006a) e Rahimi et al. (2006b) trabalharam conjuntamente e obtiveram um modelo CFD para prever a hidrodinâmica, transferência de calor e massa em pratos de destilação perfurados. O modelo de Higbie (1935)³ apud Rahimi et al. (2006a) foi utilizado para estimar os coeficientes de transferência de massa para cada fase; enquanto que a constante termodinâmica do equilíbrio (K) foi obtida através de dados experimentais da literatura. Os resultados obtidos no estudo demonstraram boa concordância com os dados experimentais e apontaram o CFD como abordagem promissora para cálculo de eficiência em pratos de destilação. Estes trabalhos foram a base para o desenvolvimento da metodologia de transporte de espécies químicas adotadas nesta dissertação, sendo adotado o modelo de Higbie para estimar os coeficientes de transferência de massa.

Preocupados com a mistura não perfeita em pratos, Noriler et al. (2010) aplicaram um modelo CFD mais sofisticado e com algumas modificações em relação ao trabalho anterior (NORILER et al., 2008). Para a transferência de energia entre as fases, utilizaram uma correlação empírica para determinar a área interfacial por unidade de volume. Consideraram a transferência líquida de massa entre as fases desprezível, considerando-se apenas a transferência de espécies químicas pelo modelo de duas resistências. Para isso, aplicaram a correlação empírica de Zuideweg (1982) para determinar o coeficiente global de transferência de massa. A constante termodinâmica foi calculada empregando-se a abordagem $\gamma - \Phi$, utilizando o método UNIQUAC para estimar os coeficientes de atividade e a equação de Antoine para estimar a pressão de vapor. Considerou-se a fase gasosa como ideal. Os autores ainda calcularam a eficiência global do prato baseando-se na eficiência de Murphree. Noriler et al. (2010) concluíram que o modelo em CFD apresentou concordância com os dados experimentais, tendo a parte hidrodinâmica validada. A modelagem do autor é o ponto principal para os estudos de hidrodinâmica e transferência de espécies químicas nesta dissertação, sendo adotados o modelo de duas resistências e a hipótese de nula transferência líquida de massa.

Assim, foi possível traçar as estratégias de modelagem a ser empregadas; tendo-se definido o fechamento das equações de transferência de *momentum* e espécies químicas através da definição do tratamento do arraste e o do transporte mássico entre as fases. Por fim, destaca-se os poucos estudos e trabalhos que buscaram de alguma forma, alterar a geometria dos pratos perfurados de modo a contornar as regiões de baixa eficiência e assim, otimizar o seu desempenho no processo de separação dos componentes de uma mistura.

Em virtude das limitações, em suma hidrodinâmicas, apresentadas pelos pratos perfurados, Lavin e Urua (1992) desenvolveram um prato em metal expandido (*expanded metal tray*) no qual os orifícios são uniformes ranhuras não circulares, as quais podem ser configuradas para direcionar o fluxo de vapor. Demonstraram que este aparato significou uma melhoria no fluxo e na perda de carga, o que proporciona o uso deste interno para amplas opções de operações de pratos perfurados.

Wijn (1996) destacou as várias configurações de *downcomers* e avaliou o efeito do *layout* deste tubo de descida na eficiência das bandejas. O autor fez simulações que demonstraram importantes diferenças nos valores da eficiência para os exemplos estudados e destacou o efeito prejudicial das zonas de estagnação. Por uma abordagem experimental, Zhang et al. (1998) utilizaram termopares e sondas de condutividade para avaliar o grau de mistura no *downcomer* e o efeito sobre a eficiência. Os resultados sugeriram que os mais importantes fatores que afetam a extensão da mistura são: a vazão de líquido, o fator F_S de vapor e a altura da barreira do prato.

López e Castells (1999) estudaram o efeito da geometria - especialmente em relação ao diâmetro dos orifícios do prato - e da composição do líquido na eficiência do prato. Os resultados do estudo demonstraram o importante efeito do tamanho dos orifícios na eficiência de colunas de diâmetros reduzidos. Verificaram que pratos com buracos largos apresentam comportamento hidrodinâmico diferente e são menos eficientes em relação aos pratos de menores orifícios. O espaçamento entre pratos não demonstrou efeito significativo na eficiência de colunas pequenas, mas deve-se atentar aos fenômenos de arraste e gotejamento.

Sakata et al. (2007) também focaram no efeito do tamanho dos orifícios dos pratos perfurados e encontraram que a dimensão dos buracos afeta a eficiência de

transferência de massa e a capacidade do prato. As capacidades dos pratos decresceram à medida que os orifícios aumentaram, em virtude do arraste.

Dando continuidade ao efeito dos furos, Rahimi, Sotoodeh e Bahramifar (2012) apresentam um dos estudos mais recentes que alia os efeitos da geometria com a eficiência da bandeja. Com abordagem semelhante aos seus trabalhos anteriores (RAHIMI et al., 2006a e RAHIMI et al., 2006b) e com o modelo SRS de transferência de massa (*surface renewal stretch*), os autores previram a hidráulica, transferência de massa e eficiência de pratos retangulares com orifícios de tamanhos diferentes. Verificaram que o padrão de escoamento nos pratos de orifícios menores é muito semelhante a um escoamento pistonado (*plug flow*) e tende a apresentar maior taxa de transferência de massa. Além disto, o modelo SRS reduziu a sensibilidade dos resultados das simulações com o diâmetro das bolhas, porém demonstrou ser de complicada implantação.

Buscando analisar outra parte do prato, Sun et al. (2011) utilizaram um modelo computacional de transferência de massa para prever a eficiência de prato para duas alturas distintas do vertedor de saída do prato, sendo 20 e 100 mm as alturas estudadas. A alteração resultou na modificação da piscina retida no prato, e os autores verificaram um aumento de 86,7 para 89,5% na eficiência de prato de Murphree, da menor para a maior estrutura.

Justi (2012) também alterou a piscina do líquido contida no prato, mas ao contrário de Sun et al. (2011), o autor manteve a altura da barreira e alterou sua configuração. Através de sua modelagem CFD tridimensional e estacionária, o autor avaliou a fluidodinâmica de um sistema multifásico formado por água e ar em um prato perfurado de 1,213 m de diâmetro. No fechamento do modelo, o autor fixou o coeficiente de arraste em 0,44; além de aplicar o modelo $k - \varepsilon$ de turbulência para ambas as fases. Foi verificada que a nova configuração apresentou um perfil de velocidade de líquido mais uniforme e influenciou positivamente na hidrodinâmica do prato, pois resultou na redução das regiões de recirculação e estagnação. Concluiu-se que as condições geométricas do prato e as condições operacionais tem grande impacto no comportamento dos fluidos.

Com uma abordagem ousada, Fair, Trutna e Seibert (1999) elaboraram uma configuração de prato, na qual todo o líquido é arrastado pelo gás e posteriormente separado por um dispositivo localizado na coluna. O aparelho de contato descrito neste trabalho demonstrou potencial de dobrar a capacidade de processamento exibida em pratos perfurados e valvulados de fluxo cruzado.

As características de muitos dos pratos perfurados comerciais não são possíveis de serem encontradas na literatura em virtude da confidencialidade destas. Segundo o catálogo da Koch-Glitsch (KOCH-GLITSCH, 2013), à medida que a demanda por produtos aumenta, os pratos originais tornam-se o principal obstáculo de desenvolvimento. Assim, três regiões dos pratos ganham destaque para melhorias: *downcomers*, área ativa e as entradas de fluidos. Observa-se o uso de promotores de bolhas, chicanas, mecanismos direcionais de fluxos, diferentes vertedores e outras tentativas de contornar os usuais empecilhos dos pratos convencionais. Surge então, a categoria dos pratos de alta performance que demonstram melhorias significativas em relação a eficiência e a capacidade de processamento. Caldas et al. (2007) apresentam alguns exemplos de pratos de alta capacidade.

Olujić et al. (2009) apontaram as principais tendências e desafios sobre a destilação. Salientaram que as principais atividades estão focadas na melhoria das características de desempenho dos dispositivos de contato entre líquido e gás, isto é, pratos e recheios. Este trabalho reforça ainda mais a ideia e a convergência de se buscar novas configurações de pratos cada vez mais eficientes, endossando ainda mais a necessidade de um profundo entendimento do escoamento.

3.4. Aspectos de Investigação

Com base no levantamento bibliográfico realizado até então, é possível identificar alguns aspectos importantes que nortearam os passos deste trabalho de investigação científica:

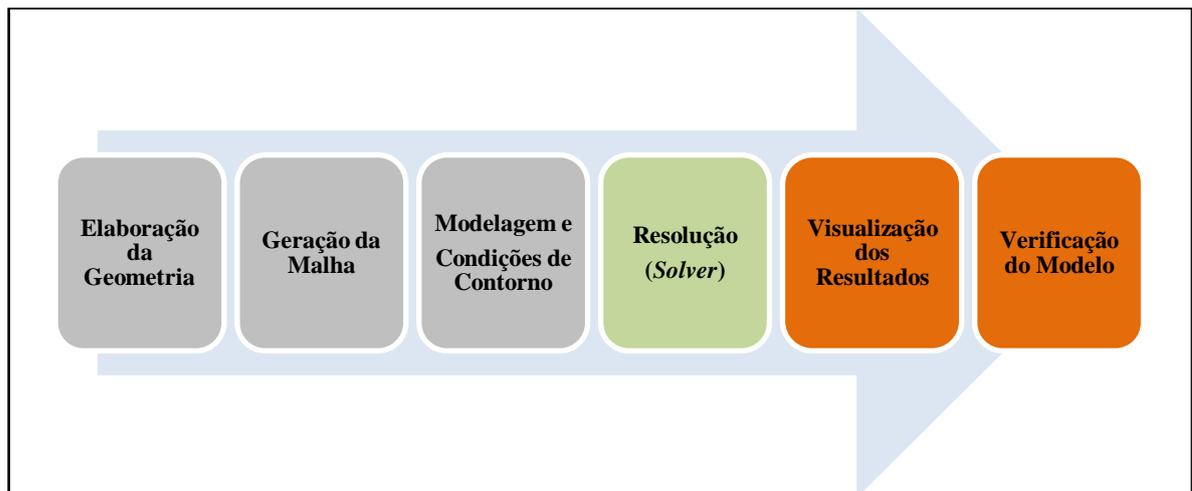
- A transferência de calor e massa ainda é pouco abordada, indicando um caminho para uma modelagem mais completa para pratos de destilação;
- Poucos modelos de turbulência foram estudados e desempenham importante papel na mistura entre as fases;
- Os sistemas multicomponentes são complexos e ainda é um campo de estudo em desenvolvimento;
- Não há estudos que indicam as regiões do prato que mais impactam no desempenho do processo de destilação.

CAPÍTULO 4

METODOLOGIA

Neste capítulo são apresentados os recursos utilizados e a metodologia envolvida na simulação do prato perfurado, isto é, as etapas da técnica de fluidodinâmica computacional. A Figura 4.1 elucida os passos realizados na criação do modelo em questão.

Figura 4.1 - Etapas da análise CFD empregada.



Fonte: Acervo pessoal.

4.1. Hardware e Software

Para realizar as etapas apresentadas anteriormente, fez-se necessário o uso de recursos computacionais. Utilizou-se um *cluster* com as seguintes características:

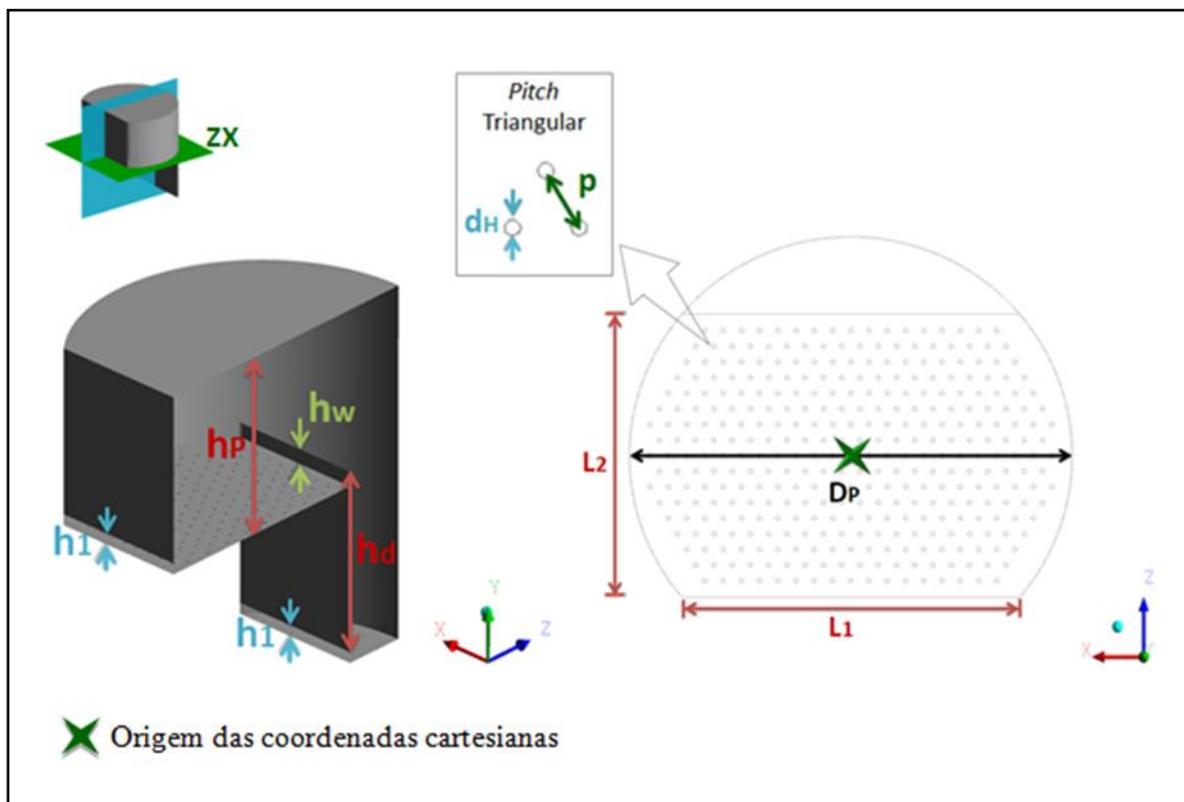
- Sistema operacional Linux;
- Processadores AMD Opteron™ 6234 com frequência 2400 MHz;
- 26 núcleos.

O *software* utilizado nas simulações numéricas conduzidas neste trabalho consistiu no pacote comercial de fluidodinâmica computacional CFX 14.5 da ANSYS®.

4.2. Configuração Geométrica

Nos estudos encontrados na literatura sobre pratos de destilação, observou-se que as dimensões geométricas avaliadas mais próximas de diâmetros industriais foram de aproximadamente 1,2 m de diâmetro. Com o objetivo de se aproximar também das dimensões industriais destes internos, foram usadas as características do mesmo aparato avaliado experimentalmente por Solari e Bell (1986). Os detalhes dessa geometria podem ser vistos na Figura 4.2 enquanto que, na Tabela 4.1, são apresentadas as principais dimensões e parâmetros relevantes do prato em estudo.

Figura 4.2 - Características e dimensões geométricas do prato perfurado simulado.



Fonte: Acervo pessoal.

Tabela 4.1 - Dimensões geométricas do prato perfurado simulado.

Dimensões	Valor	Unidade
Comprimento, L_2	0,785	m
Número de orifícios, N_H	347	-
Área de Borbulhamento, A_B	0,880	m ²
Diâmetro do prato, D_P	1,213	m
Diâmetro do orifício, d_H	0,0127	m
Espaçamento do prato, h_P	0,610	m
Altura do <i>downcomer</i>, h_d	0,572	m
Altura da represa, h_w	0,050	m
Altura de entrada e saída de líquido, h_1	0,038	m
Comprimento, L_1	0,925	m
Disposição triangular, p	0,05	m

Fonte: Acervo pessoal.

Um aspecto muito importante neste trabalho é a não consideração de simetria do fluxo, ou seja, o prato estudado é considerado em sua totalidade. Apesar de muitos trabalhos utilizarem o recurso da simetria (MEHTA; CHUANG; NANDAKUMAR, 1998; YU et al., 1999; LIU et al., 2000; GESIT; NANDAKUMAR; CHUANG, 2003; WANG et al., 2004; RAHIMI et al., 2006a; RAHIMI et al., 2006b; MALVIN; CHAN; LAU, 2010; RAHIMI; AMERI; SETOODEH, 2011; JUSTI, 2012; ZAREI; HOSSEINI; RAHIMI, 2013a e ZAREI; HOSSEINI; RAHIMI, 2013b), suspeita-se que esta hipótese depende consideravelmente do instante de tempo para tomada de resultados. Além do mais, os escoamentos multifásicos por serem naturalmente transientes nem sempre se comportam de forma constante e simétrica em um dado domínio. A má distribuição do fluxo no prato já foi reportada por Solari e Bell (1986), assim como a má distribuição do gás foi estudada por Rahimi e Karimi (2010).

4.3. Malha Numérica

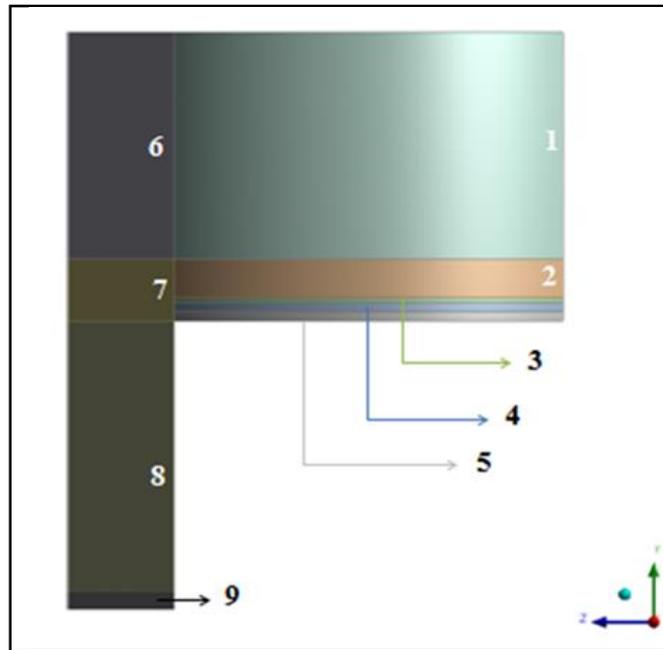
Com o domínio computacional devidamente definido, partiu-se para a criação das malhas computacionais (também chamadas pelas palavras inglesas *mesh* ou *grid*) através do *software* CFX-Mesh™ (versão 14.5) do pacote comercial de CFD da ANSYS Inc. Como a malha é crucial na obtenção de resultados com acurácia, realizou-se o teste de sensibilidade da solução da malha, visando garantir independência dos resultados em relação ao seu refinamento. A Figura 4.3 apresenta a estrutura de blocos adotada na construção da malha.

Tem-se que a geometria foi dividida em 9 blocos distintos. Esta divisão deu-se pela necessidade de trabalhar melhor a malha em regiões distintas, como a região próxima ao fundo do prato. Trata-se uma malha mista, ou seja, com tetraedros e hexaedros. O bloco 5 é a porção que contém os furos do prato, e por isso, é uma região na qual a malha foi mais refinada. Entretanto, devido à presença dos orifícios, adotou-se a estratégia por elementos tetraédricos, por terem maior flexibilidade em geometrias complexas. Já nos blocos restantes, optou-se pela dominância de elementos hexaédricos.

As malhas avaliadas diferiram-se no grau de refino, variando de 600.000 à 1.800.000 elementos. O refinamento deu-se com maior destaque nos blocos 2, 3, 4 e 5; diminuindo à medida que ascendiam em direção ao topo do prato. Esta abordagem foi necessária para garantir que as regiões de espuma e líquido – maiores gradientes das propriedades – fossem devidamente detalhadas. Já os blocos 6 e 1 foram pouco refinados por serem considerados pouco influentes nos resultados, uma vez que, são ocupados quase que totalmente por apenas gás. Por fim, optou-se pelo compartilhamento dos *meshs* entre os blocos 2, 3, 4, 5, 7, 8 e 9 com a finalidade de garantir continuidade da malha entre os diferentes blocos, evitando problemas numéricos e esforço computacional desnecessário. A mesma tática foi adotada para os blocos 1 e 6.

A Tabela 4.2 apresenta as características de cada malha avaliada enquanto a Figura 4.4 apresenta diferentes visões e maior detalhamento da estrutura.

Figura 4.3 - Representação da estrutura de blocos adotadas para a adaptação da malha.



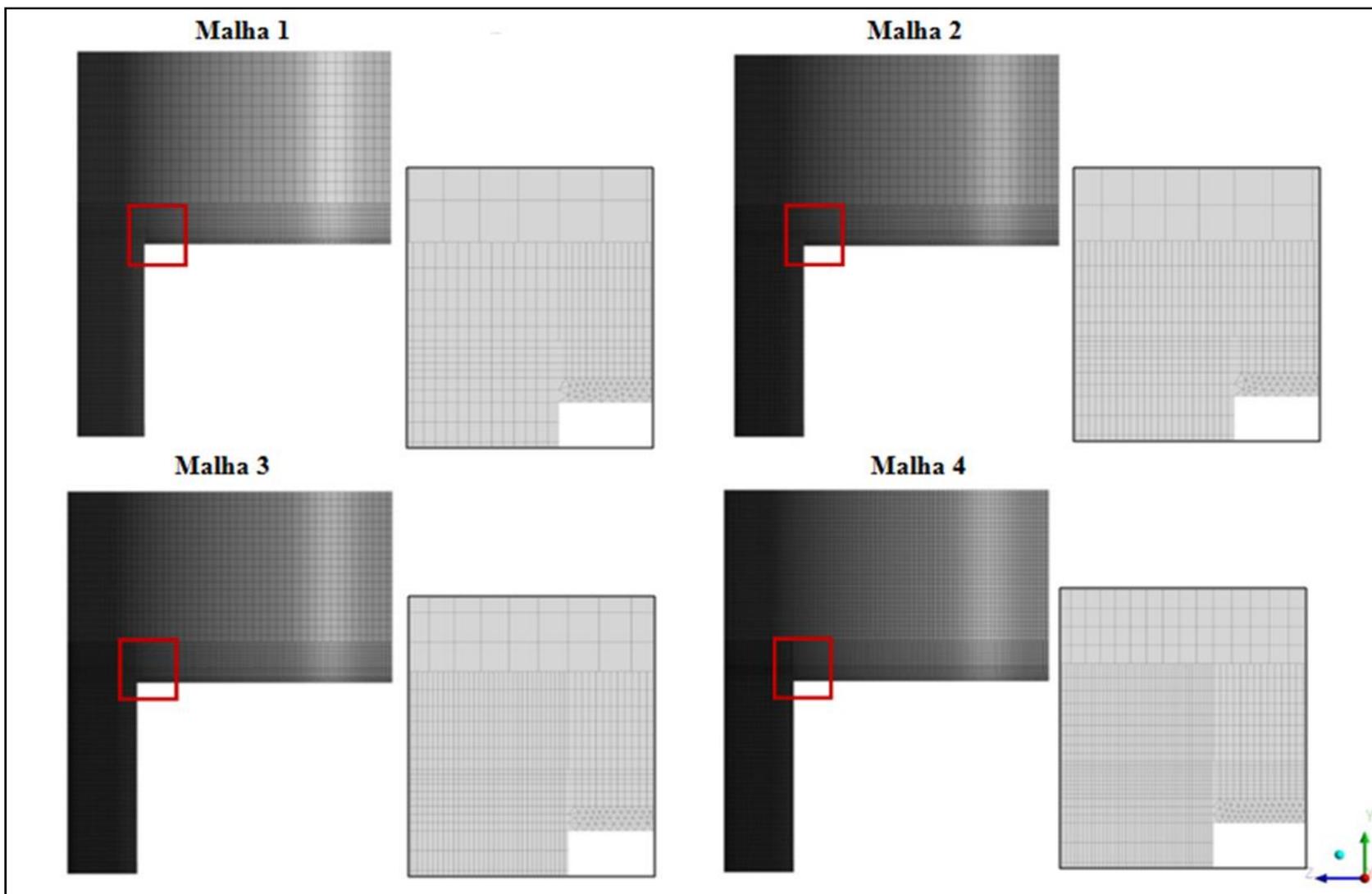
Fonte: Acervo pessoal.

Tabela 4.2 - Características das malhas utilizadas no teste de independência de malha.

Malha	1	2	3	4
Elementos	595.465	898.751	1.224.072	1.858.675
Nós	418.190	574.754	756.811	1.179.241
<i>Element Quality Máx</i>	0,99	0,99	0,99	0,99
<i>Element Quality Médio</i>	0,62	0,70	0,75	0,77
<i>Aspect Ratio Máx</i>	16,84	13,53	17,87	19,82
<i>Aspect Ratio Médio</i>	2,69	2,31	2,19	2,07
<i>Skewness Máx</i>	0,95	0,94	0,96	0,97
<i>Skewness Médio</i>	0,23	0,19	0,18	0,18

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 4.4 - Malhas utilizadas para a realização do teste de independência de malha com destaque para os principais blocos.



Fonte: Acervo pessoal.

4.4. Configurações das Simulações

Neste passo, foi utilizado o *software* CFX-Pre (versão 14.5) do pacote comercial de CFD da ANSYS Inc. para detalhar e especificar as condições envolvidas na simulação de interesse, isto significa informar o regime de trabalho, os fluidos que estão presentes no domínio, as condições iniciais e de contorno além de outras informações pertinentes em relação ao método de resolução. Ou seja, fez-se necessário especificar as informações acerca do processo e da forma como este foi tratado, resolvido e analisado. É importante deixar claro, que dois sistemas foram avaliados. O primeiro é composto por uma mistura água-ar, utilizado para verificar o modelo proposto através das características fluidodinâmicas. O segundo, composto pelo binário água-etanol foi utilizado para simular a transferência de espécies químicas e assim avaliar a eficiência de separação. O Quadro 4.1 apresenta as características e configurações das principais informações sobre as simulações realizadas, desde o teste de independência da malha até a inclusão do transporte de componentes.

Quadro 4.1 - Características e configurações das simulações realizadas.

Modelagem		Teste de Malha	Verificação do Modelo	Modelo de Transferência de Espécies Químicas
Tipo de escoamento		Multifásico	Multifásico	Multifásico
Modelo		Heterogêneo	Heterogêneo	Heterogêneo
Regime		Transiente	Transiente	Transiente
Modelo Multifásico		<i>Particle Model</i>	<i>Particle Model</i>	<i>Particle Model</i>
Tempo simulado		20 s	40 s	40 s
<i>Free Surface</i>		Não	Não	Não
Geometria		3D	3D	3D
Morfologia dos Fluidos	Líquido	Contínuo	Contínuo	Contínuo
	Gás	Disperso	Disperso	Disperso
Modelo de Turbulência	Líquido	SST	SST	SST
	Gás	Laminar	Laminar	Laminar
Sistema		Ar-Água	Ar-Água	Etanol-Água

Fonte: Acervo pessoal.

Ressalta-se que para garantir que os resultados estão na faixa estabelecida de fluxo (quase estacionário), o tempo simulado foi determinado de acordo com os resultados de Solari e Bell (1986), os quais indicam que os maiores tempos de residência de líquido no prato para as condições operacionais estudadas são de aproximadamente 15 s.

As informações sobre o modelo matemático e método numérico são apresentadas detalhadamente nos capítulos seguintes, especificamente nos Capítulos 5 e 6.

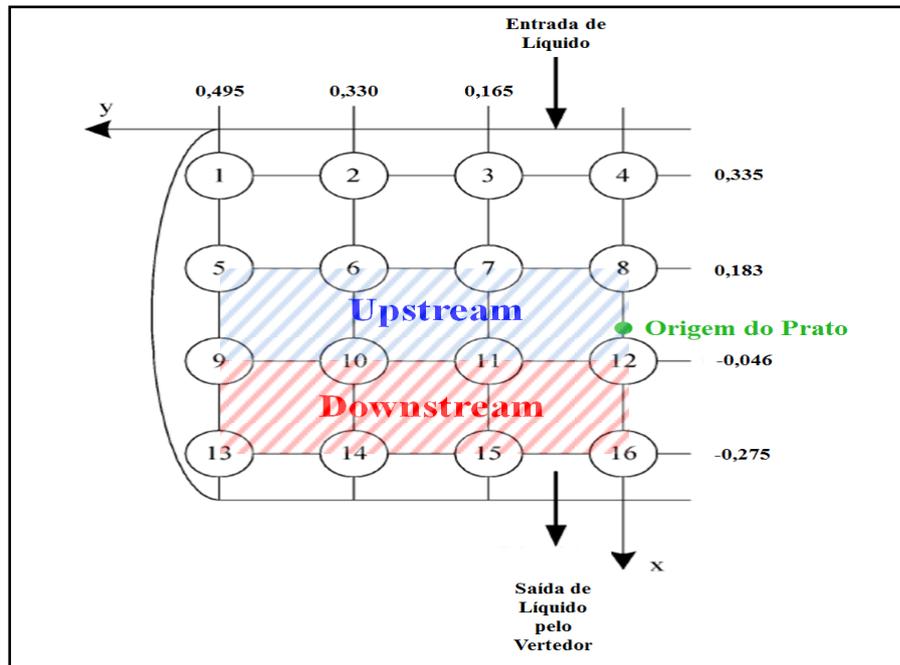
4.5. Metodologia de Análise

Após a etapa de resolução (*solver*) da simulação, realizou-se a visualização dos resultados obtidos pelo *software* CFX-Post (versão 14.5) do pacote comercial de CFD da ANSYS Inc. Com o propósito de qualificar e quantificar os resultados conseguidos, realizaram-se distintas análises baseadas em imagens de renderização de volume, perfis de concentração, contornos, linhas de fluxo, vetores de velocidade e medições.

Visando verificar o modelo, buscou-se avaliar a adequação do perfil de velocidades do líquido obtido com os pontos e regiões de medição estabelecidos no trabalho experimental de Solari e Bell (1986), apresentado na Figura 4.5. Para isso, o prato foi dividido em duas regiões: “*upstream*” e “*downstream*”, compostas por 47 linhas de medições distribuídas em relação à coordenada adimensional x/R , conforme apresentado pela Figura 4.6.

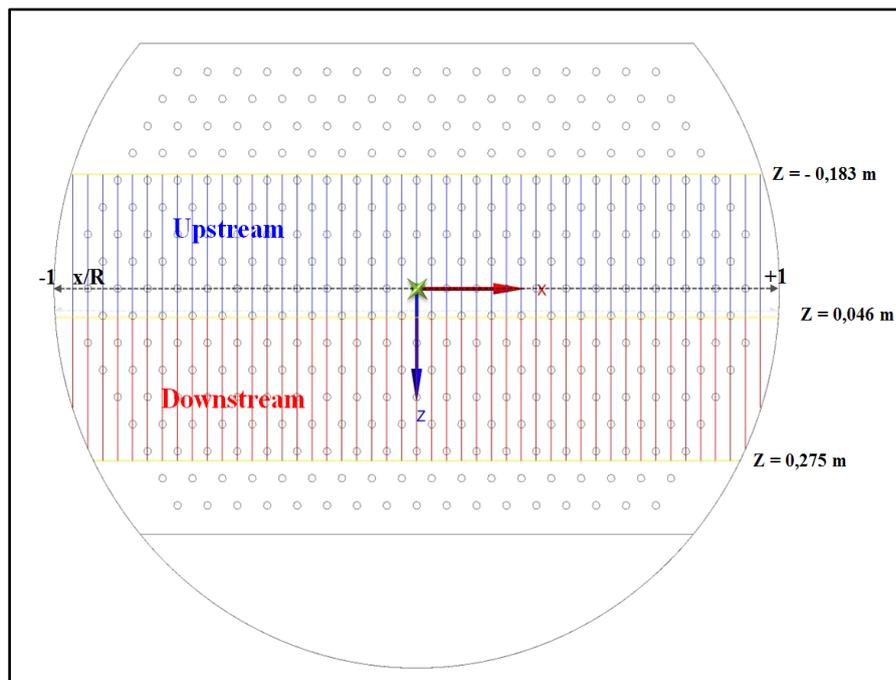
A área rachurada em azul compreende a região “*upstream*”, situada entre os sensores 5 a 8 e 9 a 12. Já a área rachurada em vermelho compreende a região “*downstream*”, situada entre os sensores 9 a 12 e 13 a 16. Os sensores e as linhas estão situados a 0,038 m acima da base do prato, posição escolhida para coleta dos dados de velocidade do líquido neste trabalho. Como Solari e Bell (1986) determinaram a velocidade simplesmente pela relação entre a distância entre sensores e o tempo gasto no trajeto, optou-se por avaliar apenas as componentes das velocidades que coincidem com esta prática. Assim, avaliou-se a média da componente w da velocidade do líquido (coordenada associada ao eixo Z) no prato em cada linha de cada região.

Figura 4.5 - Regiões e medidores do experimento de Solari e Bell (1986).



Fonte: Adaptado de WANG et al., (2004).

Figura 4.6 – Regiões e linhas utilizadas para medição da velocidade do líquido.



Fonte: Acervo pessoal.

Complementando a verificação do modelo, avaliou-se também um importante parâmetro hidráulico: a altura de líquido claro. A altura de líquido claro é compreendida como a altura que o líquido teria se não houvesse a presença do gás, ou seja, a altura de líquido desareado. Sua medição deu-se através da quantidade de líquido presente em cada bloco da região do prato, excluindo as regiões do *downcomer*, conforme a Equação (4.1):

$$hcl_{medida} = \sum_{i=1}^{nb} (\bar{f}_L^{vol} h_b) \quad (4.1)$$

em que hcl_{medida} é a altura de líquido claro medida, i é o índice do bloco, nb é a quantidade de blocos, \bar{f}_L^{vol} é a média volumétrica da fração volumétrica de líquido e h_b é a altura de cada bloco.

A maneira mais utilizada para a verificação deste parâmetro é através de correlações empíricas obtidas da literatura. Para isso, recorreu-se as correlações de Solari e Bell (1986) e Bennet, Agrawal e Cook (1983), apresentadas a seguir pelas Equações (4.2), (4.3a) e (4.3b), respectivamente.

$$hcl = 1,4 \cdot 10^{-2} + 0,4h_w + 2,21L_w - 0,0135F_S \quad (4.2)$$

$$hcl = f_\beta^{medio} \left[h_w + C \left(\frac{Q_L}{L_w f_\beta^{medio}} \right)^{0,67} \right] \quad (4.3a)$$

$$C = 0,5 + 0,438 \cdot \exp(-137,8h_w) \quad (4.3b)$$

em que hcl é a altura de líquido claro, h_w é a altura do vertedor de saída, Q_L é a vazão volumétrica de líquido, F_S é um parâmetro de fluxo de gás, f_β^{medio} é a fração volumétrica média de gás e L_w é a razão entre a vazão volumétrica de líquido e a largura média da bandeja. O fator F_S é definido de acordo com a Equação (4.4):

$$F_S = v_s \sqrt{\rho_V} \quad (4.4)$$

em que v_s é a velocidade superficial do vapor e ρ_V é a massa específica do vapor.

Para o cálculo da fração de volume médio do gás, recorreu-se à correlação de Bennet, Agrawal e Cook (1983), dada pela Equação (4.5):

$$f_\beta^{medio} = 1 - \exp \left[-12,55 \left(v_s \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L - \rho_V}} \right)^{0,91} \right] \quad (4.5)$$

em que ρ_L é a massa específica do líquido.

Para avaliar a transferência de massa (espécies químicas), recorreu-se a eficiência de Murphree (1925). A Equação (4.6) representa a eficiência para o vapor (E_{MV}):

$$E_{MV} = \frac{y_{i,j} - y_{i+1,j}}{y_{i,j}^* - y_{i+1,j}} \quad (4.6)$$

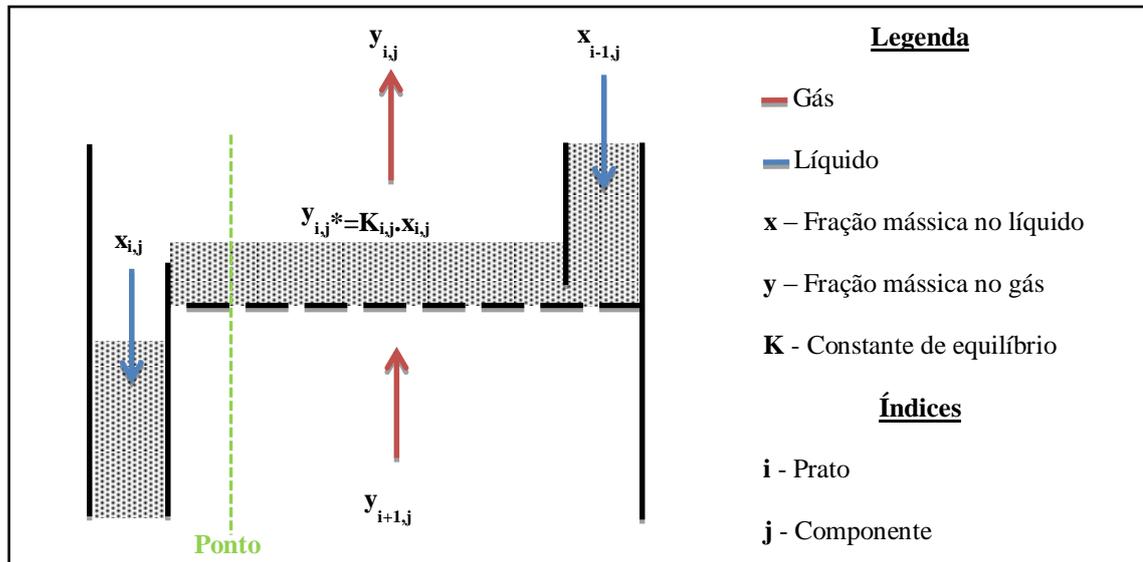
em que $y_{i,j}$ é a fração mássica do componente j na fase vapor que deixa o prato, $y_{i+1,j}$ é a fração mássica do componente j na fase vapor que chega ao prato e $y_{i,j}^*$ é a fração mássica do componente j na fase vapor em equilíbrio com o mesmo componente na fase líquida que deixa o prato.

Também se avaliou as eficiências pontuais (E_{OG}), conforme West, Gilbert e Shimizu (1952) sugeriram pela Equação (4.7):

$$E_{OG} = \left(\frac{y_{i,j} - y_{i+1,j}}{y_{i,j}^* - y_{i+1,j}} \right)_{ponto} \quad (4.7)$$

As medições foram feitas conforme o esquema apresentado na Figura 4.7, a qual ilustra os dois conceitos de eficiência avaliados.

Figura 4.7 - Esquema representativo de avaliação da eficiência em um prato de destilação.



Fonte: Adaptado de BARROS, 1997.

Visando à checagem dos valores de eficiência numericamente obtidos, realizou-se a comparação com os resultados simulados por Noriler et al. (2010) e também com a correlação empírica de van Winkle, MacFarland e Sigmund (1972)⁴ apud Sinnott e Towler (2009), demonstrada pela Equação (4.8):

$$E_{MV} = 0,07 Dg^{0,14} Sc^{0,25} Re^{0,08} \quad (4.8)$$

na qual Dg é o número de tensão superficial, Sc é o número de Schmidt para o líquido e Re é o número de Reynolds.

Estes três adimensionais podem ser estimados conforme as Equações (4.9), (4.10) e (4.11):

⁴ VAN WINKLE, M.; MACFARLAND, A.; SIGMUND, P. M. Predict distillation efficiency. **Hyd. Proc.** 51, 1972.

$$Dg = \frac{\sigma_L}{\mu_L v_s} \quad (4.9)$$

$$Sc = \frac{\mu_L}{\rho_L D_L} \quad (4.10)$$

$$Re = \frac{h_w v_s \rho_V}{\mu_L FA} \quad (4.11)$$

em que σ_L é a tensão superficial do líquido, μ_L é a viscosidade do líquido, D_L é a difusividade do componente mais leve no líquido e FA é a fração da área perfurada, avaliada como a razão da área dos orifícios pela área da secção transversal da coluna.

CAPÍTULO 5

MODELAGEM MATEMÁTICA

Foram realizadas simulações do escoamento multifásico e multicomponente em pratos perfurados de destilação. Durante o avanço na modelagem computacional, gradualmente foram incorporados os fenômenos de transferência de espécies químicas, conferindo maior complexidade ao modelo. Sendo assim, este capítulo elenca as equações fundamentais da conservação, assim como equações complementares que constituíram os modelos usados nas simulações.

5.1. Considerações

Primeiramente, apresentam-se as principais considerações assumidas acerca do modelo:

1. Abordagem Euleriana-Euleriana;
2. Modelo heterogêneo;
3. Incompressibilidade;
4. Tridimensionalidade;
5. Fase líquida turbulenta;
6. Predominância da força de arraste;
7. Nula transferência líquida de massa entre as fases.

A seguir, cada hipótese é desenvolvida e os aspectos relevantes para a compreensão são abordados no que concerne ao escoamento em questão.

Na descrição Euleriana do movimento, as propriedades do escoamento, tais como as velocidades, são funções tanto do espaço como do tempo (POTTER; WIGGERT, 2001). Sob uma visão de modelagem computacional, as diferentes fases são consideradas como meios contínuos interpenetrantes, o que resulta na introdução do conceito de fração volumétrica como função contínua no tempo e no espaço. A soma das frações volumétricas de

todas as fases em cada célula computacional é igual a um. As leis da conservação são aplicadas a cada fase e relações constitutivas adicionais são necessárias para o fechamento do modelo matemático. As fases podem trocar massa, quantidade de movimento e energia. Esta aproximação permite a modelagem de múltiplas fases separadas, ainda que haja interação entre as mesmas.

A hipótese do contínuo aborda que todas as fases são consideradas como matéria contínua no domínio, que por definição significa que suas propriedades variam infinitamente ponto a ponto e negligenciam-se todas as características moleculares da matéria (FOX; MCDONALD; PRITCHARD, 2004). A hipótese do contínuo requer que exista um número significativo de moléculas dentro do volume do corpo, de forma que a densidade altere-se continuamente com o volume. Assim, os fluidos não são tratados sob um enfoque molecular e/ou estatístico, de forma que por menor que seja uma divisão de um fluido, esta parte isolada deverá apresentar as mesmas propriedades que a matéria como um todo. Já a interpenetrabilidade das fases completa a ideia anterior, pois a análise é feita em escala longe da macroscópica, porém, ainda no nível do contínuo, onde as fases ocupam o mesmo volume no espaço e, ao mesmo tempo, através da interpenetração. Assim, as propriedades conserváveis de uma fase coexistem com suas análogas de outras fases em um mesmo ponto do espaço-tempo, de tal forma que as características de transporte em todas as fases podem ser mensuradas matematicamente num mesmo ponto no espaço ao mesmo tempo. Logo, as propriedades de transporte para todas as fases podem ser calculadas sob tais características por meio de uma média volumétrica (MOURA et al., 2012).

O escoamento foi considerado heterogêneo, o que implica que cada fluido possui seu próprio campo de variáveis e a interação entre os fluidos dá-se através da interface. Esta consideração implica que há um campo de solução para cada fase separadamente.

Em virtude do comportamento complicado dos fluidos em pratos perfurados, o escoamento é tridimensional. Além disto, o fluxo varia consideravelmente nas três dimensões cartesianas e nenhuma das características espaciais do prato é demasiadamente distinta das outras. Yu et al. (1999) verificaram experimentalmente que há regiões no prato no qual o escoamento pode ser considerado bidimensional, porém observaram o comportamento tridimensional próximo ao fundo do prato. Sendo assim, a abordagem tridimensional é mais representativa e completa para a avaliação de pratos de destilação.

Em relação à compressibilidade do escoamento, o fato de a avaliação dar-se apenas em um estágio de equilíbrio - o que implica em reduzidas variações de pressão e temperatura -, é assumido que a massa específica de cada partícula dos fluidos permanece relativamente constante no seu movimento através do campo de escoamento, constituindo um fluxo incompressível. De acordo com Ferziger e Perić (2002), a compressibilidade dos líquidos e dos gases a baixas velocidades (número de Mach menor que 0,3) pode ser negligenciada.

Já para a questão da turbulência, muitos fluxos encontrados nos problemas de engenharia e na natureza são considerados turbulentos. Segundo Kundu e Cohen (2004), fluxos turbulentos apresentam as seguintes características: “randomicidade”, não linearidade, difusividade, “vorticidade” e dissipação. A turbulência pode ser compreendida como regime de operação de qualquer sistema dinâmico cuja operação pode ser caracterizada por um número de graus de liberdade suficientemente elevado. Para o caso de pratos de destilação, a prática mais comum consiste restringir os fenômenos turbulentos à fase líquida (contínua). Isso se dá em virtude de a turbulência na fase líquida ser mais vigorosa do que na fase vapor, sobressaindo-se. Os efeitos de turbulência são transmitidos ao gás através da transferência de quantidade de movimento entre as fases. Para prever os efeitos turbulentos em modelos CFD, são inseridos modelos de turbulência, que na sua maioria são estatísticos.

Outra hipótese faz-se necessária quando há escoamento bifásico, pois se deve considerar a influência que uma dada fase exerce na outra. Essa interação é representada pelas forças interfaciais. Dentre as possíveis forças, a força de arraste é mais significativa e por isso é a única força interfacial assumida no escoamento em questão. A predominância desta força também é considerada por inúmeros autores em seus trabalhos (GESIT; NANDAKUMAR; CHUANG, 2003; KRISHNA; VAN BATEN, 2003; RAHIMI et al., 2006a; RAHIMI et al., 2006b; NORILER, 2007; TELEKEN, 2009; RAHIMI; SOTOODEH; BARHMIFAR, 2012; JUSTI, 2012).

Na destilação, dois fenômenos ocorrem simultaneamente no estágio de equilíbrio: a vaporização de parte do inventário líquido e a condensação de parte do inventário gasoso. Estes fenômenos representam troca de massa entre as fases e suas quantificações dependem de suas intensidades. Perante isso, é considerado que tanto a vaporização, quanto a condensação são fenômenos equivalentes, ou seja, a mesma quantidade de matéria evaporada

é condensada. Isso resulta em uma troca líquida de massa nula. Essa consideração é respaldada pelos trabalhos de Noriler et al. (2010).

Com base nas descrições explanadas, é apresentado a seguir o modelo matemático constituído pelas equações fundamentais da conservação, de restrição e fechamento do modelo. Considerando um sistema formado por um número de fases (N_F) igual a dois, sendo o índice L a fase líquida e V a fase vapor, tem-se o equacionamento a seguir.

5.2. Equações de Transporte

A conservação da massa no domínio é indicada pela equação da continuidade, a qual representa a máxima primordial das leis da conservação. Desta forma, assegura-se que a massa do fluido é conservada, ou seja, não pode ser criada nem destruída. As equações da continuidade para as fases líquida e vapor são dadas pelas Equações (5.1a) e (5.1b), respectivamente:

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_L \rho_L) + \nabla \cdot (f_L \rho_L \mathbf{v}_L) = \mathbf{S}_{MS,L} + \sum_{V=1}^{N_F} M_{LV} \quad (5.1a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_V \rho_V) + \nabla \cdot (f_V \rho_V \mathbf{v}_V) = \mathbf{S}_{MS,V} + \sum_{L=1}^{N_F} M_{VL} \quad (5.1b)$$

em que f representa a fração volumétrica, ρ a massa específica, \mathbf{v} o vetor velocidade e os termos \mathbf{S}_{MS} são termos de fonte de massa. Como não há reações ou outras formas de criar massa para este escoamento, estes termos são nulos. Os termos M representam a taxa de transferência de massa entre as fases por unidade de volume do sistema.

Outra propriedade conservada é a quantidade de movimento (ou do latim, *momentum*), pois conforme a segunda lei de Newton: a força resultante agindo em um sistema é igual à taxa de variação da quantidade de movimento do sistema, quando medida em um

referencial inercial (POTTER; WIGGERT, 2001). Assim, as equações da conservação de quantidade de movimento para as fases de um sistema binário líquido-vapor são dadas pelas Equações (5.2a) e (5.2b):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(f_L \rho_L \mathbf{v}_L) + \nabla \cdot (f_L (\rho_L \mathbf{v}_L \otimes \mathbf{v}_L)) & (5.2a) \\ & = -f_L \nabla P_L + \nabla \cdot (f_L \mathbf{T}_L^{eff}) + \sum_{V=1}^{N_F} (\Gamma_{LV}^+ \mathbf{v}_V - \Gamma_{VL}^+ \mathbf{v}_L) + \mathbf{S}_{M,L} + \mathbf{F}_L \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(f_V \rho_V \mathbf{v}_V) + \nabla \cdot (f_V (\rho_V \mathbf{v}_V \otimes \mathbf{v}_V)) & (5.2b) \\ & = -f_V \nabla P_V + \nabla \cdot (f_V \mathbf{T}_V^{eff}) + \sum_{L=1}^{N_F} (\Gamma_{VL}^+ \mathbf{v}_L - \Gamma_{LV}^+ \mathbf{v}_V) + \mathbf{S}_{M,V} + \mathbf{F}_V \end{aligned}$$

em que \mathbf{S}_M são os termos fonte de *momentum*, em virtude das forças externas do corpo e/ou fontes definidas. Já os termos \mathbf{F} descrevem as forças interfaciais atuando nas fases devido à presença da outra fase e P é a pressão. Os termos $(\Gamma_{LV}^+ \mathbf{v}_V - \Gamma_{VL}^+ \mathbf{v}_L)$ e $(\Gamma_{VL}^+ \mathbf{v}_L - \Gamma_{LV}^+ \mathbf{v}_V)$ representam a transferência de quantidade de movimento induzida pela transferência de massa entre as fases.

O tensor efetivo, \mathbf{T}^{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 (5.3a) e (5.3b):

$$\mathbf{T}_L^{eff} = \mathbf{T}_L + \mathbf{T}_L^{turb} \quad (5.3a)$$

$$\mathbf{T}_V^{eff} = \mathbf{T}_V + \mathbf{T}_V^{turb} \quad (5.3b)$$

Considerando os fluidos como Newtonianos e a hipótese da viscosidade turbulenta, os tensores efetivos podem ser reescritos na forma das Equações (5.4a) e (5.4b):

$$\mathbf{T}_L^{eff} = -\mu_L^{eff} \left[\nabla \mathbf{v}_L + (\nabla \mathbf{v}_L)^T \right] \quad (5.4a)$$

$$\mathbf{T}_V^{eff} = -\mu_V^{eff} \left[\nabla \mathbf{v}_V + (\nabla \mathbf{v}_V)^T \right] \quad (5.4b)$$

A viscosidade efetiva (μ^{eff}) pode ser combinada com a viscosidade molecular (μ) e a viscosidade turbulenta devido aos efeitos de turbulência (μ^{turb}), ficando conforme as Equações (5.5a) e (5.5b):

$$\mu_L^{eff} = \mu_L + \mu_L^{turb} \quad (5.5a)$$

$$\mu_V^{eff} = \mu_V + \mu_V^{turb} \quad (5.5b)$$

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 para ambas as fases pelas Equações (5.6a) e (5.6b):

$$\mathbf{S}_{M,L} = f_L \rho_L \mathbf{g} \quad (5.6a)$$

$$\mathbf{S}_{M,V} = f_V \rho_V \mathbf{g} \quad (5.6b)$$

onde \mathbf{g} é a aceleração gravitacional na sua forma vetorial.

Conforme a sétima consideração assumida no início deste Capítulo, a transferência líquida de massa entre as fases é nula. Entretanto, segundo o principal objetivo da operação de destilação, há transferência da espécie química mais volátil da fase líquida para a fase gasosa. Assim, as equações da conservação de um componente genérico - aqui representado pelo índice A -, é descrita pelas Equações (5.7a) e (5.7b):

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_L \rho_L y_{AL}) + \nabla \cdot (f_L (\rho_L \mathbf{v}_L y_{AL} - \rho_L D_{AL} (\nabla y_{AL}))) = \quad (5.7a)$$

$$S_{AL} + \sum_{V=1}^{N_F} Y_{LV}^A + \sum_{V=1}^{N_F} (M_{LV}^+ y_{AV} - M_{VL}^+ y_{AL})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_V \rho_V y_{AV}) + \nabla \cdot (f_V (\rho_V \mathbf{v}_V y_{AV} - \rho_V D_{AV} (\nabla y_{AV}))) = \quad (5.7b)$$

$$S_{AV} + \sum_{L=1}^{N_F} Y_{VL}^A + \sum_{L=1}^{N_F} (M_{VL}^+ y_{AL} - M_{LV}^+ y_{AV})$$

em que y é a fração mássica e D é a difusividade. Os dois últimos termos representam a transferência de massa entre as fases, o primeiro devido à diferença de potenciais químicos entre as fases e o segundo devido à quantidade líquida de massa total transferida de uma fase para a outra. Para o caso onde a quantidade de massa total transferida da fase L para a fase V é igual à quantidade de massa total que sai da fase V para a fase L , o último termo se anula. No entanto ainda há transferência de espécies químicas entre as fases devido a diferença de potenciais químicos, o que é exatamente a chave para avaliar a eficiência de separação de um processo de destilação.

5.3. Equações de Restrição

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

Restrição de pressão: todas as fases compartilham o mesmo campo de pressão, conforme a Equação (5.8):

$$P_L = P_V = P \quad (5.8)$$

Restrição de volume: As frações volumétricas de líquido e vapor estão relacionadas pela Equação (5.9):

$$f_L + f_V = 1 \quad (5.9)$$

Restrição de massa: As frações mássicas dos componentes nas fases estão relacionadas pelas Equações (5.10a) e (5.10b):

$$\sum_{i=1}^{N_c} y_{i,L} = 1 \quad (5.10a)$$

$$\sum_{i=1}^{N_c} y_{i,V} = 1 \quad (5.10b)$$

5.4. Fechamento do Modelo

Observando a modelagem apresentada até aqui, verifica-se que ainda há graus de liberdade que precisam ser reduzidos para a adequação do modelo. Para isso, é apresentado o fechamento do modelo, que consiste na definição de alguns termos até então não relacionados. Estes termos estão diretamente relacionados às transferências nas interfaces e à turbulência. Portanto, apresenta-se abaixo as equações constitutivas para os seguintes termos: \mathbf{F} (da transferência de *momentum*), \mathbf{M} (da transferência de massa), \mathbf{Y} (da transferência de espécies químicas) e μ^{turb} (do modelo de turbulência).

5.4.1. Transferência de Quantidade de Movimento na Interface

A transferência de quantidade de movimento entre as fases dá-se por muitos efeitos que variam em sua intensidade e natureza. Entretanto, pode-se dizer que a força total exercida sobre a fase líquida e sobre a fase vapor devido à interação entre elas é simbolizada pelas Equações (5.11a) e (5.11b):

$$\mathbf{F}_L = \sum_{V \neq L} \mathbf{F}_{LV} \quad (5.11a)$$

$$\mathbf{F}_V = \sum_{L \neq V} \mathbf{F}_{VL} \quad (5.11b)$$

Nota-se que, as forças de interface entre as fases (índice k para uma fase genérica) são iguais e opostas, de modo que a soma das forças de interface é zero (ANSYS Inc., 2009). A Equação (5.12) ressalva esta afirmação:

$$(\mathbf{F}_{LV} = -\mathbf{F}_{VL}) \Rightarrow \sum_{k=1}^{N_F} \mathbf{F}_k = 0 \quad (5.12)$$

A força de interface total atuando entre as duas fases pode surgir a partir de vários efeitos físicos independentes, conforme a Equação (5.13) sugere:

$$\mathbf{F}_{LV} = \mathbf{F}_{LV}^D + \mathbf{F}_{LV}^L + \mathbf{F}_{LV}^{LUB} + \mathbf{F}_{LV}^{VM} + \mathbf{F}_{LV}^{TD} + \mathbf{F}_S + \dots \quad (5.13)$$

onde \mathbf{F}_{LV}^D , \mathbf{F}_{LV}^L , \mathbf{F}_{LV}^{LUB} , \mathbf{F}_{LV}^{VM} , \mathbf{F}_{LV}^{TD} , \mathbf{F}_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 de sólidos, respectivamente.

Dentre todas estas contribuições, a força de arraste destaca-se por demonstrar maior importância nos fenômenos de transferência de quantidade de movimento na interface em escoamentos multifásicos em colunas de destilação (sexta consideração). A forma de modelar a força de arraste atuando na fase contínua L devido à fase dispersa V é dada pela Equação (5.14):

$$\mathbf{F}_{LV} = c_{LV}^{(d)}(\mathbf{v}_V - \mathbf{v}_L) \quad (5.14)$$

em que $c^{(d)}$ é o coeficiente volumétrico de transferência de quantidade de movimento devido ao arraste e $(\mathbf{v}_L - \mathbf{v}_V)$ é a velocidade relativa do fluxo.

Ressalta-se que c_{LL} é nulo e $c_{LV} = c_{VL}$. Assim, a soma de todos os termos de transferência entre as fases resulta em zero.

Para partículas esféricas, como é o caso de uma aproximação para as bolhas, os coeficientes volumétricos acima podem ser determinados analiticamente. A área projetada por uma única partícula na direção do escoamento (A_p) e o volume da partícula (V_p) são calculados pelas Equações (5.15) e (5.16), respectivamente:

$$A_p = \pi \frac{d^2}{4} \quad (5.15)$$

$$V_p = \pi \frac{d^3}{6} \quad (5.16)$$

onde d é o diâmetro da partícula.

O número de partículas por unidade de volume (n_p) é dado pela Equação (5.17):

$$n_p = \frac{f_\beta}{V_p} = \frac{6f_\beta}{\pi d^3} \quad (5.17)$$

ANSYS Inc. (2009) apresenta o arraste exercido por uma única partícula (fase dispersa β) em uma fase contínua α através da Equação (5.18):

$$\mathbf{F}_p = \frac{1}{2} C_D \rho_\alpha A_p |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha) \quad (5.18)$$

Portanto, a força de arraste total por unidade de volume da fase contínua é dada pela Equação (5.19):

$$\mathbf{F}_{\alpha\beta} = n_p \mathbf{F}_p = \frac{3 C_D}{4 d} f_\beta \rho_\alpha |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha) \quad (5.19)$$

Comparando-se as Equações (5.14) e (5.19), obtém-se a Equação (5.20):

$$c_{\alpha\beta}^{(d)} = \frac{3 C_D}{4 d} f_\beta \rho_\alpha |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| \quad (5.20)$$

em que C_D é o coeficiente de arraste.

Para o caso multifásico em que a fase contínua é o líquido (L) e a fase dispersa é o vapor (V), a força de arraste total é convenientemente expressa em termos do adimensional coeficiente de arraste, segundo a Equação (5.21):

$$C_D = \frac{D}{\frac{1}{2} \rho_L (v_L - v_V)^2 A_p} \quad (5.21)$$

onde D é a magnitude da força de arraste.

Com a condição de contribuição exclusiva da força de arraste, C_D precisa ser especificado. Krishna et al. (1999c) propuseram uma correlação para o coeficiente de arraste para regimes de escoamento com intenso borbulhamento, como o caso dos pratos perfurados de destilação. A Equação (5.22) apresenta esta correlação:

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_L} g d_b \frac{1}{|v_{slip}|^2} \quad (5.22)$$

em que g é a aceleração gravitacional, d_b é o diâmetro de bolha da fase discreta, v_{slip} é a velocidade de escorregamento das bolhas e pode ser estimada como função da velocidade superficial do gás (v_s) e da fração de volume média do gás na região de borbulhamento, conforme as Equações (5.23a) e (5.23b):

$$v_{slip} = \frac{v_s}{f_V^{medio}} \quad (5.23a)$$

$$v_s = \frac{Q_V}{A_B} \quad (5.23b)$$

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

Para o cálculo da fração de volume médio do gás, pode-se recorrer à correlação de Bennett, Agrawal e Cook (1983), já apresentada pela Equação (4.5).

Substituindo a Expressão (5.22) na Equação (5.19) resulta na Equação (5.24a):

$$\mathbf{F}_{LV} = f_V (\rho_L - \rho_V) g \frac{1}{v_{slip}^2} (\mathbf{v}_V - \mathbf{v}_L) |\mathbf{v}_V - \mathbf{v}_L| \quad (5.24a)$$

que aplicando a Equação (5.23a), obtém-se a Equação (5.24b):

$$\mathbf{F}_{LV} = f_V (\rho_L - \rho_V) g \frac{1}{(v_S / f_V^{medio})^2} (\mathbf{v}_V - \mathbf{v}_L) |\mathbf{v}_V - \mathbf{v}_L| \quad (5.24b)$$

Entretanto, a formulação acima fornece dificuldades numéricas em virtude de existir regiões no qual o *hold-up* de líquido é zero. Para superar este inconveniente, altera-se a equação de Krishna et al. (1999c), multiplicando-a pelo *hold-up* do líquido e dividindo-a pelo *hold-up* médio do líquido. Logo, o coeficiente de arraste inserido via CCL no CFX 14.5 foi o seguinte:

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_L} g d_b \frac{1}{|v_{slip}|^2} \frac{f_L}{f_L^{medio}} \quad (5.25)$$

Com a alteração feita, a transferência de quantidade de movimento na interface torna-se a Equação (5.26):

$$\mathbf{F}_{LV} = f_V f_L (\rho_L - \rho_V) g \left[\frac{1}{(v_S / f_V^{medio})^2} \frac{1}{f_L^{medio}} \right] (\mathbf{v}_V - \mathbf{v}_L) |\mathbf{v}_V - \mathbf{v}_L| \quad (5.26)$$

Observe que o termo $\left[\frac{1}{(v_S / f_V^{medio})^2} \frac{1}{f_L^{medio}} \right]$ é estimado a priori pela relação de

Bennett, Agrawal e Cook (1983) e pela velocidade desejada de gás. Segundo Krishna e van Baten (2003), esta abordagem garante que a retenção média de gás na dispersão gás-líquido

da espuma esteja de acordo com dados experimentais ao longo de uma ampla faixa de condições.

Vale a pena ressaltar que com esse arranjo matemático obtido, apenas a transferência de quantidade de movimento torna-se independente do diâmetro de bolha. Sabe-se que o diâmetro de bolha é decisivo no padrão de qualquer tipo de escoamento, mas para o caso de pratos perfurados nas condições adotadas nesta dissertação, trata-se de uma hipótese factível largamente adotada na literatura. A necessidade desta simplificação dá-se pela dificuldade de especificação do diâmetro de bolha em pratos de destilação, o que é extremamente difícil, ainda mais em virtude da não exata esfericidade das bolhas formadas. Além do mais, a modelagem utilizando a correlação de Krishna et al. (1999c) é uma das mais bem multiplicadas no campo das pesquisas acadêmicas que visam escoamentos borbulhantes.

Por outro lado, o diâmetro de bolha é fundamental para descrever a transferência de espécies químicas entre as fases, pois determina o tempo de contato entre elas. Antecipando-se a modelagem de transporte de componentes, apresenta-se na Equação (5.27), a estimativa do diâmetro de bolha máximo ($d_{G\text{máx}}$) para pratos perfurados de uma coluna com secção transversal A_C e com *pitch* triangular p , segundo Davidson e Schüler (1960)⁵ apud Hofhuis (1980):

$$d_{G\text{máx}} = 1,23 g^{-1/5} p^{4/5} \left(v_s \frac{A_C}{A_B} \right)^{2/5} \quad (5.27)$$

Hofhuis (1980) tem um interessante enfoque no escoamento em pratos perfurados de destilação e definiu que o diâmetro médio de Sauter é a metade do diâmetro máximo de bolha obtido pela correlação anterior. Assim, para esta dissertação, tem-se que o diâmetro médio de bolha utilizado é de 35 mm.

⁵ DAVIDSON, J. F.; SCHULER, B. O. G. Bubble formation at an orifice in an inviscid liquid. **Trans. Inst. Chem. Eng.** v. 38, p. 335-342, 1960.

5.4.2. Transferência de Massa na Interface

Como apresentado anteriormente, a taxa líquida de massa por unidade de volume que se desloca da fase L para a fase V , dado a operação de uma coluna de destilação, pode ser escrita pela Equação (5.28a):

$$M_{LV} = -M_{VL} \quad (5.28a)$$

Para reconhecer a direção do fenômeno de transferência de massa é conveniente expressar M_{LV} conforme a Equação (5.28b):

$$M_{LV} = M_{LV}^+ - M_{VL}^+ \quad (5.28b)$$

sendo $M_{LV}^+ > 0$ e $M_{VL}^+ > 0$. Estes termos representam a taxa mássica positiva por unidade de volume da transferência de massa da fase V para a fase L e da fase L para a fase V , respectivamente.

Para o fenômeno de transferência de massa é conveniente expressar M_{LV} em termos da taxa de transferência de massa, ou seja, conforme a Equação (5.28c):

$$M_{LV} = \dot{m}_{LV} A_{LV} \quad (5.28c)$$

onde \dot{m}_{LV} é a taxa mássica por unidade de área interfacial que cruza a interface a partir da fase V para a fase L e A_{LV} é a área interfacial por unidade de volume.

Segundo Noriler (2007), é possível afirmar que a transferência de massa entre as fases acarretará em quantidades adicionais de transferência das propriedades conserváveis

entre as fases ($\mathbf{v}_k, h_k, y_{Ak}$, etc). Isto implica que o fluxo (S_k) de uma propriedade conservável, ϕ_k , de uma fase k para uma fase j pode ser definido como a Equação (5.29) elucidada:

$$S_k = \sum_{k \neq j}^{N_C} (M_{kj}^+ \phi_j - M_{jk}^+ \phi_k) \quad (5.29)$$

É factível assumir que a taxa mássica líquida que atravessa a interface é nula devido à equivalência dos fenômenos de condensação e vaporização. Entretanto, a taxa líquida das propriedades devido à vaporização e condensação não é nula, pois a entalpia de vaporização e condensação não são iguais. Consequentemente, isto implica em uma taxa líquida de transferência de energia entre as fases, devido à transferência de massa, diferente de zero. De qualquer maneira, adota-se esta hipótese nesta dissertação, negligenciando-se o termo de transferência de massa total entre as fases nas equações de conservação, assumindo-os zero. Tem-se ciência de que esta condição não é totalmente verdadeira, mas conforme explicado por Noriler et al. (2010) trata-se de uma hipótese válida quando os gradientes de temperatura e fração mássica dos componentes nas fases são pequenos, caso comum em pratos de destilação.

5.4.3. Transferência de Espécies Químicas Entre Fases

O termo de transferência de componentes entre as fases, Y_{VL} , que aparece na equação de transferência de massa (Equações 5.7a e 5.7b), pode ser definido conforme a Equação (5.30):

$$\sum_{k \neq j}^{N_F} Y_{kj}^A = - \sum_{k \neq j}^{N_F} k_k^C A_{kj} \rho_k (y_{Aks} - y_{Ak}) \quad (5.30)$$

onde k_k^C é o coeficiente de transferência de espécies químicas na fase k , A_{kj} é a área interfacial, y_{Aks} e y_{Ak} são as frações mássicas do componente A na interface com a fase j e no seio da fase k , respectivamente. Para um sistema bifásico com a fase L sendo a fase contínua e a fase V a fase discreta, têm-se as Equações (5.31a) e (5.31b):

$$\sum_{k \neq j}^{N_F} Y_{kj}^A = Y_{LV}^A \quad (5.31a)$$

$$Y_{LV}^A = -Y_{VL}^A \quad (5.31b)$$

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

Como o potencial químico pode ser relacionado diretamente com a concentração do componente em cada fase, é necessário conhecer a concentração do componente A em ambas as fases.

Conforme ANSYS Inc. (2009), a concentração do componente A em uma mistura pode ser representada de várias maneiras:

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

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

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

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

As quais se relacionam pelas Equações (5.32), (5.33) e (5.34):

$$\rho_{Ak} = PM_A C_{Ak} \quad (5.32)$$

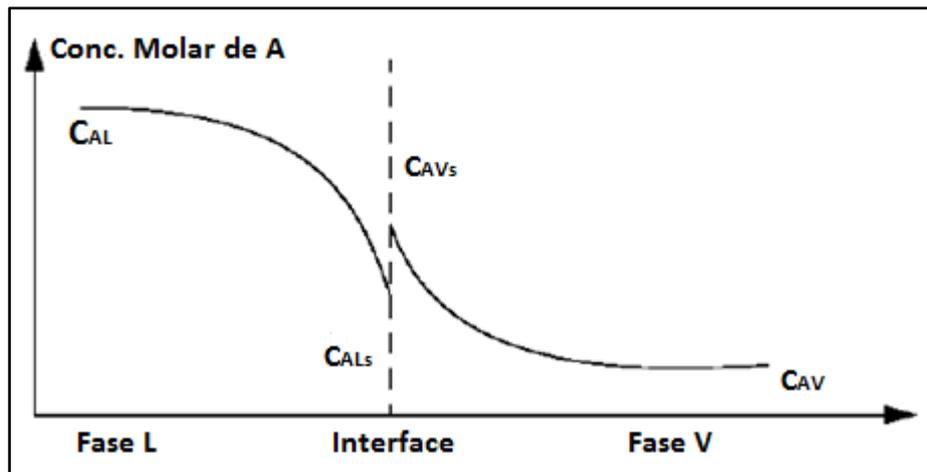
$$x_{Ak} = \frac{C_{Ak}}{C_k} \quad (5.33)$$

$$y_{Ak} = \frac{\rho_{Ak}}{\rho_k} \quad (5.34)$$

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

Em virtude da descontinuidade da concentração no equilíbrio de fases, conforme se pode observar na Figura 5.1, não é possível tratar a transferência de massa multicomponente usando os coeficientes globais de transferência de massa. Assim, neste trabalho, a transferência do componente A da fase L para a fase V , ou *vice-versa*, é tratada pela análise do modelo de duas resistências. Tal análise consiste em considerar a resistência à transferência de massa na camada limite em um ou em ambos os lados da interface, ou seja, o componente A sofre uma resistência para chegar à interface, causada pela camada limite. Além disso, o equilíbrio de potenciais químicos na interface deve ser assumido para que as equações de transporte de componentes tenham continuidade do lado da fase L como do lado da fase V .

Figura 5.1 - Esquema da transferência de massa multicomponente entre fases.



Fonte: Adaptado de NORILER, 2007.

Pode-se tratar o transporte de espécies químicas usando os coeficientes de transferência de massa, k_L^C e k_V^C , segundo as Equações (5.35a) e (5.35b):

$$n_{AL} = k_L^C (C_{ALs} - C_{AL}) \quad (5.35a)$$

$$n_{AV} = k_V^C (C_{AVs} - C_{AV}) \quad (5.35b)$$

onde n_A é a taxa molar do componente A do seio da fase até a interface, C_{Aks} é a concentração molar do componente A na interface da fase k e k^C é o coeficiente de transferência de massa. Ao se multiplicar as equações acima pelo peso molecular do componente A, PM_A , tem-se as Equações (5.36a) e (5.36b):

$$m_{AL} = k_L^C (\rho_{ALs} - \rho_{AL}) \quad (5.36a)$$

$$m_{AV} = k_V^C (\rho_{AVs} - \rho_{AV}) \quad (5.36b)$$

onde m_A é a taxa mássica do componente A do seio da fase até a interface e ρ_{Aks} é a concentração mássica do componente A na fase k , na interface.

Para eliminar os valores desconhecidos na interface (indicados pelo índice s), as equações devem ser suplementadas pela relação de equilíbrio estabelecido entre ρ_{AVs} e ρ_{ALs} . Segundo ANSYS Inc. (2011a), isto é convenientemente expresso usando a razão das concentrações molares em equilíbrio (K^C).

$$C_{AVs} = K^C C_{ALs} \quad (5.37)$$

$$\rho_{AVs} = K^C \rho_{ALs} \quad (5.38)$$

Entretanto, na etapa de pré-processamento do modelo CFD aqui apresentado, especificou-se o modelo de equilíbrio termodinâmico que considera a razão entre as frações mássicas em equilíbrio, K^y :

$$K^C = \frac{\rho_L}{\rho_V} K^y \quad (5.39)$$

Pela restrição do balanço de massa na interface, dado pela Equação (5.40):

$$m_{AL} + m_{AV} = 0 \quad (5.40)$$

tem-se a Equação (5.41):

$$\frac{\rho_{AVs}}{K^C} = \rho_{ALs} = \frac{k_L^C \rho_{AL} + k_V^C \rho_{AV}}{K^C k_V^C + k_L^C} \quad (5.41)$$

A Equação (5.41) pode ser utilizada para eliminar o termo da concentração na interface na expressão da taxa de transferência de espécies químicas entre as fases. Assim, pode-se calcular a taxa de massa do componente A que cruza a interface conforme as Equações (5.42a) e (5.42b):

$$Y_{LV}^A = -Y_{VL}^A = k_{LV}^C A_{LV} (K^C \rho_{AL} - \rho_{AV}) \quad (5.42a)$$

$$\frac{1}{k_{LV}^C} = \frac{1}{k_L^C} + \frac{K^C}{k_V^C} \quad (5.42b)$$

Os valores da constante K^C são determinados pelas equações de equilíbrio. Para fins de comparação, neste trabalho optou-se por utilizar os valores de K^y inferidos do trabalho de Noriler et al. (2010). Porém, existem outros dados disponíveis na literatura (WANKAT, 2007; CHEMICAL ENGINEERING AND MATERIALS RESEARCH INFORMATION CENTER, 2013). A escolha de um modelo termodinâmico simples, baseado apenas na especificação da constante K , dá-se devido ao escoamento ser isotérmico e apresentar pequena variação de pressão. Destaca-se que, por simplificação, não foi considerado a existência de ponto de azeotropia da mistura água-álcool por avaliar-se apenas um estágio da coluna.

Os coeficientes de transferência de massa (k_L^C e k_V^C) podem ser calculados por correlações, frequentemente apresentadas na literatura. Segundo Rahimi et al. (2006a), a teoria de penetração de Higbie vem sendo amplamente empregada para simular o transporte de componentes em um sistema gás-líquido em pratos de destilação. O modelo de Higbie assume que a composição do filme não permanece estagnada como no modelo de filme. O tempo de exposição é determinado pelas propriedades hidrodinâmicas do sistema e trata-se do único parâmetro requerido para contabilizar os efeitos hidrodinâmicos no coeficiente de transferência k^C . Durante este breve período, o elemento de líquido absorve a mesma quantidade de gás por unidade de área que absorveria se fosse estagnado e infinitamente profundo. Higbie (1935)³ apud Rahimi et al. (2006a) deduziu que para um tempo médio, os coeficientes de transferência de massa para o líquido e para o gás possuem as formas das Equações (5.43a) e (5.43b), respectivamente:

$$k_L^C = 2 \sqrt{\frac{D_{AL}}{\pi \theta_L}} \quad (5.43a)$$

$$k_V^C = 2 \sqrt{\frac{D_{AV}}{\pi \theta_V}} \quad (5.43b)$$

onde D_A é o coeficiente de difusão do componente A . O termo θ é o tempo de contato na região de espuma sendo definido para cada fase, conforme as Equações (5.44a) e (5.44b):

$$\theta_V = \frac{d_G}{v_H} \quad (5.44a)$$

$$\theta_L = \frac{d_G}{v_R} \quad (5.44b)$$

onde v_R é a velocidade média de ascensão das bolhas através da espuma e é dada pela Equação (5.45):

$$v_R = \frac{v_S}{(1 - f_L)} \quad (5.45)$$

A estimativa das difusividades é complicada, mas segundo Sinnott e Towler (2009), o manual de *design* da AIChE recomenda a equação de Wilke e Chang para a difusividade em líquidos e a equação de Wilke e Lee em gases. De acordo com Wilke e Chang (1955), a estimativa da difusividade em soluções diluídas, tendo como solvente a água, dá-se pela Equação (5.46):

$$D_L = 7,4 \cdot 10^{-8} \frac{(xPM_1)^{1/2} T}{\mu V_{b_2}^{0,6}} \quad (5.46)$$

onde D_L é a difusividade no líquido, x é um parâmetro de associação (que para água é igual a 2,6), PM_1 é o peso molecular do solvente, T é a temperatura absoluta da solução, μ é a viscosidade da solução e V_{b_2} é o volume molar do soluto no ponto normal de ebulição.

O volume molar do soluto no ponto normal de ebulição pode ser avaliado por diferentes métodos, entre eles os métodos de Le Bas (1915)⁶ apud Poling, Prausnitz e O'Connell (2000) e Tyn e Calus (1975)⁷ apud Poling, Prausnitz e O'Connell (2000).

Por outro lado, segundo Wilke e Lee (1955), a difusividade em gases e vapores pode ser estimada pelas Equações (5.47a) e (5.47b):

$$D_v = \frac{BT^{3/2} \left(\frac{PM_1 + PM_2}{PM_1 PM_2} \right)^{1/2}}{Pr_{12}^2 W^{(1)}_{(1)} (1 - \Delta)} \quad (5.47a)$$

$$B = \left[10,7 - 2,46 \left(\frac{PM_1 + PM_2}{PM_1 PM_2} \right)^{1/2} \right] \cdot 10^{-4} \quad (5.47b)$$

sendo D_v a difusividade no gás, B uma constante numérica, PM_2 é o peso molecular do soluto, P é a pressão, r_{12} é o diâmetro de colisão, $W^{(1)}_{(1)}$ é a integral de colisão para difusão e Δ é um termo de correção (geralmente menor que 0,03).

O diâmetro de colisão é calculado pela contribuição de cada componente genérico i (sendo $i=1$ para solvente e $i=2$ para o soluto), conforme as Equações (5.48a) e (5.48b):

$$r_i = 1,18V_{bi}^{1/3} \quad (5.48a)$$

$$r_{12} = \frac{r_1 + r_2}{2} \quad (5.48b)$$

⁶ LE BAS, G. **The molecular volume of liquid chemical compounds**. New York: Longmans, Green, 1915.

⁷ TYN, M. T.; CALUS, W. F. Estimating liquid molal volume. **Processing**, v. 21, p. 16-17, 1975.

em que r_i é o comprimento característico do componente i e V_{bi} é o volume molar do componente i no ponto normal de ebulição.

A integral de colisão é tabulada como uma função de kT/ε_{12} e foi determinada de acordo com os dados extraídos de Wilke e Lee (1955), apresentados no Apêndice A.

O termo k/ε_{12} pode ser determinado pela contribuição de cada componente i , conforme as Equações (5.49a) e (5.49b):

$$\frac{\varepsilon_i}{k} = 1,21V_{bi} \quad (5.49a)$$

$$\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2} \quad (5.49b)$$

em que k é a constante de Boltzman e ε_i é a energia de atração para o componente i .

Poling, Prausnitz e O'Connell (2000) apresentam uma ampla coletânea de outras correlações possíveis, além de uma análise completa dos parâmetros apresentados.

5.4.4. Equações Constitutivas da Turbulência

Segundo ANSYS Inc. (2009), modelos de turbulência de duas equações são amplamente utilizados, pois oferecem um bom compromisso entre o esforço numérico e a precisão computacional. Baseados no conceito de viscosidade turbulenta, estes modelos apresentam duas equações diferenciais de transporte de propriedades turbulentas, configurando-se assim como modelos de fechamento completos.

No presente trabalho foi empregado o modelo SST, pois se trata de um modelo que já engloba o $k - \varepsilon$ padrão e adiciona o $k - \omega$ também. Sua vantagem é a flexibilidade, o tratamento dado próximo às paredes, além de apresentar melhores convergências e menos problemas numéricos.

5.4.4.1. Modelo k-ε Padrão

É o modelo mais representativo e o mais empregado no estudo de pratos de destilação, conforme foi visto no Quadro 3.2. Trata-se de um modelo estável e numericamente robusto.

As viscosidades turbulentas (μ^{turb}) das Equações (5.5a) e (5.5b) podem ser modeladas conforme as Equações (5.50a) e (5.50b):

$$\mu_L^{turb} = C_\mu \rho_L \left(\frac{k_L^2}{\varepsilon_L} \right) \quad (5.50a)$$

$$\mu_V^{turb} = C_\mu \rho_V \left(\frac{k_V^2}{\varepsilon_V} \right) \quad (5.50b)$$

em que C_μ é a constante do modelo de turbulência, k é a energia cinética turbulenta e ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta.

Os valores de k e ε vêm diretamente das equações diferenciais de transporte, nas quais se fazem necessários mais duas equações para cada fase.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (f_L \rho_L k_L) + \nabla \left\{ f_L \left[f_L \rho_L \mathbf{v}_L k_L - \left(\mu_L + \frac{\mu_L^{turb}}{\sigma_k} \right) \nabla k_L \right] \right\} \\ & = f_L (\mathbf{P}_L + P_{kb} - \rho_L \varepsilon_L) \end{aligned} \quad (5.51a)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (f_L \rho_L \varepsilon_L) + \nabla \left\{ f_L \left[\rho_L \mathbf{v}_L \varepsilon_L - \left(\mu_L + \frac{\mu_L^{turb}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_L \right] \right\} \\ & = f_L \frac{\varepsilon_L}{k_L} (C_{\varepsilon 1} (\mathbf{P}_L + P_{eb}) - C_{\varepsilon 2} \rho_L \varepsilon_L) \end{aligned} \quad (5.51b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_V \rho_V k_V) + \nabla \cdot \left\{ f_V \left[f_V \rho_V \mathbf{v}_V k_V - \left(\mu_V + \frac{\mu_V^{turb}}{\sigma_k} \right) \nabla k_V \right] \right\} \\ = f_V (\mathbf{P}_V + P_{kb} - \rho_V \varepsilon_V) \end{aligned} \quad (5.52a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_V \rho_V \varepsilon_V) + \nabla \cdot \left\{ f_V \left[\rho_V \mathbf{v}_V \varepsilon_V - \left(\mu_V + \frac{\mu_V^{turb}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_V \right] \right\} \\ = f_V \frac{\varepsilon_V}{k_V} (C_{\varepsilon 1} (\mathbf{P}_V + P_{cb}) - C_{\varepsilon 2} \rho_V \varepsilon_V) \end{aligned} \quad (5.52b)$$

onde P_{kb} e P_{cb} representam a influência das forças de flutuação. \mathbf{P} é a produção de turbulência devido às forças viscosas, definida conforme as Equações (5.53a) e (5.53b):

$$\mathbf{P}_L = \mu_L^{turb} \nabla \mathbf{v}_L \cdot (\nabla \mathbf{v}_L + \nabla \mathbf{v}_L^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_L (3\mu_L^{turb} \cdot \nabla \mathbf{v}_L + \rho_L k_L) \quad (5.53a)$$

$$\mathbf{P}_V = \mu_V^{turb} \nabla \mathbf{v}_V \cdot (\nabla \mathbf{v}_V + \nabla \mathbf{v}_V^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_V (3\mu_V^{turb} \cdot \nabla \mathbf{v}_V + \rho_V k_V) \quad (5.53b)$$

Para escoamentos incompressíveis, $\nabla \cdot \mathbf{v}$ é muito pequeno e o segundo termo do lado direito das equações anteriores não contribui significativamente para a produção de turbulência. Os valores das constantes do modelo de turbulência, de acordo com Wilcox (2004), são:

$$\begin{aligned} C_\mu &= 1,92 \\ \sigma_k &= 1,00 \\ \sigma_\varepsilon &= 1,30 \\ C_{\varepsilon 1} &= 0,09 \\ C_{\varepsilon 2} &= 1,44 \end{aligned}$$

5.4.4.2. Modelo $k-\omega$

Outros modelos surgiram para tentar cobrir as deficiências do modelo $k-\varepsilon$, como é o caso do modelo $k-\omega$, no qual, em vez do termo de dissipação turbulenta (ε), define-se o termo de frequência turbulenta (ω). Este modelo e suas derivações são normalmente recomendados para melhor previsão próxima a parede.

Este modelo não envolve as funções de amortecimento não lineares requeridas para o modelo $k-\varepsilon$ e por esta razão é mais preciso e robusto. Tal modelo assume que a viscosidade turbulenta está vinculada à energia cinética turbulenta e à frequência turbulenta via relaxação, conforme as Equações (5.54a) e (5.54b):

$$\mu_L^{turb} = \rho_L \frac{k_L}{\omega_L} \quad (5.54a)$$

$$\mu_V^{turb} = \rho_V \frac{k_V}{\omega_V} \quad (5.54b)$$

A formulação do modelo segue então com as seguintes equações para cada fase:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(f_L \rho_L k_L)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_L \rho_L \mathbf{v}_L k_L) = \nabla \cdot \left[f_L \left(\mu_L + \frac{\mu_L^{turb}}{\sigma_k} \right) \nabla k_L \right] \\ + f_L (\mathbf{P}_L + P_{kb} - \beta' \rho_L k_L \omega_L) \end{aligned} \quad (5.55a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(f_L \rho_L \omega_L)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_L \rho_L \mathbf{v}_L \omega_L) = \nabla \cdot \left[f_L \left(\mu_L + \frac{\mu_L^{turb}}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega_L \right] \\ + f_L \left(\alpha \frac{\omega_L}{k_L} \mathbf{P}_L + P_{\omega b} - \beta \rho_L \omega_L^2 \right) \end{aligned} \quad (5.55b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(f_V \rho_V k_V)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_V \rho_V \mathbf{v}_V k_V) = \nabla \cdot \left[f_V \left(\mu_V + \frac{\mu_V^{turb}}{\sigma_k} \right) \nabla k_V \right] \\ + f_V (\mathbf{P}_V + P_{kb} - \beta' \rho_V k_V \omega_V) \end{aligned} \quad (5.56a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(f_V \rho_V \omega_V)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_V \rho_V \mathbf{v}_V \omega_V) = \nabla \cdot \left[f_V \left(\mu_V + \frac{\mu_V^{turb}}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega_V \right] \\ + f_V \left(\alpha \frac{\omega_V}{k_V} \mathbf{P}_V + P_{\omega b} - \beta \rho_V \omega_V^2 \right) \end{aligned} \quad (5.56b)$$

onde o vetor velocidade (\mathbf{v}) e a densidade (ρ) são tratados como conhecidos.

No caso de fluidos incompressíveis, o divergente da velocidade é pequeno e, assim, o segundo termo do lado direito desta equação não contribui significativamente para a produção.

As constantes para o modelo são dadas por:

$$\beta' = 0,09$$

$$\alpha = 5/9$$

$$\beta = 0,075$$

$$\sigma_k = 2$$

$$\sigma_\omega = 2$$

5.4.4.3. Modelo SST (*Shear Stress Transport*) Baseado em $k-\omega$

O principal problema com o modelo $k-\omega$ é sua forte sensibilidade às condições de corrente livre. Assim, o modelo SST aplica o modelo $k-\omega$ quando próximo à parede e $k-\varepsilon$ quando longe. Isto consiste na transformação do modelo $k-\varepsilon$ em $k-\omega$, e *vice-versa*, multiplicando por uma função de combinação (*blend*). Este modelo é um aperfeiçoamento do modelo BSL $k-\omega$ (*The Baseline $k-\omega$ Model*), e a função *blend* foi modificada a fim de fornecer resultados mais precisos (ANSYS Inc., 2009).

Assim, tem-se o equacionamento para cada fase:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(f_L \rho_L k_L)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_L \rho_L \mathbf{v}_L k_L) &= \nabla \cdot \left[f_L \left(\mu_L + \frac{\mu_L^{turb}}{\sigma_{k_2}} \right) \nabla k_L \right] \\ &+ f_L (\mathbf{P}_L + P_{kb} - \beta' \rho_L k_L \omega_L) \end{aligned} \quad (5.57a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(f_L \rho_L \omega_L)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_L \rho_L \mathbf{v}_L \omega_L) &= \nabla \cdot \left[f_L \left(\mu_L + \frac{\mu_L^{turb}}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega_L \right] \\ &+ f_L \left[(1 - F_{1L}) 2 \rho_L \frac{1}{\sigma_{\omega_2}} \nabla k_L \omega_L + \alpha_2 \frac{\omega_L}{k_L} P_L - \beta_2 \rho_L \omega_L^2 \right] \end{aligned} \quad (5.57b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(f_V \rho_V k_V)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_V \rho_V \mathbf{v}_V k_V) &= \nabla \cdot \left[f_V \left(\mu_V + \frac{\mu_V^{turb}}{\sigma_{k_2}} \right) \nabla k_V \right] \\ &+ f_V (\mathbf{P}_V + P_{kb} - \beta' \rho_V k_V \omega_V) \end{aligned} \quad (5.58a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(f_V \rho_V \omega_V)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_V \rho_V \mathbf{v}_V \omega_V) &= \nabla \cdot \left[f_V \left(\mu_V + \frac{\mu_V^{turb}}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega_V \right] \\ &+ f_V \left[(1 - F_{1V}) 2 \rho_V \frac{1}{\sigma_{\omega_2}} \nabla k_V \omega_V + \alpha_2 \frac{\omega_V}{k_V} P_V - \beta_2 \rho_V \omega_V^2 \right] \end{aligned} \quad (5.58b)$$

onde

$$F_{1L} = \tanh(\arg_{1L})$$

$$F_{1V} = \tanh(\arg_{1V})$$

$$\arg_{1L} = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k_L}}{\beta' \omega_L y}, \frac{500 v_L}{y^2 \omega_L} \right), \frac{4 \rho_L k_L}{CD_{k\omega L} \sigma_{\omega_2} y^2} \right]$$

$$\arg_{1V} = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k_V}}{\beta' \omega_V y}, \frac{500 v_V}{y^2 \omega_V} \right), \frac{4 \rho_V k_V}{CD_{k\omega V} \sigma_{\omega_2} y^2} \right]$$

$$CD_{k\omega L} = \max \left(2 \rho_L \frac{1}{\sigma_{\omega_2} \omega_L} \nabla k_L \nabla \omega_L, 1.10^{-10} \right)$$

$$CD_{k\omega} = \max\left(2\rho_V \frac{1}{\sigma_{\omega_2} \omega_V} \nabla k_V \nabla \omega_V, 1.10^{-10}\right)$$

em que y é a distância mais próxima da parede e ν é a viscosidade cinemática. As novas constantes que aparecem são dadas por:

$$\alpha_2 = 0,44$$

$$\beta_2 = 0,0828$$

$$\sigma_{k_2} = 1$$

$$\sigma_{\omega_2} = 1/0,856$$

De acordo com ANSYS Inc. (2009), o modelo SST baseado em $k - \omega$ leva em conta o transporte das tensões de cisalhamento turbulentas e fornece previsões precisas para casos de escoamentos com gradientes adversos de pressão envolvendo separação.

O comportamento do transporte pode ser obtido por um limitador à formulação da viscosidade turbulenta:

$$v_L^{turb} = \frac{a_1 k_L}{\max(a_1 \omega_L, SF_2)}$$

$$v_V^{turb} = \frac{a_1 k_V}{\max(a_1 \omega_V, SF_2)}$$

$$v_L^{turb} = \frac{\mu_L^{turb}}{\rho_L}$$

$$v_V^{turb} = \frac{\mu_V^{turb}}{\rho_V}$$

em que, novamente F_2 é uma função *blending* similar a F_1 , a qual determina o limite da parede à camada limite. S é uma medida invariante da taxa de tensão. As funções de combinação são críticas para o sucesso do método. Sua formulação é baseada na distância próxima à superfície e sobre as variáveis do escoamento.

$$F_{2L} = \tanh(\arg_{2L}^2)$$

$$F_{2V} = \tanh(\arg_{2V}^2)$$

$$\arg_{2L} = \max\left(\frac{2\sqrt{k_L}}{\beta' \omega_L y}, \frac{500\nu_L}{y^2 \omega_L}\right)$$

$$\arg_{2V} = \max\left(\frac{2\sqrt{k_V}}{\beta' \omega_V y}, \frac{500\nu_V}{y^2 \omega_V}\right)$$

5.4.5. Condições de Contorno e de Inicialização

As condições de contorno e iniciais são fundamentais para o fechamento do modelo e permitem a resolução das equações numéricas envolvidas nas simulações. A Figura 5.2 elucidada as regiões importantes para a definição das condições pertinentes.

Inicialização do domínio: A condição inicial aplicada nas simulações do prato perfurado consistiu em velocidades nulas para os dois fluidos, ou seja, com o domínio vazio, permitindo a observação do fenômeno de enchimento do prato.

Já para as condições de contorno, bastou associar cada face externa do domínio computacional a uma condição de contorno (*boundary*). Ou seja, cada região bidimensional foi definida como entrada, saída, abertura, simetria ou parede.

Entrada de líquido: adotou-se um perfil de velocidade uniforme para o líquido na entrada do prato ($v_{z,L}^{in}$), conforme a Equação (5.59):

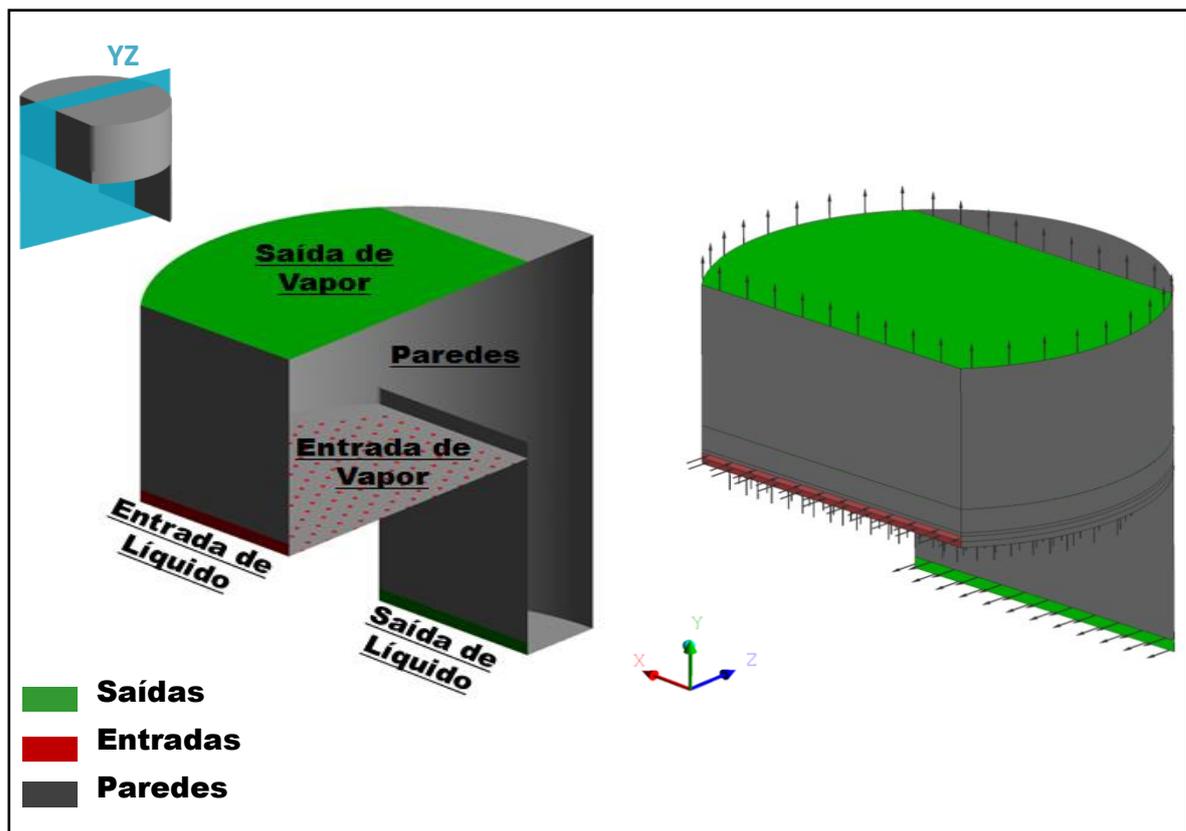
$$v_{z,L}^{in} = \frac{Q_L}{A_L^{in}} \quad (5.59)$$

com

$$A_L^{in} = h_1 L_1 \quad (5.60)$$

onde A_L^{in} representa a área da região de entrada de líquido no prato.

Figura 5.2 - Ilustração das regiões nas quais são aplicadas as condições de contorno.



Fonte: Acervo pessoal.

Considerou-se que apenas líquido entra no domínio por esta região, ou seja, a fração volumétrica de líquido tem valor unitário ($f_L^{in} = 1$), pois a quantidade arrastada de

vapor é desprezível. Adicionalmente para o binário etanol-água, especificou-se a fração mássica de etanol (y_{EL}) na entrada sendo igual a 0,785.

Entrada de vapor: considerou-se que a vazão mássica de vapor que entra no prato pelos orifícios é a mesma em cada orifício. Sendo assim, a velocidade de vapor fluindo através dos furos, $v_{y,V}^{in}$, foi calculada conforme a Equação (5.61):

$$v_{y,V}^{in} = \frac{v_s A_B}{N_H A_{H,i}} \quad (5.61)$$

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

Analogamente à condição adotada na entrada de líquido, considerou-se que apenas vapor entra no sistema pelos orifícios, sendo sua fração volumétrica unitária ($f_V^{in} = 1$). Esta consideração é uma prática comum em virtude da quantidade baixa de líquido arrastado pelo vapor. Adicionalmente para o binário etanol-água, especificou-se a fração mássica de etanol (y_{EV}) na entrada sendo igual a 0,812.

Saída de líquido: adotou-se uma condição de pressão. A ideia foi adicionar uma resistência na saída de líquido que existe em função do prato consequente, o qual não consta no modelo proposto. Desta forma, observa-se a formação de uma coluna de líquido no *downcomer* de saída ($z_2 - z_1$), esta que foi projetada para ser de aproximadamente 20 cm de altura no estado estacionário. Assim, para especificar tal pressão recorreu-se a equação de Bernoulli a seguir:

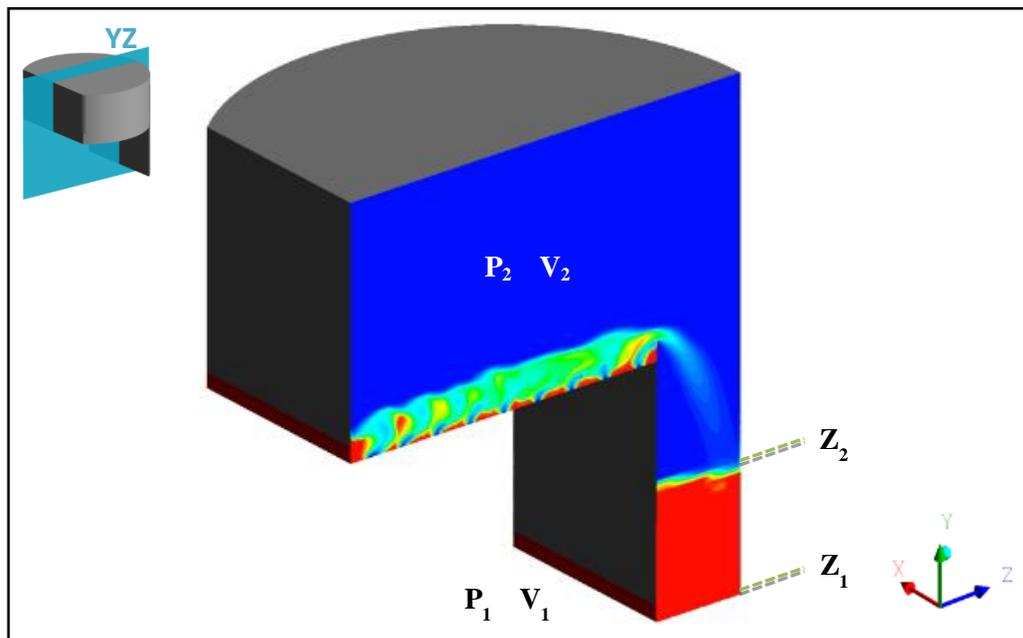
$$\frac{P_1}{\gamma} + \frac{v_1^2}{2g} + z_1 = \frac{P_2}{\gamma} + \frac{v_2^2}{2g} + z_2 \quad (5.62)$$

O termo γ é a multiplicação da massa específica do fluido (ρ_L) pela gravidade (g). Por motivos de simplificação, considerou-se a superfície estagnada ($v_2 = 0$) e $P_2 = P_{ref}$. Pelo manuseio algébrico, chega-se a Equação (5.63):

$$P_1 = P_{ref} + \rho_L g \left[\frac{v_1^2}{2g} + (z_2 - z_1) \right] \quad (5.63)$$

onde os índices 1 e 2, indicam as posições de referência para avaliação das variáveis no fundo do *downcomer* e na superfície da piscina formada, respectivamente, conforme a Figura 5.3.

Figura 5.3 - Representação dos pontos de referência para cálculo da pressão de saída do líquido.



Fonte: Acervo pessoal.

Saída de vapor: também foi adotada uma condição de pressão. Especificou-se uma pressão absoluta de 1 atm (relativa igual a zero), pois esta é a pressão de operação da coluna em estudo.

Paredes: a condição de não deslizamento na parede ($v_{wall} = 0$) foi imposta aos dois fluidos.

Sumariza-se no Quadro 5.1 as informações requeridas pelo *software* CFX-Pre. Estes dados foram obtidos do estudo experimental de Solari e Bell (1986) e dos estudos de Noriler et al. (2010).

Quadro 5.1 - Informações complementares para a especificação do modelo e condições de contorno.

Verificação do Modelo		Modelo para Transferência de Espécies Químicas	
Fluidos			
Líquido	Gás	Líquido	Gás
Água	Ar	Mistura Água-Etanol	Mistura Água-Etanol
Densidade [kg m³]			
997,0	1,185	853,8	1,292
Temperatura de Entrada [° C]			
25*	25*	81,65*	83,75*
Fração Mássica de Etanol na Entrada			
-	-	0,785	0,812
Condições Operacionais			
Q_L [m ³ s ⁻¹]	F_s [m s ⁻¹ (kg m ⁻³) ^{0,5}]	Q_L [m ³ s ⁻¹]	F_s [m s ⁻¹ (kg m ⁻³) ^{0,5}]
$6,94 \times 10^{-3}$	1,015	$6,94 \times 10^{-3}$	1,015

Fonte: Acervo pessoal.

* Todos os fluidos foram considerados isotérmicos.

CAPÍTULO 6

PROCEDIMENTO NUMÉRICO

Na modelagem matemática de escoamentos multifásicos - como o do problema em questão - e de problemas complexos de engenharia são utilizadas equações diferenciais parciais não lineares que não possuem solução analítica, ou que a solução analítica é aplicável somente mediante hipóteses simplificativas que desviam demasiadamente do fenômeno físico real. Portanto, para a obtenção da solução computacional faz-se necessária à adoção de uma abordagem numérica. Segundo Ferziger e Perić (2002), os componentes de um método de solução numérica são:

- I) Modelo matemático;
- II) Método de discretização;
- III) Sistema de coordenadas e base vetorial;
- IV) Malha numérica;
- V) Aproximações finitas;
- VI) Método de resolução;
- VII) Critério de convergência.

6.1. Modelo Matemático

O primeiro passo de qualquer método numérico é o modelo matemático, isto é, a definição das equações parciais diferenciais ou integral-diferenciais além das condições de contorno. O modelo matemático dependerá das características do escoamento (compressibilidade, turbulência, dimensionamento espacial e outros atributos). O Capítulo 5 já apresentou o conjunto das equações abordadas neste trabalho para a modelagem do escoamento multifásico em pratos de destilação.

6.2. Método de Discretização

Após a seleção do modelo matemático, há a necessidade de se escolher um método de discretização adequado, ou seja, um método de aproximação das equações diferenciais por um sistema de equações algébricas para as variáveis em um conjunto de pontos discretos no espaço e no tempo. Existem muitas abordagens, entretanto, no contexto dos pacotes comerciais de abrangência industrial e acadêmica, como é o caso do ANSYS CFX, o Método dos Volumes Finitos (MVF) é o mais empregado na discretização das equações diferenciais. A preferência é em função da robustez, devido às características conservativas do MVF (MALISKA, 2004).

O método dos volumes finitos é utilizado para resolver modelos que sejam, parcial ou totalmente, a parâmetros distribuídos (PINTO; LAGE, 2001). Consequentemente, esta abordagem tem como ponto de partida a discretização da forma integral das equações da conservação diretamente em um local físico. O domínio computacional - através de uma malha - é subdividido em uma série de volumes de controle finitos, sobre os quais devem ser aplicadas as equações aproximadas provenientes da aplicação da análise numérica, de forma que estas representem a conservação das propriedades relevantes em cada um desses volumes. Dessa forma, não existe a possibilidade da existência de gerações/sumidouros de quantidades, como massa, quantidade de movimento e energia, no interior do domínio de cálculo.

Segundo ANSYS Inc. (2009), o ANSYS CFX aborda o método dos volumes finitos baseados em elementos, isto é, criam-se os volumes de controle para os balanços a partir de discretizações triangulares ou de paralelogramos, em 2D, e de tetraedros e hexaedros em 3D pelo método das medianas (MALISKA, 2004). Desta forma, os nós da malha tornam-se os centroides dos volumes de controle utilizados no MVF. Cada centroide representa o nó computacional onde os valores das variáveis são calculados. Estratégias de interpolação são utilizadas para expressar os valores das variáveis na superfície dos volumes de controle em termos dos valores nodais (centroide do volume de controle).

6.3. Sistema de Coordenadas e Base de Vetores

As equações da conservação podem ser escritas nas mais diversas formas, dependendo do sistema de coordenadas e a base vetorial utilizada. Neste trabalho utilizou-se

apenas coordenadas cartesianas com origem no centro do prato, conforme a Figura 4.2 apresentada no Capítulo 4.

6.4. Malha Numérica

As localizações discretas nas quais as variáveis são calculadas definem-se pelo *grid* numérico que consiste essencialmente de uma representação discreta do domínio geométrico no qual o problema é então solucionado. Conforme mencionado no Item III deste Capítulo, há a divisão do domínio de solução em um número finito de subdomínios, chamados também de volumes de controle que assim constituem a malha numérica. Como cada equação diferencial dá origem a n equações algébricas (em que n é o número de volumes elementares em que o domínio é dividido), o número de equações algébricas será tanto maior quanto mais refinada for a malha numérica. A malha - referenciada também pela palavra inglesa *mesh* - construída no ANSYS CFX através do *Meshing*, não consiste propriamente a malha numérica, mas como referência para a construção dos volumes finitos. Utilizando as medianas, um volume de controle é construído ao redor de cada nó do *grid*, definidas por linhas que se juntam do centro das arestas ao centro do elemento, contornando o nó. No problema aqui abordado, optou-se por um *mesh* tridimensional conforme as características já apresentadas na Subseção 4.3.

6.5. Aproximações Finitas

Seguindo a elaboração da malha numérica, faz-se a escolha das aproximações a serem usadas no processo de discretização. No MVF, seleciona-se os métodos de aproximação das integrais de superfície e volume. Para obter uma equação algébrica particular a um controle de volume, as integrais de superfície e volume necessitam ser aproximadas utilizando formulação quadrática (FERZIGER; PERIĆ, 2002). As integrais volumétricas representam fontes ou termos de acúmulo, enquanto que as integrais de superfície representa a soma dos fluxos.

Muitas aproximações discretas desenvolvidas para estudos em CFD são baseadas em aproximações das expansões de séries das funções contínuas (como as séries de Taylor). A ordem de acurácia da aproximação é determinada pelo expoente do espaçamento

da malha ou do fator do passo no tempo do maior termo na parte truncada da expansão em séries, o qual se trata do primeiro termo excluído durante a aproximação. O aumento da ordem de acurácia de uma aproximação geralmente implica que os erros são reduzidos mais rapidamente com o refinamento da malha ou do passo temporal. O ANSYS CFX utiliza-se de aproximações com acurácia de segunda ordem sempre que possível, balanceando a robustez e carregamento computacional (ANSYS Inc., 2009).

Conforme discutido no Capítulo 5, as equações de conservação apresentam termos que representam o acúmulo, o transporte convectivo, o transporte difusivo e a geração de uma dada grandeza. De acordo com Patankar (1980), se a variável dependente é denotada por ϕ , a equação diferencial geral é dada pela Equação (6.1):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho\mathbf{v}\phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) + S \quad (6.1)$$

em que os quatro termos da equação são o termo transiente, o convectivo, o difusivo e o termo fonte, respectivamente.

A integração de cada uma dessas categorias de termos sobre os subdomínios da malha gera variáveis localizadas em diferentes posições espaciais e temporais. Assim, para que essas variáveis estejam convenientemente localizadas no tempo e no espaço de modo que se possa relacioná-las, faz-se necessário o uso de funções de interpolação. Existem vários esquemas de interpolação para definir as variáveis nas faces dos volumes de controle, tais como esquemas tradicionais (ex: diferença central), esquemas de ordem superior, entre outras abordagens. A escolha do melhor esquema depende do modelo adotado. Neste trabalho, as funções de interpolação usadas para cada classe de termo foram:

- **Termos difusivos:** O ANSYS CFX recorre a funções de forma para avaliar espacialmente tal categoria de termos, o que é dependente do tipo de elemento (hexaedro, tetraedro, pirâmide ou cunha) gerado na etapa de definição da malha.

- **Termos convectivos/advectivos:** Adotou-se o esquema de baixa ordem (*Upwind*) por ser mais robusto e mais rápido.
- **Termos transientes:** foram interpolados utilizando o esquema de Euler de primeira ordem (*First Order Backward Euler*).

6.6. Método de Resolução

A discretização resulta em um grande sistema não linear de equações algébricas. Em virtude da suposição de incompressibilidade, a solução das equações governativas é dificultada pela falta de uma equação independente para a pressão. A implicação dá-se no fato de a equação da continuidade e de quantidade de movimento serem requeridas para resolver os campos de pressão e velocidades em escoamentos incompressíveis. De modo a relacionar a pressão com a velocidade para um escoamento deste tipo há duas abordagens possíveis: a solução acoplada e a solução segregada do sistema de equações.

O ANSYS CFX utiliza a abordagem acoplada, a qual resolve as equações hidrodinâmicas como um sistema único. A abordagem da solução utiliza a discretização totalmente implícita das equações em qualquer espaço de tempo. A solução de cada conjunto de equações de campo consiste em basicamente duas operações: a linearização das equações e montagem da matriz solução, e por fim, a solução das equações lineares.

O sistema de equações algébricas resultantes da aplicação do método numérico é então resolvido por métodos de solução lineares, como os tradicionais métodos de eliminação de Gauss e de decomposição LU. O comportamento de convergência de muitas técnicas de inversão de matrizes pode ser melhorado através de técnicas “*Multigrid*”. O ANSYS CFX utiliza a técnica de *Multigrid* Algébrico, a qual se trata de uma técnica de fatoração, consistindo em um *solver* iterativo em que a solução exata é aproximada durante o processo de iteração. Neste método, é criada uma malha virtual mais grosseira a partir da malha original do problema. Um sistema de equações discretas é então formado para malha grosseira somando-se as equações geradas para a malha fina. Isso resulta em uma reestruturação virtual do espaçamento da malha durante o curso das iterações, que são refinadas até a obtenção de uma solução exata. O uso do esquema *Multigrid* pode reduzir significativamente o número de iterações e o tempo de processamento requerido para obter a

convergência da solução, principalmente em problemas que requerem o uso de uma malha numérica muito refinada.

6.7. Critério de Convergência

Finalmente, necessita-se especificar o critério de convergência para o método iterativo. Segundo ANSYS Inc. (2011a), uma medida de quão boa é a convergência de uma solução pode ser obtida através do acompanhamento dos resíduos de cada equação ao final de cada intervalo de tempo (*timestep*). O resíduo de uma equação é compreendido como o quanto os termos do lado esquerdo da equação diferem dos termos do lado direito em um determinado ponto do espaço. Se a solução é dita “exata” (o que significa que cada equação relevante nos volumes de controles é satisfeita precisamente, o que não implica que a solução exata vai de encontro com o que acontece na realidade), logo o resíduo é zero. Se a solução está convergindo, os resíduos devem diminuir a cada passo de tempo sucessivo. Visando tornar as escalas dos resíduos significativas, o *solver* normaliza os valores dividindo as escalas apropriadas em cada ponto. Os gráficos gerados apresentam os resíduos normalizados em escala logarítmica de base 10. Conforme ANSYS Inc. (2011b), valores da raiz quadrada da média residual (RMS, do inglês *Root Mean Square*) abaixo de 10^{-4} pode ser considerada suficiente para muitas aplicações na engenharia, e por isso, esta foi a meta residual adotada como critério de convergência.

CAPÍTULO 7

RESULTADOS

Nesta seção são apresentados os resultados e discussões pertinentes ao estudo da fluidodinâmica em um estágio de destilação conforme as configurações expostas nas seções anteriores.

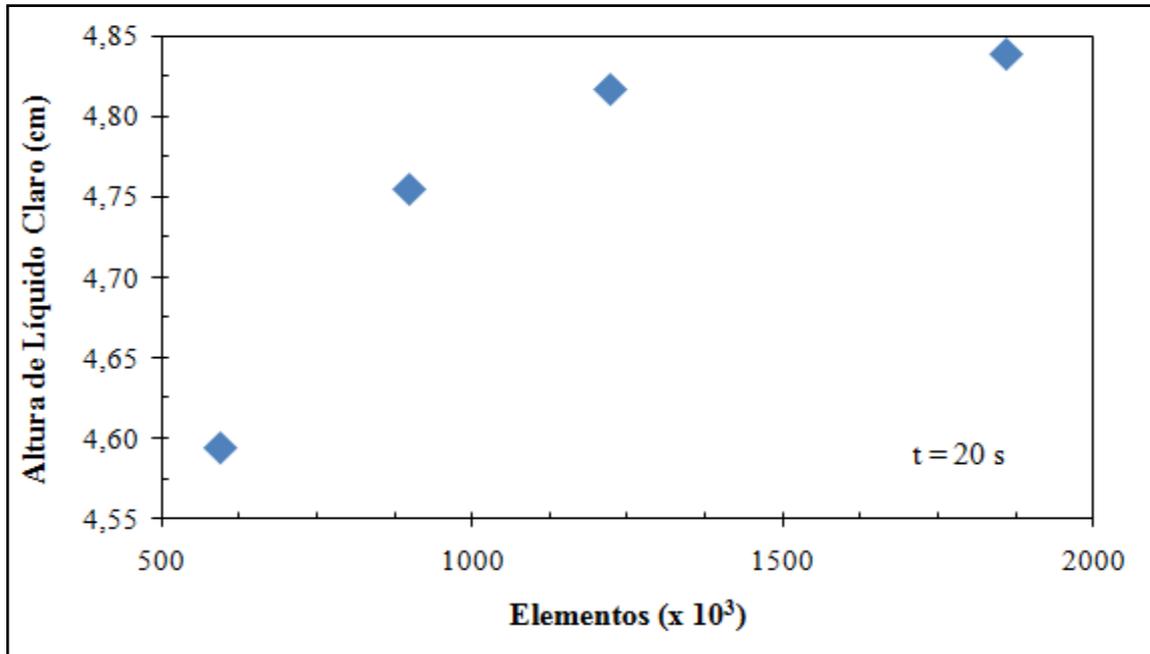
7.1. Teste de Independência de Malha

Para avaliar os erros numéricos associados às malhas, foi escolhido o parâmetro hidráulico altura de líquido claro como variável global e a componente w da velocidade do líquido como variável local. Visando a ponderar a relação entre o custo e a acurácia, também se verificou o tempo de processamento gasto em cada simulação.

A Figura 7.1 apresenta a variação da altura de líquido claro em função do número de elementos do *mesh*, enquanto a Figura 7.2 mostra o tempo gasto com processamento em cada simulação realizada.

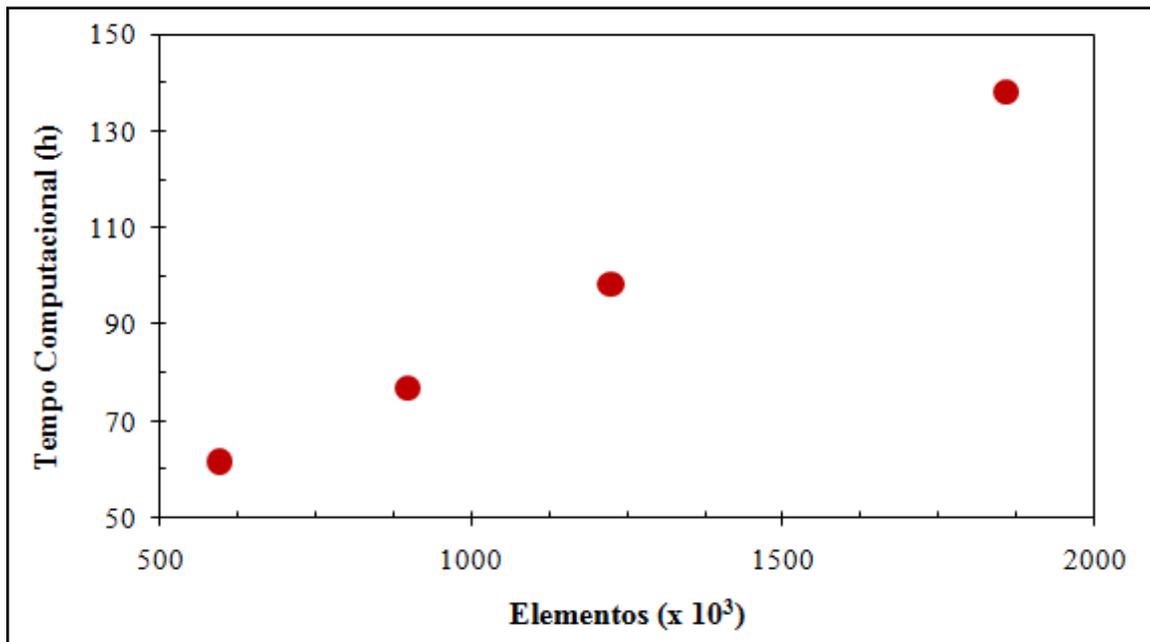
Pode ser visto na Figura 7.1 que a partir de aproximadamente 1.200.000 elementos, a variação na altura de líquido claro é pequena, na ordem de 0,05 mm, sugerindo que maior refinamento não se faz necessário, pois o ganho em precisão é muito baixo se comparado com o aumento do tempo computacional – apresentado na Figura 7.2. Para as malhas estudadas, tem-se um aumento quase que linear do tempo de processamento gasto na resolução das equações que descrevem a fluidodinâmica no prato. Estima-se que um ganho na ordem de 0,1% de precisão para a variável global avaliada é obtido com um aumento de tempo computacional de 40%.

Figura 7.1 – Altura de líquido claro no prato em função da quantidade de elementos das malhas no instante de 20 s.



Fonte: Acervo pessoal.

Figura 7.2 - Tempo de processamento em função da quantidade de elementos da malha para 20 s de tempo real de escoamento.



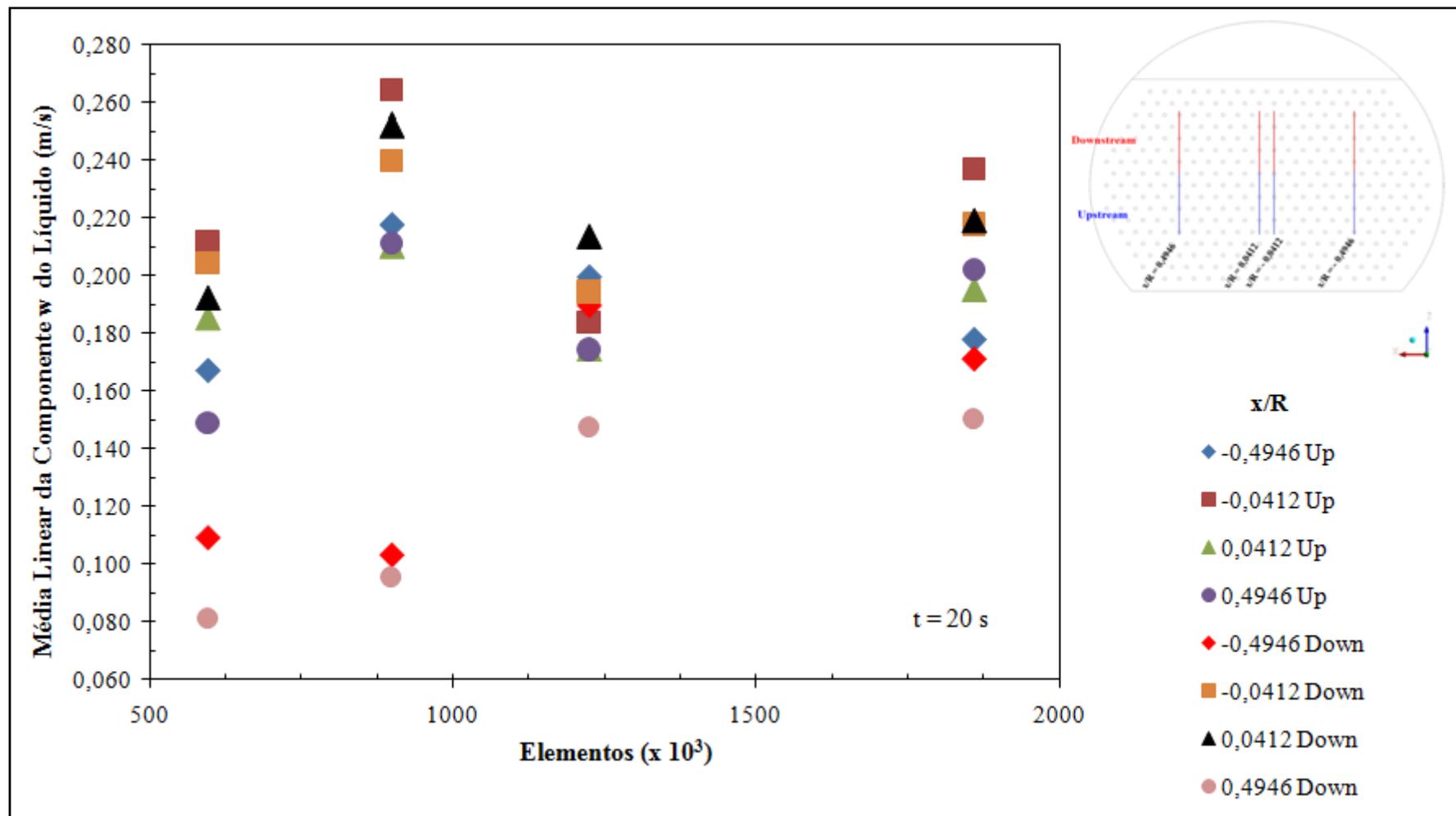
Fonte: Acervo pessoal.

Para a variável local escolhida, a Figura 7.3 apresenta os valores da média da componente w da velocidade do líquido aferida nas regiões do *upstream* e *downstream* das malhas testadas em função da quantidade de elementos. As velocidades foram tomadas como médias nas linhas situadas em um plano ZX acima da base do prato ($y = 0,038$ m) e determinadas pela coordenada adimensional x/R . As coordenadas adimensionais indicam que 0 é o centro do prato e $|1|$ é a parede.

Tem-se, pela Figura 7.3, que a variação da velocidade local também não é significativa a ponto de se comprometer com o uso de maiores recursos computacional. Os maiores desvios encontram-se região do *upstream* chegando a no máximo 22,4% entre as últimas malhas da coordenada $x/R = -0,0412$, enquanto que na região do *downstream*, a maior variação dá-se na magnitude de 10,9% para $x/R = -0,4946$. Apesar destas discrepâncias, há a tendência de estabilização dos valores para duas posições analisadas na região do *downstream*, sendo $x/R = -0,4946$ e $x/R = 0,4946$. Além disso, nas outras posições existe um comportamento oscilatório dos valores em torno de uma média, indicando que os resultados não se alterarão significativamente com o aumento da quantidade de elementos da malha aos custos de maiores gastos computacionais. Estes dois comportamentos (estabilização e oscilação) também podem ser inferidos a partir dos dados relatados por Gesit, Nandakumar e Chuang (2003) em seus estudos de sensibilidade do *grid*. Assim, a partir destes resultados, já se tem a dimensão da complexidade da natureza do escoamento de fluxo cruzado presente nos pratos de destilação.

Com base nas análises discutidas, empregou-se a malha 3 como referência para obtenção dos dados numéricos e para evitar desvios expressivos da solução em função da quantidade de elementos, ao mesmo tempo evitando o dispêndio computacional desnecessário. As características desta malha já foram apresentadas anteriormente na Tabela 4.2.

Figura 7.3 - Componente w da velocidade do líquido em função da quantidade de elementos das malhas nas regiões *upstream* e *downstream* avaliada em um plano ZX ($y = 0,038$ m) para diferentes coordenadas adimensionais (x/R) no instante de 20 s.



Fonte: Acervo pessoal.

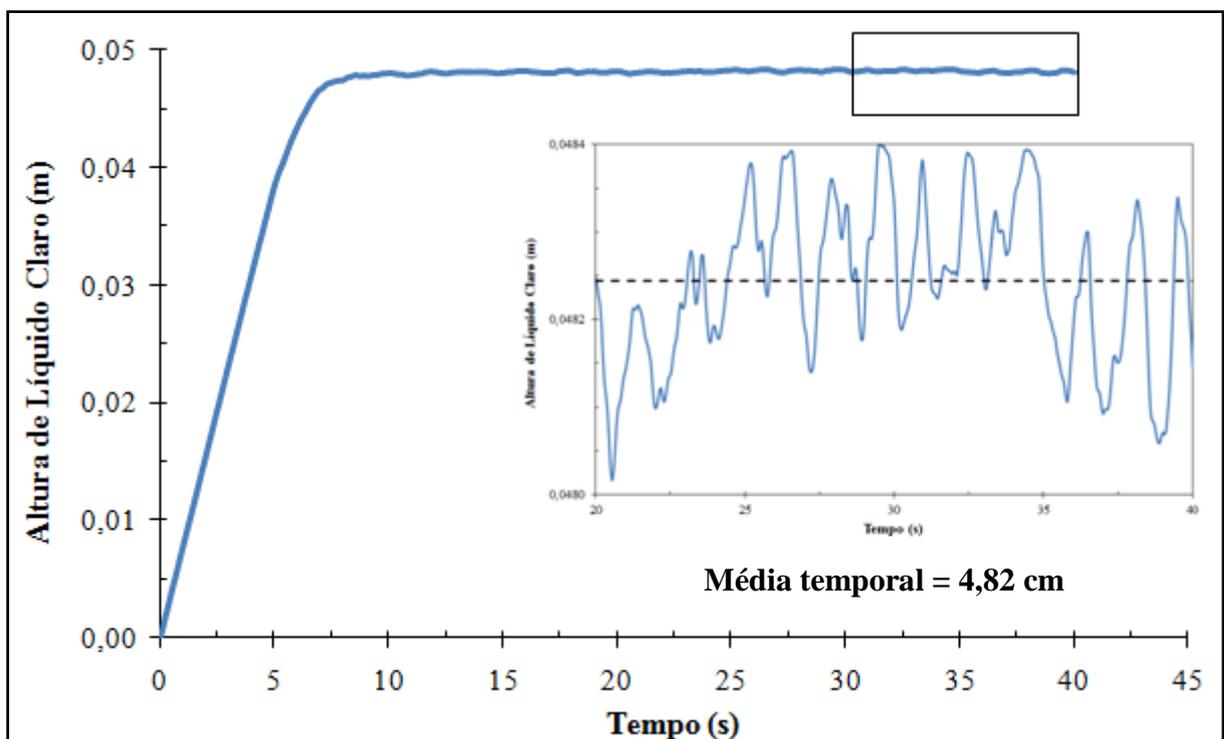
7.2. Verificação do Modelo

Para verificar o modelo numérico proposto frente aos fenômenos esperados em pratos perfurados, fez-se uma análise qualitativa e quantitativa de diferentes parâmetros, utilizando dados experimentais da literatura como base de comparação.

7.2.1. Altura de Líquido Claro

A abordagem inicial para avaliar o modelo CFD deu-se através da comparação do valor do parâmetro hidráulico: altura de líquido claro. A Figura 7.4 ilustra os resultados obtidos nas simulações para a altura de líquido claro em função do tempo e em detalhe, a oscilação da propriedade.

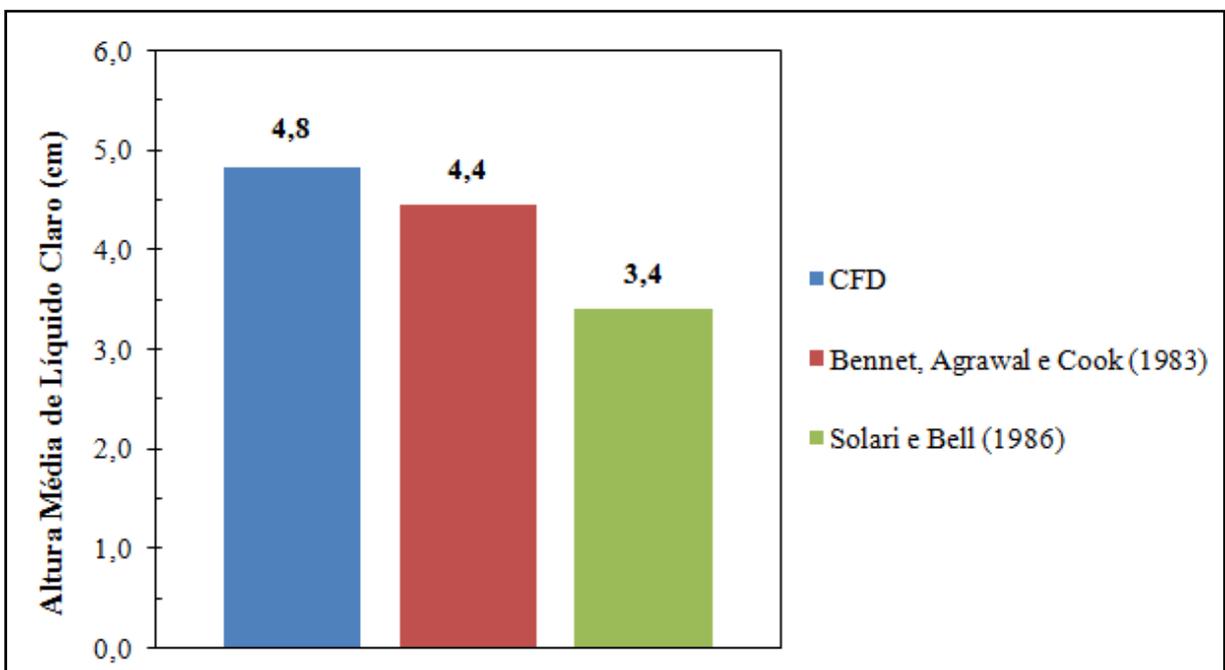
Figura 7.4 - Altura de líquido claro em função do tempo.



Fonte: Acervo pessoal.

Através da variação temporal do parâmetro, observa-se que a altura aumenta rapidamente ao longo de aproximados 8 s de escoamento real, até atingir um patamar com pequenas oscilações em torno de uma média. O crescimento dá-se na etapa de enchimento do prato, pois à medida que o inventário de líquido represado aumenta, a fração volumétrica de líquido também cresce por consequência. O detalhe ilustra o comportamento oscilatório estabelecido durante os últimos 20 s de escoamento real, evidenciando que o fluxo não apresenta um estado estacionário bem definido, mas sim um estado quase estacionário. Esta característica quase estacionária do escoamento foi verificada por inúmeros estudos anteriores, entre eles os de Noriler et al. (2010), Gesit, Nandakumar e Chuang (2003) e van Baten e Krishna (2000). Assim, para fins de comparação, estimou-se um valor médio da altura de líquido claro durante este período de 20 s e gerou-se a Figura 7.5, a qual apresenta a média inferida frente os dados obtidos via correlações da literatura.

Figura 7.5 - Comparação entre as alturas de líquido claro simulada e obtidas da literatura.



Fonte: Acervo pessoal.

Analisando a Figura 7.5, infere-se que os dados extraídos via simulação apresentaram concordância com a correlação teórica de Bennet, Agrawal e Cook (1983), com desvio de apenas 8,4%. Já para a correlação empírica de Solari e Bell (1986), a discrepância

aumenta para próximo de 41,5%, porém já esperado, pois Gesit, Nandakumar e Chuang (2003) e van Baten e Krishna (2000) afirmam que os resultados CFD e a correlação de Bennet, Agrawal e Cook (1983) tendem a superestimar os dados de natureza experimental. Ainda segundo os autores, a presença de impurezas suprime o fenômeno da coalescência, aumentando a retenção gasosa e conseqüentemente, reduzindo a altura de líquido claro. Deste modo, acredita-se que a possível presença de impurezas/interferências seja a explicação que justifique os valores mais baixos encontrados pela correlação de Solari e Bell (1986).

A falta de dados experimentais de altura de líquido claro para pratos desta dimensão e características, além de ponderar as incertezas da correlação empírica analisada, dificulta uma verificação mais profunda deste parâmetro hidráulico.

7.2.2. Perfis da Média Linear da Componente w do Vetor Velocidade do Líquido

A distribuição de velocidade no prato é o principal campo para verificar o modelo sugerido. Os dados de velocidades extraídos com a aplicação do modelo numérico foram comparados com os campos de velocidades do trabalho experimental de Solari e Bell (1986). Primeiramente, o comportamento desta variável ao longo do tempo foi analisado para três posições distintas de x/R para as duas regiões do prato, apresentando assim, a Figura 7.6. Outra vez tem-se que as coordenadas adimensionais x/R indicam que 0 é o centro do prato e $|1|$ é a parede.

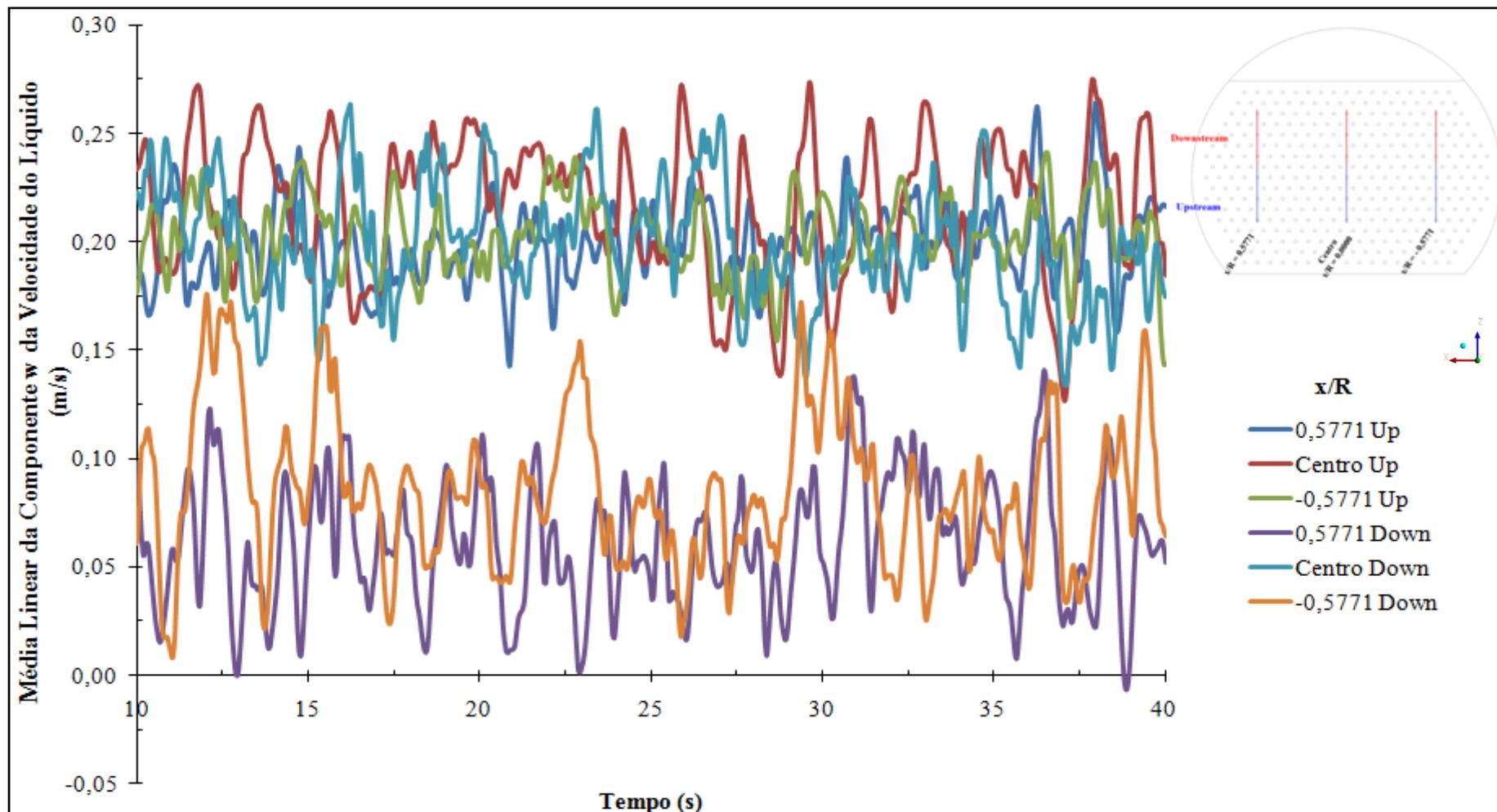
O perfil das velocidades médias nas linhas reportado na Figura 7.6, novamente mostra a complexidade do escoamento e a oscilação da variável no tempo. Tem-se que no período analisado de 30 s (após o enchimento do prato que se dá em aproximados 10 s de escoamento real), a velocidade altera-se constantemente no tempo, caracterizando o já mencionado regime quase estacionário. As variações na região *downstream* são mais acentuadas que na *upstream*, provavelmente em virtude dos efeitos de mistura que tornam-se mais significativos à jusante da entrada de líquido e também devido a influência da condição de contorno atribuída na entrada de líquido. Através desta observação, tem-se que o cálculo da média temporal deve ser feito com rigor, utilizando-se uma amostragem com a maior quantidade possível de dados.

A Figura 7.7 e a Figura 7.8 apresentam os perfis de velocidades da média da componente w do vetor velocidade do líquido para as regiões *upstream* e *downstream* em função da coordenada adimensional x/R , respectivamente.

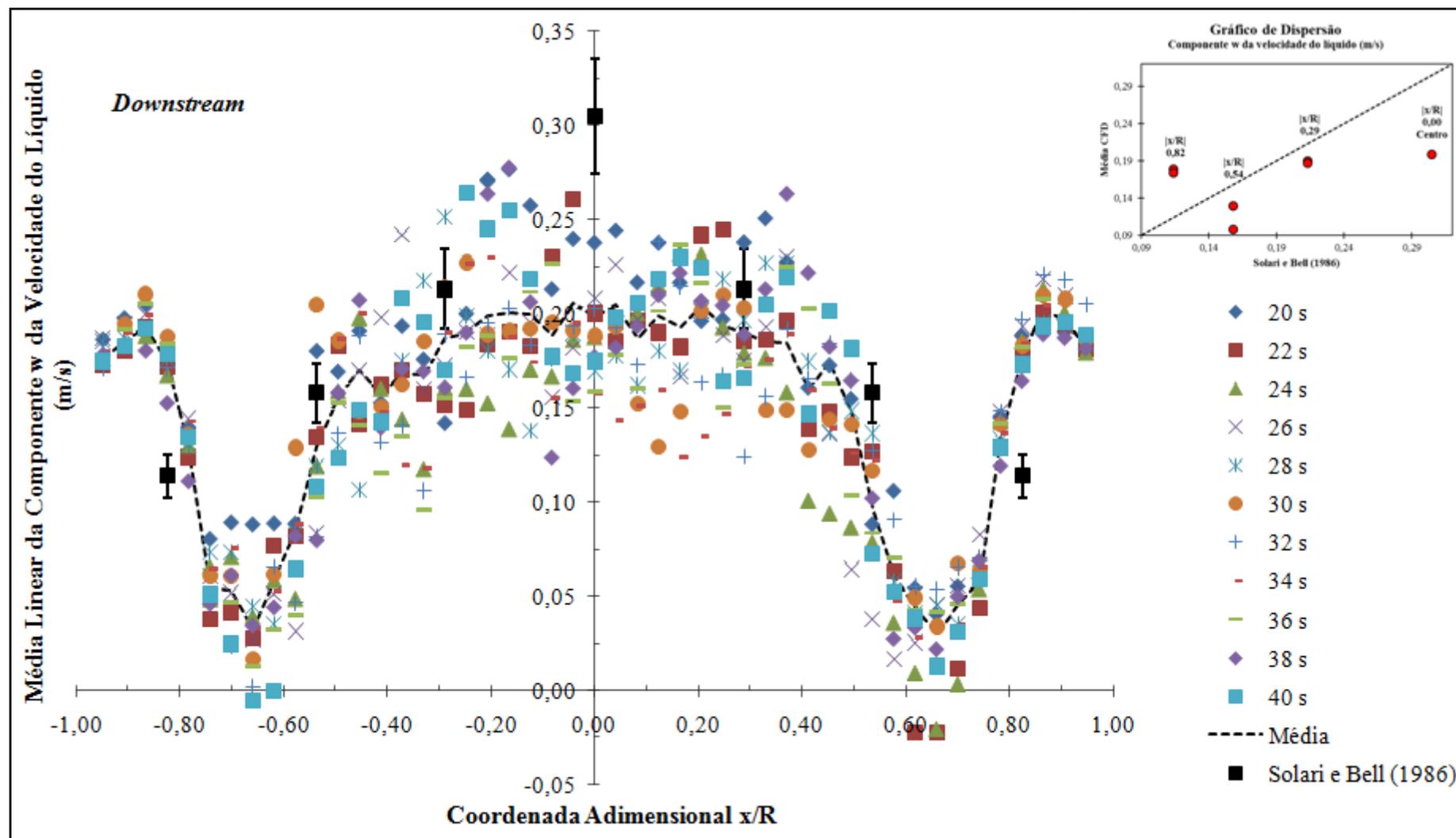
Pela análise das figuras, a disposição dos pontos nos gráficos já torna clara a natureza desordenada da hidrodinâmica do escoamento, com uma dispersão significativa para ambas regiões, sendo que para a *downstream* o perfil é mais conturbado, verificando-se até velocidades negativas, o que indica fluxo retrógrado. Os perfis gerados demonstram um comportamento de fluxo simétrico na direção z , sugerindo que a hipótese de simetria poderia ser utilizada sem perdas significativas de confiabilidade e exatidão. As amostragens a cada 2 s de escoamento real ilustram a transitoriedade do escoamento, enquanto a média (estimada através de um conjunto de dados de velocidade aferida a cada 0,05 s para cada coordenada x/R) fornece um valor representativo do campo de escoamento, além de ilustrar o perfil do fluxo.

Comparando os dados obtidos via simulação com os dados de Solari e Bell (1986), verifica-se que apesar da irregularidade, pontos dos perfis de velocidade são próximos aos experimentais, principalmente nas regiões intermediárias do prato ($0,3 < |x/R| < 0,4$) para ambas as regiões estudadas. Também é nítido que a maior dificuldade de verificação dá-se para o centro do prato, onde se observa os maiores desvios. Entretanto, tem-se que os desvios mais significativos dão-se nas regiões sem dados experimentais, e não nas localizações exatas reportadas na literatura.

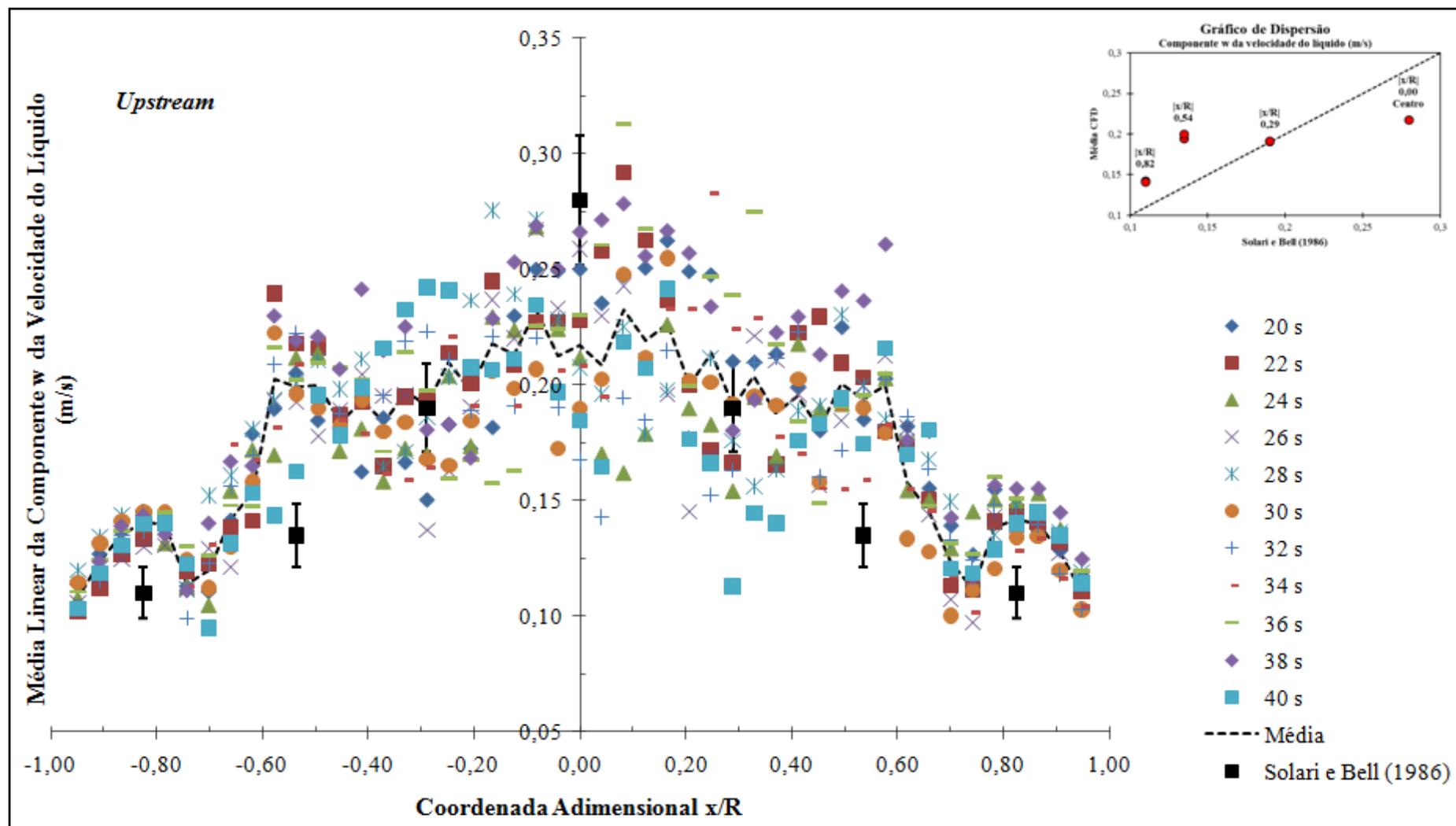
Figura 7.6 - Variação temporal da média da componente w da velocidade do líquido aferida em três diferentes coordenadas adimensionais x/R para as regiões *upstream* e *downstream*.



Fonte: Acervo pessoal.

Figura 7.7 - Perfil da componente w do vetor velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) para a região *downstream*.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 7.8 - Perfil da componente w do vetor velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) para a região *upstream*.

Fonte: Acervo pessoal.

Na região *downstream*, o perfil ilustrado pela média da componente w da velocidade ficou abaixo do perfil experimental quase que integralmente, com um desvio médio de 33,4% em relação aos pontos experimentais. As discrepâncias mais evidentes dão-se na porção central e de $0,5 < |x/R| < 0,8$ do prato. Isto é corroborado, avaliando-se o gráfico de dispersão no detalhe da figura, onde se observa que o modelo CFD subestimou as velocidades de uma forma geral, com exceção dos pontos próximos as paredes. Além do mais, o distanciamento mais eminente em relação à reta pontilhada (situação de igualdade), de fato, é no ponto central. À medida que se aproxima das paredes, há variações bruscas de velocidade. Acredita-se que a presença do vertedor ao fim do prato pode provocar fluxo retrógrado e recirculação, possível explicação para tais variações. Por fim, ressalta-se que o borbulhamento é intenso pela injeção constante de gás e que a condição de alta vazão gasosa ($F_S = 1.015$) interfere decisivamente no padrão de escoamento do líquido.

Já na região *upstream*, o perfil da componente w da velocidade do líquido assemelha-se pouco mais com os dados experimentais, com desvio médio de 19,6% em relação aos pontos experimentais. Observam-se os maiores valores de velocidade na região central do prato e quando se afasta desta região em direção às paredes, essas velocidades sofrem oscilação e desaceleração lentamente. Novamente, através da análise da dispersão dos dados, tem-se que próximo às paredes, o perfil obtido via CFD superestimou as velocidades, provavelmente em virtude das ocorrências de caminhos preferenciais ou zonas de recirculação. A melhor paridade em relação aos dados experimentais ocorreu na região de $|x/R| = 0,29$. As piores foram no centro, onde a velocidade foi inferior aos dados experimentais e em $|x/R| = 0,54$, onde a velocidade foi superestimada numericamente. Mais uma vez destaca-se a influência da localização da região estudada, pois esta se encontra mais próxima da entrada de líquido, indicando efeito de contorno de entrada.

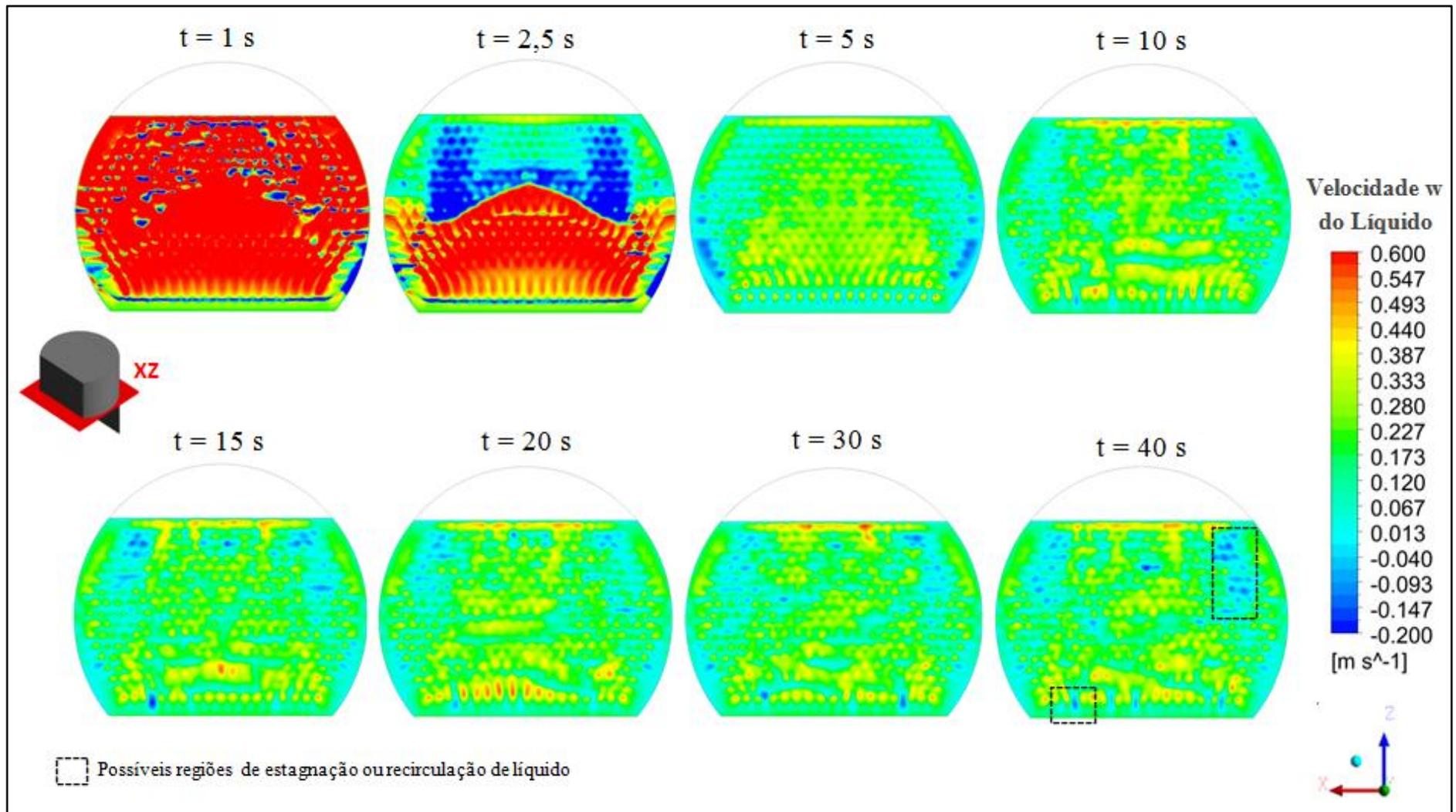
As medições em diferentes instantes de tempo mostram a dificuldade de obtenção de um valor médio representativo e mostra também a natureza transiente dos escoamentos multifásicos. A quantidade limitada de pontos experimentais é um fator que dificulta uma comparação e obtenção de conclusões mais abrangentes.

O Apêndice B apresenta os dados extraídos dos trabalhos de Solari e Bell (1986), enquanto que o Apêndice C apresenta os dados da média da componente w das velocidades obtidas via experimentação numérica; ambos utilizados na construção da Figura 7.7 e da Figura 7.8.

7.2.3. Mapas de Contornos de Velocidades

A Figura 7.9 ilustra os mapas de contornos da componente w da velocidade do líquido, situados no plano ZX ($y = 0,038$ m) acima da base do prato perfurado em instantes definidos de tempo.

A diferença de cores evidencia a variação da velocidade do líquido por todo o prato. Nos instantes de 1 s até aproximadamente 10 s, tem-se grandes alterações devido à fase de enchimento, na qual o carregamento líquido no prato ainda não está definido. É notória uma intensa mistura e alterações significativas de velocidade tanto no espaço, quanto no tempo. Porém, existem algumas regiões que apresentam características quase constantes depois de decorridos 15 s de escoamento real. As regiões azul-escuras são as regiões onde a velocidade é negativa, ou seja, com sentido contrário ao estabelecido pelo eixo de referência e, portanto indicam regiões de fluxo retrógrado e/ou recirculação (existência já verificada pelo perfil de velocidade). Tais fenômenos também são noticiados em pontos discretos próximos às paredes e à entrada de líquido. Estas regiões sofrem o efeito do vertedor e da parede, compreendendo parte da região do *downstream*. Já as regiões azul-claras são regiões de velocidade reduzida, ou até mesmo, de estagnação. Tais regiões aparecem na mesma porção das áreas anteriores, além de se estender significativamente perto das paredes mais próximas à entrada de líquido. As regiões mais avermelhadas são regiões de maior velocidade, presente na entrada e na saída de líquido. Na entrada dá-se em virtude da carga recente e constante que adentra o prato, enquanto que na saída dá-se em virtude do escorregamento para a região do *downcomer*. Na região mais central do prato, verificam-se alternâncias de cores com o decorrer do tempo, corroborando com a ideia de transitoriedade.

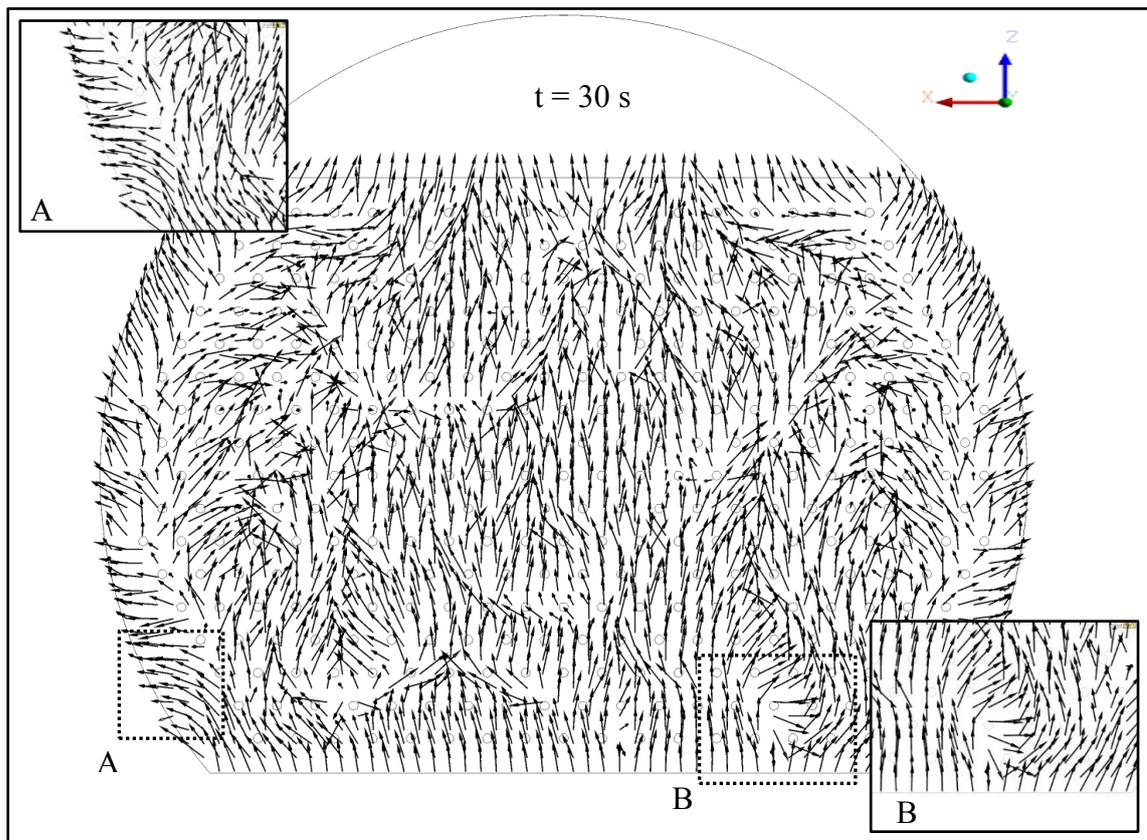
Figura 7.9 - Mapas de contornos da componente w da velocidade do líquido ao longo do tempo em um plano ZX ($y = 0,038$ m).

Fonte: Acervo pessoal.

7.2.4. Vetores Velocidades

A Figura 7.10 ilustra os vetores velocidade do líquido, situados no plano ZX ($y = 0,038$ m) acima da base do prato perfurado para um instante definido de tempo de 30 s, inserida na faixa rotulada quase estacionária.

Figura 7.10 - Mapas de vetores do líquido no prato em um plano ZX ($y = 0,038$ m).



Fonte: Acervo pessoal.

Observando-se a Figura 7.10 é possível ter uma noção do comportamento do líquido sobre o prato, através da direção e sentido dos vetores velocidade. Logo na entrada, é possível verificar o perfil uniforme assumido. Novamente ficam claras as alterações no fluxo que caracterizam a desordem. Além disso, o detalhe B evidencia claramente a existência de regiões de recirculação de fluxo caracterizadas pela existência de vetores em sentido e direção contrários, corroborando com a análise feita pelo mapa de cores. Somado a isso, verifica-se

pelo detalhe A, que próximo à parede há fluxo preferencial de líquido pela região sem orifícios. Tanto a recirculação, zonas estagnadas e caminhos preferenciais prejudicam o desempenho da destilação, pois limitam a transferência de massa entre as fases. Assim, tem-se que as regiões com maior potencial de melhorias para a eficiência do processo dão-se na entrada do prato e próxima às paredes.

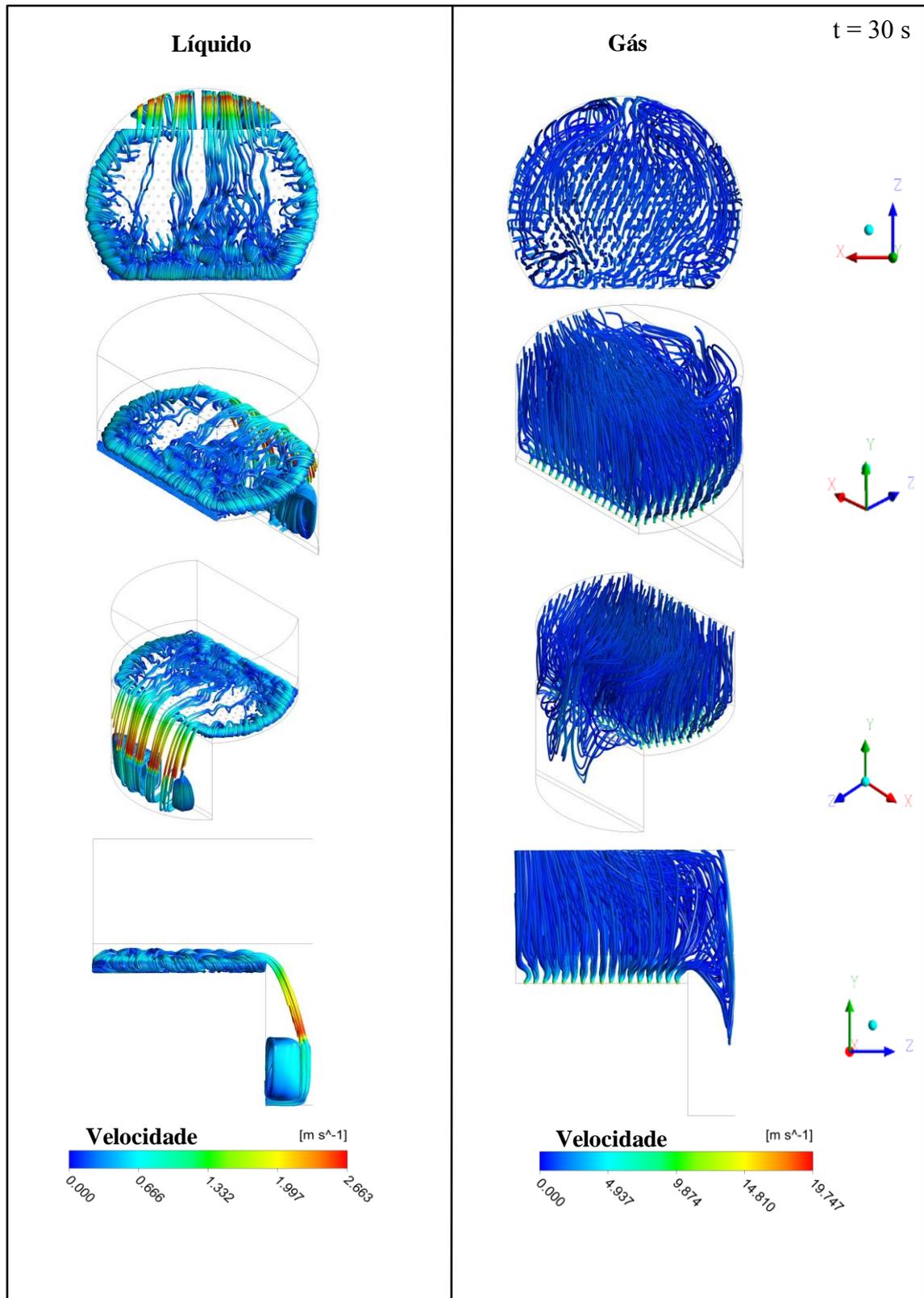
7.2.5. Linhas de Fluxo

Na tentativa de verificar visualmente o deslocamento das fases pelo domínio computacional, a Figura 7.11 apresenta as linhas de corrente (conhecidas também pela palavra inglesa *streamlines*) das duas fases para as condições operacionais estabelecidas.

Observando as várias imagens da Figura 7.11, é possível fazer uma análise qualitativa importante. Nota-se que o líquido ao adentrar o domínio, percorre todo o prato em velocidade moderada e finalmente descende – acelerado pela gravidade - pelo *downcomer*. Neste caminho percorrido, observa-se uma densidade maior de *streamlines* na região direita do prato (direção negativa da coordenada x), o que pode ser interpretado como caminhos preferenciais. Além disso, o padrão de escoamento revela a complexa hidrodinâmica sobre o prato e sugere possíveis áreas de recirculação nas regiões próximas às paredes, caracterizadas pela presença de turbilhões e “caracóis”. Finalmente, não fica claro o arraste de líquido pelo gás, pois não há linhas de fluxo de líquido ascendendo em direção ao topo do domínio. Assim, conclui-se que as condições de operação são adequadas para o funcionamento apropriado do prato.

Já o gás, descreve um movimento quase que em sua totalidade vertical, cruzando toda a camada de líquido e atingindo o topo do prato. Porém, é possível verificar que a saída de gás não apresenta uma disposição completamente uniforme, o que indica que a suposição de não simetria se aplica para o fluxo gasoso. Os perfis de velocidade de gás no prato apresentados por Noriler et al. (2008) evidenciam este comportamento não uniforme.

Figura 7.11 - Linhas de corrente do líquido (esq.) e do gás (dir.) pelo domínio do prato.



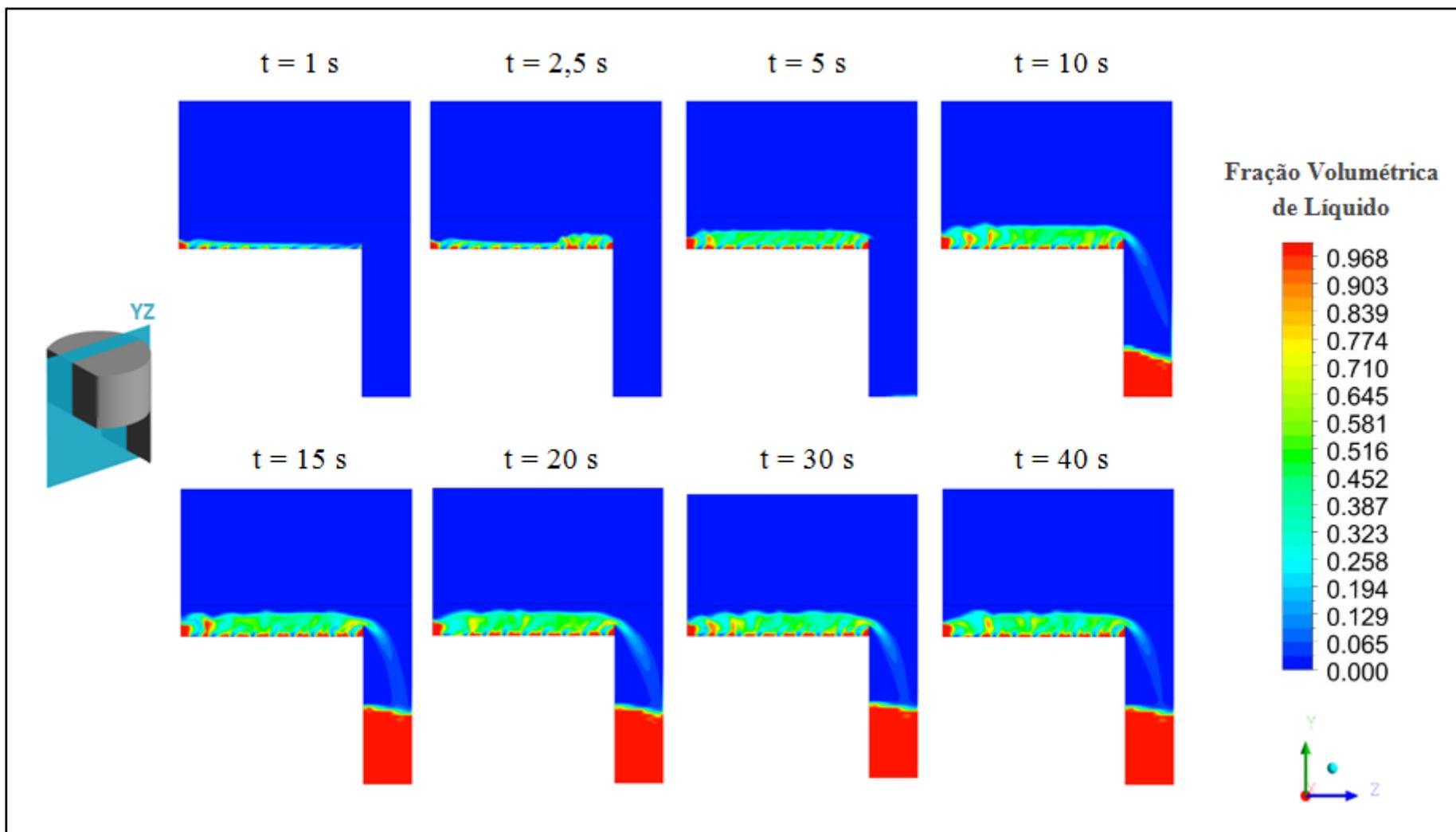
Fonte: Acervo pessoal.

Os padrões de fluxo estão conforme o esperado, de acordo com projetos de uma coluna de destilação. Maior atenção deve ser dada a região do *downcomer* de saída. Nota-se que parte da fase gasosa - proveniente dos furos mais próximos ao vertedor (*weir*) - é arrastada juntamente com o líquido para dentro desta região, entretanto, é nítido o desprendimento desta parcela de gás, evitando assim que ela atinja o estágio inferior. Este fenômeno é esperado, uma vez que segundo Kister (1992), nesta região há o desprendimento das fases. Além de permitir a descida, uma das funções do *downcomer* é promover esta separação de fases evitando o comprometimento da eficiência do processo.

7.2.6. Campos de Frações Volumétricas

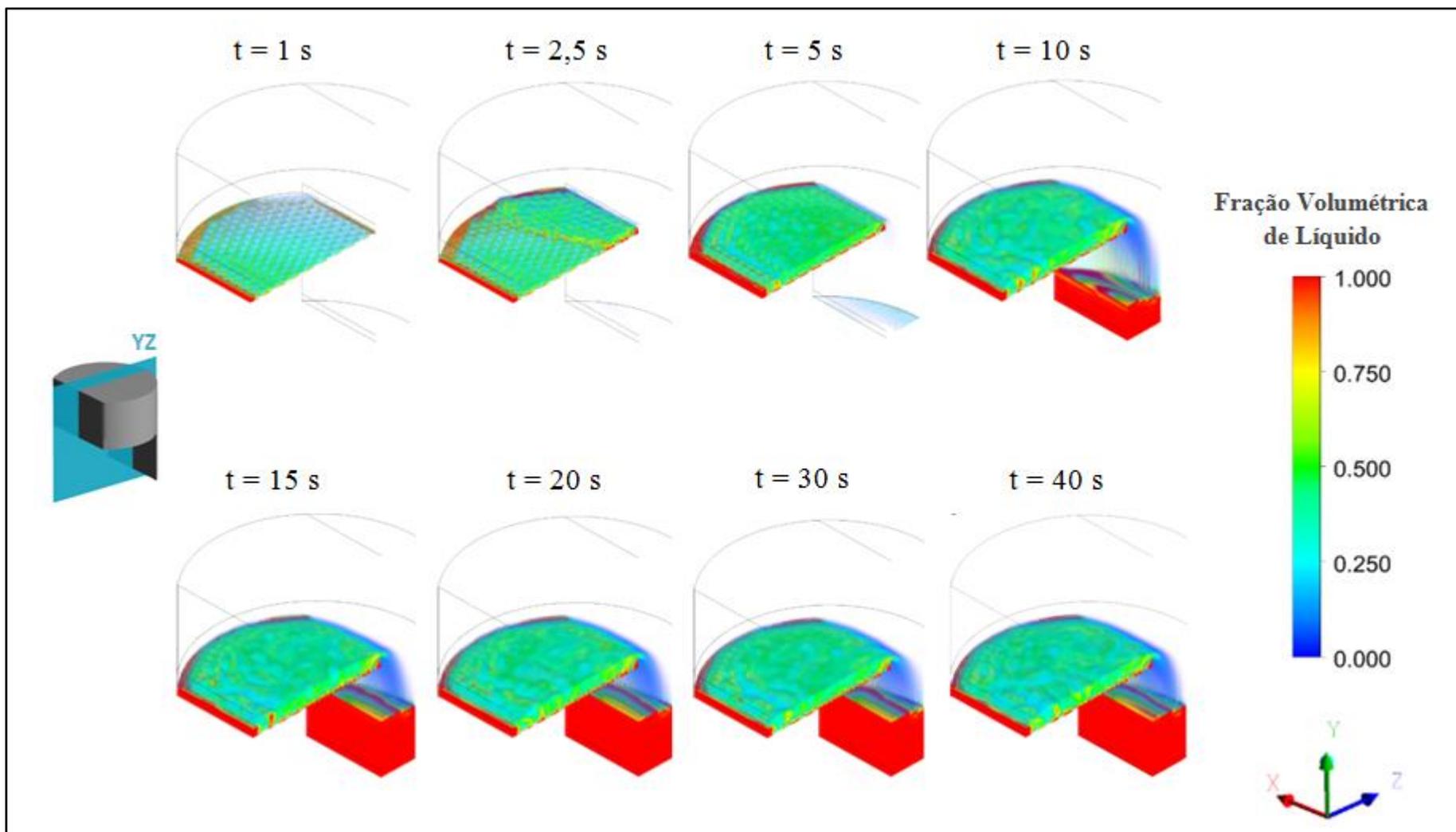
A Figura 7.12 apresenta a distribuição das frações volumétricas do líquido para instantes definidos de tempo.

A importância desta análise soma-se à caracterização qualitativa do modelo, observando-se a disposição das fases em todo o domínio. Primeiramente tem-se a fase de enchimento do prato de 1 até 10 s, sendo que o líquido represado apresentou mudanças significativas até completar a estabilização da piscina, a qual é controlada pela altura do vertedor. Porém, nota-se que a altura de líquido no *downcomer* alterou-se do instante $t = 10$ s até $t = 15$ s, evidenciando que o estado quase estacionário ainda não havia sido estabelecido por todo o domínio. Na sequência temporal ($t > 15$ s) já é possível verificar uma estabilização do fluxo e da altura de líquido no *downcomer*, com pequenas alterações inerentes à natureza complexa e transiente do escoamento. Assim, conclui-se que o estado quase estacionário já está estabelecido e as propriedades tendem a se alterar de forma pouco expressiva. Os contornos evidenciam que na base do prato, a concentração de líquido é maior, e vai diminuindo até formar uma intensa mistura entre as fases, o que resulta na formação do regime de espuma, que depois termina no limite da região de borbulhamento. A Figura 7.13 facilita a identificação destas diferenças de fração volumétrica através das técnicas de renderização de volumes, permitindo avaliar a disposição das fases na forma tridimensional. Por esta figura também é possível visualizar as ondas na superfície do líquido e o efeito do borbulhamento do gás. Novamente verifica-se que não há arraste de líquido pelo gás e que o *downcomer* é preenchido somente pelo líquido.

Figura 7.12 - Distribuição das frações volumétricas de líquido pelo prato em um plano YZ ($x = 0$ m).

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 7.13 - Distribuição das frações volumétricas de líquido pelo prato por imagens de renderização.



Fonte: Acervo pessoal.

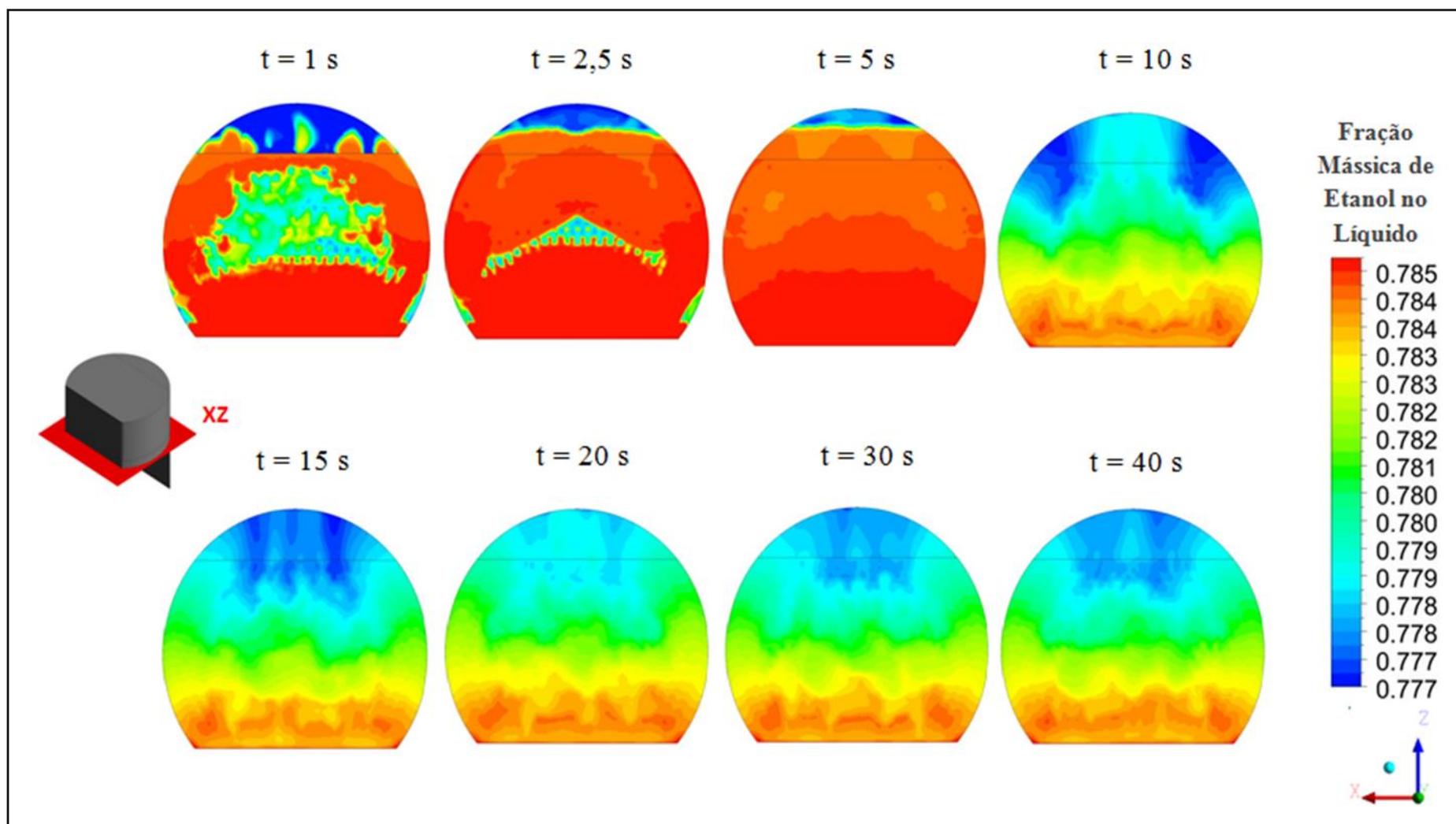
7.3. Transferência de Espécies Químicas

Com a hidrodinâmica verificada, utilizou-se as substâncias água e etanol para avaliar e quantificar o fenômeno da transferência de espécies químicas entre as fases existentes no escoamento, sendo este mecanismo de transporte, o principal índice de performance da destilaria da indústria sucroalcooleira. Para este caso em questão, o etanol é a espécie química transferida, também chamada muitas vezes de componente chave. A distribuição da concentração de etanol nas fases foi analisada tanto ao longo do tempo, quanto em função da posição no prato. Além disso, apresentam-se os valores de eficiência de Murphree global e pontual calculados.

7.3.1. Campos de Frações Mássicas

Visando conhecer a distribuição da concentração de etanol no líquido por todo o prato e ao longo do tempo simulado, recorreu-se aos contornos de cor. A Figura 7.14 apresenta a distribuição de concentrações para instantes de tempo definidos.

À medida que o líquido entra no prato e, de forma turbulenta, mistura-se com o gás, a diferença de concentração entre as fases é responsável pela transferência do etanol da fase líquida para a fase gasosa. Nos primeiros instantes, o perfil ainda não está definido, pois o prato está no seu período puramente transiente (enchimento do *downcomer* e carregamento de líquido). Depois de decorridos cerca de 10 s, um visível perfil começa a ser moldado, evidenciando regiões com concentrações distintas. O líquido entra no prato com fração mássica de etanol alta - em torno de 0,785 e indicada pelas regiões avermelhadas - e tal concentração decai em virtude da transferência de espécies entre fases. Tem-se que a diminuição do componente na fase líquida dá-se de forma gradual ao longo do prato, uma vez que o processo de transferência é função do tempo de contato, área efetiva de contato e gradiente de concentração. Esta gradação é verificada pela mudança da coloração avermelhada para tons de amarelo, verde e azul. Estima-se uma redução mais expressiva na região central do prato, enquanto as regiões periféricas demonstram uma transferência levemente mais lenta. Conforme já explorado anteriormente, acredita-se que a transferência de componentes na região periférica do prato seja influenciada pela existência dos efeitos de recirculação, estagnação, baixa mistura ou o próprio efeito de parede.

Figura 7.14 - Mapas de contornos da fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano ZX ($y = 0,038$ m).

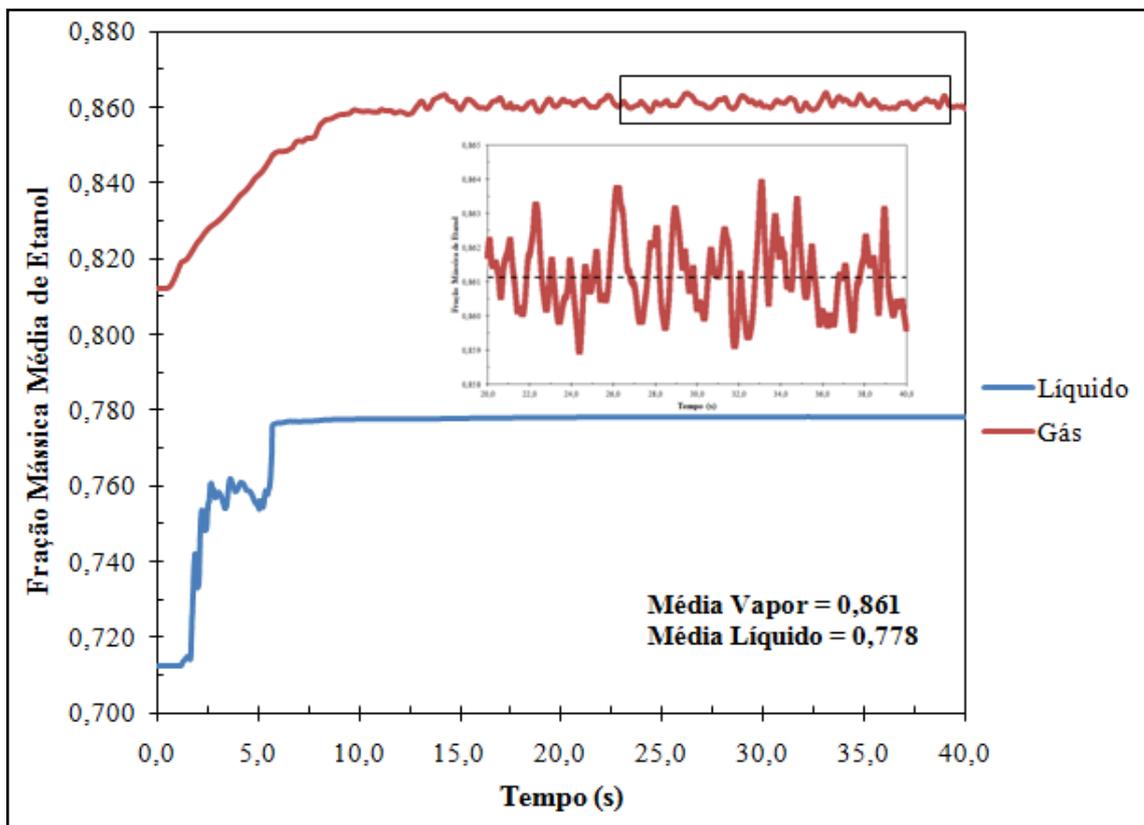
Fonte: Acervo pessoal.

O mapa de concentrações permite identificar possíveis regiões de melhoria no prato, visando promover maior eficiência de prato. Logo na entrada de líquido, observam-se regiões extensas de alta concentração de etanol, o que indica pouca transferência de massa nesta região em virtude de uma mistura não eficiente. As regiões próximas às paredes, mais precisamente perto do vertedor, indicam menores transferências também. Acredita-se que isto se dá devido à ausência de orifícios nesta região e/ou também pelo estabelecimento de caminhos preferenciais.

7.3.2. Perfis de Frações Mássicas

A Figura 7.15 apresenta a variação temporal da fração mássica média de etanol para as fases líquida e vapor, avaliadas nas saídas do domínio computacional.

Figura 7.15 - Variação da fração mássica de etanol média para as fases líquida e vapor ao longo do tempo, medidas nas saídas do domínio.



Fonte: Acervo pessoal.

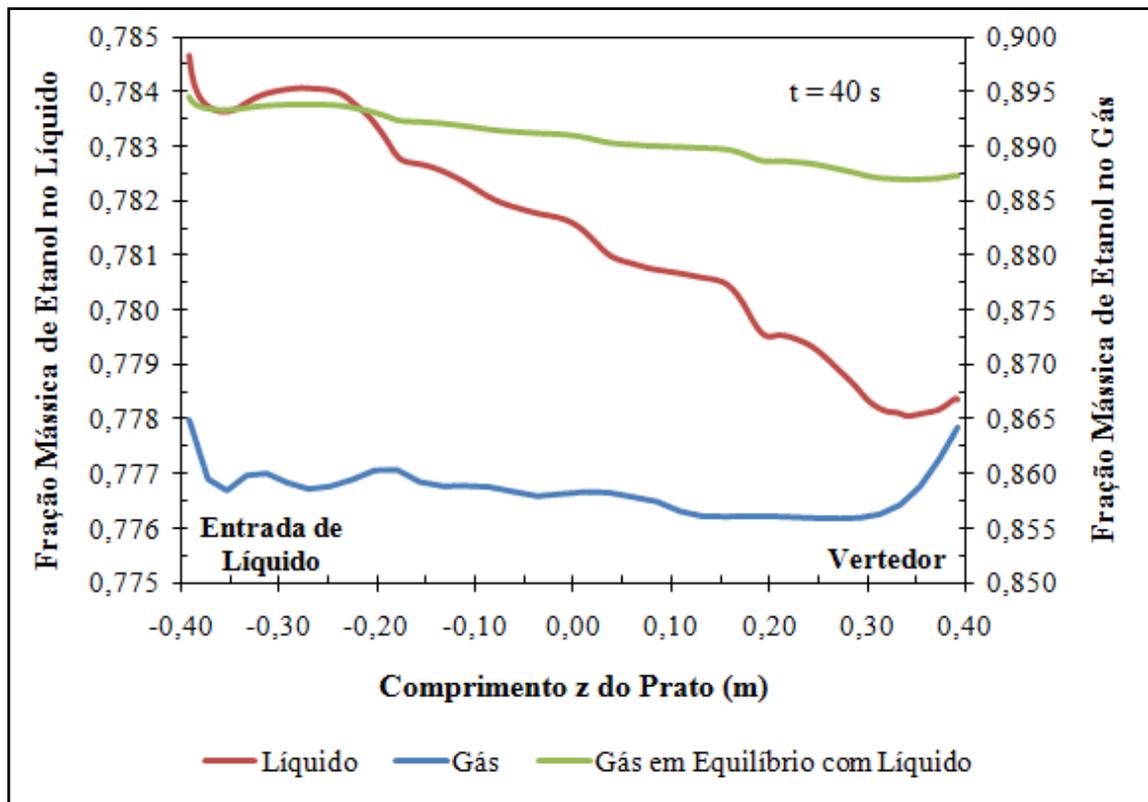
Observando-se o comportamento da fração mássica de etanol média em ambas as fases nota-se variações diferentes ao longo do tempo. A fase gasosa (entra no prato com 0,812) varia quase que linearmente crescente até atingir um patamar oscilatório depois de decorridos aproximadamente 10 s. Após este tempo, a variável oscila em torno de um valor médio de 0,861; ilustrando o regime chamado de quase estacionário. Através de uma média representativa da fração mássica de etanol, estima-se um ganho mássico de etanol na fase gasosa de aproximadamente 6%.

Em relação à fase líquida, a variação da fração mássica de etanol é mais abrupta nos primeiros 6 s de escoamento real, passando de 0,712 para 0,777. Este comportamento deve-se ao fato de o monitoramento ter sido iniciado com o prato vazio. De qualquer forma, após o estabelecimento do fluxo no prato, a fração de etanol no líquido permanece quase que inalterada em aproximadamente 0,778. Ou seja, o líquido estabiliza-se com um valor pouco menor ao de entrada (redução de aproximadamente 1%), indicando a perda do componente mais volátil para a fase gasosa. Corroborando com a avaliação da hidrodinâmica feita anteriormente no Subseção 7.2, tem-se que as variáveis tendem a se estabilizar em um curto período, indicando que longas avaliações são apenas pertinentes quando perturbações se fazem presentes.

Já a Figura 7.16 mostra os perfis da fração mássica de etanol no vapor e no líquido em função da posição, e também a fração mássica de etanol no vapor que estaria em equilíbrio com a fase líquida.

Nota-se que a fração mássica de etanol no líquido decresce gradativamente da entrada do líquido até o vertedor. Todavia, apesar desta redução do líquido, é nítido que ainda existe um gradiente de concentração na saída do prato, indicando que o equilíbrio termodinâmico não foi estabelecido, e conseqüentemente, a eficiência do prato não será a máxima possível.

Figura 7.16 - Perfis de fração mássica de etanol para as fases e a fração mássica de etanol no vapor que estaria em equilíbrio com a fase líquida em função do comprimento do prato.



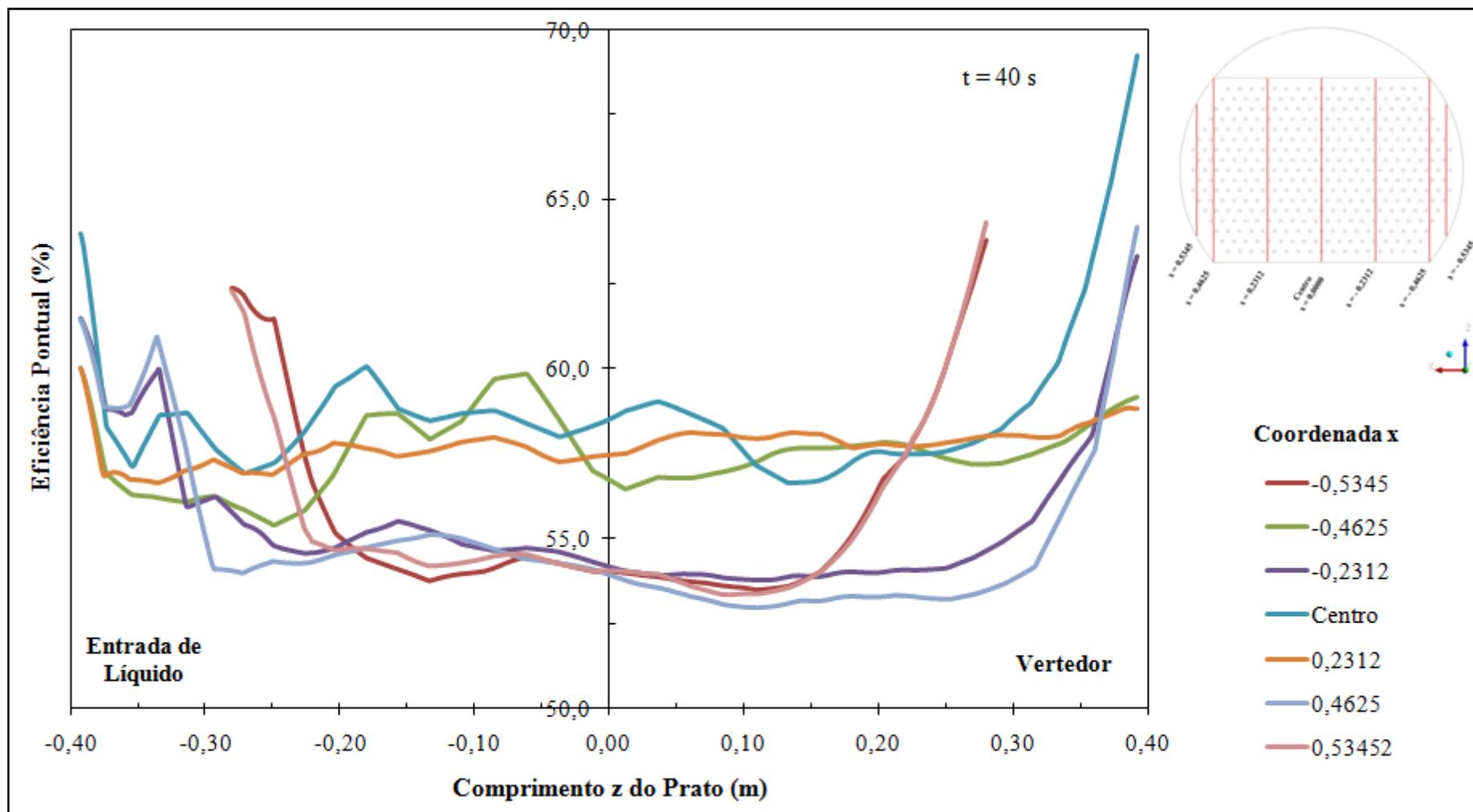
Fonte: Acervo pessoal.

Para a fração mássica de etanol no vapor, há um decaimento na primeira parte do prato, o qual segundo Noriler et al. (2010) é devido ao grande gradiente de concentração nesta região. Nas outras regiões, a fração é praticamente constante devido à capacidade de homogeneização da fase vapor. Já na região próxima ao vertedor, observa-se um acréscimo expressivo na fração mássica da fase gasosa. Acredita-se que este aumento seja resultado de possíveis transferências de massa que ainda ocorrem no *downcomer* pela parcela de gás arrastada e logo desprendida, conforme abordado no Item 7.2.5.

7.3.3. Eficiência

Avaliou-se a eficiência pontual de West, Gilbert e Shimizu (1952) em regiões do prato definidas para diferentes posições ao longo das coordenadas x. Logo, os dados obtidos são apresentados pela Figura 7.17.

Figura 7.17 - Eficiências pontuais avaliadas ao longo do comprimento z do prato para diferentes coordenadas x.



Fonte: Acervo pessoal.

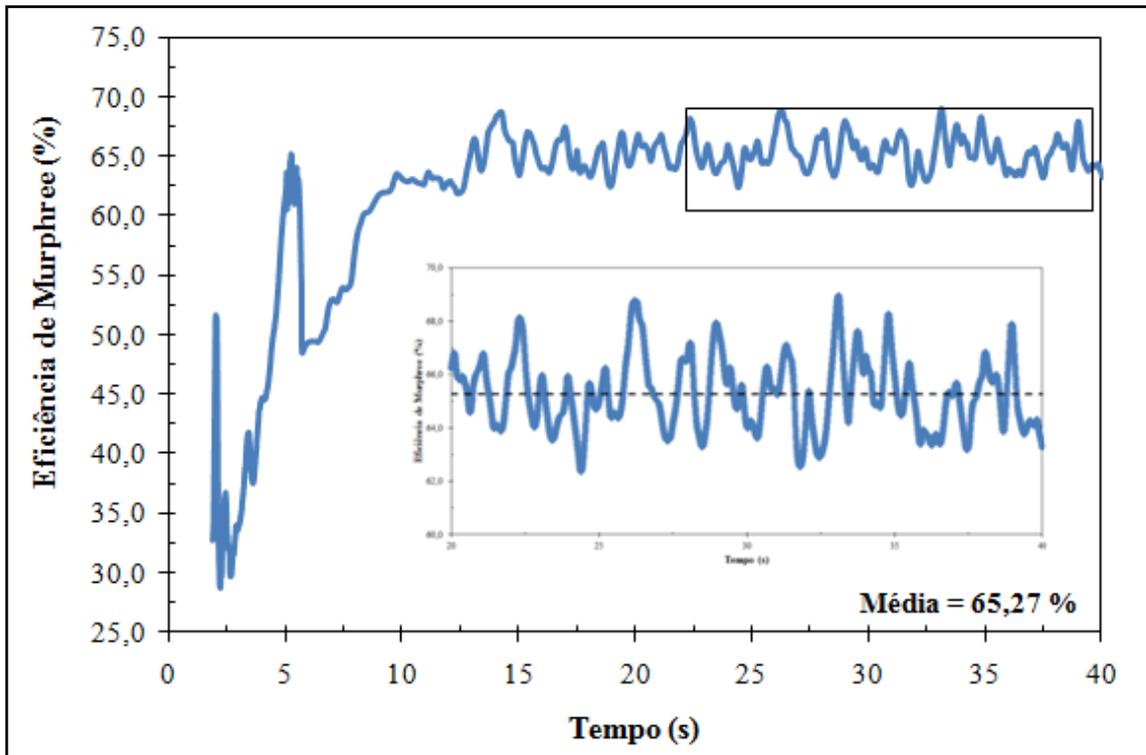
A partir dos perfis, tem-se que as maiores eficiências estão presentes no centro do prato e próximas ao vertedor. Calculou-se pelas eficiências pontuais, que a de eficiência média do prato encontra-se na faixa de 54,9 a 58,7%. Conforme já ilustrado pelos mapas de cor, certifica-se que as maiores transferências de componentes ocorrem com destaque nestas regiões. As elevações nas regiões de entrada devem-se a maior diferença de concentração entre as fases, já as elevações nas proximidades do vertedouro - conforme Noriler et al. (2010) -, devem-se à recirculação de líquido na saída, aumentando o tempo de residência do líquido no prato. Porém, adiciona-se também o possível efeito do transporte mássico que ocorre no *downcomer*, conforme já abordado anteriormente. Por outro lado, estas zonas de recirculação podem ser provenientes de fluxos retrógrados e, portanto, negativos para a eficiência. Apesar do incremento nas transferências em virtude da recirculação de líquido, Noriler et al. (2010) alerta que estes fenômenos são considerados nocivos para o desempenho do prato, pois a contribuição efetiva para a eficiência é pequena se considerada a alta ocupação de espaço no prato (alta eficiência local pode implicar em baixa eficiência global).

Para efeitos práticos e industriais, a eficiência é normalmente medida de forma global. Assim, estabeleceu-se a fração mássica de etanol no líquido avaliada na saída do *downcomer* e a fração mássica de etanol no vapor calculada no topo do domínio, como valores para estimar a eficiência de Murphree no prato. A Figura 7.18 demonstra o comportamento da eficiência de Murphree ao longo do tempo.

Em virtude do enchimento do prato, têm-se bruscas variações da eficiência nos primeiros segundos, a qual descreve uma variação aparentemente hiperbólica até aproximadamente 15 s. Logo após este período, tem-se uma variação temporal oscilatória de amplitude discreta. O detalhe dos últimos 20 s de escoamento real ilustra com maior nitidez que é possível estimar uma média representativa da eficiência após o estabelecimento do regime quase estacionário. O valor encontrado de 65,27% é maior que a faixa de valores avaliados pontualmente em regiões distintas do prato. Esta diferença dá-se principalmente pela não homogeneidade da mistura líquida pelo prato, e novamente, acredita-se que esteja ocorrendo transferência de massa na região do *downcomer*.

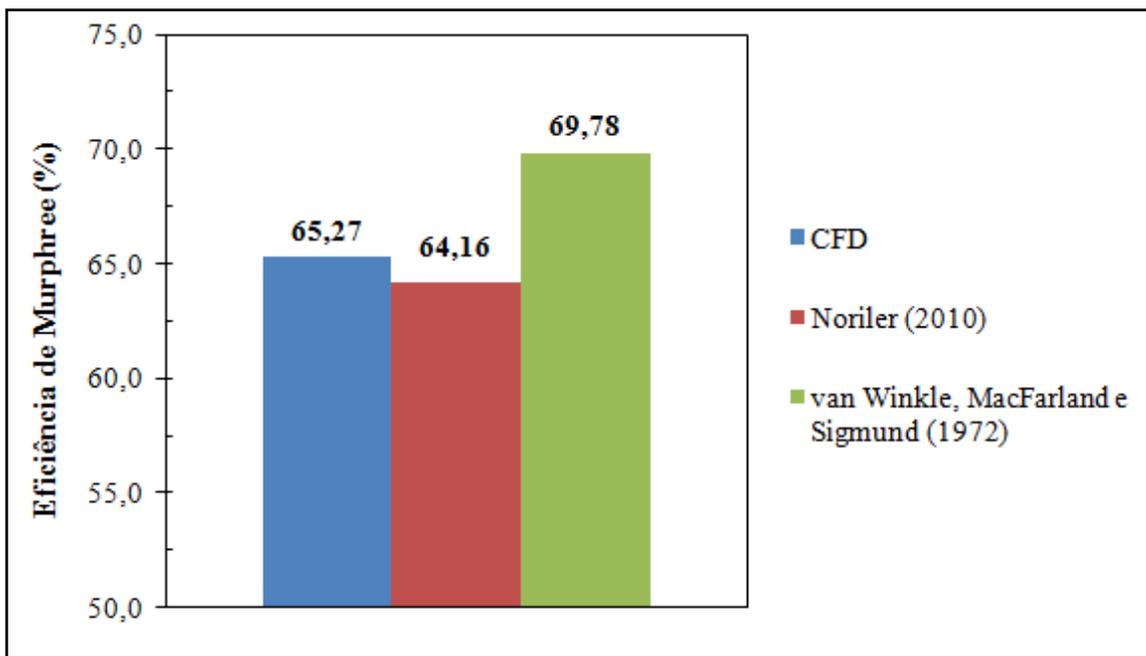
A Figura 7.19 compara o resultado de eficiência de Murphree determinado via CFD em relação ao resultado reportado por Noriler et al. (2010) e também, em relação ao valor retornado pela correlação empírica de van Winkle, MacFarland e Sigmund (1972)⁴ apud Sinnott e Towler (2009).

Figura 7.18 - Variação temporal da eficiência de Murphree no prato.



Fonte: Acervo pessoal.

Figura 7.19 - Comparação entre a eficiência de Murphree simulada com a literatura e correlações empíricas.



Fonte: Acervo pessoal.

Os dados aqui encontrados estão de acordo com aqueles citados por Noriler et al. (2010), com 1,7% de desvio. Acredita-se que esta discrepância dos resultados obtidos numericamente dê-se por dois motivos: primeiro e principalmente pelo tamanho menor e características do prato avaliado e segundo pelas difusividades estipuladas de formas diferentes.

Por outro lado, a correlação empírica de van Winkle, MacFarland e Sigmund (1972)⁴ apud Sinnott e Towler (2009) forneceu eficiências superiores ao modelo numérico aqui proposto, com discrepância de 6,5% de desvio. Acredita-se que este desvio é aceitável, pois a correlação utilizada é sensível aos valores das propriedades da mistura líquida.

CAPÍTULO 8

CONCLUSÕES

Esta dissertação visou o desenvolvimento de pesquisas e estudos para descrever com maior profundidade os fenômenos que envolvem escoamentos líquido-vapor em pratos perfurados de colunas de destilação, sendo uma etapa da busca por melhorias. Assim, fundamentado nas atividades desenvolvidas, nos resultados numéricos obtidos e no levantamento teórico presente na revisão bibliográfica, têm-se as conclusões abaixo.

Foi possível descrever tanto a fluidodinâmica, quanto a transferência de etanol em um prato perfurado de destilação utilizando a abordagem pela fluidodinâmica computacional. Além disso, os desvios entre a literatura e os perfis de velocidade obtidos via CFD indicam que medições experimentais próximas às paredes e na região central devem ser estudadas para aprofundar a verificação do modelo numérico.

Através dos resultados CFD de eficiência e distribuição multicomponente, tem-se que as regiões próximas à entrada de líquido e as regiões periféricas do prato, principalmente aquelas próximas ao vertedor, apresentam grande potencial de melhorias para a eficiência de separação. Essas observações explicam a razão de existir um grande esforço em desenvolver barreiras de formatos diferentes, uso de direcionadores de fluxos, inserção de promotores de bolhas ou chicanas, e outras adaptações.

Portanto, a fluidodinâmica computacional demonstrou grande potencial na predição dos fenômenos encontrados em escoamentos multicomponentes em pratos perfurados de destilação, podendo ser empregada na otimização de projetos de pratos, para a definição de condições operacionais adequadas e, principalmente, em estudos de eficiência de pratos.

CAPÍTULO 9

SUGESTÕES

Para garantir o enriquecimento e avanço na área de pesquisa, são ponderadas as seguintes sugestões para a continuidade do trabalho.

- Inclusão da transferência de energia ao modelo até aqui elaborado, uma vez que os três mecanismos de transporte (*momentum*, massa e energia) estão intimamente relacionados.
- Apesar da boa avaliação do modelo de duas resistências, o desenvolvimento e o aprofundamento de novos modelos, assim como de correlações para as difusividades, seria interessante para a concretização da transferência de componentes;
- Os fenômenos de condensação e evaporação foram considerados equivalentes, sendo uma hipótese aceitável. Entretanto, não há na literatura tentativas de estudar estes fatos e nem mesmo seus efeitos. Esta sugestão dá-se, pois, apesar de a taxa líquida de massa entre as fases ser negligenciável, outras propriedades são afetadas pelas mudanças de fases;
- A mistura entre as fases é fundamental para a análise no prato, e este parâmetro depende dos efeitos de turbulência presentes. Poucos modelos veem sendo testados e um melhor detalhamento pode ser levantado;
- Por fim, seria interessante explorar modificações nas regiões aqui consideradas como possíveis limitantes de ganhos de eficiência.

REFERÊNCIAS

ANSYS Inc. **ANSYS CFX-Solver Manager User's Guide**. Canonsburg, 2011a. 186 p. Apostila.

ANSYS Inc. **ANSYS CFX-Solver Modeling Guide**. Canonsburg, 2011b. 626 p. Apostila.

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

BARROS, A. A. C. **Desenvolvimento de modelo de estágios de não-equilíbrio e proposição de correlações de eficiência para os processos de destilação convencional e extrativa**. 1997. 268 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1997.

BARROS, A. A. C.; WOLF, M. R.; FOSSY, M. F. Estudo da hidrodinâmica dos pratos de destilação. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 10.,1994, São Paulo. **Anais...** São Paulo, 1994. v. 1. p. 363-368.

BECKER, S; DE BIE, H.; SWEENEY, J. Dynamic flow behavior in bubble columns. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 4929-4935, 1999.

BELL, R. L.; SOLARI, R. L. Effect of nonuniform velocity fields and retrograde flow on distillation tray efficiency. **AIChE Journal**, v. 20, p. 688-694, 1974.

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

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHFOOT, E. N. **Transport phenomena**. New York: John Wiley, 1960. 780 p.

BOISSON, N.; MALIN, M. R. Numerical prediction of two-phase flow in bubble columns. **International journal for numerical methods in fluids**, v. 23, p. 1289-1310, 1996.

CALDAS, J.N. et al. **Internos de torres: pratos e recheios**. 2 ed. Rio de Janeiro: Interciência: Petrobrás, 2007. 510 p.

CARVALHO, U. W. **Expressões idiomáticas: matéria-prima**, 27 dez. 2008. Disponível em: <www.teclasap.com.br/2008/12/27/expressoes-idiomaticas-materia-prima>. Acesso em: fev. 2014.

CHEMICAL ENGINEERING AND MATERIALS RESEARCH INFORMATION CENTER. **Binary vapor-liquid equilibrium data**. Disponível em: <<http://www.thermo.com/research/kdb/hcvle/showvle.php?vleid=475>>. Acesso em: jul. 2013.

COLWELL, C. J. Clear liquid height and froth density on sieve trays. **Industrial Engineering Chemistry Process Design Development**, v.20, p. 298-307, 1981.

DELNOIJ, E.; KUIPERS, J.A.M.; VAN SWAAIJ, W. P. M. A three-dimensional CFD model for gas-liquid bubble columns. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 2217-2226, 1999.

DIONÍSIO, R. P. **Simulação tridimensional de uma coluna de bolhas – diferentes abordagens geométricas e modelagem**. 2008. 79 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

FAIR, J. R.; TRUTNA, W. R.; SEIBERT, A. F. A new, ultracapacity tray for distillation columns. **Transactions IChemE**, v. 77, p. 619-626, 1999.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. 3rd ed. Berlin: Springer, 2002. 433 p.

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

FORTUNA, A. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações**. São Paulo: Edusp, 2000. 426 p. (Acadêmica; v. 30).

FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. **Introduction to fluid mechanics**. 6th ed. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2004. 787 p.

GESIT, G.; NANDAKUMAR, K.; CHUANG, K. T. CFD modeling of flow patterns and hydraulics of commercial-scale sieve trays. **AIChE Journal**, v. 49, n.4, p. 910-924, 2003.

GREEN, D. W.; PERRY, R. H. **Perry's chemical engineering handbook**, 8th ed. Boston: McGraw-Hill, 2008. 2400 p.

HIRSCHBERG, S.; WIJN, E. F.; WEHRLI, M. Simulating the two phase flow on column trays. **Transactions IChemE**, v.83(A12), p. 1410-1424, 2005.

HOFHUIS, P. A. M. **Flow regimes on sieve-trays for gas/liquid contacting**. 1980. 196 p.– Technische Hogeschool Delft, Afdeling der werktuigbouwkunde.WTHD, Delft, 1980.

JUSTI, G. H. **Aplicação da fluidodinâmica computacional na avaliação da hidrodinâmica de estágio em colunas de destilação**. 2012. 121 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2012.

KAESER, M.; PRITCHARD, C. L. The impact of heat transfer on Murphree tray efficiency. **Energy**, 31, p. 3108-3116, 2006.

KISTER, H. Z. **Distillation design**. Boston: McGraw-Hill, 1992. 710 p.

KISTER, H. Z. **Distillation operation**. Boston: McGraw-Hill, 1989. 729 p.

KLER, S. C.; LAVIN, J. T. Simulation of flow on distillation trays. **Gas Separation & Purification**, v. 2, p. 34-40, 1988.

KOCH-GLITSCH. **SUPERFRAC™, High performance trays**. Wichita, 2013. 16 p. Catálogo.

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

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.; VAN BATEN, J. M. Modelling sieve tray hydraulics using computational fluid dynamics. **Transactions IChemE**, v. 81, p. 27-38, 2003.

KRISHNA, R.; VAN BATEN, J. M.; URSEANU, M. I. Three-phase Eulerian simulations of bubble column reactors operating in the churn-turbulent regime: a scale up strategy. **Chemical Engineering Science**, v.55, p. 3275-3286, 2000.

KUNDU, P. K.; COHEN, I. M. **Fluid mechanics**. 3th ed. London: Elsevier Inc., 2004. 759 p.

LAVIN, J. T.; URUA, I. J. Distillation trays with non-circular holes: expanded metal trays. **Gas Separation & Purification**, v. 6, n.1, p. 3-8, 1992.

LEVANTI, C. **Computational fluid dynamics and experimental study of the hydrodynamics of a bubble column and an air-water jet-stirred cell**. 2011-2012. 132 f. Dottorato di Ricerca in Geoingegneria e Tecnologie Ambientali, Università degli Studi di Cagliari, Cagliari 2013.

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

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

LÓPEZ, F.; CASTELLS, F. Influence of tray geometry on scaling up distillation efficiency from laboratory data. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 38, p. 2747-2753, 1999.

MAHAJAN, V. **CFD analysis of hydrodynamics and mass transfer of a gas-liquid bubble column**. 2010. 52 f. Bachelor of Technology, Department of Chemical Engineering, National Institute of Technology, Rourkela, 2010.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004. 453 p.

MALVIN, A.; CHAN, A.; LAU, P. L. Large eddy simulation of distillation sieve tray hydrodynamics using volume-of-fluid (VOF) multiphase model. In: **WORLD CONGRESS ON ENGINEERING AND COMPUTER SCIENCE**, 2010, San Francisco. **Proc...** San Francisco, 2010. v. 2 p.

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

MOURA, L. et al. Análise CFD da proposta de melhoria geométrica durante escoamento multifásico de mineral granulado sobre processo de secagem e transporte em chute de descarga. In: **CONGRESSO INTERNACIONAL DE COOPERAÇÃO UNIVERSIDADE-INDÚSTRIA**, 4., 2012, Taubaté. **Anais ...** Taubaté, 2012.

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

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

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

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 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2007.

OLUJIC, Z. et al. Equipment improvement trends in distillation. **Chemical Engineering and Processing**, v. 48, p. 1089-1104, 2009.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York: Hemisphere Publishing Corporation/McGraw-Hill, 1980. 197 p. (Series in computational methods in mechanics and thermal sciences).

PETLYUK, F. B. **Distillation theory and its application to optimal design of separation units**. New York: Cambridge University Press, 2004. 336 p. (Cambridge series in chemical engineering).

PFLEGER, D.; BECKER, S. Modelling and simulation of the dynamic flow behavior in a bubble column. **Chemical Engineering Science**, v. 56, p. 1737-1747, 2001.

PINTO, J. C.; LAGE, P. L. C. **Métodos numéricos em problemas de engenharia química**. Rio de Janeiro: E-papers serviços editoriais, 2001. 316 p. (Série Escola Piloto em Engenharia Química COPPE/UFRJ).

POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. **The properties of gases and liquids**. 5th ed. New York: McGraw-Hill, 2000.

POTTER, M. C.; WIGGERT, D. C. **Mechanics of fluids**. 3rd ed. California: Brooks/Cole, 2001. 816 p.

RAHIMI, M. R. et al. Prediction of temperature and concentration distributions of distillation sieve trays by CFD. **Tamkang Journal of Science and Engineering**, v. 9, n. 3, p. 265-278, 2006b.

RAHIMI, M. R.; KARIMI, H. CFD simulation of hydraulics of sieve trays with gas maldistribution. **Chemical Product and Process Modeling**, v. 5, issue 1, art. 2, 2010.

RAHIMI, R.; AMERI, A.; SETOODEH, N. Effect of inlet downcomer on the hydrodynamic parameters of sieve trays using CFD analysis. **Journal of Chemical and Petroleum Engineering**, v. 45, n. 1, p. 27-38, 2011.

RAHIMI, R. et al. Efficiencies of sieve tray distillation columns by CFD simulation. **Chem. Eng. Technol.**, 29, n. 3, p. 326-335, 2006a.

RAHIMI, R.; SOTOODEH, M. M.; BAHRAMIFAR, E. The effect of tray geometry on the sieve tray efficiency. **Chemical Engineering Science**, v. 76, p. 90-98, 2012.

SAGHATOLESLAMI, N. et al. Prediction of the overall sieve tray efficiency for a group of hydrocarbons, an artificial neural network approach. **Journal of Natural Gas Science and Engineering**, v. 3, n. 1, p. 319-325, 2011.

SAKATA, M. et al. The effect of hole size on sieve tray performance. In: AIChE Spring Meeting, 2007, Houston. **Proc...** Houston, 2007.

SANTOS, C. M. **Simulação tridimensional com sistema gás-líquido em colunas de bolhas**. 2005. 120 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

SILVA JÚNIOR, J. L. **Investigação do escoamento bifásico gás-líquido em uma coluna de bolhas retangular por meio da técnica CFD**. 2011. 151 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2011.

SINNOTT, R.; TOWLER, G. **Chemical engineering design**. 5 ed. Burlington: Elsevier, 2009. 1255 p. (Coulson & Richardson's Chemical Engineering Series)

SOARES, C. **Desenvolvimento de uma metodologia para avaliação numérica e experimental do escoamento líquido/vapor em colunas de destilação**. 2005. 191 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

SOLARI, R. B.; BELL, R. L. Fluid flow patterns and velocity distribution on commercial-scale sieve trays. **AIChE Journal**, v. 32, n. 4, p. 640-649, 1986.

SOUSA, P. N.; SCUR, G.; SOUZA, R. C. Panorama da cadeia produtiva de etanol no Brasil: gargalos e proposições para seu desenvolvimento. **GEPROS. Gestão da Produção, Operações e Sistemas**, Ano 7, nº 3, p. 145-159, 2012.

STAUDT, P. B. **Modelagem e simulação dinâmica de colunas de destilação**. 2007. 156 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2007.

STICHLMAIR, J. G.; FAIR, J. R. **Distillation: principles and practice**. New York: Wiley-VCH, 1998. 524 p.

SULZER, **Conventional trays**. Disponível em: <www.sulzer.com>. Acesso em: mar. 2013.

SUN, Z. et al. Precision of distillation column performance by computational mass transfer method. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, 19, v. 5, p. 833-844, 2011.

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.

TELEKEN, J. G. et al. Fluid-dynamics study of multiphase flow in a sieve tray of a distillation column. In: European Symposium on Computer Aided Process Engineering, 20., 2010, Ischia. **Proc...** Ischia, 2010. p. 73-78.

TPUB, **Alternative fuels** Disponível em:
<<http://alternativefuels1.tpub.com.com/0663/06630046.htm>>. Acesso em: mar. 2013.

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**. London: Pearson Prentice Hall, 1995. 257 p.

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.

WANKAT, P. C. **Separation process engineering**. 2 ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2007. 738 p.

WEST, F. B.; GILBERT, W. D.; SHIMIZU, T. Mechanism of mass transfer on bubble plates: plate efficiencies. **Industrial and Engineering Chemistry**, v. 44, n. 10, p. 2470-2478, 1952.

WIJN, E. F. The effect of downcomer layout pattern on tray efficiency. **The Chemical Engineering Journal**, 63, p. 167-180, 1996.

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

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

WILKE, C. R.; LEE, C. Y. Estimation of diffusion coefficients for gases and vapors. **Industrial and Engineering Chemistry**, v. 47, n. 6, p. 1253-1257, 1955.

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.

YU, K. T. et al. Computational fluid-dynamics and experimental verification of two-phase two-dimensional flow on a sieve column tray. **Transactions IChemE**, v. 77, p. 554-560, 1999.

ZAREI, A.; HOSSEINI, S. H.; RAHIMI, R. CFD and experimental studies of liquid weeping in the circular sieve tray columns. **Chemical Engineering Research and Design**, 2013b. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2013.03.006>>. Acesso em: ago. 2013.

ZAREI, A.; HOSSEINI, S. H.; RAHIMI, R. CFD study of weeping rate in the rectangular sieve trays. **Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers**, v. 44, p. 27-33, 2013a.

ZAREI, T.; RAHIMI, R.; ZIVDAR, M. Computational fluid dynamics simulation of MVG tray hydraulics. **Korean Journal of Chemical Engineering**, v. 26, n. 5, p. 1213-1219, 2009.

ZHANG, M. et al. Downcomer mixing and its effect on distillation tray efficiency. **Transaction of Tianjin University**, v. 4, n. 1, p. 17-23, 1998.

ZUIDERWEG, F. J. Sieve trays: a view on the state of the art. **Chemical Engineering Science**, v. 37, p. 1441-1464, 1982.

APÊNDICES

Apêndice A – Dados das integrais de colisão para determinar a difusividade por correlações empíricas.

Tabela A1 - Integrais de colisão para cálculo da difusividade.

kT / ε_{12}	$W_{(1)}^{(1)}$
0,30	1,331
0,50	1,033
0,75	0,8335
1,00	0,7197
1,25	0,6479
1,5	0,5991
2,0	0,5373
2,5	0,4998
3,0	0,4745
4,0	0,4418
5,0	0,4211
10,0	0,3712
50,0	0,2878
100,0	0,2585
400,0	0,2085

Fonte: Adaptado de WILKE; LEE (1955).

Apêndice B – Dados dos campos de velocidade extraídos dos trabalhos de Solari e Bell (1986).

Tabela B1 - Dados experimentais de Solari e Bell (1986) para os campos de velocidade de líquido.

Coordenada Adimensional x/R	Velocidade do líquido [$m s^{-1}$]	
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>
0,8244	0,1101	0,1144
0,5359	0,1355	0,1556
0,2885	0,1864	0,2124
0,0000	0,2798	0,3037

Fonte: Adaptado de SOLARI; BELL (1986).

**Apêndice C – Dados dos campos de velocidade média de líquido obtidos pela
experimentação numérica.**

Tabela C1 - Médias da componente w das velocidades de líquido obtidas por simulações CFD.

(continua)

Coordenada Adimensional <i>x/R</i>	Velocidade da componente w do líquido [m s^{-1}]	
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>
0,9481	0,1115	0,1832
0,9068	0,1275	0,1966
0,8656	0,1397	0,2019
0,8244	0,1422	0,1786
0,7832	0,1384	0,1333
0,7420	0,1120	0,0591
0,7007	0,1231	0,0451
0,6595	0,1451	0,0301
0,6183	0,1578	0,0443
0,5771	0,1997	0,0606
0,5359	0,1941	0,0979
0,4946	0,2009	0,1477
0,4534	0,1811	0,1741
0,4122	0,1951	0,1601
0,3710	0,1878	0,1843
0,3298	0,2041	0,1851
0,2885	0,1905	0,1898
0,2473	0,2141	0,1937
0,2061	0,1998	0,2046
0,1649	0,2266	0,1930
0,1237	0,2191	0,1990
0,0824	0,2323	0,1874
0,0412	0,2089	0,2046
0,0000	0,2172	0,1987
-0,0412	0,2128	0,2054
-0,0824	0,2323	0,1886
-0,1237	0,2135	0,1998
-0,1649	0,2178	0,2007
-0,2061	0,1977	0,1992
-0,2473	0,2098	0,1906
-0,2885	0,1914	0,1868
-0,3298	0,1976	0,1671
-0,3710	0,1841	0,1684
-0,4122	0,1936	0,1572
-0,4534	0,1842	0,1702

Tabela C1 - Médias da componente w das velocidades de líquido obtidas por simulações CFD.

(conclusão).

Coordenada Adimensional x/R	Velocidade da componente w do líquido [$m s^{-1}$]	
	<i>Upstream</i>	<i>Downstream</i>
-0,4946	0,1997	0,1568
-0,5359	0,1995	0,1296
-0,5771	0,2024	0,0858
-0,6183	0,1541	0,0579
-0,6595	0,1418	0,0330
-0,7007	0,1198	0,0534
-0,7420	0,1137	0,0546
-0,7832	0,1398	0,1298
-0,8244	0,1407	0,1739
-0,8656	0,1355	0,1941
-0,9068	0,1231	0,1850
-0,9481	0,1084	0,1760

Fonte: Acervo pessoal.