

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

CONRADO PLANAS ZANUTTO

**APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL (CFD) NA AVALIAÇÃO DA
HIDRODINÂMICA E DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM
ESTÁGIO DE COLUNA DE DESTILAÇÃO**

SÃO CARLOS - SP
FEVEREIRO DE 2015

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

CONRADO PLANAS ZANUTTO

**APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL (CFD) NA AVALIAÇÃO DA
HIDRODINÂMICA E DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM
ESTÁGIO DE COLUNA DE DESTILAÇÃO**

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
FEVEREIRO DE 2015

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

Z34at

Zanutto, Conrado Planas.

Aplicação de técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD) na avaliação da hidrodinâmica e da transferência de massa em estágio de coluna de destilação / Conrado Planas Zanutto. -- São Carlos : UFSCar, 2015.
197 f.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2015.

1. Destilação. 2. Pratos perfurados. 3. Fluidodinâmica computacional. 4. Hidrodinâmica. 5. Massa - transferência. I. Título.

CDD: 660.2842 (20^a)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE
CONRADO PLANAS ZANUTTO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-
GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE
SÃO CARLOS, EM 19 DE FEVEREIRO DE 2015.

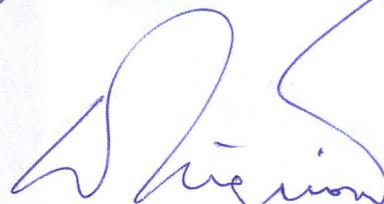
BANCA EXAMINADORA:



José Antonio Silveira Gonçalves
Orientador, UFSCar



Gabriela Cantarelli Lopes
UFSCar



Waldir Pedro Martignoni
PETROBRAS

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.



Dedico este trabalho aos meus pais, a minha irmã,
e a minha noiva, Talita, por sempre serem essenciais à minha vida.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a Deus, por sempre estar ao meu lado e por ser tudo em minha vida. Sem Ele nada disso seria possível.

Em especial agradeço aos meus pais, Braz e Sumaia, a minha irmã Pamela e a minha noiva Talita, por serem a minha alegria, a minha força e as pessoas mais preciosas da minha vida.

Ao professor e orientador Dr. José Antônio Silveira Gonçalves pela oportunidade, orientação e dedicação. Além de ser um ótimo orientador, também é uma ótima pessoa.

Ao meu tio, Carlos Alexandre Zanutto, por toda a ajuda no início deste mestrado.

A todos que colaboraram de alguma forma.

Conrado Planas Zanutto

“Buscai, pois, em primeiro lugar, o Reino de Deus e a Sua Justiça, e todas as outras coisas vos serão acrescentadas.”

Mateus 6:33

"Nem olhos viram, nem ouvidos ouviram, nem jamais penetrou em coração humano o que Deus tem preparado para aqueles que O amam."

1 Coríntios 2:9

RESUMO

Destilação é uma das técnicas industriais de separação mais importante. Este processo requer grande quantidade de energia, correspondendo a aproximadamente 40% do consumo total de energia de indústrias químicas. Dessa forma, a otimização de colunas de destilação é indispensável, e para isso é necessário o conhecimento dos fenômenos fluidodinâmicos que ocorrem dentro da coluna. Alguns modelos utilizados nesses equipamentos, tais como os modelos baseados em conceitos de estágios de equilíbrio e não-equilíbrio, geralmente fornecem resultados úteis, mas consideram empiricamente muitos fenômenos fluidodinâmicos e assumem uma mistura perfeita em cada fase. Nos anos recentes, com o advento de computadores mais potentes combinado ao desenvolvimento de métodos numéricos precisos para a resolução dos problemas físicos, houve uma revolução no modo como lidamos com os fenômenos de fluidodinâmica. As técnicas de fluidodinâmica computacional permitem uma descrição microscópica das características físicas do escoamento dos fluidos. O principal objetivo deste estudo foi desenvolver um modelo de fluidodinâmica computacional para escoamentos líquido-vapor que fosse capaz de prever a hidrodinâmica e a transferência de massa em pratos perfurados. Um modelo bifásico, tridimensional e transiente, numa abordagem Euleriana-Eulariana, foi proposto para os sistemas ar/água (25°C e 1atm) e etanol/água a 1atm. As equações da continuidade, de momento e da transferência de espécies químicas foram utilizadas para descrever as fases líquida e gasosa. A geometria do prato perfurado simulado foi baseada no trabalho experimental de Solari e Bell (1986). As variáveis preditas foram o perfil de velocidades, a fração volumétrica de cada fase, a altura de líquido claro, áreas de recirculação, frações mássicas e eficiência. As predições do modelo para a hidrodinâmica e transferência de massa foram comparadas com dados experimentais e numéricos de alguns autores e apresentaram boa concordância. Este estudo mostra que o CFD pode ser utilizado como uma ferramenta poderosa para a simulação de pratos perfurados.

Palavras-Chave: Destilação; Pratos Perfurados; Fluidodinâmica Computacional (CFD); Hidrodinâmica; Eficiência.

ABSTRACT

Distillation is one of the most important industrial separation techniques. It requires high quantity of energy, corresponding to around 40% of the total energy consumption of chemical industries. As such, the optimization of a distillation column is indispensable, and it is only possible from the knowledge of the fluid dynamics phenomena occurring within the column. Some of models used for this, such as the models based on equilibrium and non-equilibrium stage concepts, usually provide useful results, but consider empirically many of the fluid dynamics phenomena by assuming a perfect mixture in each phase. In recent years, the advent of the high-speed computers combined with the development of accurate numerical methods for solving physical problems has revolutionized the way we deal with fluid dynamics phenomena. Computational fluid dynamics (CFD) techniques allow a microscopic description of the physical characteristics of the fluid motion. The main purpose of this study was develop a computational fluid dynamics model for gas-liquid flows that was able to predict the hydrodynamics and mass transfer on a sieve tray. A two-phase, three-dimensional and transient model, in an Eulerian-Eulerian framework was proposed for air/water (25°C) and ethanol/water systems at 1 atm. The continuity, momentum and mass equations were used to describe the gas and liquid phases. The sieve tray geometry simulated was based on experimental work of Solari e Bell (1986). The variables predicted were the velocity profiles, volume fraction of each phase, clear liquid height, recirculation areas, mass fraction and efficiency. The hydrodynamic and mass transfer model predictions were compared with experimental and numerical data from some authors and presented good agreement. This study shows that CFD can be used as a powerful tool for sieve tray simulation.

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

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Representação esquemática de uma coluna de destilação com 5 estágios ($T_1 < T_2 < T_3 < T_4 < T_5 < T_6$).	29
Figura 2.2 - Representação esquemática de pratos perfurados, vista lateral (A) e vista do topo (B).	29
Figura 2.3 - Representação esquemática do estágio de não-equilíbrio.	33
Figura 3.1 - Dimensões geométricas do prato perfurado em estudo.	56
Figura 3.2 - Detalhes e dimensões geométricas do prato perfurado em estudo.	57
Figura 3.3 - Domínio computacional (a) e vista simétrica (b) do domínio computacional utilizado nas simulações.	57
Figura 3.4 – Vista inferior do domínio computacional utilizado nas simulações.	58
Figura 3.5 - Malhas utilizadas durante o teste de independência de malha.	61
Figura 3.6 - Detalhes das malhas utilizadas durante o teste de independência de malha.	62
Figura 3.7 - Regiões utilizadas na aplicação das condições de contorno.	63
Figura 3.8 – Localização dos pontos de referência para o cálculo da pressão de saída do líquido.	66
Figura 3.9 - Regiões e disposição das sondas utilizadas no experimento de Solari e Bell (1986).	69
Figura 3.10 – Regiões e linhas utilizadas na análise da velocidade do líquido.	69
Figura 3.11 – Representação esquemática do prato de destilação para a avaliação da eficiência de prato.	73
Figura 3.12 – Representação esquemática do prato de destilação para a avaliação da eficiência de ponto.	74
Figura 4.1 - Volume de controle finito. Sendo: a) Referencial Euleriano, no qual o fluido se move através do volume de controle fixo; b) Referencial Lagrangeano, no qual o volume de controle se move juntamente com o fluido.	81
Figura 4.2 - Elemento de fluido infinitesimal. Sendo: a) Referencial Euleriano, no qual o fluido se move através do elemento de fluido fixo; b) Referencial Lagrangeano, no qual o elemento de fluido se move juntamente com o fluido.	81
Figura 4.3 - Classificação das abordagens para escoamentos multifásicos.	81

Figura 4.4 - Representação da transferência de massa entre as fases.	95
Figura 4.5 – Classificação geral dos modelos de turbulência.	105
Figura 4.6 - Representação das subcamadas na região próxima da superfície.	118
Figura 4.7 – Fator de atrito para pratos perfurados.	122
Figura 5.1 – Região contínua (esquerda) discretizada por uma malha de pontos (direita). ...	124
Figura 5.2 – Exemplo de uma malha estruturada em 2D.	125
Figura 5.3 - Exemplo de uma malha em 2D estruturada em blocos e com as interfaces correspondentes.	126
Figura 5.4 - Exemplo de uma malha em 2D estruturada em blocos e com as interfaces não-correspondentes.	126
Figura 6.1 – Regiões e linhas utilizadas na análise da velocidade do líquido.	137
Figura 6.2 – Altura de líquido claro no prato em função da quantidade de nós das malhas.	138
Figura 6.3 - Componente w da velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) na região <i>upstream</i> avaliada em um plano ZX ($y = 0,038$ m) para cada malha.	139
Figura 6.4 - Componente w da velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) na região <i>downstream</i> avaliada em um plano ZX ($y = 0,038$ m) para cada malha.	139
Figura 6.5 – Vista lateral da malha numérica.	141
Figura 6.6 – Detalhes dos elementos da malha numérica.	141
Figura 6.7 – Vista inferior da malha numérica na região dos orifícios.	142
Figura 6.8 - Altura de líquido claro em função do tempo real de escoamento.	143
Figura 6.9 – Valor médio da altura de líquido claro e sua flutuação em função do tempo real de escoamento, calculada entre os instantes 25s e 60s.	144
Figura 6.10 - Comparação entre as alturas de líquido claro obtidas por correlações da literatura e a simulada neste estudo.	145
Figura 6.11 - Perfil do componente w da velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) para a região <i>upstream</i>	147
Figura 6.12 - Perfil do componente w da velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) para a região <i>downstream</i>	148
Figura 6.13 - Fração volumétrica de líquido ao longo do prato em um plano YZ ($x = 0$ m).	150
Figura 6.14 – Fração volumétrica de líquido para o instante de 60s a partir da ferramenta <i>Volume Rendering</i> (Renderização de Volume).	151
Figura 6.15 - Linhas de corrente da fase líquida e da fase gasosa.	152
Figura 6.16 – Isosuperfície com fração volumétrica de líquido de 0,5.	153

Figura 6.17 - Contornos do componente w da velocidade do líquido em um plano XZ ($y = 0,038$ m).....	155
Figura 6.18 - Mapa de vetores da velocidade do líquido para o instante de 40s em um plano XZ ($y = 0,038$ m).....	156
Figura 6.19 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo de Higbie.....	159
Figura 6.20 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano XZ ($y = 0.038$ m), para o modelo de Higbie.....	160
Figura 6.21 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo SRS.	161
Figura 6.22 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano XZ ($y = 0.038$ m), para o modelo SRS.	162
Figura 6.23 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo de Zuiderweg.	163
Figura 6.24 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano XZ ($y = 0.038$ m), para o modelo de Zuiderweg.	164
Figura 6.25 - Fração mássica de etanol no vapor ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo de Higbie.....	166
Figura 6.26 - Fração mássica de etanol no vapor ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo SRS.	167
Figura 6.27 - Fração mássica de etanol no vapor ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo de Zuiderweg.	168
Figura 6.28 – Fração mássica de etanol no vapor na região de saída de vapor (topo), para o modelo de Higbie.....	169
Figura 6.29 – Fração mássica de etanol no vapor na região de saída de vapor (topo), para o modelo SRS.	170
Figura 6.30 – Fração mássica de etanol no vapor na região de saída de vapor (topo), para o modelo de Zuiderweg.	170
Figura 6.31 - Variação da fração mássica de etanol avaliada na saída do prato para as fases líquida e vapor em função do tempo, para o modelo de Higbie.	172
Figura 6.32 – Valor médio da fração mássica de etanol no vapor na saída do prato e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo de Higbie.....	172

Figura 6.33 – Valor médio da fração mássica de etanol no líquido na saída do prato e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo de Higbie.....	173
Figura 6.34 - Variação da fração mássica de etanol avaliada na saída do prato para as fases líquida e vapor em função do tempo, para o modelo SRS.....	173
Figura 6.35 - Valor médio da fração mássica de etanol no vapor na saída do prato e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo SRS.	174
Figura 6.36 - Valor médio da fração mássica de etanol no líquido na saída do prato e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo SRS.	174
Figura 6.37 - Variação da fração mássica de etanol avaliada na saída do prato para a fase vapor em função do tempo, para o modelo de Zuiderweg.....	175
Figura 6.38 - Valor médio da fração mássica de etanol no vapor na saída do prato e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo de Zuiderweg.	175
Figura 6.39 - Variação da eficiência de Murphree do prato em função do tempo para o modelo de Higbie.....	177
Figura 6.40 – Valor médio da eficiência de Murphree e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo de Higbie.	177
Figura 6.41 - Variação da eficiência de Murphree do prato em função do tempo para o modelo SRS.	178
Figura 6.42 – Valor médio da eficiência de Murphree e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo SRS.....	178
Figura 6.43 - Variação da eficiência de Murphree do prato em função do tempo para o modelo de Zuiderweg.	179
Figura 6.44 - Valor médio da eficiência de Murphree e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo de Zuiderweg.....	179
Figura 6.45 - Perfis da fração mássica de etanol no líquido, no vapor e no vapor que estaria	181
Figura 6.46 - Perfis da fração mássica de etanol no líquido, no vapor e no vapor que estaria	181
Figura 6.47 - Perfis da fração mássica de etanol no líquido, no vapor e no vapor que estaria	182
Figura 6.48 - Eficiências de ponto avaliadas ao longo dos subdomínios e a média da eficiência de prato, para o modelo de Higbie.	183

Figura 6.49 - Eficiências de ponto avaliadas ao longo dos subdomínios e a média da eficiência de prato, para o modelo SRS.	184
Figura 6.50 - Eficiências de ponto avaliadas ao longo dos subdomínios e a média da eficiência de prato, para o modelo de Zuiderweg.	184
Figura 6.51 - Comparação das eficiências de Murphree simuladas, dados da literatura e correlação empírica.	185

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Condições geométricas utilizadas por Solari e Bell (1986).	44
Tabela 2.2 – Resumo tabelado dos estudos em CFD apresentados anteriormente.	54
Tabela 3.1 - Características geométricas do prato perfurado em estudo.	56
Tabela 3.2 - Propriedade das malhas utilizadas no teste de independência de malha.	63
Tabela 3.3 – Condições operacionais e propriedades das fases na avaliação da hidrodinâmica do prato.	67
Tabela 3.4 – Condições operacionais e propriedades das fases na avaliação da transferência de espécies químicas ao longo do prato.	67
Tabela 5.1 – Configuração dos modelos utilizados	134

LISTA DE ABREVIATURAS

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);
MVF	Método dos Volumes Finitos;
PRIME	<i>Pressure Implicit Linked Equations</i> ;
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i> ;
SIMPLEC	<i>SIMPLE-Consistent</i> ;
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
RMS	<i>Root Mean Square</i> (raiz quadrada da média);
RSM	<i>Reynolds Stress Model</i> (turbulência);
SRS	<i>Surface Renewal Stretch</i> (modelo de transferência de massa);
SST	<i>The Shear Stress Transport</i> (turbulência);

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos

a : constante da equação (2.12);

A_c : área da seção transversal da coluna;

A , A_g : área interfacial e área interfacial por unidade de volume;

A_H : área total dos orifícios;

A_B : área de borbulhamento;

A_P : área perfurada;

c_v : coeficiente de descarga;

C : concentração molar;

C_D : coeficiente de arraste;

d_H : diâmetro dos orifícios (*holes*);

D^0 , D : difusividade à diluição infinita e difusividade;

d , d_B : diâmetro de bolha;

D_p : diâmetro do prato;

Dg : número de tensão superficial;

E^{ML} , E^{MV} : eficiência de prato de Murphree para a fase líquida e vapor;

E_{OG}^{Ponto} : eficiência pontual;

f : fração volumétrica e fluxo do componente na fase líquida;

\hat{f} : fugacidade do componente na mistura;

F : fluxo molar total;

F_S : Fator F;

Fr : número de Froude;

FA : fração de área perfurada;

F_1 : função de mistura;

G^E : energia livre de Gibbs em excesso;

H, h : entalpia total e entalpia total da alimentação;

h_{cl}, h_{cf} : altura de líquido claro e altura da crista;

h_{DP} : perda de carga devido a passagem do vapor pelas perfurações;

h_{en} e h_{sai} : altura de entrada e saída de líquido;

h_f : altura de espuma;

h_p : espaçamento do prato;

h_T : perda de carga total através do prato;

h_σ : perda de carga devido as forças de tensão superficial;

h_w : altura da represa (*weir*);

k^C : coeficiente de transferência de massa;

k : coeficiente de transferência de massa, energia cinética turbulenta, constante de Boltzman ou constante de von Kármán;

K ou K^C : constante de equilíbrio;

L_d : comprimento do *downcomer*;

L_w : comprimento da represa;

l_{fw} : largura total do escoamento ao longo do prato e normal ao escoamento;

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

$MM, MM^{média}$: massa molecular e massa molecular média da mistura;

M : forças interfaciais atuando nas fases devido à presença da outra fase;

n : taxa molar;

n_p : número de partículas por unidade de volume;

N : fluxo total de transferência de massa entre as fases;

N_F : número de fases;

N_H : número de orifícios (*holes*);

N_{ideal}, N_{real} : número de pratos ideais e número de pratos reais;

P, P^{sat} : pressão e pressão de saturação do componente;

P_L : produção de turbulência devido às forças viscosas;

p : espaçamento dos orifícios na disposição triangular;

Q : vazão volumétrica ou quantidade de calor;

R : constante dos gases ideais;

R_h : raio hidráulico do prato;

Re, Re_h : número de Reynolds e número de Reynolds para o escoamento ao longo do prato;

S : termo fonte;

S_A : fonte do componente A na fase em questão;

Sc : número de Schmidt;

S_M, S_{MS} : fonte de momento e fonte de massa;

t : tempo;

T, T_b : temperatura e ponto normal de ebulição;

T, T^{eff} : tensor tensão e tensor efetivo;

u_{τ} : velocidade de atrito;

\mathbf{v} : vetor velocidade;

V_R : velocidade média de ascensão das bolhas através da região de intensa mistura líquido-vapor (*froth region*);

v_{slip} : velocidade de deslizamento das bolhas;

V_H : velocidade do vapor através das perfurações;

V_S : velocidade superficial do vapor;

V_P : velocidade do vapor através das perfurações do prato;

V_b : volume molar no ponto normal de ebulição;

x, y : Fração mássica ou molar;

Y : transferência de espécies químicas entre as fases;

y^+ : distância adimensional a partir da parede.

Letras Gregas

α : representa a fase contínua;

β : representa a fase dispersa;

γ : coeficiente de atividade ou peso específico;

γ^{∞} : coeficiente de atividade à diluição infinita;

ρ : massa específica, densidade ou concentração mássica;

$\rho^{médio}$: densidade média da mistura;

κ : energia cinética turbulenta;

ε : taxa de dissipação da energia cinética turbulenta;

ε : energia característica de Lennard-Jones;

ε : fluxo total de transferência de energia entre as fases;

ω : frequência turbulenta;

ϕ : propriedade genérica;

$\hat{\phi}$: coeficiente de fugacidade na mistura;

ϕ^{sat} : coeficiente de fugacidade na saturação;

η : eficiência de prato ou parâmetro da densidade de espuma;

η_o : eficiência global da coluna;

θ : tempo de contato na região de dispersão (*froth region*);

σ : tensão superficial;

σ : comprimento característico de Lennard-Jones;

ν : viscosidade cinemática;

μ : viscosidade ou potencial químico;

μ^{eff} , μ^{turb} : viscosidade efetiva e turbulenta;

μ_p : momento dipolar;

Γ : taxa de transferência de massa entre fases por unidade de volume do sistema.

κ : viscosidade dilatacional;

φ : fator de associação do solvente;

Ω_D : integral de colisão;

δ : parâmetro polar.

Λ : parâmetro da equação de Wilson;

Δy : distância entre o primeiro nó da malha e a parede;

τ_ω : tensão de cisalhamento na parede.

Subscritos

i : componente genérico ou índice de prato;

j : componente genérico;

L : fase líquida;

V : fase vapor;

$slip$: escorregamento;

Sobrescritos

D : arraste;

L : sustentação;

LUB : lubrificação;

VM : massa virtual;

$*$: condição de equilíbrio;

$médio$: valor médio da propriedade;

in : entrada;

out : saída;

T : vetor transposto;

eff : propriedade efetiva;

$turb$: propriedade turbulenta.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	24
1.1	Motivação pelo Tema.....	24
1.2	Objetivos Gerais.....	26
1.3	Objetivos Específicos.....	26
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	27
2.1	Fundamentação Teórica	27
2.1.1	Destilação.....	27
2.1.2	Modelagem de Estágios de Equilíbrio	31
2.1.3	Modelagem de Estágios de Não-Equilíbrio	32
2.1.4	Fluidodinâmica Computacional	34
2.1.5	Funcionamento de um Código de CFD	37
2.2	Revisão da Literatura	39
2.2.1	Estudos Experimentais.....	39
2.2.2	Estudos de Colunas de Destilação Utilizando Fluidodinâmica Computacional	46
3	METODOLOGIA.....	55
3.1	Etapa de Pré-Processamento	55
3.1.1	Características Geométricas do Prato Perfurado e Domínio Computacional	56
3.1.2	Malha Numérica.....	58
3.1.3	Condições Iniciais e de Contorno	63
3.2	Metodologia para o Processamento.....	68
3.3	Metodologia para o Pós-Processamento	68
3.3.1	Metodologia de Análise	68
4	MODELAGEM MATEMÁTICA	77
4.1	Considerações Assumidas	77
4.1.1	Modelo Heterogêneo.....	77
4.1.2	Hipótese do Contínuo	78
4.1.3	Interpenetrabilidade entre as Fases	78
4.1.4	Incompressibilidade	78

4.1.5	Fase Líquida Turbulenta	78
4.1.6	Predominância da Força de Arraste	79
4.1.7	Transferência Líquida de Massa entre as Fases por Convecção é Considerada Nula	79
4.2	Abordagem Matemática	79
4.3	Equações Governantes e Constitutivas	82
4.3.1	Equação da Continuidade	82
4.3.2	Equação da Quantidade de Movimento	83
4.3.3	Equação de Conservação das Espécies Químicas.....	84
4.3.4	Equações de Restrição	85
4.3.5	Equações para o Fechamento do Modelo	86
4.4	Coefficientes de Transferência de Massa	97
4.4.1	Modelo de Higbie	97
4.4.2	Modelo SRS (<i>Surface-Renewal-Stretch</i>)	99
4.4.3	Modelo de Zuiderweg	100
4.5	Difusividades.....	101
4.6	O <i>Particle Model</i>	104
4.7	Turbulência.....	104
4.7.1	Modelos de Turbulência	105
4.8	Sistema Bifásico Líquido-Vapor	113
4.9	Modelagem do Escoamento Próximo à Parede.....	117
4.9.1	Camada Limite.....	117
4.9.2	Modelando o Escoamento Próximo à Parede	118
4.10	Critérios para a Geração da Malha	120
5	PROCEDIMENTO NUMÉRICO	124
5.1	Malha Numérica.....	124
5.1.1	Malha Numérica Utilizada neste Estudo.....	127
5.2	Método Numérico	127
5.2.1	Formulação no Tempo	129
5.2.2	Tratamento do Termo Fonte	130
5.2.3	Termo Difusivo.....	130
5.2.4	Termos Convectivos	131
5.2.5	Solução Segregada e Acoplada.....	131

5.2.6	Métodos para Resolução de Sistemas Lineares	132
5.3	Resumo da Metodologia Numérica	134
5.3.1	Critério de Convergência	134
6	RESULTADOS E ANÁLISE.....	136
6.1	Análise das Malhas Numéricas	137
6.2	Análise da Hidrodinâmica	142
6.2.1	Altura de Líquido Claro	142
6.2.2	Distribuição de Velocidades	146
6.2.3	Fração Volumétrica.....	149
6.2.4	Linhas de Corrente	151
6.2.5	Isosuperfície	153
6.2.6	Mapas de Contorno do Componente w da Velocidade do Líquido	153
6.3	Análise da Transferência de Espécies Químicas.....	157
6.3.1	Campo de Frações Mássicas	157
6.3.2	Perfis Médios de Frações Mássicas	171
6.3.3	Eficiência de Murphree do Prato Perfurado.....	176
6.3.4	Perfis Pontuais de Frações Mássicas e Eficiência de Ponto	180
6.3.5	Comparação dos Modelos utilizados na Predição dos Coeficientes de Transferência de Massa.....	185
7	CONCLUSÕES.....	187
8	SUGESTÕES	189
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	191

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação pelo Tema

Uma preocupação constante das indústrias está relacionada com a busca de processos mais eficientes, tanto em relação à otimização dos processos quanto à questão ambiental. Dessa forma, em parceria com as universidades ou com grupos próprios de pesquisa e desenvolvimento, as indústrias procuram incessantemente métodos de melhoria para seus processos, objetivando a redução do consumo de energia e do impacto ambiental, da mesma forma que mantêm suas atividades economicamente viáveis.

Os processos de separação, como a evaporação e a destilação, são processos que consomem uma grande quantidade de energia. Segundo Wankat (2012), a destilação é a técnica de separação mais comumente utilizada nas indústrias de processos químicos, contabilizando entre 90 e 95% dessas técnicas. Segundo o autor, as diversas colunas de destilação utilizadas pelas indústrias de processamento químico dos Estados Unidos utilizam cerca de 40% de toda a energia demandada por essas indústrias. Ainda segundo o autor, as plantas químicas possuem entre 40% a 70% de capital e custos operacionais em técnicas de separação. Outro dado importante é citado por Smith e Linnhoff (1988), que afirmaram que 13% de toda a energia consumida pela indústria química no Reino Unido era destinada ao processo de destilação. À vista destes dados, pode-se visualizar a grande quantidade de energia consumida nestes processos, explicando assim os motivos de inúmeros trabalhos desenvolvidos com o intuito de se obter métodos de otimização de colunas de destilação.

A destilação é um processo físico de separação baseado na diferença de volatilidade dos constituintes de uma mistura, e no qual ocorre transferência de calor, massa e momento.

Devido à importância desse processo, diversos métodos foram propostos ao longo dos tempos para estudar este fenômeno. Dentre os principais modelos desenvolvidos estão o modelo de estágios de equilíbrio e o modelo de estágios de não-equilíbrio.

O modelo de estágios de equilíbrio considera que as correntes de líquido e vapor que saem de um determinado estágio estão em equilíbrio entre si, ou seja, possuem a mesma temperatura, a mesma pressão, e os mesmos potenciais químicos para os mesmos constituintes. Porém, na prática, raramente as correntes que abandonam os estágios alcançam esse equilíbrio entre si, sendo neste contexto que surge o conceito de eficiência de estágio, para corrigir os erros envolvidos ao se assumir essa condição de idealidade. Essa eficiência é baseada em análises práticas, ao se efetuar testes práticos comparando os resultados teóricos com os práticos, ou por correlações existentes na literatura. Porém há muitas imprecisões em se utilizar este método. Exemplos de métodos famosos que seguem este modelo são: Sorel (1899), Ponchon-Savarit (1921), e McCabe-Thiele (1925).

Deste modo, surgiu a necessidade de um método mais preciso, que eliminasse esta idealização de mistura perfeita e equilíbrio entre as correntes que abandonam o prato. O princípio básico do modelo de estágios de não-equilíbrio é a consideração da não existência de equilíbrio entre as duas correntes que abandonam um dado prato de destilação, assumindo-se o equilíbrio termodinâmico somente na interface líquido-vapor. Este modelo elimina as incertezas resultantes do uso da eficiência de estágio (NORILER, 2007). Contudo, este modelo macroscópico ainda apresenta algumas limitações, pois não trata os fenômenos de escoamento na superfície do prato como essenciais no desempenho do processo (SOARES, 2005).

Diversas são as dificuldades na obtenção de processos mais eficientes, principalmente porque, para isto, precisa-se de técnicas de análise que permitam identificar, dentre os diferentes processos e diferentes configurações dos mesmos, qual é a estrutura mais eficiente, menos poluidora, ou que gaste menos energia ou capital (FARIA, 2003).

Assim sendo, dentro deste contexto se enquadra a Fluidodinâmica Computacional (CFD), (do inglês *Computational Fluid Dynamics*). A CFD é um ramo da engenharia que emprega conceitos relacionados às disciplinas de fenômenos de transporte, matemática e computação, na solução de problemas que envolvem escoamentos. A partir da CFD pode-se abordar um fenômeno a partir de suas equações fundamentais, como transferência de calor, massa e momento, resolvendo-as a partir de ferramentas numéricas e computacionais. Ou seja, podem-se avaliar os fenômenos de maneira precisa e em uma escala microscópica, enquanto os outros métodos citados analisam os fenômenos de maneira macroscópica.

O desenvolvimento da CFD está fortemente ligado à rápida evolução dos computadores digitais e a partir de 1990 começou a ser utilizada em escala industrial. Além da grande vantagem em se observar o fenômeno de maneira mais realista, a CFD também permite a diminuição dos gastos relacionados com experimentos, pois através desta técnica pode-se avaliar os diversos testes propostos para uma determinada melhoria no processo e selecionar apenas os mais promissores para serem executados (TU; YEOH; LIU, 2008).

Desta maneira, é neste contexto que se baseia a temática desta dissertação, no intuito de desenvolver um estudo microscópico dos fenômenos de transferência de massa e momento que ocorrem nos estágios de uma torre de destilação, visando a melhor compreensão dos fenômenos ocorridos nestes locais, para posteriores propostas de mudanças visando à otimização do processo.

1.2 Objetivos Gerais

Este trabalho tem como objetivo geral a aplicação das técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD) na simulação dos fenômenos ocorridos em um prato perfurado de uma coluna de destilação com o auxílio do pacote comercial ANSYS® 14.5.

1.3 Objetivos Específicos

A seguir são apresentados os objetivos específicos:

- Utilização de modelo microscópico para a descrição e estudo da hidrodinâmica e da transferência de espécies químicas no escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de coluna de destilação, a partir de um código comercial de fluidodinâmica computacional (CFX 14.5);
- Validação do modelo através da comparação entre dados experimentais encontrados na literatura e os dados numéricos obtidos pelo modelo;
- Comparação e análise de três modelos de transferência de massa;
- Aplicação do modelo visando propor melhorias na eficiência, na operação e na geometria dos pratos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Fundamentação Teórica

2.1.1 Destilação

A destilação é uma operação unitária na qual uma mistura é separada em seus componentes devido a uma diferença de volatilidade dos mesmos. Este é um processo físico de separação e, segundo Kister (1992), a destilação em geral fornece o melhor e mais barato método para a separação de uma mistura líquida em seus componentes, exceto quando:

- A diferença de volatilidade entre seus componentes é suficientemente pequena a ponto de dificultar a separação;
- A alimentação da torre contém pequenas quantidades do componente desejado, necessitando uma excessiva vaporização para a obtenção do mesmo;
- Um componente é termicamente instável, mesmo sob condição de vácuo;
- A mistura é extremamente corrosiva ou possui grande potencial de causar incrustação.

A destilação pode ser efetuada de diversos modos, cada um dos quais apresentando vantagens e desvantagens segundo o propósito ao qual se destina.

2.1.1.1 Destilação Fracionada

Nesta dissertação o estudo foi direcionado à destilação fracionada. Conforme apresentado em Caldas *et al.* (2007), a destilação fracionada pode ser operada em diversos tipos de colunas (ou torres) de destilação, que são classificados de acordo com os tipos de

“internos”, ou seja, os equipamentos utilizados para propiciar o contato líquido-vapor. Estes equipamentos promovem da maneira mais eficiente possível o contato entre o líquido que desce e o vapor que sobe, por toda a extensão da coluna. Podem-se citar três classes principais de colunas de destilação deste tipo:

- Torres de pratos (ou bandejas);
- Torres recheadas;
- Torres mistas, compostas por seções de pratos e de recheios.

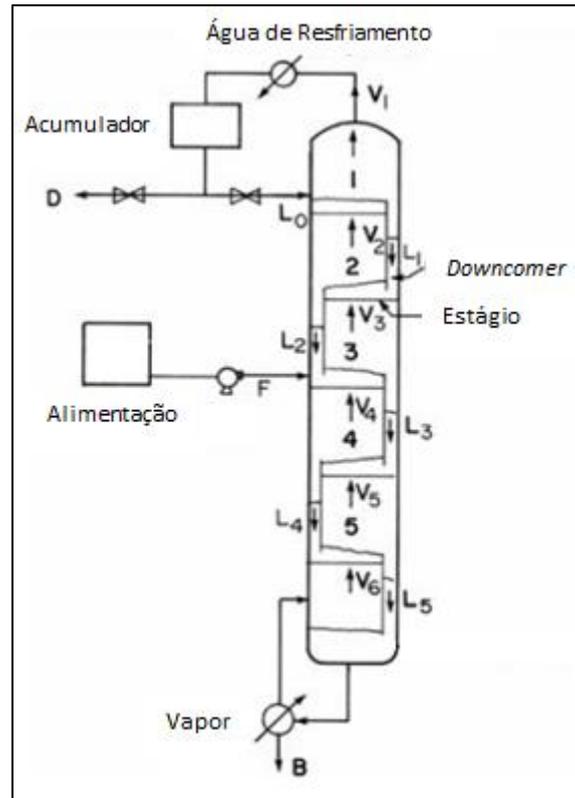
Os internos das torres de pratos (ou bandejas) podem ser classificados, de maneira geral, da seguinte forma:

- Pratos perfurados;
- Pratos com borbulhadores;
- Pratos valvulados.

Este trabalho se encontra no contexto da destilação fracionada operada em colunas de destilação com pratos perfurados. Desta forma, o enfoque deste item será neste tipo de coluna.

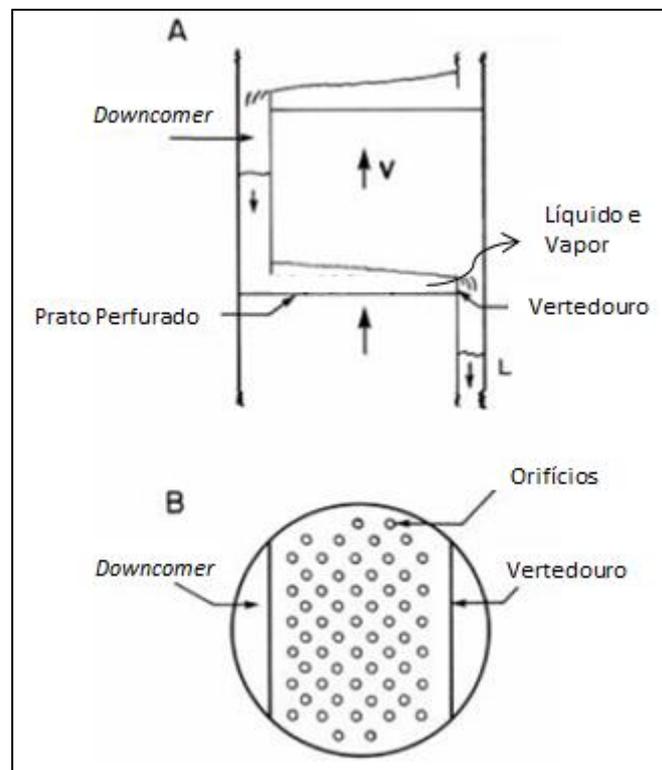
Uma torre de destilação com pratos perfurados são equipamentos que consistem em uma sequência vertical de estágios onde ocorre o contato líquido-vapor. A seguir consta um desenho esquemático de uma torre deste tipo.

Figura 2.1 - Representação esquemática de uma coluna de destilação com 5 estágios ($T_1 < T_2 < T_3 < T_4 < T_5 < T_6$).



Fonte: Adaptado de WANKAT (2012).

Figura 2.2 - Representação esquemática de pratos perfurados, vista lateral (A) e vista do topo (B).



Fonte: Adaptado de WANKAT (2012).

Como pode ser observada nas Figuras (2.1) e (2.2), a alimentação é feita em uma região intermediária da coluna, lembrando que podem ocorrer múltiplas alimentações ao longo da coluna. O líquido, por ação da gravidade, percorre a coluna de um prato para o outro por meio de canais laterais, chamados vertedores, em direção ao fundo da coluna. Além da corrente líquida da alimentação há também a corrente líquida que entra pelo topo da coluna, chamada de refluxo, sendo esta gerada por um trocador de calor chamado de condensador, que usa um fluido de resfriamento (normalmente água) para a condensação do vapor efluente do topo da coluna. O vapor presente na torre é produzido na base da coluna por um trocador de calor chamado refeedor, onde um fluido com maior energia (na forma de vapor) fornece calor ao líquido que sai pelo fundo da torre, vaporizando-o total ou parcialmente. Desta forma, enquanto a corrente líquida se dirige para a base da coluna pela ação da gravidade, o vapor sobe borbulhando através do líquido devido a um gradiente de pressão dentro da torre.

A pressão dentro da torre é menor na parte superior da coluna, ou seja, há um aumento de pressão da parte superior da coluna (topo) para a parte inferior (base) da mesma, sendo a maior pressão devido ao vapor produzido pelo refeedor e a menor pressão devido às perdas de cargas ao longo da coluna. Assim, devido à diferença entre as densidades relativas do vapor (menos denso) e do líquido (mais denso) e à diferença de pressão ao longo do equipamento, ocorre naturalmente o fluxo do líquido em direção à base da torre e o fluxo de vapor em direção ao topo da torre. No caso das colunas possuírem vertedores de descida do líquido, o contato entre as duas fases ocorre na superfície dos pratos em um escoamento cruzado, no qual o vapor ascende através das perfurações existentes nos pratos e entra em contato com o líquido escoando sobre a superfície do mesmo. No caso da coluna não possuir vertedores, as fases escoam em contracorrente pela coluna, apenas pelos movimentos ascendentes e descendentes das fases.

À vista disso, pode-se notar que a mistura rica no(s) componente(s) mais leve(s) (com menor ponto de ebulição, e portanto mais volátil) é retirado no topo da coluna, e recebe o nome de destilado ou produto de topo. Já a mistura rica no(s) componente(s) mais pesado(s) (com maior ponto de ebulição, isto é, menos volátil) sai pelo fundo da coluna, e recebe o nome de resíduo ou produto de fundo. E vale observar que toda esta operação consome uma grande quantidade de energia, sendo esta o agente de separação.

Para ocorrer uma transferência efetiva de massa entre as fases, o contato líquido/vapor deve ocorrer sob regime turbulento, uma vez que a turbulência aumenta a taxa de transferência de massa por unidade de área, ajudando a dispersar um fluido em outro e aumentando a área interfacial (SOARES, 2000).

2.1.2 Modelagem de Estágios de Equilíbrio

Neste tipo de modelagem utiliza-se o conceito de estágios de equilíbrio. Um estágio de equilíbrio é aquele que promove o contato líquido-vapor de modo tão eficiente a ponto das duas correntes de saída (líquido e vapor) atingirem o equilíbrio entre si. Segundo Wankat (2012) esta condição de equilíbrio pode ser convenientemente subdividida em equilíbrio térmico (de temperatura), mecânico (de pressão) e químico (de potencial químico). A maior parte das ferramentas computacionais utilizadas na simulação de colunas de destilação utiliza este conceito de estágios de equilíbrio.

A modelagem matemática para este conceito envolve as equações denominadas MESH, compostas pelos balanços de massa (M), as equações de equilíbrio (E), as equações de restrição (S) e as equações dos balanços de energia (H) (SOARES, 2005).

Porém, mesmo sabendo que o equilíbrio é raramente atingido, pois requereria um tempo de contato extremamente grande ou uma área de contato extremamente grande entre as fases, o modelo de estágio de equilíbrio é utilizado para a análise de colunas de separação, devido a sua praticidade (PESCARINI, 1996).

No entanto, observa-se que em um estágio real não há transferência de massa tão eficiente quanto a que ocorre em um estágio de equilíbrio ideal. Desta maneira, o conceito de eficiência do prato deve ser utilizado na modelagem para substituir o cálculo direto das transferências de calor e massa entre as fases líquida e vapor no prato real. Com a eficiência pode-se determinar o comportamento de uma coluna real a partir do comportamento de uma coluna ideal (PESCARINI, 1996). Ou seja, admite-se que a coluna opera de maneira ideal em todos os estágios e, a partir dos resultados obtidos, corrigem-se os mesmos utilizando a definição de eficiência. A seguir serão apresentados alguns conceitos de eficiências, dentre os muitos existentes, para uma melhor interpretação do seu significado.

Do mesmo modo pelo qual Soares (2000) cita em seu trabalho, há diferentes expressões para o cálculo de eficiências de colunas de destilação, elaboradas ao longo dos anos. A primeira e mais simples é a expressão proposta por Lewis em 1922, que relaciona o número de estágios reais (N_{real}) e ideais (N_{ideal}) para o cálculo da eficiência global da coluna (η_o), e está apresentada da Equação (2.1).

$$\eta_o = \frac{N_{ideal}}{N_{real}} \quad (2.1)$$

Outro conceito de eficiência que pode ser utilizado é a eficiência de Murphree (1925), que é uma eficiência de prato (estágio), ou seja, avalia o desempenho de um estágio, e não da coluna como um todo. Esta eficiência relaciona as diferenças nas concentrações entre as correntes de vapor que entram e saem do prato e a diferença nas concentrações entre a corrente de vapor em equilíbrio com o líquido que deixa o prato e a corrente de vapor que entra no prato (SOARES, 2000). A eficiência de Murphree para a fase vapor é apresentado na Equação (2.2).

$$E_{i,j}^{MV} = \frac{y_{i,j} - y_{i+1,j}}{y_{i,j}^* - y_{i+1,j}} \quad (2.2)$$

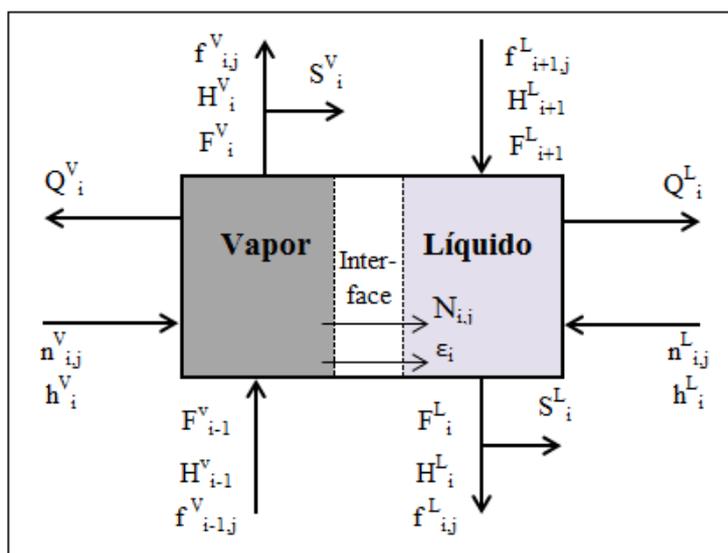
Na Equação (2.2), tem-se que: $y_{i+1,j}$ é a fração molar do componente j na fase vapor que entra no prato i , $y_{i,j}$ é a fração molar do componente j na fase vapor que sai do prato, e o termo $y_{i,j}^*$ é a fração molar do componente j na fase vapor em equilíbrio com o mesmo componente na fase líquida que sai do prato. A eficiência de Murphree será apresentada com mais detalhes em seções subsequentes.

Outro conceito importante de eficiência, é a modificação da eficiência de Murphree proposta por West *et al.* (1952), a qual analisa a eficiência em diferentes pontos no prato, e será discutida com mais detalhes em seções subsequentes. Além dessas, diversas correlações empíricas de eficiência foram desenvolvidas. As correlações de eficiência procuram incorporar parâmetros importantes de transferência de massa para o cálculo da eficiência, ou seja, foram desenvolvidas com o intuito de correlacionar dados reais no cálculo da eficiência de colunas e de pratos de destilação. Como exemplo pode-se citar: as correlações de Drickamer e Bradford (1943), O'Connell (1946), Macfarle (1972), English e VanWinkle (1983), Barros e Wolf (1997), dentre outras (NORILER, 2007).

2.1.3 Modelagem de Estágios de Não-Equilíbrio

Na modelagem de estágios de não equilíbrio considera-se a não existência de equilíbrio termodinâmico entre as duas fases, líquida e vapor, que abandonam cada estágio da coluna. O equilíbrio termodinâmico é assumido somente na interface líquido-vapor de separação das duas fases. A Figura (2.3) apresenta um esquema das duas fases e da interface de separação.

Figura 2.3 - Representação esquemática do estágio de não-equilíbrio.



Fonte: Adaptado de PESCARINI (1996).

Na Figura (2.3), os termos expostos são: F é fluxo molar total (mol s^{-1}), f é o fluxo do componente na fase líquida (mol s^{-1}), n é o fluxo do componente na alimentação (mol s^{-1}), H é a entalpia total (J s^{-1}), h é a entalpia total da alimentação (J s^{-1}), N é o fluxo total de transferência de massa entre as fases (mol s^{-1}), Q é o calor removido (J s^{-1}), S é o fluxo total na saída lateral (mol s^{-1}), ϵ é o fluxo total de transferência de energia entre as fases (J s^{-1}), i representa o estágio, j o componente, L a fase líquida e V a fase vapor.

Na modelagem matemática deste conceito, os balanços de massa e de energia em cada estágio são substituídos por balanços para a fase vapor e para a fase líquida. Para cada um dos componentes presentes nas fases, os balanços de massa aplicados contêm um termo de taxa de transferência de massa entre as duas fases. Já os balanços de energia contêm um termo de taxa de transferência de energia entre as fases. Esses termos de taxas de transferência de calor e massa são estimados a partir de equações constitutivas apropriadas. Consequentemente, os balanços para cada fase são acoplados às taxas de transferência de massa e calor. Assim, de maneira geral, a metodologia deste modelo consiste em escrever as equações de conservação para cada fase independentemente, escrever as equações constitutivas, e assim resolvê-las simultaneamente (PESCARINI, 1996; SOARES, 2005).

Nesta modelagem considera-se apenas o equilíbrio mecânico, ou seja, equilíbrio de pressão entre as fases. Dessa forma, como não se considera nem o equilíbrio térmico nem o equilíbrio químico, há transferências de massa e energia através da interface. Esta interface é

considerada uniforme, não havendo resistência ao transporte de massa e energia, deste modo não existe acúmulo de massa e energia na mesma, ou seja, na interface ocorre o equilíbrio termodinâmico (PESCARINI, 1996).

Sendo a consideração de equilíbrio termodinâmico entre as fases o fator que implica no uso do conceito de eficiência de estágios, na modelagem de estágios de não equilíbrio as incertezas resultantes da utilização do conceito de eficiência são eliminadas, pois apenas a interface está em equilíbrio (PESCARINI, 1996).

Diante do exposto, nota-se que as modelagens de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio descritas (modelos macroscópicos), consideram apenas os fenômenos de transferência de massa e de calor, enquanto a fluidodinâmica é avaliada por meio de correlações empíricas que fornecem estimativas de parâmetros, como queda de pressão, altura de líquido sobre o prato, vazão de líquido e de vapor, entre outros, relacionados no cálculo de eficiência do processo (SOARES, 2005).

Nos trabalhos realizados por PESCARINI (1996), BARROS (1997) e SOARES (2000) há informações mais detalhadas dessas modelagens.

2.1.4 Fluidodinâmica Computacional

Com o intuito de estudar um fenômeno físico qualquer, deve-se inicialmente modelar a física do problema. Por modelagem, entende-se determinar quais as grandezas físicas (temperatura, pressão, densidade etc.) atuam sobre o sistema físico, e como elas o afetam. Elabora-se um modelo, por exemplo, a partir da aplicação dos princípios de conservação adequados ao fenômeno (conservação da massa, energia e momento) e de equações constitutivas (equação cinética, lei do resfriamento de Newton, equações PVT, lei de Raoult etc.). Dessa forma, os modelos resultantes são expressos por equações que relacionam as grandezas entre si, e frequentemente esses modelos só admitem soluções analíticas se forem feitas simplificações (FORTUNA, 2012).

Ao longo dos anos, o tratamento matemático (através de modelos) dos fenômenos seguiram um avanço tanto em ordem cronológica quanto em nível de detalhamento. Segundo Himmelblau (1968), os modelos matemáticos podem ser classificados segundo o nível de detalhamento da forma que segue:

- a) Modelagem Atômica e Molecular;
- b) Modelagem Microscópica;

- c) Modelagem de Múltiplo Gradiente;
- d) Modelagem de Máximo Gradiente;
- e) Modelagem Macroscópica.

A descrição molecular do processo é a descrição mais fundamental de um processo e trata um dado sistema como se ele fosse composto por várias entidades individuais, onde as propriedades, variáveis de estado e respostas às perturbações do sistema são obtidas pela soma das contribuições individuais, calculadas através da mecânica quântica, estatística e clássica. Este tipo de descrição envolve um tratamento matemático demasiado complexo, sendo somente utilizado em engenharia quando o sistema em questão é constituído de gases ideais (HIMMELBLAU, 1968).

Já a modelagem microscópica considera o sistema como um contínuo, fazendo uma descrição fenomenológica do mesmo, ignorando as interações moleculares na formulação das equações matemáticas para os balanços de massa, energia e momento. O balanço é realizado em um elemento de volume infinitesimal, tendo dessa forma suas equações baseadas em balanços diferenciais (HIMMELBLAU, 1968). A hipótese do contínuo também é aplicada para os casos c, d, e, apresentados anteriormente.

A modelagem de múltiplo gradiente constitui-se numa descrição que se aplica a fenômenos de transporte laminar e turbulento do tipo que ocorrem em escoamento em meios porosos, leitos de recheio, enfim, todo e qualquer processo onde não seja possível medir ou calcular o campo de velocidade local. Este nível de descrição utiliza informações menos detalhadas das características internas do processo que o modelo microscópico. As equações utilizadas provêm do modelo microscópico, entretanto os coeficientes das mesmas são empíricos e devem ser determinados experimentalmente para o processo em questão (HIMMELBLAU, 1968).

A modelagem de máximo gradiente pode ser considerado uma simplificação do modelo de múltiplo gradiente, sendo suprimidos os termos de dispersão e conservadas as derivadas dos termos de fluxo global. Quando a análise interna detalhada do sistema não é importante, algumas hipóteses simplificadoras são admitidas, o que conduz a equações matematicamente mais simples. No modelo de máximo gradiente é levada em consideração somente a maior componente (unidimensional) do gradiente da variável independente de cada balanço. Por exemplo, na representação do gradiente máximo de um reator tubular para

absorção de gás, só são considerados os gradientes de concentração na direção axial (fluxo empistonado) originados pelo fluxo global (HIMMELBLAU, 1968).

A modelagem macroscópica despreza todo o detalhamento interno do sistema, de forma que as variáveis não variam com a posição, mas somente com o tempo, sendo somente o tempo a variável independente nos balanços. Estas simplificações tornam a resolução das equações mais fácil e rápida, mas também ocorrem certas perdas de características do sistema (HIMMELBLAU, 1968).

É no contexto da modelagem microscópica que o modelo de Fluidodinâmica Computacional utilizado neste estudo se enquadra. Esta modelagem abrange quase todos os efeitos fenomenológicos, mas em contrapartida, torna complicada a solução das equações. Essas equações só podem ser resolvidas através de métodos numéricos, que deram origem à Fluidodinâmica Computacional (NORILER, 2003).

A Fluidodinâmica Computacional ou CFD (*Computational Fluid Dynamics*) é uma ferramenta da engenharia e da ciência que emprega conceitos relacionados às disciplinas de fenômenos de transporte, matemática e computação. A primeira estuda os fluidos em movimento, como eles se comportam durante o escoamento e respondem a influências como reações químicas e transferência de calor e massa. As características físicas dos fluidos em movimento podem ser representadas por equações matemáticas fundamentais, geralmente na forma diferencial, chamadas equações governantes. A parte computacional atua na resolução dessas equações através de simulações numéricas por meio de linguagens computacionais de alto nível, convertendo as equações diferenciais em algébricas (TU; YEOH; LIU, 2008).

A partir de 1960 em diante, a indústria aeroespacial integrou as técnicas de CFD para o design, desenvolvimento e produção das aeronaves. Dessa forma, com a disponibilidade mais acessível de computadores de alta performance, a CFD teve gradativamente um aumento de interesse, e entrou de forma mais ampla na comunidade industrial na década de 1990 (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

Existem muitas vantagens em utilizar fluidodinâmica computacional. Primeiramente, deve-se recordar o fato de no desenvolvimento teórico de uma situação física, muitos termos serem desprezados de modo que a resolução das equações seja possível. A CFD apresenta a possibilidade de resolver as equações diferenciais completas, tornando a análise do escoamento mais próxima da realidade, e possibilitando o estudo em maiores detalhes de

alguns termos específicos que aparecem nas equações governantes. Outra vantagem está no fato da CFD complementar os estudos analíticos e experimentais no escoamento de um fluido real, fornecendo uma alternativa mais completa ou com menor custo. Particularmente, a CFD reduz substancialmente o tempo dedicado e os gastos em design e produção comparado com os estudos experimentais e oferece a habilidade de resolver problemas complexos de escoamentos nos quais os estudos analíticos não seriam possíveis. A CFD também tem a capacidade de simular escoamentos em condições que não seriam reproduzíveis em testes experimentais, por exemplo, em cenários de acidente nuclear, cenários muito grandes ou muito remotos e perigosos de serem simulados experimentalmente, como é o caso de estudos na biologia e na geofísica. Outra vantagem importante é a maneira com que os códigos de CFD fornecem os resultados das simulações, através de informações detalhadas e visíveis (TU; YEOH; LIU, 2008).

2.1.5 Funcionamento de um Código de CFD

Os códigos de CFD são estruturados em torno de algoritmos numéricos que permitem a resolução de problemas de escoamento de fluidos. Esses códigos são compostos por três elementos principais: um pré-processador, um “*solver*” e um pós-processador. Uma análise das etapas constituintes desses três elementos é apresentada a seguir (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

O pré-processamento consiste na implementação de um problema de escoamento no código de CFD através de uma interface e a subsequente transformação dos dados de entrada em uma forma adequada para ser processada pelo “*solver*”. As atividades nesta etapa envolvem (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007):

- Definição da geometria da região de interesse: o domínio computacional;
- Geração da malha: a subdivisão do domínio em um número de pequenos subdomínios;
- Seleção dos fenômenos físicos e químicos que precisam ser modelados;
- Definição das propriedades dos fluidos;
- Especificação de condições de contorno apropriadas para as células que coincidem, ou tocam, a fronteira do domínio;
- Definição de métodos numéricos, funções de interpolação, etc.

A precisão de uma solução por CFD é governada, além de outros fatores, pelo número de células na malha obtida do domínio computacional. Em geral, quanto maior o número de células, melhor a precisão da solução. Malhas mais elaboradas são frequentemente não-uniformes, ou seja, são mais finas em áreas onde ocorrem grandes variações de ponto a ponto, e mais grossas em regiões com variações relativamente pequenas. Mais de 50% do tempo gasto em projetos de CFD é dedicado à definição do domínio geométrico e à geração da malha (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007). No entanto, outros fatores, tais como o intervalo de tempo utilizado (*time step*) e o número de Courant, também exercem uma importante função na precisão de uma solução por CFD.

Processador, ou “solver”, como o próprio nome diz, é o elemento responsável pelo processamento das informações fornecidas durante as etapas de pré-processamento. A técnica de solução numérica mais empregada pelos códigos de CFD é a técnica dos volumes finitos. As principais etapas realizadas pelos algoritmos numéricos são compostas por (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007):

- Integração das equações governantes do escoamento do fluido ao longo de todos os volumes de controle do domínio;
- Discretização, ou seja, conversão das equações resultantes em um sistema de equações algébricas;
- Solução do sistema de equações algébricas por meio de um método iterativo.

As equações governantes do escoamento são oriundas dos princípios de conservação apresentados na teoria de fenômenos de transporte. Dentre essas equações estão, por exemplo, a equação da continuidade e as equações de Navier-Stokes. A maioria dos termos dessas relações são não-lineares e, como consequência, não possuem soluções analíticas (MALISKA, 2004).

A primeira etapa, que consiste na integração das equações, é o que distingue o método de volumes finitos de todas as outras técnicas de CFD, como por exemplo, método das diferenças finitas e método dos elementos finitos (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007). Uma grande vantagem de se utilizar o método de volumes finitos está na sua capacidade de manter o caráter físico de cada termo nas equações discretas, possibilitando maior robustez ao método (MALISKA, 2004).

O pós-processamento é a etapa do código de CFD responsável pela apresentação dos resultados oriundos da simulação. As etapas que constituem este elemento são (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007):

- Visualização da malha e do domínio geométrico;
- Gráficos de vetores;
- Gráficos de linhas e contornos;
- Gráficos de superfície em 2D e 3D;
- Trajetórias de partículas;
- Manipulação gráfica (translação e rotação);
- Animações.

2.2 Revisão da Literatura

O objetivo deste item está na apresentação geral de alguns trabalhos já realizados tanto experimentalmente quanto utilizando as técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) no estudo de estágios de destilação. A partir deste item poderão ser entendidos de maneira mais clara os diferentes tipos de abordagens dos fenômenos internos que ocorrem em uma coluna de destilação.

2.2.1 Estudos Experimentais

Colwell (1979), propôs uma equação para o cálculo da altura de líquido claro a partir de diversos dados oriundos da literatura. A partir da equação de Francis e de diversas condições e dados experimentais (apresentados no próprio artigo), o autor desenvolveu uma adaptação da equação de Francis, obtendo uma equação para o cálculo da altura de líquido claro a partir da densidade de espuma (fração volumétrica média de líquido na dispersão). Como o autor cita no escopo do trabalho e na seção de desenvolvimento da correlação, apenas foram utilizados dados experimentais de pratos com seção retangular para o desenvolvimento da equação proposta, devido ao fato da equação de Francis requerer escoamento uniforme sobre o comprimento da barragem de saída. Essas equações fornecem boas estimativas para pratos perfurados operando no regime de espuma (*froth regime*), embora o autor assumira a possibilidade em se utilizar no regime de *spray* (*spray regime*). A equação de Francis é conforme a Equação (2.3).

$$h_{cl} = h_w + 6,65 \left(\frac{Q_L}{L_w} \right)^{2/3} \quad (2.3)$$

As variáveis dessa equação são definidas a seguir. A partir da Equação (2.3), Colwell propôs a seguinte correlação semi-empírica para o cálculo da altura de líquido claro (Equação (2.4)), que deve ser usada juntamente com a equação para a densidade de espuma e com as demais equações apresentadas (Equações (2.5) à (2.10)).

$$h_{cl} = f_L^{médio} h_w + 7,3 \left(\frac{f_L^{médio^{1/2} Q_L}{C_d L_w} \right)^{2/3} \quad (2.4)$$

$$C_d = 0,61 + 0,08 \frac{h_{cf}}{h_w}; \quad \frac{h_{cf}}{h_w} \leq 8,135 \quad (2.5)$$

Ou

$$C_d = 1,06 \left(1 + \frac{h_{cf}}{h_w} \right)^{1,5}; \quad \frac{h_{cf}}{h_w} > 8,135 \quad (2.6)$$

$$h_{cf} = h_f - h_w \quad (2.7)$$

$$f_L^{médio} = \frac{1}{\eta + 1} \quad (2.8)$$

$$\eta = 12,6 Fr^{0,4} \left(\frac{A_H}{A_B} \right)^{-0,25} \quad (2.9)$$

$$Fr = \frac{\rho_V V_s^2}{g \left(\frac{h_{cl}}{1000} \right) (\rho_L - \rho_V)} \quad (2.10)$$

Nas equações anteriores, os termos são: Q_L é a vazão volumétrica de líquido (m^3/s), C_d é o coeficiente da represa, L_w é o comprimento da represa (m), h_{cf} é a altura da crista da espuma acima da barragem (m), η é o parâmetro da densidade de espuma, Fr é o número de Froude, A_H é a área total dos orifícios (m^2), A_B é a área efetiva de borbulhamento (m^2), ρ_L é a densidade do líquido ($kg m^{-3}$), ρ_V é a densidade do vapor ($kg m^{-3}$); V_s é a velocidade do vapor através da área de borbulhamento ($m s^{-1}$), g é a constante de gravidade ($m s^{-2}$), h_w é a

altura da represa (m), $f_L^{médio}$ é a densidade de espuma (relativa) ou fração volumétrica média de líquido na dispersão, h_{cl} a altura de líquido claro (m), h_f a altura da espuma (m).

Conforme citado no próprio artigo, a utilização desta correlação para torres com seção retangular apresentou resultados muito satisfatórios, tanto na predição da altura de líquido claro, com erros em torno de 7%, como para o cálculo da densidade de espuma (fração volumétrica), com erros em torno de 8%.

O uso da equação proposta por Colwell para torres com diâmetro circular exige correções, devido principalmente a dois problemas. Um deles está relacionado à contração gerada pelo comprimento da represa em relação à largura do prato, por ser o comprimento da represa sempre menor que o diâmetro do prato. O outro está relacionado ao fato do escoamento sobre a barragem ser não uniforme para esse tipo de geometria. Entretanto, o impacto desses dois fatores tendem a diminuir conforme se aumenta o diâmetro das colunas, sendo fortemente observado em torres de pequenos diâmetros.

Neste sentido, o autor realizou testes em uma geometria circular com diâmetro de 1,22 metros para dois sistemas diferentes, ar/água e ar/Isopar-M, sendo que os resultados obtidos apresentaram boa concordância com os valores experimentais. Assim, o autor sugere que a correlação proposta pode ser usada como boas primeiras aproximações para torres de geometrias circulares com diâmetros iguais ou superiores que 1,22 metros. O estudo também apresenta correções da equação para os pratos com chicanas de saída (*Splash Baffles*) e para pratos apresentando regiões sem perfuração antes da barragem (*Calming Zones*). Além dos testes citados anteriormente, o autor apresenta comparações com outros tipos de internos e outros diâmetros de prato, para base de comparação. Vale ressaltar que a equação utilizada para a densidade de mistura apresentou boa precisão, independentemente da configuração geométrica da torre (retangular ou circular), para operações no regime de espuma.

Bennet *et al.* (1983) desenvolveram uma correlação para a perda de carga total em colunas de destilação utilizando pratos perfurados. Durante o estudo, os autores citam o fato de estudos anteriores não terem trabalhado com represas de alturas entre zero e 25 mm, e com pratos apresentando perfurações de pequenos diâmetros. Segundo os autores, perfurações de pequenos diâmetros geram grandes perdas de cargas devido a forças de tensões superficiais. Dessa forma, com o intuito de desenvolver uma correlação que envolvesse o máximo de efeitos presentes em um prato perfurado sobre a perda de carga total, os autores montaram um extenso banco de dados contendo dados experimentais realizados por eles próprios e dados obtidos de trabalhos anteriores.

O trabalho experimental desenvolvido utilizou dois sistemas, os pares ar/água e ar/etileno glicol, em um prato perfurado retangular (0,152 m x 0,610 m) no qual se variou a altura da represa entre valores de zero a 25,4 mm e com perfurações de 1 mm e 3 mm, além de se variar também a velocidade superficial do vapor e a vazão de líquido. Dessa forma, incorporou-se os dados experimentais obtidos neste estudo com os dados experimentais obtidos em outros trabalhos, formando um grupo de aproximadamente 300 conjuntos de dados, dentre os quais estavam envolvidas extensas faixas de propriedades de gás e líquido, taxas de escoamento e geometrias de pratos perfurados.

Como será apresentado nas equações a seguir, os autores propuseram que a perda de carga total era composta por três fatores: perda de carga devido a coluna de líquido, perda de carga devido a passagem do vapor pelas perfurações e perda de carga devido as forças de tensão superficial. Quanto à altura de líquido claro os autores observaram que a equação proposta para a altura de líquido claro neste estudo é muito similar às outras equações propostas na época, como a proposta por Colwell (1979), com a importante exceção de não demandar de observações visuais no cálculo da densidade de espuma (fração volumétrica de líquido) e, assim, não incorporar na correlação proposta os grandes erros envolvidos nessa prática visual. Dessa forma, ao invés da altura de espuma (dispersão) observada, os autores propuseram o uso de uma altura de dispersão efetiva e, assim, uma fração volumétrica de líquido efetiva contida nessa dispersão efetiva.

Como será apresentada a seguir, na expressão para a fração volumétrica de líquido, diferentemente de Colwell (1979) os autores não consideraram as condições geométricas do prato, pois os dados experimentais receberam melhores ajustes sem estes fatores. A equação proposta para a altura de líquido claro também foi baseada na equação de Francis, da mesma forma como a equação de Colwell (1979). As equações obtidas neste estudo são apresentadas a seguir (Equações (2.11) à (2.16)).

$$h_T = h_{cl} + h_{DP} + h_\sigma \quad (2.11)$$

$$h_D = \frac{a}{c_V^2} \frac{\rho_V V_H^2}{\rho_L g} \quad (2.12)$$

$$h_\sigma = \frac{6 \sigma^{2/3}}{1,27 g^{2/3} \rho_L \left[\frac{D_H}{(\rho_L - \rho_V)} \right]^{1/3}} \quad (2.13)$$

$$h_{cl} = f_L^{m\u00e9dio} \left[h_W + C \left(\frac{Q_L}{f_L^{m\u00e9dio}} \right)^{2/3} \right] \quad (2.14)$$

$$C = 0,0327 + 0,0286 \exp[-137,8 h_W] \quad (2.15)$$

$$f_L^{m\u00e9dio} = \exp \left[-12,55 \left(V_S^2 \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L - \rho_V}} \right)^{0,91} \right] \quad (2.16)$$

Nas equa\u00e7\u00f5es anteriores, tem-se que: h_T \u00e9 a perda de carga total atrav\u00e9s do prato (m de l\u00edquido), h_{cl} \u00e9 a perda de carga devido a coluna de l\u00edquido (m de l\u00edquido), h_{DP} \u00e9 a perda de carga devido a passagem do vapor pelas perfura\u00e7\u00f5es (m de l\u00edquido), h_σ \u00e9 a perda de carga devido as for\u00e7as de tens\u00e3o superficial (m de l\u00edquido), h_W \u00e9 a altura da barragem (m), V_H \u00e9 a velocidade do vapor atrav\u00e9s das perfura\u00e7\u00f5es ($m s^{-1}$), V_s \u00e9 a velocidade superficial do g\u00e1s ($m s^{-1}$), a \u00e9 a constante da Equa\u00e7\u00e3o (2.12) e de acordo com o artigo geralmente $a = 0,499$, c_v \u00e9 a coeficiente de descarga, Q_L \u00e9 a vaz\u00e3o volum\u00e9trica de l\u00edquido ($m^3 s^{-1}$) e D_H \u00e9 a di\u00e2metro do orif\u00edcio (m).

Solari e Bell (1986) realizaram um estudo experimental em uma coluna de destila\u00e7\u00e3o com cinco pratos perfurados em escala comercial, sendo o prato do meio (prato n\u00famero tr\u00eas) o prato de an\u00e1lise. Os pratos eram circulares e com di\u00e2metro de 1,213 metros. As demais condi\u00e7\u00f5es geom\u00e9tricas seguem na Tabela (2.1), na qual o s\u00edmbolo Δ contido na tabela representa que os orif\u00edcios do prato s\u00e3o espa\u00e7ados em forma de tri\u00e2ngulo equil\u00e1tero e com 0,05 m de dist\u00e2ncia. Os autores utilizaram duas vaz\u00f5es volum\u00e9tricas de l\u00edquido, sendo $6,94 \times 10^{-3} m^3/s$ e $17,8 \times 10^{-3} m^3/s$, e quatro valores diferentes do fator F_S , sendo 1,015 e 1,464 para a vaz\u00e3o $6,94 \times 10^{-3} m^3/s$ e 0,462 e 0,801 para a vaz\u00e3o $17,8 \times 10^{-3} m^3/s$. A defini\u00e7\u00e3o do fator F_S \u00e9 dada na Equa\u00e7\u00e3o (2.17). O sistema utilizado foi \u00e1gua/ar a 1 atm. Utilizou-se uma t\u00e9cnica fluorim\u00e9trica para a obten\u00e7\u00e3o das medidas experimentais, no qual a resposta do sistema a um pulso de um corante fluorescente injetado p\u00f4de ser medido em diversos pontos instalados no prato.

$$F_S = V_S \sqrt{\rho_V} \quad (2.17)$$

Na Equa\u00e7\u00e3o (2.10), o termo F_S \u00e9 equivalente ao Fator F , ($m s^{-1} (kg m^{-3})^{0,5}$).

Tabela 2.1 – Condições geométricas utilizadas por Solari e Bell (1986).

Condição Geométrica	Dimensão
Diâmetro do prato, [m]	1,213
Espaçamento do prato, [m]	0,61
Comprimento da represa, [m]	0,925
Altura da represa, [m]	0,05 ou 0,10
Comprimento do downcomer, [m]	0,572
Diâmetro e espaçamento do orifício, [m]	0,0127 x 0,05Δ
% Área de borbulhamento do prato (ao longo da área total)	76
% Área perfurada do prato (ao longo da área de borbulhamento)	5
% Área do downcomer (ao longo da área total)	12,5

Fonte: Adaptado de Solari e Bell (1986).

Os objetivos principais deste estudo foram os de avaliar a distribuição do tempo de residência do líquido no prato, a distribuição de velocidades sobre o prato e o efeito da variação da taxa de escoamento do líquido e do gás sobre essas distribuições. Os experimentos foram realizados diversas vezes nas mesmas condições para a reprodutibilidade dos dados. Os perfis de tempo de residência foram obtidos traçando-se linhas de tempo de residência constante.

O prato apresentou regiões de altos tempos de residência próximos da parede e regiões de pequenos tempos de residência próximos à linha central do prato. Estes perfis foram observados principalmente quando se utilizam baixas cargas de líquido e principalmente baixas cargas de gás. Ao aumentar a carga de líquido os autores observaram uma redução dessas áreas de alto tempo de residência próximos da parede para uma região mais estreita. Porém a grande diferença foi observada ao se aumentar a carga de vapor, no qual à grandes cargas de vapor essas regiões quase desapareceram totalmente. Segundo os autores, esses resultados sugerem que os padrões de mistura sobre o prato estão longe de serem uniformes, e zonas de diferentes graus de mistura estão presentes no prato.

Quanto à distribuição de velocidades, os autores observaram que a velocidade linear na linha central estava entre 1,1 a 2,8 vezes maior que a velocidade média sobre o prato, e a velocidade na parede se apresentou apenas como uma fração dessa velocidade média. Os perfis de velocidades a baixas velocidades superficiais de vapor mostraram severas não uniformidades no escoamento, caracterizadas por alta velocidade na linha central e zonas estagnadas próximas à parede. Estas não uniformidades estão relacionadas às regiões de

escoamento estagnadas e regiões com certo grau de retromistura. Aumentando ambas as cargas de líquido ou de vapor, as não uniformidades foram reduzidas, porém não desapareceram completamente.

Para altas taxas de gás, mesmo ainda sendo observadas velocidades baixas próximo da parede, o perfil de velocidades se tornou mais próximo de ser plano. Assim, os autores admitem como fundamental o efeito da taxa de gás nos padrões de escoamento, sendo que a quantidade de momento e energia introduzida pela corrente gasosa tende a frear o padrão de recirculação e a aumentar a velocidade do líquido próximo da parede. Dessa forma, os autores puderam identificar importantes fatores hidrodinâmicos, tais como distribuições não uniformes de velocidades, zonas de estagnação e recirculação de líquido, todos os quais afetam a eficiência do prato perfurado.

Dribika e Biddulph (1986) estudaram a eficiência de pratos perfurados com perfurações de pequenos diâmetros. O equipamento utilizado foi uma torre de destilação com três pratos, sendo o prato do meio o destinado para o estudo. O prato tinha seção retangular com dimensões 1.067 x 89 mm e com perfurações de 1,8 mm de diâmetro. O sistema utilizado foi metanol/água a 1 atm de pressão. Os autores utilizaram um prato com seção retangular para evitar a formação de zonas estagnadas e para a obtenção de um escoamento líquido mais uniforme.

Os dados experimentais foram obtidos a partir de 8 pontos situados ao longo do prato, nos quais era medida a temperatura do escoamento e eram retiradas determinadas quantidades de líquido através de tubos estreitos de amostragem para a avaliação da composição. Juntamente com este estudo experimental, os autores desenvolveram um modelo para a predição dos dados experimentais. Este modelo levou em consideração o grau de mistura da fase líquida sobre o prato e o conceito de difusão turbulenta.

O modelo desenvolvido, juntamente com outros modelos existentes na época, foram comparados com os dados experimentais obtidos, para avaliar o perfil de composição do líquido ao longo do prato, o perfil de temperatura, altura de espuma, valores de eficiência do prato e valores de eficiência no ponto variando-se alguns fatores. Os valores preditos pelo modelo apresentaram bons resultados em relação aos valores medidos, e o modelo se mostrou mais preciso em relação aos demais modelos, na predição de valores para torres com perfurações de pequenos diâmetros, devido ao fato deste modelo proposto ter sido desenvolvido para esse tipo de geometria. Dessa forma, os autores afirmaram que ambos os

estudos, teórico e experimental, demonstraram que pratos perfurados em escala comercial e com perfurações de diâmetros pequenos podem apresentar eficiências de ponto bem altas.

2.2.2 Estudos de Colunas de Destilação Utilizando Fluidodinâmica Computacional

Recentemente, o desenvolvimento de computadores mais potentes, métodos numéricos mais avançados e melhorias efetuadas em modelos de escoamentos multifásicos, permitiram a investigação de problemas de escoamentos complexos (MEHTA *et al.*, 1998). A técnica que combina estes fatores é a Fluidodinâmica Computacional que, comparada com os métodos experimentais, oferece informações mais completas, a um custo relativamente menor e com maior rapidez. Outra vantagem é a flexibilidade em efetuar mudanças na geometria e nas condições operacionais sem incorrer em um custo apreciável (GESIT *et al.*, 2003).

Mehta *et al.* (1998), propuseram um modelo tridimensional, em estado estacionário e monofásico. O sistema utilizado foi ar/água para um prato perfurado circular. Nesse trabalho as equações de conservação de massa (continuidade) e do momento (equações de Navier-Stokes) foram aplicadas apenas para a fase líquida. Os efeitos do escoamento da fase vapor foram incorporados usando-se termos adicionais calculados utilizando correlações empíricas. O coeficiente de transferência de momento na interface foi estimado a partir da correlação de Colwell (1979). O acoplamento pressão-velocidade foi obtido utilizando o algoritmo SIMPLEC. O objetivo desse estudo foi o de avaliar a distribuição de velocidades da fase líquida sobre o prato. Os resultados das simulações foram comparados com os dados experimentais de Solari e Bell (1986), e apresentaram concordância razoável, apresentando desvios pequenos em alguns casos, porém grandes desvios em outros casos. Os autores concluíram que há variações significativas no escoamento tanto através da área ativa do prato como também na direção vertical do mesmo. Os erros encontrados nas simulações indicam que o efeito do escoamento da fase gasosa no escoamento da fase líquida é mais importante do que os autores esperavam.

Krishna *et al.* (1999a) e van Baten e Krishna (2000), propuseram um modelo tridimensional, transiente e multifásico, dentro de uma abordagem Euleriana-Euleriana. O sistema utilizado foi ar para a fase gasosa e água para a fase líquida. Ambos os trabalhos foram elaborados nessa mesma modelagem, com a diferença que o primeiro foi elaborado

para uma coluna com seção transversal retangular e o segundo para uma coluna de seção transversal circular. O objetivo desses trabalhos foi o de avaliar o comportamento hidrodinâmico do escoamento sobre pratos perfurados. Dessa forma os autores trabalharam apenas com as equações da continuidade e da transferência de momento (equações de Navier-Stokes), sendo estas escritas para as duas fases. O coeficiente de transferência de momento na interface foi estimado a partir das correlações de Krishna *et al.* (1999c) e Bennet *et al.* (1983). Os autores utilizaram malhas estruturadas em ambos os trabalhos. O modelo de turbulência utilizado foi o κ - ϵ padrão (apenas para a fase líquida). O acoplamento pressão-velocidade foi obtido utilizando o algoritmo SIMPLEC. Os resultados obtidos a partir da simulação, por exemplo a altura de líquido claro e o escoamento sobre o prato perfurado, foram confrontados com dados experimentais e apresentaram boa concordância.

Liu *et al.* (2000), propuseram um modelo bidimensional, monofásico, no qual as equações da continuidade e da transferência de momento (equações de Navier-Stokes) foram escritas apenas para a fase líquida. O sistema utilizado foi ar/água. O objetivo deste estudo foi o de avaliar o padrão de escoamento da fase líquida em um prato perfurado circular, como as distribuições de velocidade e as regiões de recirculação de líquido, fatores que influenciam na eficiência do estágio. Neste estudo os autores consideraram a influência de dois fatores no padrão de escoamento da fase líquida, tais como a força de resistência exercida na fase líquida pela fase vapor ao escoar no prato e o efeito borbulhante criado pela fase vapor ao entrar no prato. O efeito borbulhante foi representado pelo modelo de turbulência k - ϵ padrão.

Para a verificação do modelo foram utilizados dados experimentais realizados pelos autores a partir de um aparato experimental com um anemômetro de filme quente para a obtenção da velocidade local, e também foram utilizados dados da literatura. Assim, os autores utilizaram um anemômetro de filme quente para obterem medidas de velocidade local da fase líquida, a partir do qual puderam observar que o gradiente de velocidade da fase líquida não era significativo até uma distância em torno de 10 mm a partir da bandeja, e se tornava fortemente agudo na direção de maior profundidade do líquido a partir deste valor, ou seja, próximo da bandeja. Dessa forma, os autores assumiram como sensato considerar o escoamento da fase líquida como bidimensional em distâncias maiores que 10 mm a partir da bandeja, e instalaram o sensor de velocidade local em posições variando entre 20 mm e 40 mm a partir da bandeja, para garantir que as medidas de velocidade estariam na região de escoamento em duas dimensões do líquido, sendo essa a região de interesse nesse trabalho. O algoritmo usado para o acoplamento pressão-velocidade foi o SIMPLE. Os resultados obtidos

foram confrontados com dados experimentais e da literatura e apresentaram boa concordância na predição do escoamento da fase líquida na região bifásica.

Gesit *et al.* (2003), propuseram dois modelos tridimensionais, multifásicos, sendo um para regime estacionário e outro para transiente, ambos dentro de uma abordagem Euleriana-Euleriana. O sistema utilizado foi ar para a fase gasosa e água para a fase líquida. O objetivo deste trabalho foi o de avaliar o comportamento hidrodinâmico do escoamento sobre pratos perfurados. Dessa forma os autores trabalharam apenas com as equações da continuidade e da transferência de momento (equações de Navier-Stokes), sendo estas escritas para as duas fases. O coeficiente de transferência de momento na interface foi estimado a partir das correlações de Krishna *et al.* (1999c), Bennet *et al.* (1983) e Colwell (1979). O modelo de turbulência utilizado foi o κ - ϵ padrão (apenas para a fase líquida). A geometria do prato usada foi a de prato perfurado circular, e as condições experimentais foram baseadas no trabalho experimental realizado por Solari e Bell (1986), a partir do qual utilizou-se os dados experimentais para a comparação com os resultados oriundos das simulações. Os resultados obtidos, como por exemplo, a altura de líquido claro, altura da espuma e distribuição de velocidades sobre o prato, foram confrontados com os dados experimentais e obtiveram boa concordância.

Wang *et al.* (2004) propuseram um modelo tridimensional, monofásico e em regime estacionário. As equações da continuidade, balanço de momento e de espécie química foram escritas apenas para a fase líquida, sendo que o efeito do escoamento da fase vapor foi inserido no estudo a partir de parâmetros contidos nas equações da fase líquida, motivo pelo qual os autores chamaram este escoamento de pseudo-monofásico. Este trabalho foi elaborado para um único prato perfurado circular, no qual o sistema utilizado foi ar/água, assim como para uma coluna de destilação de 10 pratos, no qual os sistemas utilizados foram ar/água e ciclohexano/heptano. Os resultados obtidos pela simulação do prato único foram comparados com os dados experimentais obtidos por Solari e Bell (1986) e com os resultados obtidos pelas simulações efetuadas por Gesit *et al.* (2003).

Os resultados obtidos pela simulação da coluna com 10 pratos foram confrontados com o trabalho experimental de Yanagi e Sakata (1979). O modelo de turbulência utilizado foi o κ - ϵ padrão e o acoplamento pressão-velocidade foi obtido pelo algoritmo SIMPLEC. O objetivo deste estudo foi avaliar os perfis de velocidades, de concentração, o padrão de escoamento sobre o prato e regiões de recirculação para todas as simulações e a eficiência

global para a torre operando com o par ciclohexano/heptano. A partir dos resultados da hidrodinâmica sobre os pratos da coluna, verificou-se que a recirculação no prato 5 é menor que no prato 10. Isso ocorre devido à diferença na condição de entrada do prato. A entrada de líquido no prato 10 é mais uniforme que as demais entradas, pois o prato 10 é o prato do topo da coluna, no qual os autores assumiram refluxo total e uniforme sobre o mesmo, enquanto as demais entradas são oriundas do escoamento líquido do prato superior, possuindo assim uma distribuição não uniforme. A distribuição de velocidades do prato único foi similar à do prato 10 (do topo da coluna). Os resultados obtidos neste experimento apresentaram boa concordância com os resultados experimentais.

Rahimi *et al.* (2006), propuseram um modelo tridimensional, multifásico, em regime estacionário, e dentro de uma abordagem Euleriana-Euleriana. Os sistemas utilizados foram os pares MeOH/nPrOH, EtOH/nPrOH e ciclohexano/heptano. Esse estudo foi desenvolvido para um prato perfurado retangular com as dimensões utilizadas nos estudos experimentais de Dribika e Biddulph (1986), e para um prato perfurado circular com as dimensões utilizadas nos estudos experimentais de Yanagi e Sakata (1982), a partir dos quais utilizaram os dados experimentais para a comparação com os resultados oriundos das simulações.

O objetivo deste trabalho de Rahimi *et al.* (2006) foi avaliar o comportamento hidrodinâmico do escoamento, assim como as distribuições de concentração e temperatura sobre pratos perfurados, e o cálculo da eficiência dos mesmos. Dessa forma, além das equações da continuidade e da transferência de momento (equações de Navier-Stokes), os autores também utilizaram as equações de conservação de energia e de espécies químicas, todas estas escritas para as duas fases. O coeficiente de transferência de momento na interface foi estimado a partir das correlações de Krishna *et al.* (1999c) e Bennet *et al.* (1983), e o coeficiente de transferência de calor foi estimado a partir de correlação empírica para o número de Nusselt, e o coeficiente de transferência de espécies químicas estimado a partir do modelo de Higbie. O modelo de turbulência utilizado foi o κ - ϵ padrão (apenas para a fase líquida).

Os resultados obtidos neste estudo, tais como as distribuições de concentração e temperatura no prato, a eficiência do prato, entre outros, apresentaram boa concordância em relação aos dados experimentais. Os autores ressaltaram sobre a maior precisão dada aos resultados ao se incluir relações para a transferência interfásica de energia e espécie química. Além disso, também ressaltaram sobre os resultados obtidos nas simulações em CFD serem

dependentes das relações de fechamento utilizadas, o que estimula novos trabalhos no sentido de desenvolver e refinar essas relações.

Sun *et al.* (2007), propuseram um modelo tridimensional, em estado estacionário e monofásico. As equações da continuidade, balanço de momento e de espécie química foram escritas apenas para a fase líquida, sendo que o efeito do escoamento da fase vapor foi inserido no estudo a partir de parâmetros contidos nas equações da fase líquida, motivo pelo qual os autores chamaram este escoamento de pseudo-monofásico. O coeficiente de transferência de momento na interface foi estimado a partir das correlações de Krishna *et al.* (1999c) e Bennet *et al.* (1983), e o coeficiente de transferência de espécies químicas foi estimado a partir da relação empírica de Zuyderweg (1982). O modelo de turbulência utilizado foi o κ - ϵ padrão.

O principal objetivo deste estudo foi a aplicação de um modelo simplificado do modelo CMT (*Computational Mass Transfer*) proposto por Liu (2003), o qual contém as equações auxiliares de fechamento do tipo $\overline{c^2} - \epsilon_c$. Os autores propuseram esta simplificação devido à complexidade do modelo original. O modelo CMT é um modelo de duas equações, uma para o termo $\overline{c^2}$ que representa a variação da concentração e outra para o termo ϵ_c , que representa a taxa de dissipação do termo $\overline{c^2}$, sendo estas equações utilizadas no fechamento da equação de transferência de massa. Este modelo tem sido aplicado com sucesso na predição da difusividade turbulenta de transferência de massa e na eficiência em colunas de destilação, e tem por objetivo obter um melhor tratamento da transferência de massa nas simulações.

Os autores utilizaram como sistema o par ar/água para um prato perfurado circular, comparando-se os resultados com os dados experimentais de Solari e Bell (1986), para a análise de distribuição de velocidades no prato. Também foi utilizado como sistema o par ciclohexano/n-heptano para uma coluna de destilação circular. Esses resultados foram comparados com os dados experimentais de Yanaga e Sakata (1979), para serem avaliados a distribuição da difusividade turbulenta de transferência de massa, a distribuição de concentração, as concentrações de saída nos pratos, e para os cálculos das eficiências de cada estágio e da eficiência global. Os resultados obtidos pelo modelo simplificado apresentaram boa concordância com os dados experimentais. Neste estudo também foram apresentados, em cada análise, resultados com o modelo CMT simplificado, resultados sem o tratamento CMT

para a transferência de massa e os dados experimentais. As simulações que utilizaram o modelo CMT simplificado apresentaram melhores resultados. Também foram efetuadas análises de concentração de saída e de distribuição de concentração, no qual além do modelo simplificado foi utilizado o modelo original, sendo extremamente pequena a diferença de ambos. Além disso, foram feitas análises de distribuição da difusividade turbulenta de transferência de massa, nas quais os autores verificaram que o modelo simplificado pode fornecer melhores resultados que o modelo original.

Noriler *et al.* (2010), propuseram um modelo tridimensional, multifásico, em regime transiente, e dentro de uma abordagem Euleriana-Euleriana. O sistema utilizado foi etanol/água. Com o intuito de avaliar a hidrodinâmica do escoamento, os autores efetuaram paralelamente um estudo experimental utilizando um sistema isotérmico ar/água. Neste experimento os autores utilizaram uma coluna com três pratos, sendo o prato intermediário o utilizado para o estudo. Ambos os estudos, experimental e teórico, utilizaram pratos perfurados circulares.

O objetivo do trabalho em CFD foi avaliar o comportamento hidrodinâmico do escoamento, assim como as distribuições de concentração e temperatura sobre pratos perfurados, e o cálculo da eficiência dos mesmos. Dessa forma, além das equações da continuidade e da transferência de momento (equações de Navier-Stokes), os autores também utilizaram as equações de conservação de energia e de espécies químicas, todas estas escritas para as duas fases. O coeficiente de transferência de momento na interface foi estimado a partir das correlações de Krishna *et al.* (1999c) e Bennet *et al.* (1983). O coeficiente de transferência de calor foi estimado a partir da correlação de Ranz-Marshall (1952) para o número de Nusselt, e o coeficiente de transferência de espécies químicas foi estimado a partir da relação empírica de Zuideweg (1982). O modelo de turbulência utilizado foi o κ - ϵ padrão (apenas para a fase líquida). O acoplamento pressão-velocidade foi obtido utilizando o algoritmo SIMPLEC. Os autores utilizaram malha estruturada para as simulações. Nesse estudo os autores utilizaram sub-rotinas em linguagem FORTRAN para as equações de fechamento do modelo.

Os resultados relacionados com a hidrodinâmica do escoamento, tal como altura de líquido claro e fração volumétrica, foram validados a partir do estudo experimental realizado por eles. Os autores também apresentaram, entre outros resultados, as distribuições de

temperatura e de composição, possibilitando o cálculo da eficiência do prato, estando o valor obtido em boa concordância quando comparado com trabalhos paralelos.

Rahimi *et al.* (2012), propuseram um modelo tridimensional, multifásico, em regime estacionário, e dentro de uma abordagem Euleriana-Euleriana. O sistema utilizado foi o par MeOH/nPrOH. Esse estudo foi desenvolvido para dois pratos perfurados retangulares, um deles com as dimensões utilizadas nos estudos experimentais de Dribika e Biddulph (1986), chamada geometria 2, e outro chamado geometria 1 com as mesmas dimensões que o anterior exceto pelo fato de possuir perfurações com um diâmetro maior, porém em menor número, para que a área de borbulhamento permaneça a mesma. O coeficiente de transferência de momento na interface foi estimado a partir das correlações de Krishna *et al.* (1999c) e Bennet *et al.* (1983). Para o cálculo do coeficiente de transferência de massa os autores utilizaram dois modelos, o modelo SRS (*Surface Renewal Stretch*) e a teoria de Higbie, para critério de análise sobre o mais adequado. Devido ao fato do par utilizado ser metanol e n-propanol, e a solução destes ser ideal possuindo um calor de mistura negligenciável, os autores desprezaram o uso das equações de balanço para a energia.

Dessa forma, as equações utilizadas neste estudo foram as equações da continuidade, da transferência de momento (equações de Navier-Stokes), e da conservação de espécies químicas, todas estas escritas para as duas fases. O modelo de turbulência utilizado foi o κ - ϵ padrão. Dessa forma, os objetivos desse trabalho foram os de avaliar o comportamento hidrodinâmico do escoamento, a distribuição de composição, avaliar a influência de diferentes diâmetros porém mesma área perfurada, avaliar qual dos modelos citados anteriormente trata melhor a transferência de massa, e a obtenção da eficiência dos pratos.

Os resultados hidrodinâmicos obtidos pela simulação da geometria 2 foram comparados com os resultados experimentais e foram validados. Quando comparou-se as duas geometrias, a geometria de perfurações com diâmetros maior apresentou produção de bolhas maiores e um padrão de escoamento de líquido mais irregular, enquanto a geometria 2 apresentou uma distribuição de velocidades mais uniforme. Da mesma forma, a geometria 2 apresentou maiores transferências de massa que a geometria 1, e a eficiência no ponto para a geometria 2 foi maior do que a da geometria 1, ou seja, concluiu-se que um aumento no diâmetro das perfurações implica numa diminuição da eficiência do prato. A geometria 2 também foi validada em termos de eficiência. Quanto ao efeito do uso dos dois diferentes modelos de transferência de massa, a geometria 2 foi utilizada, e a aplicação do modelo SRS implicou em melhores resultados das simulações do que a teoria de Higbie. Porém devido à

independência do modelo SRS em relação ao diâmetro da bolha, os autores sugerem o uso deste modelo em CFD apenas para bolhas com diâmetros menores que 10 mm.

Oliveira (2014), propôs um modelo tridimensional, multifásico, em regime transiente, e dentro de uma abordagem Euleriana-Euleriana. O sistema utilizado foi etanol/água. O objetivo do trabalho em CFD foi avaliar o comportamento hidrodinâmico do escoamento, assim como a distribuição de concentração sobre pratos perfurados e o cálculo da eficiência do mesmo. Dessa forma, além das equações da continuidade e da transferência de momento (equações de Navier-Stokes), o autor também utilizou as equações de conservação de espécies químicas, todas estas escritas para as duas fases. O coeficiente de transferência de momento na interface foi estimado a partir das correlações de Krishna *et al.* (1999c) e Bennet *et al.* (1983). O coeficiente de transferência de espécies químicas foi estimado a partir do modelo de Higbie (1935). O modelo de turbulência utilizado foi o SST. O autor utilizou malha não estruturada e não coincidente nas simulações.

Os resultados relacionados com a hidrodinâmica do escoamento, tal como altura de líquido claro e fração volumétrica, foram validados a partir do estudo experimental realizado por Solari e Bell (1986). Os resultados de eficiência foram comparados com outro estudo de CFD e com correlação empírica. Além desses resultados, o autor apresenta também a distribuição de concentração ao longo do prato.

Na Tabela (2.2) segue um resumo dos estudos utilizando as técnicas de CFD, o símbolo "S" indica "Sim" e o traço "-" indica a ausência de informação ou a não utilização da informação exposta. Vale ressaltar que, ao longo do texto, serão citados outros trabalhos também utilizados como base para este estudo e que não foram apresentados na revisão da literatura.

Dessa forma, a partir dos trabalhos apresentados neste capítulo, este estudo teve por objetivo principal analisar e comparar três modelos de transferência de massa, possibilitando visualizar a influência sobre os resultados de acordo com os embasamentos, teórico e empírico, assumidos no desenvolvimento desses modelos. Assim, a partir dessa análise, pode-se utilizar o modelo mais promissor e utilizá-lo na continuidade dos estudos de destilação a partir de pratos perfurados. Além do objetivo citado, este estudo também objetivou a análise da hidrodinâmica do escoamento sobre o prato perfurado, de forma a obter um melhor entendimento sobre o mesmo e indicar regiões “críticas” que comprometem a eficiência de transferência de massa.

Tabela 2.2 – Resumo tabelado dos estudos em CFD apresentados anteriormente.

Autores	Abordagem	Dimensão	Regime	Fases	Prato	Sistema	Equação da Continuidade	Equação do Momento	Equação da Energia	Equação da Massa	Coefficiente de transferência de momento na interface	Coefficiente de transferência de calor	Coefficiente de transferência de espécie química	Acoplamento P-V	Comparação com dados experimentais	Turbulência
MEHTA (1998)	-	3D	Estacionário	1	Circ	Ar/Água	S	S	-	-	Colwell (1979)	-	-	SIMPLEC	Solari e Bell (1986)	-
KRISHNA (1999a)	Euler-Euler	3D	Transiente	2	Ret	Ar/Água	S	S	-	-	Krishna (1999) e Bennet (1983)	-	-	SIMPLEC	-	κ - ϵ (Padrão)
KRISHNA (2000)	Euler-Euler	3D	Transiente	2	Circ	Ar/Água	S	S	-	-	Krishna (1999) e Bennet (1983)	-	-	SIMPLEC	-	κ - ϵ (Padrão)
LIU (2000)	-	2D	Estacionário	1	-	Ar/Água	S	S	-	-	-	-	-	SIMPLE	-	κ - ϵ (Padrão)
GESIT (2003)	Euler-Euler	3D	Estacionário	2	Circ	Ar/Água	S	S	-	-	Krishna (1999) e Bennet (1983); Colwell (1979)	-	-	-	Solari e Bell (1986)	κ - ϵ (Padrão)
GESIT (2003)	Euler-Euler	3D	Transiente	2	Circ	Ar/Água	S	S	-	-	Krishna (1999) e Bennet (1983); Colwell (1979)	-	-	-	Solari e Bell (1986)	κ - ϵ (Padrão)
WANG (2004)	-	3D	Estacionário	1	Circ	Ar/Água	S	S	-	-	-	-	-	SIMPLEC	Solari e Bell (1986); GESIT (2003)	κ - ϵ (Padrão)
WANG (2004)	-	3D	Estacionário	1	Circ	Ciclohexano/Heptano	S	S	-	S	-	-	-	SIMPLEC	Yanagi e Sakata (1982)	κ - ϵ (Padrão)
RAHIMI (2006)	Euler-Euler	3D	Estacionário	2	Circ	Ciclohexano/Heptano	S	S	S	S	Krishna (1999) e Bennet (1983)	Correlação empírica para o número de Nusselt	Modelo de Higbie	-	Yanagi e Sakata (1982)	κ - ϵ (Padrão)
RAHIMI (2006)	Euler-Euler	3D	Estacionário	2	Ret	MeOH/PrOH e EtOH/PrOH	S	S	S	S	Krishna (1999) e Bennet (1983)	Correlação empírica para o número de Nusselt	Modelo de Higbie	-	Dribika e Biddulph (1986)	κ - ϵ (Padrão)
SUN (2007)	-	3D	Estacionário	1	Circ	Ciclohexano/Heptano	S	S	-	S	Krishna (1999) e Bennet (1983)	-	Correlação empírica de Zuiderweg (1982) e Modelo CMT (Liu)	-	Yanagi e Sakata (1982)	κ - ϵ (Padrão)
SUN (2007)	-	3D	Estacionário	1	Circ	Ar/Água	S	S	-	-	Krishna (1999) e Bennet (1983)	-	-	-	Solari e Bell (1986)	κ - ϵ (Padrão)
NORILER (2010)	Euler-Euler	3D	Transiente	2	Circ	Etanol/Água	S	S	S	S	Krishna (1999) e Bennet (1983)	Correlação de Ranz-Marshall (1952) para o número de Nusselt	Correlação empírica de Zuiderweg (1982)	SIMPLEC	-	κ - ϵ (Padrão)
RAHIMI (2012)	Euler-Euler	3D	Estacionário	2	Ret	MeOH/nPrOH	S	S	-	S	Krishna (1999) e Bennet (1983)	-	Modelo de Higbie e Modelo SRS	-	Dribika e Biddulph (1986)	κ - ϵ (Padrão)

Fonte: Produzido pelo autor.

3 METODOLOGIA

Para a realização dos experimentos numéricos, dispôs-se de um *cluster* computacional localizado no Laboratório de Fluidodinâmica Computacional (LFC), pertencente ao Departamento de Engenharia Química (DEQ) da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar). O cluster utilizado possui sistema operacional Linux, processadores AMD Opteron™ 6234 com frequência 2400 MHz e foram utilizados em torno de 30 núcleos durante as simulações. O código comercial CFX 14.5 da ANSYS® foi utilizado para as simulações numéricas, as quais foram realizadas com o objetivo principal de obter dados para comparação com dados apresentados na literatura e, dessa forma, validar o modelo desenvolvido.

Como apresentado na introdução deste trabalho, um estudo de fluidodinâmica computacional pode ser separado, de forma clássica, em três etapas, sendo elas: o pré-processamento, o processamento e o pós-processamento, as quais são detalhadas a seguir. Ressaltando que neste estudo todos os índices α ou L representam a fase líquida e os índices β ou V representam a fase vapor. Foram utilizados estes índices para um melhor entendimento das equações.

3.1 Etapa de Pré-Processamento

O pré-processamento é a etapa na qual se inicia um estudo de CFD. Essa etapa consiste em definir o volume de controle do sistema em estudo e os fenômenos de transporte envolvidos no mesmo, sendo composta pela construção do domínio computacional, pela construção da malha numérica, definição das condições de contorno e dos fenômenos envolvidos, e escolha dos procedimentos numéricos a serem utilizados ao longo das simulações.

3.1.1 Características Geométricas do Prato Perfurado e Domínio Computacional

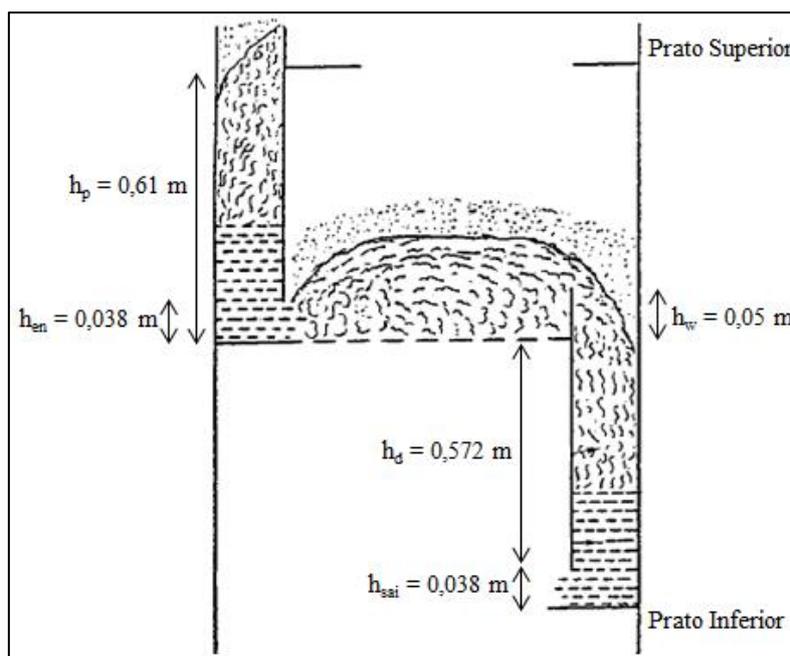
O prato perfurado utilizado neste estudo foi baseado nas características geométricas do prato utilizado no estudo experimental de Solari e Bell (1986). A Tabela (3.1) apresenta as dimensões desse aparato e as Figuras (3.1) e (3.2) apresentam essas dimensões em detalhes.

Tabela 3.1 - Características geométricas do prato perfurado em estudo.

Dimensão	Valor
Diâmetro do prato, D_P [m]	1,213
Espaçamento do prato, h_P [m]	0,610
Comprimento da represa, L_w [m]	0,925
Altura da represa, h_w [m]	0,050
Comprimento do <i>downcomer</i> , L_d [m]	0,572
Diâmetro dos orifícios, d_H [m]	0,0127
Espaçamento dos orifícios na disposição triangular, p [m]	0,050
Altura de entrada e saída de líquido, h_{en} e h_{sai} [m]	0,038
Área de borbulhamento, A_B [m ²]	0,878
Área perfurada, A_P [m ²]	0,044
Número de orifícios circulares, N_H	347

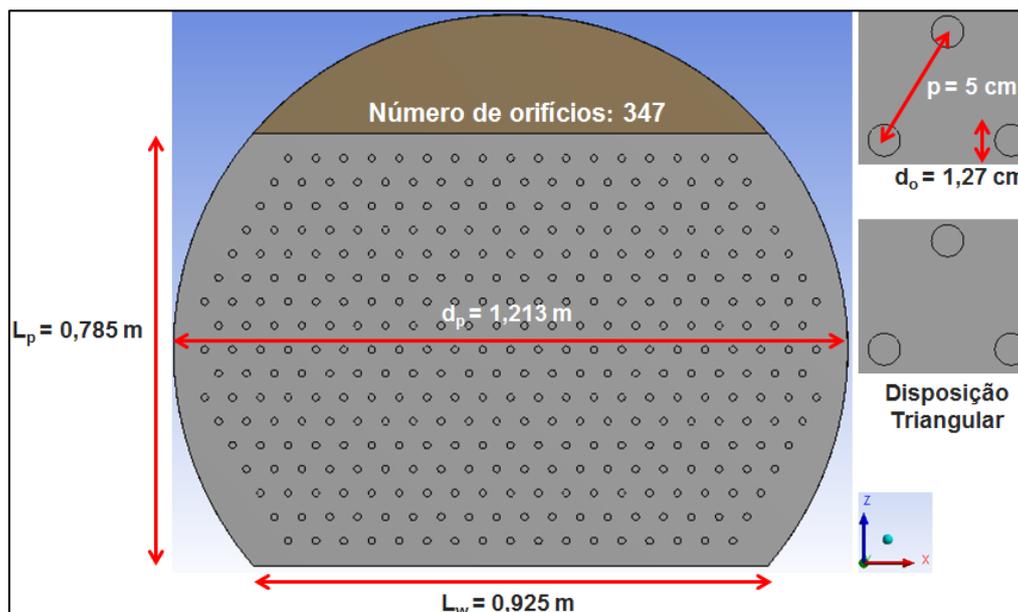
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 3.1 - Dimensões geométricas do prato perfurado em estudo.



Fonte: Adaptado de Green e Perry (2008).

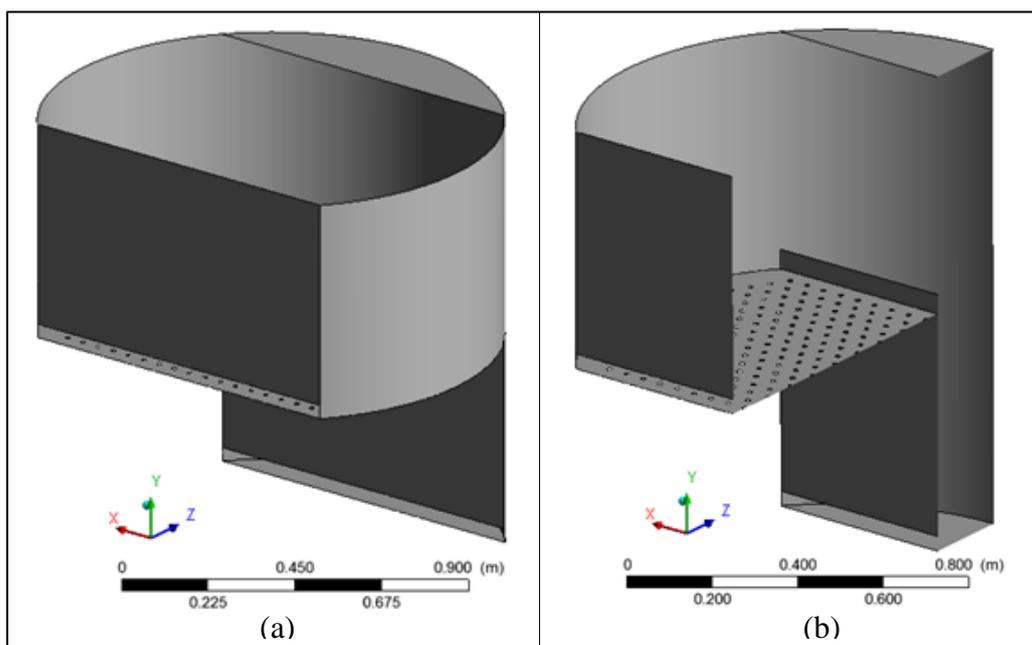
Figura 3.2 - Detalhes e dimensões geométricas do prato perfurado em estudo.



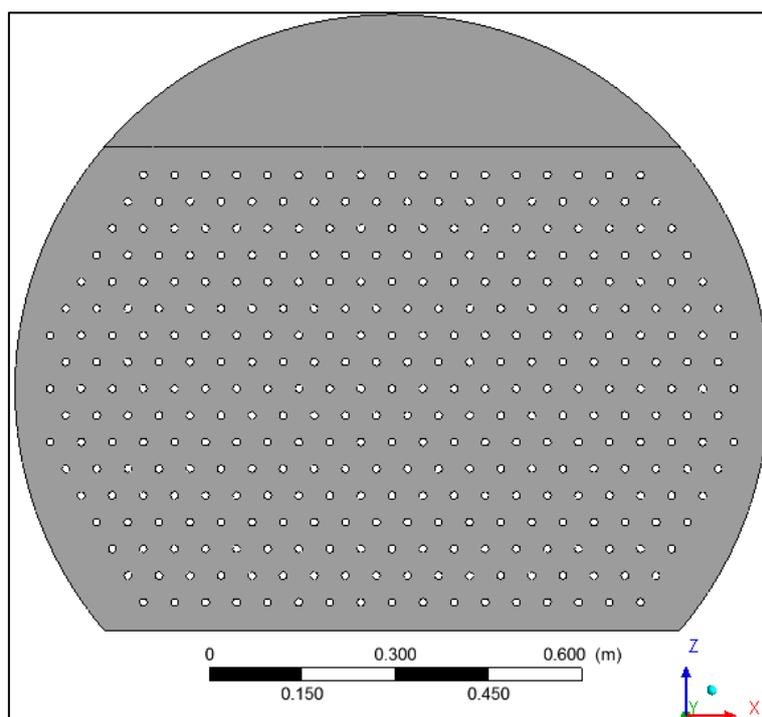
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Dessa forma, após a definição do sistema a ser estudado, construiu-se o domínio computacional (Figuras (3.3) e (3.4)) de acordo com a geometria física apresentada anteriormente. Para este fim, utilizou-se o *software* Design Modeler do pacote ANSYS® 14.5. Para critério de conhecimento, neste estudo utilizou-se um sistema de coordenadas cartesianas com origem no centro do prato.

Figura 3.3 - Domínio computacional (a) e vista simétrica (b) do domínio computacional utilizado nas simulações.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 3.4 – Vista inferior do domínio computacional utilizado nas simulações.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

3.1.2 Malha Numérica

Após a definição e construção do domínio computacional, a próxima etapa consiste na construção da malha numérica. Neste estudo, as malhas numéricas utilizadas foram construídas através do software *CFX-Meshing*® (versão 14.5) do pacote da ANSYS®.

A construção da malha numérica é uma etapa extremamente importante durante um experimento utilizando as técnicas de CFD. A importância desta etapa está no fato de que a qualidade da malha gerada está relacionada à qualidade dos resultados que serão obtidos. Dessa forma, esta etapa exige uma estratégia de análise e organização do domínio computacional de forma a serem obtidos elementos de malha com características que obedecem aos critérios de qualidade. Alguns dos critérios utilizados para o conhecimento da qualidade da malha gerada são: *aspect ratio*, *skewness* e *element quality*.

O critério *aspect ratio* é baseado em uma relação das arestas, sendo o valor ideal deste critério igual a 1. O critério *skewness* determina o quão perto do ideal (equilátero ou equiângulo) uma face ou uma célula está. O termo *skewness* pode ser traduzido do inglês como “assimetria” e, dessa forma, quanto mais próximo de zero for este valor, melhor a

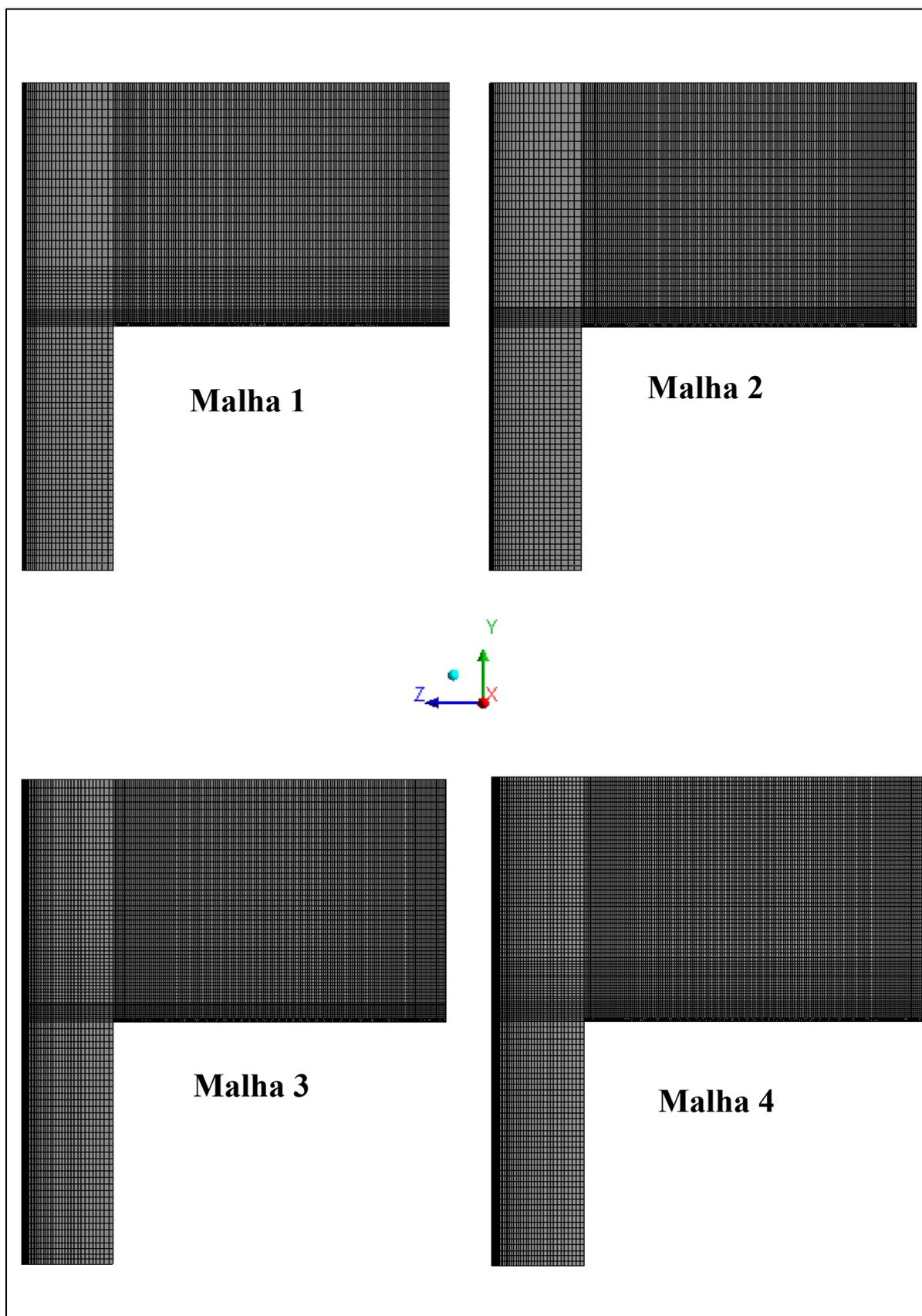
qualidade da face ou da célula. Um valor desta propriedade igual a zero, indica uma face ou uma célula perfeita (equilátero ou equiângulo), valores na faixa de 0 a 0,25 indicam uma qualidade excelente, valores na faixa de 0,25 a 0,50 indicam valores bons, e assim por diante. O critério *element quality* é baseado na razão do volume para o comprimento da aresta de um dado elemento. Um valor deste critério de 1 indica um cubo perfeito e um valor de zero indica que o elemento possui volume igual a zero ou um volume negativo. Dessa forma, quanto mais próximo de 1 estiver este parâmetro, maior será a qualidade do elemento. Existem diversos outros critérios de qualidade que foram avaliados na construção da malha, no entanto discutiu-se apenas os expostos citados por serem os mais conhecidos. As informações anteriores e outras informações relacionadas às malhas numéricas podem ser encontradas em Ansys CFX 12.1 - *Meshing Help* (2009).

Além dos fatores utilizados na análise de malhas numéricas, ainda é necessário conhecer qual será a influência da malha sobre o resultado da simulação. Dessa forma, como será apresentado no capítulo de Resultados e Discussão, realizou-se neste estudo um teste de sensibilidade das malhas em relação aos resultados, com o intuito de garantir independência dos resultados em relação ao grau de refinamento da malha.

Dessa forma, para a geração da malha, dividiu-se a geometria em diferentes blocos. A estratégia utilizada nessa divisão consiste na necessidade de se obter uma malha com maior grau de refinamento em regiões de maior interesse. Dessa forma, devido ao fato do prato perfurado ser circular e possuir orifícios circulares, optou-se por criar um bloco de elementos tetraédricos na região da base do prato (bloco de 1 cm), a qual contém os 347 orifícios. A partir daí, optou-se por utilizar blocos de malha com elementos hexaédricos. Os blocos mais próximos à base do prato receberam um maior grau de refinamento, por estarem nas regiões de maior interesse de análise. Além disso, pode-se notar que na maioria dos blocos utilizou-se um fator de crescimento dos elementos presentes, com o intuito de se obter elementos menores nas regiões inferiores dos blocos e também com a intenção de que a mudança de tamanho de elemento de um bloco para o outro não fosse acentuada, de modo a evitar erros numéricos. As Figuras (3.5) e (3.6) apresentam as malhas numéricas construídas e utilizadas neste estudo, e a Tabela (3.2) apresenta as características das mesmas.

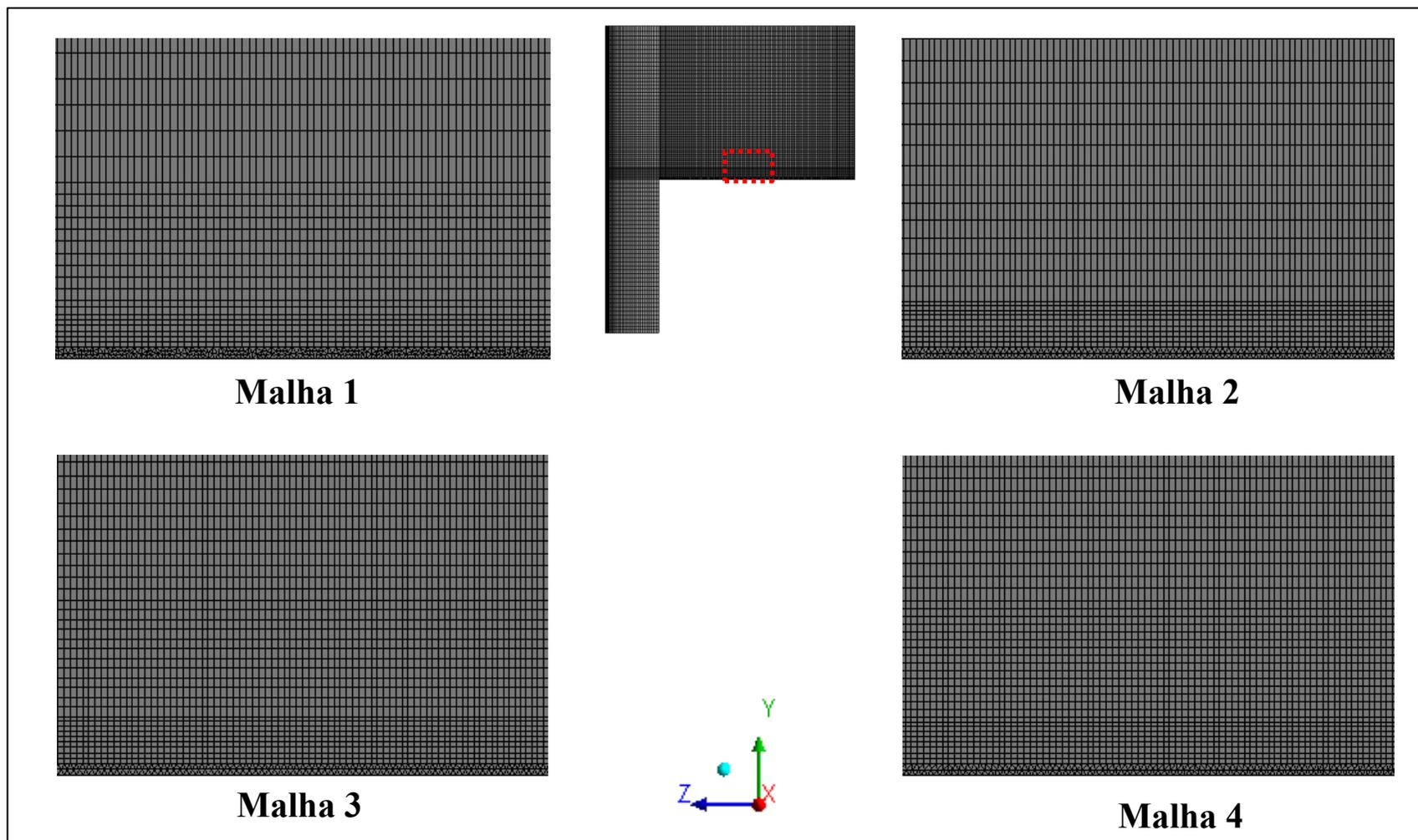
Assim, pode-se notar que se trata de uma malha mista, ou seja, composta por blocos estruturados de elementos hexaédricos e um bloco não-estruturado de elementos tetraédricos. Além disso, é importante observar que se trata de uma malha com nós coincidentes, na qual

os nós que fazem contato com a interface entre os blocos são os mesmo, ou seja, não há encontro de nós com faces de elementos, e apenas encontro de nós com nós. A base do prato, como citado anteriormente, recebeu um bloco de malha tetraédrica devido ao fato dos elementos tetraédricos terem uma alta flexibilidade em representar geometrias complexas. Os elementos tetraédricos da base foram construídos com tamanhos adequados de modo a obedecer o critério da variável y^+ , que é a distância adimensional a partir da parede do prato. Neste estudo, o critério obedecido é em relação à função de parede e ao modelo de turbulência utilizado, e o cálculo utilizado para a obtenção da variável y^+ juntamente com o critério utilizado são apresentados no capítulo de Modelagem Matemática. No capítulo de Procedimento Numérico será apresentado um item no qual são discutidos os diferentes tipos de malhas e suas características.

Figura 3.5 - Malhas utilizadas durante o teste de independência de malha.

Fonte: Elaborado pelo Autor

Figura 3.6 - Detalhes das malhas utilizadas durante o teste de independência de malha.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Tabela 3.2 - Propriedade das malhas utilizadas no teste de independência de malha.

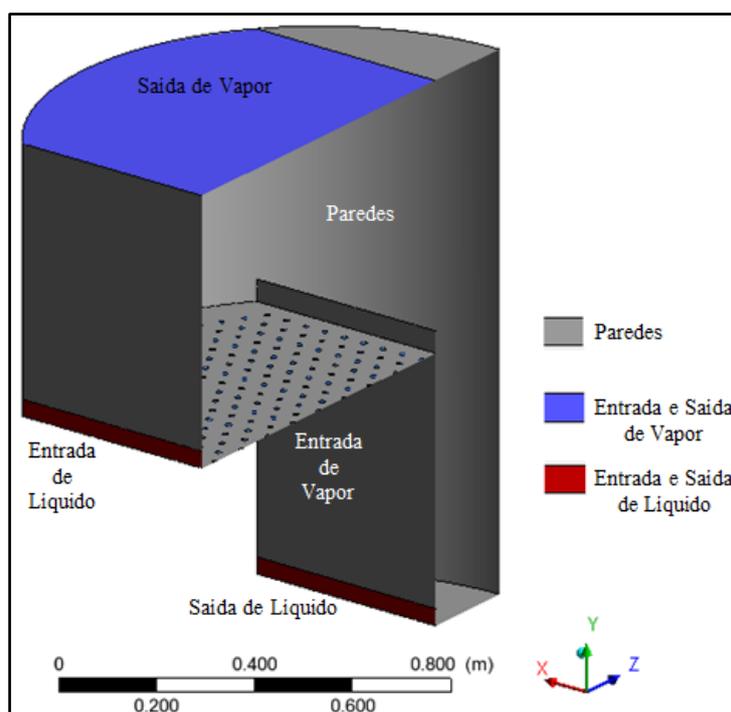
Detalhes	Malhas Numéricas			
	Malha 1	Malha 2	Malha 3	Malha 4
Número de Elementos	1.378.188	1.399.848	1.856.032	2.238.076
Número de Nós	951.620	1.102.116	1.564.249	1.940.384
"Aspect Ratio" Máximo	14,986	13,386	12,555	11,875
"Aspect Ratio" Médio	2,503	2,854	2,205	1,873
"Skewness" Médio	0,209	0,169	0,151	0,147
"Element Quality" Médio	0,666	0,598	0,724	0,805

Fonte: Elaborado pelo Autor.

3.1.3 Condições Iniciais e de Contorno

Neste item serão apresentadas as condições iniciais e de contorno utilizadas no desenvolvimento deste estudo. A Figura (3.7) ilustra as regiões nas quais essas condições foram aplicadas. Estas condições são utilizadas nas simulações para que seja possível a solução dos modelos matemáticos propostos e dependem do tipo de análise que se deseja estudar. A condição de inicialização do domínio é apresentada a seguir. Para as condições de contorno, associou-se cada face externa da geometria a uma condição de contorno (*boundary condition*), ou seja, definiu-se cada região bidimensional como entrada, saída e parede.

Figura 3.7 - Regiões utilizadas na aplicação das condições de contorno.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Condição Inicial do domínio: Na condição inicial utilizada nas simulações do prato perfurado, considerou-se o domínio computacional vazio em relação ao líquido, ou seja, considerou-se a fração volumétrica de gás igual a 1 e a fração volumétrica de líquido igual a 0. Dessa forma, pode-se observar o fenômeno de enchimento do prato.

Entrada de líquido: Na região de entrada de líquido, adotou-se um perfil de velocidade uniforme, cujo cálculo da velocidade de entrada do líquido é conforme a Equação (3.1).

$$V_{z,\alpha}^{in} = \frac{Q_\alpha}{A_\alpha^{in}} \quad (3.1)$$

Na Equação (3.1), o termo Q_α representa a vazão volumétrica de líquido e o termo A_L^{in} representa a área da região de entrada da fase líquida no prato, conforme Equação (3.2).

$$A_\alpha^{in} = h_1 L_1 \quad (3.2)$$

Na Equação (3.2), os termos h_1 e L_1 representam a altura e o comprimento de entrada do líquido, respectivamente. Outro fator a ser observado, é a consideração de apenas líquido entrando no sistema por essa região, pois a quantidade arrastada de vapor foi considerada desprezível, sendo, assim, a fração volumétrica de líquido tendo valor unitário ($f_\alpha^{in} = 1$).

Entrada de Vapor: Na região de entrada de vapor considerou-se que a vazão mássica é a mesma em cada um dos orifícios. Com base nessa consideração, calculou-se a velocidade de entrada do vapor em cada orifício conforme a Equação (3.3).

$$V_{y,\beta}^{in} = \frac{V_S A_B}{N_H A_H^{in}} \quad (3.3)$$

Na Equação (3.3), o termo V_S é a velocidade superficial do vapor baseada na área de borbulhamento, o termo A_B representa a área de borbulhamento, o termo N_H é o número total de orifícios e o termo A_H^{in} é a área de um orifício. Outro fator a observar, é a consideração de apenas vapor entrar no sistema pelos orifícios, pois a quantidade de líquido arrastado foi desprezada por ser muito baixa, sendo, assim, a fração volumétrica de vapor tendo valor unitário ($f_\beta^{in} = 1$).

Saída de Líquido: Na região de saída de líquido adotou-se uma condição de pressão. Essa condição de pressão foi utilizada com o intuito de simular uma resistência na saída de líquido, que na realidade existe devido ao prato inferior. Essa resistência implica no surgimento de uma coluna de acúmulo de líquido na saída do *downcomer*, sendo que neste estudo considerou-se uma altura de coluna de líquido acumulado de 50% do comprimento do *downcomer*. Na Figura (3.8) estão representados os valores de referência utilizados no procedimento de cálculo apresentado a seguir.

Para a obtenção da pressão de saída (P_2), utilizou-se a equação de Bernoulli, conforme apresentada na Equação (3.4).

$$\frac{P_1}{\gamma} + \frac{v_1^2}{2g} + z_1 = \frac{P_2}{\gamma} + \frac{v_2^2}{2g} + z_2 \quad (3.4)$$

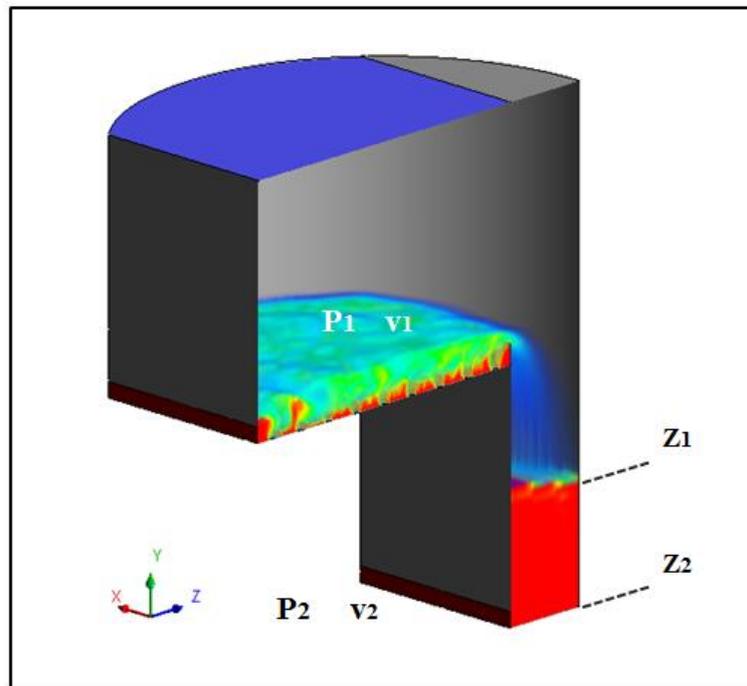
Na Equação (3.4), o termo γ representa o peso específico do fluido, o qual constitui-se pelo produto entre a massa específica do fluido e a gravidade, sendo representado pela Equação (3.5).

$$\gamma = \rho_a g \quad (3.5)$$

Na Equação (3.4), considerou-se a superfície no ponto 1 como estagnada ($v_1=0$) e $P_1 = P_{ref}$. Dessa forma, o cálculo da pressão de saída (P_2) é efetuado conforme a Equação (3.6).

$$P_2 = P_{ref} + \gamma \left[(z_1 - z_2) - \frac{v_2^2}{2g} \right] \quad (3.6)$$

Figura 3.8 – Localização dos pontos de referência para o cálculo da pressão de saída do líquido.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Lembrando que a obtenção de P_2 , como dado anteriormente, fornecerá o valor de uma pressão absoluta. Para a obtenção de uma pressão relativa, utiliza-se a equação (3.7).

$$P_2 - P_{ref} = \gamma \left[(z_1 - z_2) - \frac{v_2^2}{2g} \right] \quad (3.7)$$

Saída de Vapor: Na região de saída de vapor, também utilizou-se uma condição de pressão, especificando-se uma pressão relativa igual a zero, ou seja, uma pressão absoluta de 1 atm, devido à condição proposta por esse estudo.

Parede: Nas regiões de parede, utilizou-se a condição de não deslizamento na parede ($v = 0 \text{ m s}^{-1}$) para os dois fluidos em questão.

Simetria: Não utilizou-se a condição de simetria (plano de simetria) para o estudo em questão. Dessa forma, modelou-se o prato em sua totalidade, e não apenas metade do prato.

Além das condições apresentadas anteriormente, as Tabelas (3.3) e (3.4) apresentam outras condições também utilizadas. A Tabela (3.3) apresenta algumas características utilizadas ao longo das simulações para a avaliação da hidrodinâmica do prato perfurado, e a

Tabela (3.4) apresenta algumas características utilizadas ao longo das simulações para a avaliação da transferência de espécies químicas ao longo do prato. Ambas as simulações foram conduzidas de forma isotérmica, com ambos os fluidos a 25°C na análise da hidrodinâmica e na análise da transferência de espécies químicas os fluidos possuindo as temperaturas apresentadas na Tabela (3.4). Assim, todos os fluidos foram considerados isotérmicos.

Tabela 3.3 – Condições operacionais e propriedades das fases na avaliação da hidrodinâmica do prato.

Fase	Fluidos	Temperatura de Entrada [°C]	Densidade [kg m ⁻³]	Viscosidade [Pa s]	Condição Operacional	
Líquida	Água	25	997,05	0,890x10 ⁻³	Q _L [m ³ s ⁻¹]	6,94x10 ⁻³
Gasosa	Ar	25	1,184	1,830x10 ⁻⁵	F _s [m s ⁻¹ (kg m ⁻³) ^{0,5}]	1,015

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Tabela 3.4 – Condições operacionais e propriedades das fases na avaliação da transferência de espécies químicas ao longo do prato.

Fase	Mistura	Temperatura de Entrada [°C]	Fração Mássica de Etanol na Entrada	Densidade [kg m ⁻³]	Viscosidade [Pa s]	Difusividade [m ² s ⁻¹]
Líquida	Água/Etanol	81,65	0,785	820	0,403x10 ⁻³	6,201x10 ⁻⁹
Gasosa	Água/Etanol	83,75	0,812	1,292	-	1,689x10 ⁻⁵

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Na Tabela (3.4), os valores de temperatura, fração mássica e densidade da fase gasosa foram utilizadas com referência no trabalho realizado por Noriler (2007). Os demais valores foram calculados pelo autor deste trabalho, sendo o procedimento de cálculo da difusividade de ambas as fases apresentados no capítulo de Modelagem Matemática. Relembrando também que as condições de fluxo de gás e líquido para ambas as análises foram utilizadas as mesmas de Solari e Bell (1986) e os detalhes do procedimento numérico estão expostos no capítulo de Procedimento Numérico.

3.2 Metodologia para o Processamento

O processamento das simulações foi realizado a partir do *solver* contido no Ansys CFX 14.5, utilizando entre 30 e 35 núcleos de processamento. Todas as simulações foram realizadas em estado transiente desde o início, com um tempo de simulação total de 60s para a análise da hidrodinâmica e de 40s para a análise da transferência de massa.

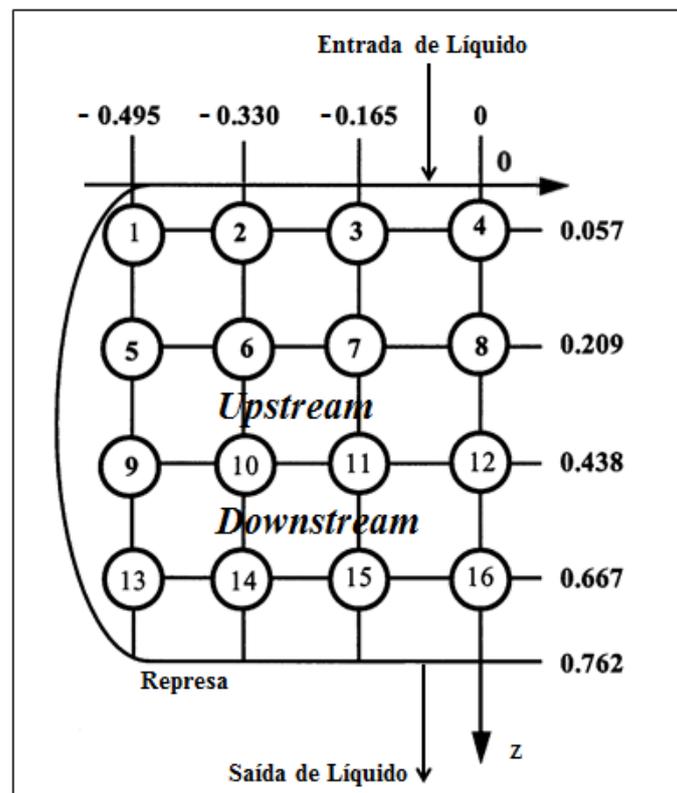
3.3 Metodologia para o Pós-Processamento

3.3.1 Metodologia de Análise

Conforme citado na revisão bibliográfica deste trabalho, Solari e Bell (1986) utilizaram diversas sondas ao longo do prato com o objetivo de obter os perfis de velocidades para cada caso estudado no trabalho citado. No total foram instaladas 25 sondas que, a partir de técnicas fluorimétricas, possibilitaram a obtenção das velocidades sobre o prato. As sondas foram dispostas conforme apresentado na Figura (3.9), estando todas situadas a uma altura de 0,038 m acima da base do prato.

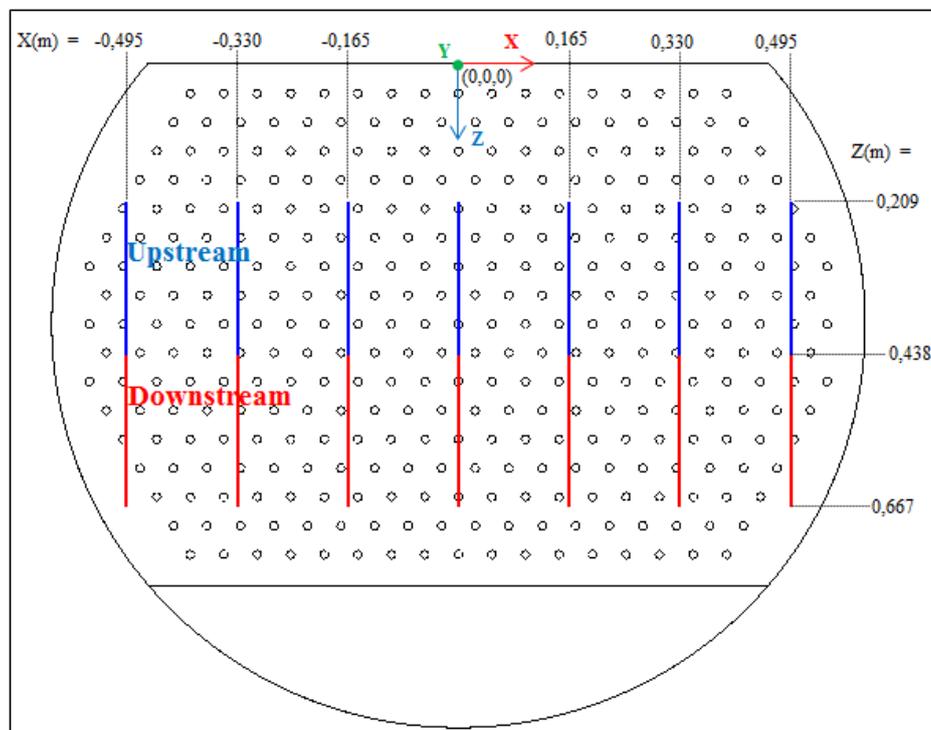
Dessa forma, para critério de comparação, o prato foi separado em duas regiões, a região *upstream* e a região *downstream*, conforme apresentado nas Figuras (3.9) e (3.10). Conforme pode ser observado na Figura (3.9), a região *upstream* está situada entre os sensores 5 a 8 e 9 a 12, e a região *downstream* é a região situada entre os sensores 9 a 12 e 13 a 16. Assim, após definidas essas duas regiões, construiu-se 14 linhas de medição para a análise das velocidades, sendo essas linhas localizadas exatamente nas mesmas coordenadas (x,y,z) que as coordenadas das sondas utilizadas por Solari e Bell (1986) (Figura (3.10)). Mais informações sobre essa análise serão apresentadas no capítulo de Resultados e Discussão.

Figura 3.9 - Regiões e disposição das sondas utilizadas no experimento de Solari e Bell (1986).



Fonte: Adaptado de Gesit *et al.*, (2003).

Figura 3.10 – Regiões e linhas utilizadas na análise da velocidade do líquido.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Além da análise do perfil de velocidades, outro fator importante que foi analisado foi a altura de líquido claro. Por definição, a altura de líquido claro corresponde ao nível de líquido que estaria presente no estágio caso não houvesse a fase gasosa presente. Ou seja, é definida como a altura de líquido acumulado a partir da superfície do prato, equivalente a uma condição de ausência da fase gasosa (NORILER, 2007). Dessa forma, um dos procedimentos de cálculo utilizado neste estudo foi através da média volumétrica da fração volumétrica de líquido em cada bloco de divisão da malha (geometria), conforme apresentado na Equação (3.8). Lembrando que as regiões que compreendem o *downcomer* não foram consideradas no cálculo, devido à própria definição desse parâmetro.

$$h_{cl} = \sum_{i=1}^n f_{Li}^{vol} \cdot h_i \quad (3.8)$$

Na Equação (3.8), o termo f_{Li}^{vol} representa a média volumétrica da fração volumétrica de líquido no bloco i , h_i é a altura do bloco i e n representa o número total de blocos utilizados no cálculo.

Para a verificação e validação do parâmetro hidráulico altura de líquido claro, foram utilizadas diversas correlações apresentadas na literatura. Essas correlações estão apresentadas nas Equações (3.9) à (3.19). Nessas equações, os termos representam: L_w é o comprimento da represa, h_w é a altura da represa, Q_L é a vazão volumétrica de líquido, h_f é a altura de espuma, ρ é a densidade, h_{ow} é a altura da crista, V_s é a velocidade superficial do vapor, h_{cl} é a altura de líquido claro e D_p é o diâmetro do prato.

Hofhuis (1980) apresenta em sua tese de doutorado a Equação (3.9), que leva em conta diversos parâmetros hidráulicos do prato, e pode possuir erro relativo médio na faixa de 16%.

$$h_{cl} = 0,6 \left(\frac{Q_L}{V_s L_w} \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho_V}} \right)^{1/4} h_w^{1/2} p^{1/4} \quad (3.9)$$

E

$$25 \text{ mm} < h_w < 100 \text{ mm}$$

Na Equação (3.9), as unidades dos termos são: L_w [m], h_w [m], Q_L [m³/s], ρ [kg/m³], V_s [m/s], h_{cl} [m].

Solari e Bell (1986), além de todo o estudo experimental o qual foi baseado este estudo, apresentaram também a correlação mostrada na Equação (3.10).

$$h_{cl} = 1,4 \cdot 10^{-2} + 0,4h_w + 2,21L_w - 0,0135F_s \quad (3.10)$$

E

$$F_s = V_s \sqrt{\rho_V} \quad (3.11)$$

$$L_w = \frac{Q_L}{[(L_w + D_p)/2]} \quad (3.12)$$

Nas Equações (3.10) à (3.12), as unidades dos termos são: L_w [m], h_w [m], Q_L [m³/s], ρ [kg/m³], V_s [m/s], h_{cl} [m], D_p [m].

Bennett *et al.* (1983) apresentaram a correlação apresentada na Equação (3.13), que pode possuir erro relativo médio na faixa de 6%.

$$h_{cl} = f_L^{\text{médio}} \left[h_w + C \left(\frac{Q_L}{L_w f_L^{\text{médio}}} \right)^{2/3} \right] \quad (3.13)$$

$$C = 0,0327 + 0,0286 \exp(-137,8h_w) \quad (3.14)$$

Nas Equações (3.13) e (3.14), as unidades dos termos são: L_w [m], h_w [m], Q_L [m³/minuto], ρ [kg/m³], V_s [m/s], h_{cl} [m].

Colwell (1981) propôs a correlação apresentada na Equação (3.15), que pode possuir erro relativo médio na faixa de 7%. Apenas lembrando que esta correlação necessita de um processo iterativo para a obtenção da altura de líquido claro. A Equação (3.15) deve ser utilizada em conjunto com as Equações (3.16) à (3.18).

$$h_{cl} = f_L^{\text{médio}} h_w + 7,3 \left(\frac{f_L^{\text{médio}^{1/2}} Q_L}{C_d L_w} \right)^{2/3} \quad (3.15)$$

$$C_d = 0,61 + 0,08 \frac{h_{cf}}{h_w}; \quad \frac{h_{cf}}{h_w} \leq 8,135 \quad (3.16)$$

$$C_d = 1,06 \left(1 + \frac{h_w}{h_{cf}}\right)^{1,5}; \quad \frac{h_{cf}}{h_w} > 8,135 \quad (3.17)$$

$$h_{cf} = h_f - h_w \quad (3.18)$$

Nas Equações (3.15) à (3.18), as unidades dos termos são: L_w [m], h_w [mm], Q_L [dm³/s], ρ [kg/m³], V_s [m/s], h_{cl} [mm] e h_{ow} [mm].

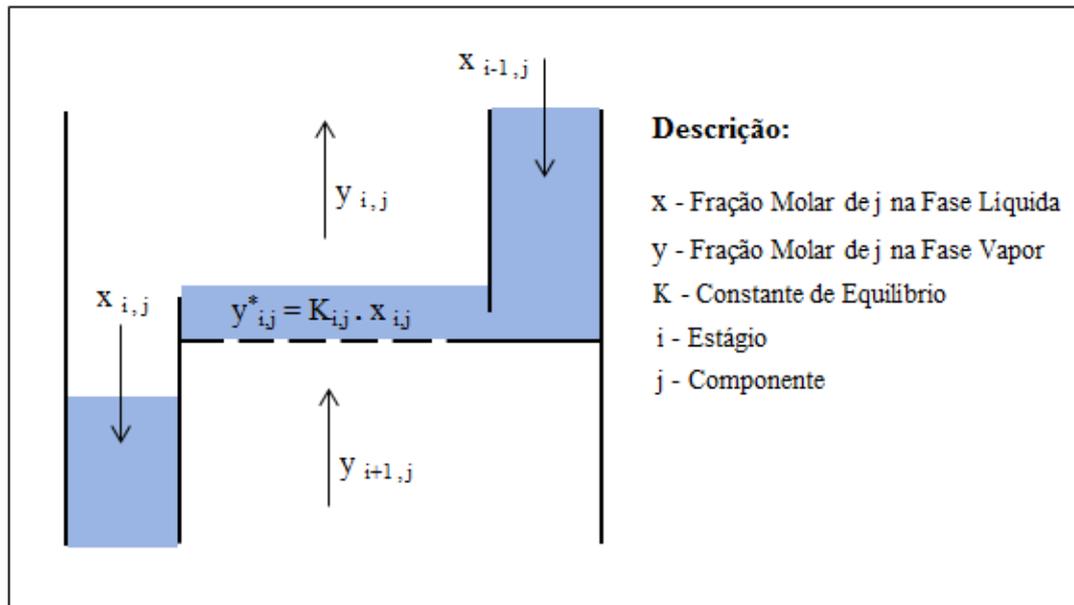
Os erros envolvidos nas equações apresentadas anteriormente estão apresentados no estudo de Colwell (1981) e Noriler (2007). A equação utilizada para a obtenção desses erros é apresentada em Colwell (1981) e é mostrada na Equação (3.19).

$$Erro = \frac{1}{N} \left[\sum_{i=1}^N \frac{|h_{cl,predito} - h_{cl,medido}|}{h_{cl,medido}} \right] \quad (3.19)$$

Na Equação (3.19), os termos $h_{cl,predito}$ e $h_{cl,medido}$ são, respectivamente, as alturas de líquido claro preditas pelas correlações e observadas por experimentos físicos, e N é o número de pontos utilizados.

Para a avaliação da eficiência do prato, que será discutida no capítulo de Resultados e Discussão, utilizou-se o cálculo de eficiência proposto por Murphree (1925). As Equações (3.20) e (3.21) são as eficiências de Murphree baseadas nas fases vapor e líquida, respectivamente. Os termos utilizados nessas equações são apresentados na Figura (3.11). Essas equações relacionam, para cada fase, as composições das correntes que entram e saem do estágio e a composição que a corrente de saída teria caso fosse atingido o equilíbrio líquido-vapor sobre o prato. Conforme afirma Barros (1997), a eficiência de Murphree relaciona o comportamento do prato real com o de um prato ideal através do grau de contato entre as fases, admitindo-se que o líquido esteja completamente misturado sobre o prato. Barros (1997) ainda cita que, na prática, as eficiências para a fase vapor e líquida fornecem valores diferentes para o mesmo estágio real e, dessa forma, a literatura trabalha mais com a aplicação da eficiência da fase vapor, a qual será avaliada nesse estudo.

Figura 3.11 – Representação esquemática do prato de destilação para a avaliação da eficiência de prato.



Fonte: Adaptado de Barros, (1997).

$$E_{i,j}^{MV} = \frac{y_{i,j} - y_{i+1,j}}{y_{i,j}^* - y_{i+1,j}} \quad (3.20)$$

$$E_{i,j}^{ML} = \frac{x_{i-1,j} - x_{i,j}}{x_{i-1,j} - x_{i,j}^*} \quad (3.21)$$

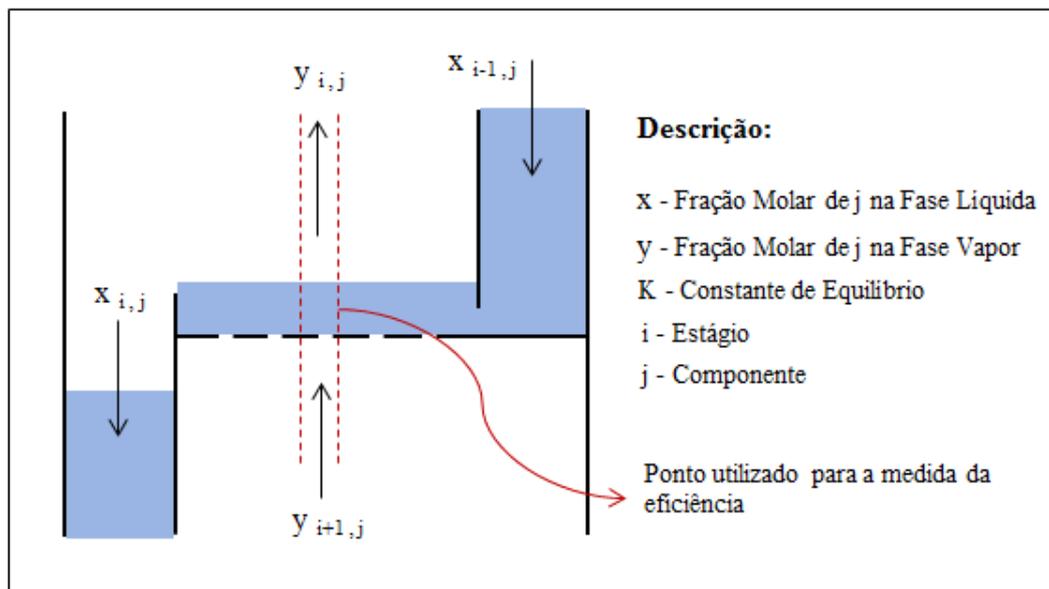
Nas Equações (3.20) e (3.21), tem-se que: $y_{i+1,j}$ é a fração molar do componente j na fase vapor que entra no prato, $y_{i,j}$ é a fração molar do componente j na fase vapor que sai do prato, $x_{i-1,j}$ é a fração molar do componente j na fase líquida que entra no prato, $x_{i,j}$ é a fração molar do componente j na fase líquida que sai do prato, o termo $y_{i,j}^*$ é a fração molar do componente j na fase vapor em equilíbrio com o mesmo componente na fase líquida que sai do prato, e o termo $x_{i,j}^*$ é a fração molar do componente j na fase líquida em equilíbrio com o mesmo componente na fase vapor que sai do prato.

No entanto, como citado na revisão de outros modelos (equilíbrio e não-equilíbrio) sabe-se que na prática não ocorre a mistura completa e nem perfeita entre o líquido e o vapor durante o escoamento sobre o prato. Assim, conforme analisa Barros (1997), como efeito dessa não-idealidade ocorrem regiões de contato líquido-vapor em diversas regiões do prato que possuem diferentes concentrações tanto da fase vapor quanto da fase líquida. Dessa

forma, é possível ocorrer certos locais nos quais o vapor abandona o prato com uma composição mais rica no componente mais volátil em relação a outros locais. Com isto em mente, surgiu o conceito de eficiência no ponto, fornecendo a possibilidade de avaliar a eficiência ao longo de diversos locais do prato.

A eficiência de Murphree no ponto é uma relação de grande importância e fornece valores de eficiência com maior fidelidade, pois possibilita análises locais de eficiência de um prato. West *et al.* (1952) propôs a aplicação da eficiência de Muphree em pontos sobre o prato, conforme a Figura (3.12) e Equação (3.22).

Figura 3.12 – Representação esquemática do prato de destilação para a avaliação da eficiência de ponto.



Fonte: Adaptado de BARROS (1997).

$$E_{OG,i}^{Ponto} = \frac{y_{i,j} - y_{i+1,j}}{y_{i,j}^* - y_{i+1,j}} \quad (3.22)$$

Os termos presentes na Equação (3.22) possuem os mesmos significados que os termos apresentados na Equação (3.20), com a exceção de que agora a análise é para o ponto. Assim, o termo $y_{i,j}^*$ é a fração molar do componente j na fase vapor em equilíbrio com o mesmo componente na fase líquida que sai do ponto no prato i .

Assim, West et al. (1952) sugerem a subdivisão do prato em vários subdomínios (pontos) nos quais serão aplicados a eficiência de Murphree, constituindo assim a eficiência pontual do prato. Esta é a relação de maior fidelidade no estudo e previsão da eficiência (NORILER, 2007). Com esse intuito, subdividiu-se o prato em onze subdomínios na direção do escoamento da fase líquida (sentido positivo do eixo z), com comprimentos iguais a 0,07136 m (sendo $11 \times 0,071364\text{m} = 0,785\text{m}$, que é o caminho percorrido pelo líquido sobre o prato desde a entrada até a represa). O cálculo da fração mássica de etanol na fase líquida foi realizado a partir da média (baseada em área) na saída de líquido de cada subdomínio, e para a fase vapor utilizou-se a média da fração mássica de etanol na região correspondente à saída de vapor do respectivo subdomínio.

Com o intuito de analisar os valores de eficiência obtidos através das simulações computacionais, comparou-se os resultados com o trabalho de Oliveira (2014) e com a correlação empírica proposta por van Winkle *et al.* (1972) *apud* Sinnott e Towler (2009), e é apresentada nas Equações (3.23) à (3.27).

$$E^{MV} = 0,07 Dg^{0,14} Sc^{0,25} Re^{0,08} \quad (3.23)$$

$$Dg = \frac{\sigma_L}{\mu_L V_s} \quad (3.24)$$

$$Sc = \frac{\mu_L}{\rho_L D_L} \quad (3.25)$$

$$Re = \frac{h_w V_s \rho_V}{\mu_L (FA)} \quad (3.26)$$

$$(FA) = \frac{A_H}{A_c} \quad (3.27)$$

Nas Equações (3.23) à (3.27), tem-se que: Dg representa o número de tensão superficial, σ_L é a tensão superficial da fase líquida, Sc é o número de Schmidt da fase líquida, D_L é a difusividade do líquido, (FA) é definido como uma área fracionada, A_H é a área perfurada e A_c é a área da seção transversal da coluna.

Em relação ao diâmetro de bolha, considerada neste estudo como sendo constante, utilizou-se a Equação (3.28) proposta por Davidson e Schüler (1960) *apud* Hofhuis (1980). O diâmetro de bolha é uma propriedade extremamente importante em escoamentos multifásicos. Ao longo de um escoamento multifásico, as bolhas podem se apresentar com diferentes morfologias e diferentes escalas de comprimento. Assim, devido à dificuldade em abordar essa propriedade, optou-se por utilizar o modelo *Particle Model*, conforme será apresentado adiante, que considera as bolhas esféricas e com diâmetro característico constante.

$$d_{\beta,DS} = 1,23 g^{-1/5} p^{4/5} \left(V_s \frac{A_c}{A_B} \right)^{2/5} \quad (3.28)$$

Sendo: $d_{\beta,DS}$ é o diâmetro de bolha segundo Davidson e Schüler (1960), p é o espaçamento entre os orifícios na disposição triangular, A_c é a área da seção transversal da coluna, A_B é a área de borbulhamento e V_s é a velocidade superficial da fase gasosa.

Assim, conforme define Hofhuis (1980) *apud* Oliveira (2014), o diâmetro médio de Sauter é a metade do diâmetro de bolha obtido pela Equação (3.28). Dessa forma, neste estudo utilizou-se um diâmetro médio de bolha no valor de 35 mm.

4 MODELAGEM MATEMÁTICA

O objetivo deste capítulo é apresentar a formulação matemática do escoamento multifásico contido neste estudo. Alguns itens desse capítulo serão discutidos detalhadamente, de forma a apresentar importantes conceitos envolvidos na modelagem de escoamento multifásicos.

4.1 Considerações Assumidas

No desenvolvimento do modelo matemático utilizado neste estudo foram utilizadas algumas considerações, as quais são apresentadas a seguir.

4.1.1 Modelo Heterogêneo

Neste estudo foi utilizado a modelagem para um modelo heterogêneo. No modelo homogêneo, como o modelo proposto por Noriler (2003), a transferência de quantidade de movimento entre as fases é considerada muito alta, ou seja, o coeficiente de arraste é considerado infinito e, dessa forma, ambas as fases contínua e dispersa compartilham um mesmo campo de velocidade, contrabalanceado pelas frações volumétricas. No entanto, neste trabalho, utilizou-se o modelo heterogêneo, no qual cada fluido possui seu próprio campo de variáveis e a interação entre os fluidos ocorre na interface fluido-fluido.

4.1.2 Hipótese do Contínuo

Sabe-se que todos os fluidos são compostos por moléculas em constante movimento. No entanto, em geral, nas aplicações de engenharia, o interesse está nos efeitos médios ou macroscópicos de muitas moléculas, pois são esses efeitos macroscópicos que geralmente são percebidos. Dessa forma, trata-se um fluido como uma substância infinitamente divisível, um contínuo, e deixa-se de lado o comportamento das moléculas individuais. Consequentemente, devido à hipótese do contínuo, cada propriedade do fluido é considerada como tendo um valor definido em cada ponto do espaço e, dessa forma, as propriedades dos fluidos como massa específica, temperatura, velocidade etc., são consideradas funções contínuas da posição e do tempo (FOX e MCDONALD, 2004).

4.1.3 Interpenetrabilidade entre as Fases

Na hipótese da interpenetrabilidade entre as fases, considera-se, num mesmo instante, que as fases ocupam o mesmo volume no espaço. Assim, as propriedades conserváveis de uma fase coexistem com suas análogas de outras fases, em um mesmo ponto do espaço-tempo, implicando que as características de transporte de todas as fases presentes podem ser mensuradas matematicamente ao mesmo tempo e em um mesmo ponto no espaço (NORILER, 2007).

4.1.4 Incompressibilidade

No presente trabalho, é estudado apenas um estágio de equilíbrio, o que implica em pequenas variações de pressão, o qual pode-se assumir que a massa específica dos fluidos permanece relativamente constante no seu escoamento ao longo do estágio, considerando-se assim, o escoamento como incompressível.

4.1.5 Fase Líquida Turbulenta

Neste trabalho considerou-se a turbulência apenas para a fase líquida. Isto devido ao fato de a turbulência na fase líquida ser mais vigorosa que a turbulência na fase vapor, sobressaindo-se. Os efeitos de turbulência são, dessa forma, transferidos para a fase gasosa através da transferência de quantidade de movimento entre as fases (NORILER, 2007).

4.1.6 Predominância da Força de Arraste

No tratamento de mais de uma fase, uma fase irá exercer influência sobre a outra, sendo essa interação representada pelas forças interfaciais. No caso do escoamento bifásico que ocorre em pratos perfurados, as frações volumétricas de ambas as fases são aproximadamente equivalentes ao longo do inventário líquido, e assim assume-se que a força de arraste predomina sobre as demais forças, sendo a única força interfacial assumida no modelo deste estudo. Lembrando que a força de arraste é a força exercida pelo fluido sobre um corpo imerso ou pelo corpo imerso sobre um fluido.

4.1.7 Transferência Líquida de Massa entre as Fases por Convecção é Considerada Nula

Ao longo de um estágio de destilação, ocorre a vaporização de parte do líquido presente no prato e a condensação de parte do vapor sobre o prato. Estes fenômenos ocorrem ao longo de todo o processo e simultaneamente, representando a transferência de massa entre as fases por convecção. Dessa forma, esta consideração compreende que os fenômenos de vaporização e de condensação são equivalentes, ou seja, a quantidade de fluido evaporada é a mesma que a quantidade de fluido condensada, resultando em uma troca líquida de massa nula por convecção.

4.2 Abordagem Matemática

No desenvolvimento deste trabalho foi utilizada uma abordagem heterogênea Euleriana-Euleriana. No que diz respeito aos modelos homogêneos e heterogêneos, além da diferença de o modelo homogêneo tratar o escoamento apenas como uma única fase e o modelo heterogêneo em duas ou mais fases, há também, conseqüentemente, a maneira em se tratar os campos de velocidades, além de outras diferenças.

Nos modelos homogêneos é considerado apenas um único campo de velocidades para todas as fases representando a velocidade média da mistura multifásica. Um exemplo de aplicação deste procedimento é para dispersões muito finas de partículas, nas quais a fase dispersa é arrastada com a mesma velocidade que a fase contínua (PALADINO, 2005).

Nos modelos heterogêneos são considerados dois ou mais campos de velocidades, ou seja, são considerados campos de velocidades diferentes para cada uma das fases. Com a evolução dos computadores digitais, os escoamentos dispersos passaram a serem resolvidos a partir do modelo de dois fluidos, exceto, por exemplo, em casos de dispersões muito finas onde a hipótese de homogeneidade de velocidades passa a ser válida (PALADINO, 2005).

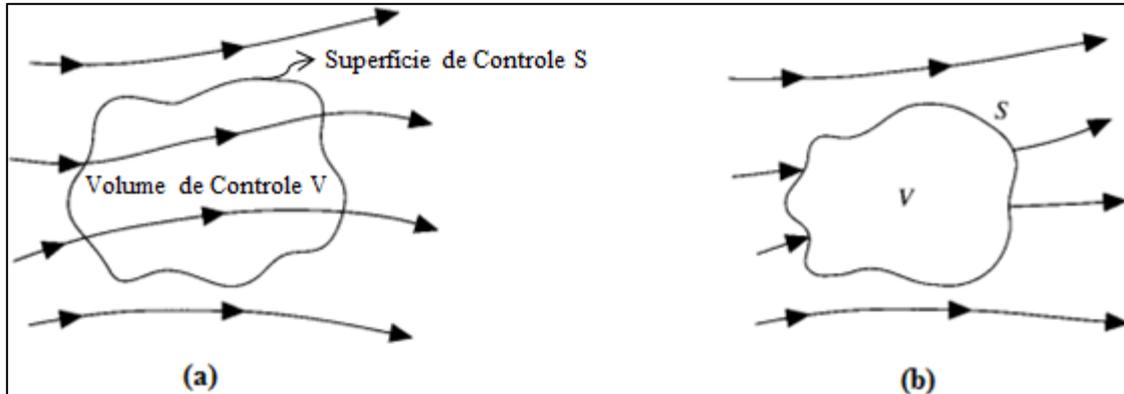
Além da classificação de uma abordagem como citado anteriormente, outra classificação diferencia os modelos em duas abordagens conforme a maneira de se tratar a fase dispersa, sendo a abordagem Euleriana-Euleriana e a abordagem Euleriana-Lagrangeana.

Na abordagem Euleriana-Euleriana, ambas as fases, dispersa e contínua, são consideradas como meios contínuos, no qual um sistema de referência Euleriano é utilizado para a dedução das equações governantes. Dessa forma, nota-se que esta abordagem é adequada para escoamentos multifásicos onde as fases estão misturadas e as velocidades relativas entre fases são consideráveis (PALADINO, 2005).

Na abordagem Euleriana-Lagrangeana, para cada partícula é resolvida uma equação da conservação de momento em um sistema de referência que se movimenta com a partícula, referencial Lagrangeano. Assim, um sistema de equações de conservação (massa, momento, energia e espécies químicas) é resolvido para a fase contínua, e a partir do campo de velocidades obtido, são calculadas as forças exercidas sobre as partículas dispersas e obtidas as trajetórias dessas partículas. Assim, nota-se que esta abordagem é restrita para sistemas dispersos e com baixa fração volumétrica da fase dispersa, pois serão necessárias a mesma quantidade de equações conforme o número de partículas presentes. Ressaltando que, quando as partículas são muito pequenas, mesmo que haja uma baixa fração volumétrica da fase dispersa, o número de partículas será muito grande e, conseqüentemente inviabilizará a utilização deste modelo, devido ao elevado número de equações que surgirão (PALADINO, 2005).

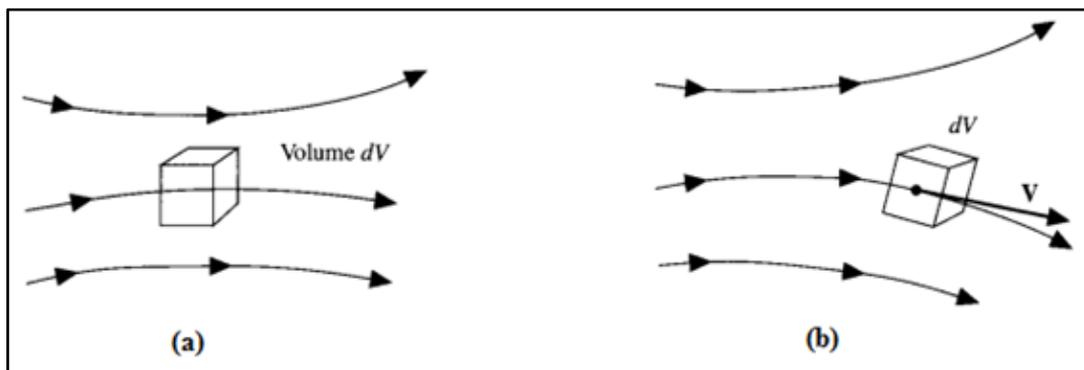
A definição de um sistema de referência Euleriano (Figuras (4.1) e (4.2) (a)) e de um sistema de referência Lagrangeano (Figuras (4.1) e (4.2) (b)) está a seguir. Na Figura (4.3) segue um esquema das abordagens citadas anteriormente.

Figura 4.1 - Volume de controle finito. Sendo: a) Referencial Euleriano, no qual o fluido se move através do volume de controle fixo; b) Referencial Lagrangeano, no qual o volume de controle se move juntamente com o fluido.



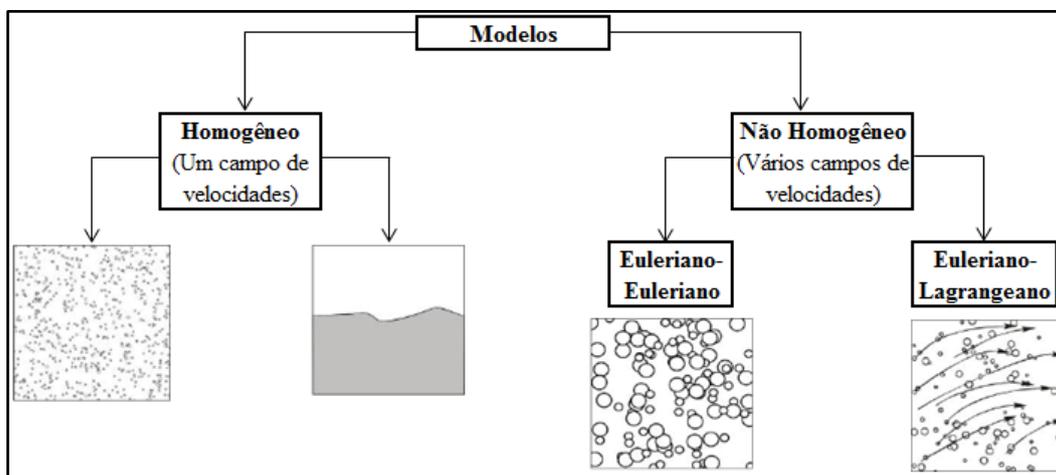
Fonte: Adaptado de Anderson, (1995).

Figura 4.2 - Elemento de fluido infinitesimal. Sendo: a) Referencial Euleriano, no qual o fluido se move através do elemento de fluido fixo; b) Referencial Lagrangeano, no qual o elemento de fluido se move juntamente com o fluido.



Fonte: Adaptado de Anderson, (1995).

Figura 4.3 - Classificação das abordagens para escoamentos multifásicos.



Fonte: Adaptado de Paladino, (2005).

4.3 Equações Governantes e Constitutivas

A fluidodinâmica computacional é fundamentalmente baseada nas equações governantes. Estas equações representam matematicamente as afirmações provenientes das leis de conservação da física. Entre estas equações pode-se citar: a equação da continuidade, que representa a conservação da massa, as equações de Navier-Stokes, que representam equações de balanço para a quantidade de movimento e a equação da energia, que representa a conservação da energia. Além das equações governantes, muitas outras equações estão implementadas, ou podem ser implementadas, nos códigos de CFD, tais como as equações de turbulência, modelos desenvolvidos para a transferência de massa, para a transferência de energia, entre outras, para auxiliarem na resolução de inúmeros fenômenos presentes na engenharia.

Neste item, são apresentadas as equações utilizadas neste estudo, ressaltando que o subscrito α representa a fase líquida, tratada aqui como a fase contínua, e o subscrito β representa a fase vapor, tratada aqui como a fase dispersa. Algumas equações serão apresentadas para uma fase α qualquer com o intuito de enfatizar que essas equações são válidas para quaisquer fases de um escoamento multifásico.

4.3.1 Equação da Continuidade

A equação da continuidade é a equação representativa da conservação da massa no sistema em questão. A conservação da massa diz que a massa não pode ser criada e nem destruída. A equação da continuidade, escrita para uma fase α qualquer, é dada pela Equação (4.1) (ANSYS CFX 14.0 – *Solver Theory Guide*, 2011).

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_{\alpha}\rho_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha}\rho_{\alpha}\mathbf{v}_{\alpha}) = \mathbf{S}_{MS,\alpha} + \sum_{\beta=1}^{N_F} \Gamma_{\alpha\beta} \quad (4.1)$$

Sendo: f é a fração volumétrica, ρ é a massa específica, \mathbf{v} é o vetor velocidade, \mathbf{S}_{MS} é o termo de fonte de massa, e $\Gamma_{\alpha\beta}$ é o termo de taxa de transferência de massa entre as fases por unidade de volume do sistema. No presente estudo, o termo de fonte de massa \mathbf{S}_{MS} é nulo, devido à não ocorrência de reações químicas ou outro tipo de fonte de massa.

4.3.2 Equação da Quantidade de Movimento

A equação da quantidade de movimento é proveniente da segunda lei de Newton, à qual afirma que a resultante das forças atuando em um sistema é igual à taxa de variação de momento do sistema. A equação de conservação da quantidade de movimento, na sua forma vetorial, para uma fase α qualquer é apresentada na Equação (4.2) (ANSYS CFX 14.0 – *Solver Theory Guide*, 2011).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) + \nabla \cdot [f_\alpha (\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \otimes \mathbf{v}_\alpha)] \\ = -f_\alpha \nabla P_\alpha + \nabla \cdot (f_\alpha \mathbf{T}_\alpha^{eff}) \\ + \sum_{\beta=1}^{N_F} (\Gamma_{\alpha\beta}^+ \mathbf{v}_\beta - \Gamma_{\beta\alpha}^+ \mathbf{v}_\alpha) + \mathbf{S}_{M,\alpha} + \mathbf{M}_\alpha \end{aligned} \quad (4.2)$$

Sendo: P a pressão, \mathbf{T}^{eff} é o tensor efetivo, $(\Gamma_{\alpha\beta}^+ \mathbf{v}_\beta - \Gamma_{\beta\alpha}^+ \mathbf{v}_\alpha)$ e $(\Gamma_{\beta\alpha}^+ \mathbf{v}_\alpha - \Gamma_{\alpha\beta}^+ \mathbf{v}_\beta)$ representam a transferência de momento devido à transferência de massa entre as fases, \mathbf{S}_M é a fonte de momento e \mathbf{M} são as forças interfaciais atuando nas fases devido à presença da outra fase.

O tensor efetivo, \mathbf{T}^{eff} , é relacionado à difusão e à dispersão das propriedades devido aos efeitos de turbulência. Assim, o tensor efetivo pode ser escrito como uma combinação entre o fluxo difusivo e fluxo turbulento (NORILER, 2010). Na Equação (4.3), escrita para uma fase α qualquer, o sobrescrito “turb” indica o fluxo turbulento, enquanto o fluxo difusivo é representado sem o sobrescrito.

$$\mathbf{T}_\alpha^{eff} = \mathbf{T}_\alpha + \mathbf{T}_\alpha^{turb} \quad (4.3)$$

Considerando ambos os fluidos como fluidos Newtonianos e a hipótese da viscosidade turbulenta, a qual assume que as tensões de Reynolds são proporcionais aos gradientes de velocidade média, os tensores efetivos podem ser escritos como apresentado nas Equações (4.4) e (4.5).

$$\mathbf{T}_\alpha^{eff} = -\mu_\alpha^{eff} (\nabla \mathbf{v}_\alpha + (\nabla \mathbf{v}_\alpha)^{turb}) + \left(\frac{2}{3} \mu_\alpha^{eff} - \kappa_\alpha\right) (\nabla \cdot \mathbf{v}_\alpha) \boldsymbol{\delta} \quad (4.4)$$

De acordo com Bird *et al.* (2004), para o caso de fluidos incompressíveis ou escoamentos com pouca variação de pressão, como é o caso deste estudo, tem-se que $(\nabla \cdot \mathbf{v}_\alpha) = 0$, e portanto os termos que contêm a viscosidade dilatacional κ e o tensor unitário $\boldsymbol{\delta}$ são igualmente descartados, não sendo, portanto, discutidos neste estudo. Dessa forma, a Equação (4.4) se torna a Equação (4.5).

$$\mathbf{T}_\alpha^{eff} = -\mu_\alpha^{eff} [\nabla \mathbf{v}_\alpha + (\nabla \mathbf{v}_\alpha)^{turb}] \quad (4.5)$$

A viscosidade efetiva, μ^{eff} , pode ser combinada com a viscosidade molecular (μ) e com a viscosidade turbulenta (μ^{turb}), proveniente dos efeitos gerados pela turbulência, como apresentado na Equação (4.6).

$$\mu_\alpha^{eff} = \mu_\alpha + \mu_\alpha^{turb} \quad (4.6)$$

Além disso, o termo \mathbf{S}_M da Equação (4.2), está relacionado às forças externas atuando sobre o fluido, sendo representado pela Equação (4.7). Sendo \mathbf{g} o termo da aceleração gravitacional em sua forma vetorial.

$$\mathbf{S}_{M,\alpha} = f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} \quad (4.7)$$

4.3.3 Equação de Conservação das Espécies Químicas

As equações de balanço para as espécies químicas representam a conservação das espécies químicas presentes no sistema em questão. Nas equações apresentadas a seguir, o índice A representa um componente genérico. Os dois últimos termos do membro direito da Equação (4.8), representam a transferência de massa entre as fases. O segundo termo do membro direito dessas equações representa a transferência de espécies químicas por ação molecular (difusiva), que é originada devido à uma diferença de potencial químico em cada

fase. Já o terceiro membro do lado direito da equação, representa a transferência de espécies químicas devido à convecção, ou seja, devido ao movimento macroscópico do fluido.

Devido ao fato de neste trabalho haver a consideração de que a massa total transferida da fase líquida α para a fase vapor β ser igual à massa total da fase β para a fase α , ou seja, a transferência líquida de massa por convecção de uma fase para outra ser nula, esse terceiro termo se anula. No entanto, a transferência devido à diferença de potencial químico (movimento molecular do fluido), não se anula, sendo este o termo (o segundo termo) a ser analisado na modelagem tratada neste trabalho. O estudo apropriado desse termo de movimento microscópico é o termo que fornecerá a precisão na análise da eficiência de separação no processo de destilação.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_{\alpha}\rho_{\alpha}y_{A\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha}(\rho_{\alpha}\mathbf{v}_{\alpha}y_{A\alpha} - \rho_{\alpha}D_{A\alpha}(\nabla y_{A\alpha}))) \\ = S_{A\alpha} + \sum_{\beta=1}^{N_F} Y_{\alpha\beta}^A + \sum_{\beta=1}^{N_F} (M_{\alpha\beta}^+ y_{A\beta} - M_{\beta\alpha}^+ y_{A\alpha}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Sendo: Y a transferência de espécies químicas entre as fases, y é a fração mássica, D é a difusividade, S_A é a fonte do componente A na fase em questão e $(M_{\alpha\beta}^+ y_{A\beta} - M_{\beta\alpha}^+ y_{A\alpha})$ representa a transferência de espécies químicas entre as fases devido à transferência de massa entre as fases.

4.3.4 Equações de Restrição

Para o escoamento multifásico em estudo, a seguir são apresentadas as equações de restrição (ANSYS CFX 14.0 – *Solver Theory Guide*, 2011).

4.3.4.1 Restrição de Pressão

Na restrição de pressão, considera-se que todas as fases compartilham o mesmo campo de pressão, de acordo com a equação (4.9).

$$P_{\alpha} = P, \alpha = 1, \dots, N_F \quad (4.9)$$

4.3.4.2 Restrição de Volume

Na equação de restrição de volume, considera-se que as frações volumétricas de líquido e vapor estão relacionadas conforme Equação (4.10).

$$\sum_{\alpha=1}^{N_F} f_{\alpha} = 1 \quad (4.10)$$

4.3.4.3 Restrição de Massa

Na restrição de massa, a fração mássica do componente A na fase α , $y_{A\alpha}$, é relacionada de acordo com a Equação (4.11), sendo N_c o número de componentes presentes na fase α .

$$\sum_{A=1}^{N_c} y_{A\alpha} = 1 \quad (4.11)$$

4.3.5 Equações para o Fechamento do Modelo

O modelo apresentado até aqui ainda possui graus de liberdade, ou seja, ainda há termos que precisam ser definidos por equações constitutivas para que seja possível a resolução do modelo. As equações constitutivas adicionais requeridas estão relacionadas aos termos de transferência na interface de espécies químicas, momento e espécies químicas, além do termo relacionado ao modelo de turbulência, o qual será tratado no item Turbulência.

4.3.5.1 Equação Constitutiva para a Transferência Interfásica de Momento

A transferência de momento na interface, \mathbf{M}_{α} , ocorre devido à forças interfaciais agindo em cada fase, devido à interação com a outra fase. A força total agindo sobre a fase α devido à interação com a fase β é denotada por \mathbf{M}_{α} , e é expressa conforme a Equação (4.12) (ANSYS CFX 14.0 – *Solver Theory Guide*, 2011).

$$\mathbf{M}_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{M}_{\alpha\beta} \quad (4.12)$$

É possível notar que as forças interfaciais entre as duas fases são iguais e opostas, consequentemente a soma das forças de interface é nula, conforme Equação (4.13).

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = -\mathbf{M}_{\beta\alpha} \Rightarrow \sum_{\alpha} \mathbf{M}_\alpha = 0 \quad (4.13)$$

A força de interface total agindo entre as duas fases pode se apresentar devido à vários efeitos físicos independentes, como apresentado na Equação (4.14).

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = \mathbf{M}_{\alpha\beta}^D + \mathbf{M}_{\alpha\beta}^L + \mathbf{M}_{\alpha\beta}^{LUB} + \mathbf{M}_{\alpha\beta}^{VM} + \mathbf{M}_{\alpha\beta}^{TD} + \mathbf{M}_S + \dots \quad (4.14)$$

As forças indicadas na Equação (4.14) representam, respectivamente, a partir do primeiro termo do membro direito, a força de arraste na interface, a força de sustentação, a força de lubrificação da parede, a força de massa virtual, a força de dispersão turbulenta e a força de pressão de sólidos.

Conforme a consideração adotada neste estudo, a qual assume a predominância da força de arraste, por ser esta a força de maior importância nos escoamentos multifásicos de estágios de destilação, será apenas esta força a ser utilizada e detalhada a seguir.

A Equação (4.15) é utilizada para modelar a força de arraste na interface agindo sobre a fase contínua (α) devido à fase dispersa (β).

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = c_{\alpha\beta}^{(d)} (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha) \quad (4.15)$$

Nota-se que $c_{\alpha\beta} = c_{\beta\alpha}$. Assim, a soma sobre todas as fases de todos os termos de transferência na interface é nula. Na Equação (4.15), $c^{(d)}$ representa o coeficiente volumétrico de transferência de momento devido ao arraste e $(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta)$ é a velocidade relativa do fluxo.

A força total de arraste é mais convenientemente expressa em termos do coeficiente de arraste adimensional C_D , conforme Equação (4.16).

$$C_D = \frac{D}{\frac{1}{2}\rho_\alpha(v_\alpha - v_\beta)^2 A_P} \quad (4.16)$$

Na Equação (4.16) o termo D representa a magnitude da força de arraste e A_P , neste caso, é a área projetada por uma única partícula na direção do escoamento.

Para partículas esféricas, assumindo neste estudo essa aproximação para as bolhas, os coeficientes volumétricos $c^{(d)}$ podem ser avaliados analiticamente. A área projetada por uma única partícula na direção do escoamento, A_P , e o volume de uma única partícula, V_P , são calculados pelas Equações (4.17) e (4.18). Nessas Equações, o termo d representa o diâmetro característico da partícula.

$$A_P = \frac{\pi d^2}{4} \quad (4.17)$$

$$V_P = \frac{\pi d^3}{6} \quad (4.18)$$

O número de partículas por unidade de volume, n_p , é dado pela Equação (4.19).

$$n_p = \frac{f_\beta}{V_p} = \frac{6f_\beta}{\pi d^3} \quad (4.19)$$

O arraste exercido por uma única partícula sobre a fase contínua (líquida) é dado pela Equação (4.20).

$$\mathbf{M}_p = \frac{1}{2} C_D \rho_\alpha A_P |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha) \quad (4.20)$$

Dessa forma, o arraste total por unidade de volume na fase contínua (líquida) é dado pela Equação (4.21).

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = n_p \mathbf{M}_p = \frac{3 C_D}{4 d} f_\beta \rho_\alpha |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha) \quad (4.21)$$

Comparando as Equações (4.21) e (4.15), chega-se à Equação (4.22).

$$c_{\alpha\beta}^{(d)} = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d} f_{\beta} \rho_{\alpha} |\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{v}_{\alpha}| \quad (4.22)$$

na qual C_D é o coeficiente de arraste.

No estudo desenvolvido por Krishna *et al.* (1999c), uma correlação foi proposta para estimativa do coeficiente de arraste para escoamentos em regime de intenso borbulhamento, como ocorre nos escoamentos em pratos perfurados de destilação. A correlação proposta é apresentada na Equação (4.23). Novamente, vale ressaltar, o fato de que neste estudo o subscrito α representa a fase líquida e o subscrito β representa a fase vapor.

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{\rho_{\alpha} - \rho_{\beta}}{\rho_{\alpha}} g d_B \frac{1}{|v_{slip}|^2} \quad (4.23)$$

na qual d_B (ou d) é o diâmetro de bolha da fase discreta, que nesse caso é uma estimativa para o diâmetro de bolha, v_{slip} é a velocidade de deslizamento das bolhas e pode ser estimado a partir da velocidade superficial do gás (V_S) e da fração de volume média do gás na região de borbulhamento, de acordo com as Equações (4.24) e (4.25).

$$v_{slip} = \frac{V_S}{f_{\beta}^{m\u00e9dio}} \quad (4.24)$$

$$V_S = \frac{Q_{\beta}}{A_B} \quad (4.25)$$

nas quais Q_V é a vazão volumétrica de vapor e A_B é a área de borbulhamento do prato.

O cálculo da fração de volume médio do gás será realizado por interm\u00e9dio da correlação de Bennett *et al.* (1983), apresentada nas Equações (4.26) e (4.27) para ambas as fases.

$$f_{\alpha}^{m\u00e9dio} = \exp \left[-12,55 \left(V_S^2 \sqrt{\frac{\rho_{\beta}}{\rho_{\alpha} - \rho_{\beta}}} \right)^{0,91} \right] \quad (4.26)$$

$$f_{\beta}^{m\u00e9dio} = 1 - \exp \left[-12,55 \left(V_S \sqrt{\frac{\rho_{\beta}}{\rho_{\alpha} - \rho_{\beta}}} \right)^{0,91} \right] \quad (4.27)$$

Ao substituir as Equa\u00e7\u00f5es (4.23) e (4.24) na Equa\u00e7\u00e3o (4.21), obt\u00eam-se a Equa\u00e7\u00e3o (4.28).

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = f_{\beta}(\rho_{\alpha} - \rho_{\beta})g \frac{1}{\left| \frac{V_S}{f_{\beta}^{m\u00e9dio}} \right|^2} |\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{v}_{\alpha}| (\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{v}_{\alpha}) \quad (4.28)$$

No entanto, o modo como a Equa\u00e7\u00e3o (4.28) \u00e9 apresentada, implica em dificuldades num\u00e9ricas devido ao fato da possibilidade da fra\u00e7\u00e3o volum\u00e9trica de g\u00e1s ou l\u00edquido ser zero em algumas regi\u00f5es. No entanto, a partir de manipula\u00e7\u00f5es alg\u00e9bricas, pode-se superar este problema, como multiplicar pela fra\u00e7\u00e3o volum\u00e9trica de l\u00edquido e dividir pela fra\u00e7\u00e3o volum\u00e9trica m\u00e9dia de l\u00edquido. A partir dessas opera\u00e7\u00f5es, obt\u00eam-se a Equa\u00e7\u00e3o (4.29), mais apropriada para o uso em quest\u00e3o.

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = f_{\beta}f_{\alpha}(\rho_{\alpha} - \rho_{\beta})g \left[\frac{1}{\left| \frac{V_S}{f_{\beta}^{m\u00e9dio}} \right|^2} \frac{1}{f_{\alpha}^{m\u00e9dio}} \right] |\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{v}_{\alpha}| (\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{v}_{\alpha}) \quad (4.29)$$

A partir da Equa\u00e7\u00e3o (4.29), vale ressaltar o importante resultado de que o coeficiente de transfer\u00eancia de momento se torna independente do di\u00e2metro de bolha d_B . Este resultado \u00e9 de fundamental import\u00e2ncia devido \u00e0 grande dificuldade em se estimar com precis\u00e3o o di\u00e2metro representativo de bolha d_B , tanto devido ao tipo de escoamento em pratos perfurados de destila\u00e7\u00e3o, quanto devido \u00e0 n\u00e3o total esfericidade das bolhas formadas.

4.3.5.2 Equa\u00e7\u00f5es Constitutivas da Transfer\u00eancia Interf\u00e1sica de Massa

Na Equa\u00e7\u00e3o (4.30), o termo Γ_{α} representa a fonte de massa por unidade de volume para o interior da fase α devido \u00e0 transfer\u00eancia de massa na interface.

$$\Gamma_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{N_P} \Gamma_{\alpha\beta} \quad (4.30)$$

A taxa de escoamento de massa por unidade de volume, que se desloca da fase contínua líquida α para a fase dispersa vapor β , pode ser representada da forma apresentada na Equação (4.31).

$$\Gamma_{\alpha\beta} = -\Gamma_{\beta\alpha} \Rightarrow \sum_{\alpha=1}^{N_P} \Gamma_{\alpha} = 0 \quad (4.31)$$

De forma a conhecer a direção do fenômeno de transferência de massa, pode-se representar $\Gamma_{\alpha\beta}$ da forma como apresentado na Equação (4.32).

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \Gamma_{\alpha\beta}^{+} - \Gamma_{\beta\alpha}^{+} \quad (4.32)$$

Na Equação (4.32), os termos $\Gamma_{\alpha\beta}^{+}$ e $\Gamma_{\beta\alpha}^{+}$ representam a taxa mássica positiva por unidade de volume da fase α para a fase β e da fase β para a fase α , respectivamente. Esses termos também possuem a seguinte propriedade, $\Gamma_{\alpha\beta}^{+} > 0$ e $\Gamma_{\beta\alpha}^{+} > 0$.

Para a transferência de massa através da interface, é conveniente expressar a taxa de escoamento de massa por unidade de volume, em termos de fluxos mássicos, como apresentado na Equação (4.33). Na Equação (4.33), o termo $\dot{m}_{\alpha\beta}$ é a taxa de escoamento de massa por unidade de área interfacial, da fase β para a fase α , e $A_{\alpha\beta}$ é a densidade de área superficial entre as fases.

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \dot{m}_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} \quad (4.33)$$

Os termos de fonte de massa que afetam a equação da continuidade, $\Gamma_{\alpha\beta}$ são referidos como fontes primárias de massa. No entanto, pode ser observado claramente que, se transferência de massa ocorre entre as fases, então essa transferência também induz fontes adicionais entre todas as outras equações de transporte. Estas são referenciadas como fontes

secundárias, ou fluxos secundários, devido à transferência de massa. A forma padrão da fonte secundária para uma variável transportada ϕ_α , transportada de uma fase β para uma fase α , é apresentada na Equação (4.34). Sendo o termo $S_{M\alpha}$ encontrado nas equações descritas anteriormente.

$$S_{M\alpha} = \sum_{\beta=1}^{N_P} (\Gamma_{\alpha\beta}^+ \phi_\beta - \Gamma_{\beta\alpha}^+ \phi_\alpha) \quad (4.34)$$

Dessa forma, como citado por Noriler (2007), no processo de transferência de massa entre as fases em pratos de destilação, a taxa líquida de massa que atravessa a fase pelo movimento convectivo do fluido pode ser considerada nula, pois os fenômenos de condensação e vaporização se equilibram. Porém, deve-se observar que a taxa líquida das propriedades devido à vaporização e à condensação não se anula, pois, por exemplo, a entalpia de vaporização e a entalpia de condensação não são as mesmas. Consequentemente, devido à transferência de massa por esses processos convectivos, haverá uma taxa líquida de transferência de energia entre as fases. No entanto, devido à baixa diferença de temperatura e de pressão que ocorre ao longo de um prato de destilação, pode-se negligenciar esta transferência de energia devido à transferência de massa. Adota-se também, como hipótese simplificadora neste estudo, como pequena a influência do movimento de massa total entre as fases sobre a conservação das propriedades e, portanto, negligencia-se o termo de transferência de massa total entre as fases nas equações, assumindo-os como nulos. Esta hipótese é fundamentada no fato de que, além dos baixos gradientes de pressão e temperatura, é baixo também o gradiente de fração mássica dos componentes nas fases ao longo de um prato de destilação.

4.3.5.3 Equações Constitutivas para a Transferência de Espécies Químicas

Da mesma forma como o termo de transferência de momento entre as fases foi tratado anteriormente, o termo de transferência de espécies químicas entre as fases é tratado nesta seção. O termo $Y_{\alpha\beta}$, de transferência de espécies químicas entre as fases, o qual aparece na Equação (4.8) (transferência de espécies químicas), pode ser definido conforme apresentado na Equação (4.35). Nesta equação, o termo k_α^C representa o coeficiente de transferência de

espécies químicas na fase α , $A_{\alpha\beta}$ representa a área interfacial e $y_{A\alpha s}$, $y_{A\alpha}$ representam as frações mássicas do componente A na interface com a fase β e no seio da fase α , respectivamente.

$$\sum_{\beta=1}^{N_F} Y_{\alpha\beta}^A = - \sum_{\beta=1}^{N_F} k_{\alpha}^C A_{\alpha\beta} \rho_{\alpha} (y_{A\alpha s} - y_{A\alpha}) \quad (4.35)$$

Para o caso de um sistema bifásico, no qual se encaixa o sistema em estudo, com a fase α sendo a fase líquida, e a fase β sendo a fase vapor, pode-se escrever as Equações (4.36) e (4.37).

$$\sum_{\beta=1}^{N_F} Y_{\alpha\beta}^A = Y_{\alpha\beta}^A \quad (4.36)$$

$$Y_{\alpha\beta}^A = -Y_{\beta\alpha}^A \quad (4.37)$$

A força motriz para que um componente A presente em uma fase α e em uma fase β , atravesse a interface entre essas duas fases, é a diferença entre os potenciais químicos de A em ambas as fases. Dessa forma, conforme A atravessa a interface entre as fases, a tendência é que o potencial químico de A em ambas as fases se igualem. Assim, é necessário definir a taxa de transferência de massa do componente A que cruza a interface em função do potencial químico de A em ambas as fases. Sabendo que o potencial químico de um componente pode estar relacionado diretamente com a concentração deste componente em cada fase, é importante conhecer a concentração do componente em ambas as fases.

Existem diversas formas de se medir a concentração de um componente A em uma mistura que o contém. Estas formas estão apresentadas nas Equações (4.38) à (4.40), conforme as definições dadas a seguir. Nessas equações, o termo MM_A é a massa molecular do componente A, C_{α} é a concentração molar total da fase α e ρ_{α} é a concentração mássica total da fase α (ANSYS CFX 14.0 - *Solver Theory Guide*, 2011).

$$\rho_{A\alpha} = MM_A C_{A\alpha} \quad (4.38)$$

$$x_{A\alpha} = \frac{C_{A\alpha}}{C_{\alpha}} \quad (4.39)$$

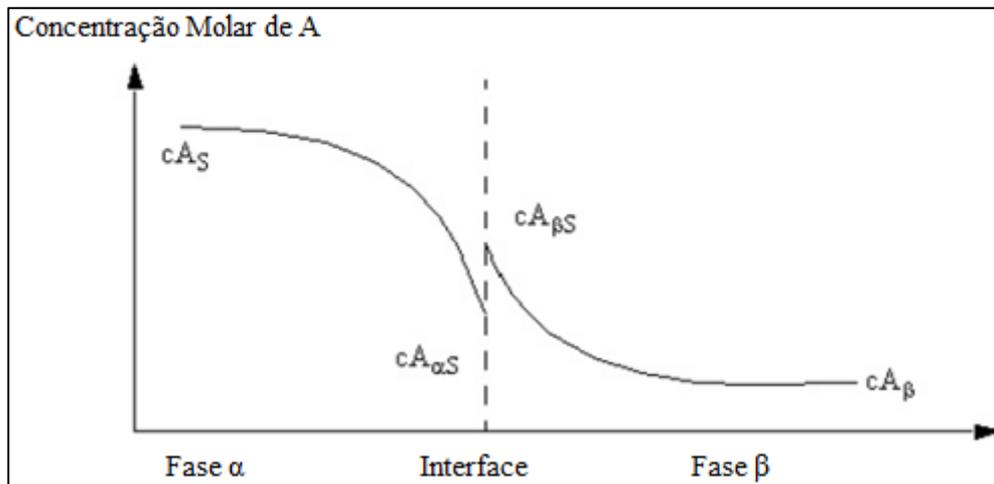
$$y_{A\alpha} = \frac{\rho_{A\alpha}}{\rho_{\alpha}} \quad (4.40)$$

Sendo que: $C_{A\alpha}$ é a concentração molar do componente A na fase α , $\rho_{A\alpha}$ é a concentração mássica do componente A na fase α , $x_{A\alpha}$ é a fração molar do componente A na fase α e $y_{A\alpha}$ é a fração mássica do componente A na fase α .

A transferência do componente A da fase α para a fase β , ou vice versa, pode ser tratada, por exemplo, conforme o “modelo de equilíbrio” ou conforme o “modelo de duas resistências”. O modelo de equilíbrio assume a hipótese de que a camada limite de massa seja suficientemente pequena de modo que não exerce resistência à chegada do componente A do seio da fase até a interface. Assumindo esta hipótese para ambos os lados da interface, então apenas o equilíbrio de potenciais químicos atuará no processo de transferência de espécies químicas (NORILER, 2007; ANSYS CFX 14.0 - *Solver Theory Guide*, 2011).

O modelo de duas resistências considera a resistência à transferência de massa na camada limite de massa em um ou ambos os lados da interface, ou seja, o componente A sofre um resistência para chegar à interface, causada pela camada limite. Além disso, o equilíbrio de potenciais químicos na interface deve ser assumido para que as equações de transferência de massa tenham continuidade do lado da fase α com o lado da fase β .

Neste estudo, foi utilizado o modelo de duas resistências para o estudo da transferência de espécies químicas entre as fases. Devido à presença de descontinuidades na concentração no equilíbrio de fases, conforme apresentado na Figura (4.4), em geral não é possível modelar a transferência de massa utilizando apenas um coeficiente de transferência de massa global. Ao invés disso, é necessário considerar um modelo de duas resistências (ANSYS CFX 14.0 - *Solver Theory Guide*, 2011).

Figura 4.4 - Representação da transferência de massa entre as fases.

Fonte: Adaptado de Ansys CFX 14.0 – *Solver Theory Guide*, 2011.

À vista do apresentado, pode-se modelar a transferência de massa utilizando coeficientes de transferência de massa, definidos em ambos os lados da interface. Esses termos, k_{α}^C e k_{β}^C , são apresentados nas Equações (4.41) e (4.42). A Equação (4.41) representa o fluxo molar do componente A para o seio da fase α a partir da interface. De forma equivalente, a Equação (4.42) representa o fluxo molar do componente A para o seio da fase β a partir da interface. Nessas equações, os termos $C_{A_{\alpha S}}$ e $C_{A_{\beta S}}$ são as concentrações molares do componente A nas interfaces das fases α e β , respectivamente, os termos k_{α}^C e k_{β}^C são os coeficientes de transferência de massa nas fases α e β , respectivamente, e os termos $C_{A_{\alpha}}$ e $C_{A_{\beta}}$ são as concentrações molares do componente A no seio das fases α e β , respectivamente.

$$n_{A\alpha} = k_{\alpha}^C (C_{A_{\alpha S}} - C_{A_{\alpha}}) \quad (4.41)$$

$$n_{A\beta} = k_{\beta}^C (C_{A_{\beta S}} - C_{A_{\beta}}) \quad (4.42)$$

Multiplicando-se as Equações (4.41) e (4.42) pela massa molar do componente A, obtêm-se as Equações (4.43) e (4.44), em termos dos fluxos de massa. A Equação (4.43) representa o fluxo mássico do componente A para o seio da fase α a partir da interface. E, de forma equivalente, a Equação (4.44) representa o fluxo mássico do componente A para o seio da fase β a partir da interface. Nessas equações, os termos $\rho_{A_{\alpha S}}$ e $\rho_{A_{\beta S}}$ são as concentrações mássicas do componente A nas interfaces das fases α e β , respectivamente, os termos k_{α}^C e k_{β}^C

são os coeficientes de transferência de massa nas fases α e β , respectivamente, e os termos $\rho_{A\alpha}$ e $\rho_{A\beta}$ são as concentrações mássicas do componente A no seio das fases α e β , respectivamente.

$$m_{A\alpha} = k_{\alpha}^C(\rho_{A\alpha s} - \rho_{A\alpha}) \quad (4.43)$$

$$m_{A\beta} = k_{\beta}^C(\rho_{A\beta s} - \rho_{A\beta}) \quad (4.44)$$

De forma a eliminar os valores desconhecidos da interface, as equações anteriores devem ser complementadas pelas relações de equilíbrio entre $C_{A\alpha s}$ e $C_{A\beta s}$, e entre $\rho_{A\alpha s}$ e $\rho_{A\beta s}$. É mais conveniente expressar essas relações utilizando uma constante de proporcionalidade que representa a razão de equilíbrio das concentrações molares. Esta constante de proporcionalidade pode ser obtida através da “quase-linearização” da relação de equilíbrio. Esta “quase-linearização” é do tipo apresentado na Equação (4.45), e a partir deste procedimento obtém-se a Equação (4.46) (ANSYS CFX 14.0 - *Solver Theory Guide*, 2011).

$$C_{A\beta s} = f(C_{A\alpha s}) \quad (4.45)$$

$$C_{A\beta s} = K^C C_{A\alpha s} \Rightarrow \rho_{A\beta s} = K^C \rho_{A\alpha s} \quad (4.46)$$

A condição do balanço de massa, Equação (4.47), pode agora ser combinada com a relação de equilíbrio “quase-linearizada” presente na Equação (4.46), para determinar as concentrações mássicas na interface, conforme Equação (4.48).

$$m_{A\alpha} + m_{A\beta} = 0 \quad (4.47)$$

$$\frac{\rho_{A\beta s}}{K^C} = \rho_{A\alpha s} = \frac{k_{\alpha}^C \rho_{A\alpha} + k_{\beta}^C \rho_{A\beta}}{K^C k_{\beta}^C + k_{\alpha}^C} \quad (4.48)$$

A Equação (4.48) pode ser utilizada para eliminar os valores da interface, presentes nas Equações (4.41) à (4.44), de forma a expressar os fluxos mássicos interfaciais em termos

das concentrações mássicas dos seios das fases, conforme apresentado nas Equações (4.49) e (4.50).

$$m_{A\alpha} = -m_{A\beta} = k_{\alpha\beta}^C (K^C \rho_{A\alpha} - \rho_{A\beta}) \quad (4.49)$$

$$\frac{1}{k_{\alpha\beta}^C} = \frac{1}{k_{\alpha}^C} + \frac{K^C}{k_{\beta}^C} \quad (4.50)$$

Desse modo, pode-se calcular a taxa de massa do componente A que cruza a interface conforme as Equações (4.50) e (4.51). Nestas equações, o termo K^C é a constante termodinâmica, o termo $k_{\alpha\beta}^C$ é o coeficiente global de transferência de massa, e o termo $A_{\alpha\beta}$ é a área interfacial por unidade de volume.

$$Y_{\alpha\beta}^A = -Y_{\beta\alpha}^A = k_{\alpha\beta}^C A_{\alpha\beta} (K^C \rho_{A\alpha} - \rho_{A\beta}) \quad (4.51)$$

Como citado anteriormente, o termo K^C , tratada aqui como uma constante termodinâmica, é uma medida conveniente da tendência de uma espécie química se dividir preferencialmente entre as fases líquida e vapor, e é conhecida como “razão de equilíbrio” nos cálculos termodinâmicos de equilíbrio líquido-vapor. Esta razão de equilíbrio, conforme apresentado pela Equação (4.46), pode ser definida também, para uma espécie A, como a razão entre as frações molares do componente A nas fases vapor e líquida (SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2007). Este termo pode ser obtido, dentre outras formas, a partir de clássicas equações de equilíbrio, tais como: lei de Raoult, lei de Raoult Modificada, lei de Henry, procedimento φ - φ , procedimento γ - φ , entre outros, lembrando que as leis citadas anteriormente possuem restrições às quais podem ser utilizadas.

4.4 Coeficientes de Transferência de Massa

4.4.1 Modelo de Higbie

Os coeficientes de transferência de massa, k_{α}^C e k_{β}^C , podem ser calculados de acordo com algumas correlações apresentadas na literatura. De acordo com Rahimi *et al.* (2006) e

Rahimi *et al.* (2012), a teoria de penetração de Higbie vem sendo amplamente utilizada para simular a transferência de massa 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 é o 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 estivesse estagnado e infinitamente profundo (RAHIMI, 2006). Higbie (1935) *apud* Rahimi *et al.* (2006) e Rahimi *et al.* (2012), deduziu que, em uma média temporal, os coeficientes de transferência de massa para o líquido e o gás são dados conforme as Equações (4.52) e (4.53).

$$k_{\alpha}^C = 2 \sqrt{\frac{D_{A\alpha}}{\pi\theta_{\alpha}}} \quad (4.52)$$

$$k_{\beta}^C = 2 \sqrt{\frac{D_{A\beta}}{\pi\theta_{\beta}}} \quad (4.53)$$

Nas Equações (4.52) e (4.53), os termos $D_{A\alpha}$ e $D_{A\beta}$ representam os coeficientes de difusão do componente A nas fases α e β , respectivamente. Os termos θ_{α} e θ_{β} representam o tempo de contato na região de dispersão (*froth region*) para cada fase, sendo apresentados nas Equações (4.54) e (4.55).

$$\theta_{\alpha} = \frac{d_{\beta}}{V_R} \quad (4.54)$$

$$\theta_{\beta} = \frac{d_{\beta}}{V_P} \quad (4.55)$$

Na Equação (4.55), o termo V_P é a velocidade do vapor através das perfurações do prato e o termo V_R é a velocidade média de ascensão das bolhas através da região de intensa mistura líquido-vapor (*froth region*), sendo apresentada na Equação (4.56).

$$V_R = \frac{V_S}{(1 - f_\alpha^{\text{médio}})} \quad (4.56)$$

Segundo Taylor e Krishna (1993) *apud* Rahimi *et al.* (2006), apenas aproximadamente 10% da transferência de massa ocorre devido às bolhas de pequenos diâmetros, enquanto que 90% da transferência de massa é devido às bolhas de maiores diâmetros. Dessa forma, em uma aproximação, o comprimento característico d_β presente nas Equações (4.54) e (4.55), pode ser assumido como sendo o diâmetro principal (ou médio) de bolhas, sendo o valor utilizado neste estudo calculado conforme foi apresentado no final do capítulo de Metodologia.

4.4.2 Modelo SRS (*Surface-Renewal-Stretch*)

O principal objetivo do desenvolvimento do estudo realizado por Jajuee *et al.* (2006), foi estender a teoria da penetração de transferência de massa para sistemas de interação fluido-fluido nos quais ocorrem movimentos do fluido devido à turbulência e à convecção.

Este é um modelo de coeficiente de transferência de massa médio (média temporal) oriundo da equação da continuidade e que incorpora a influência dos movimentos do fluido devido à turbulência e à convecção na avaliação da transferência de massa interfásica. No desenvolvimento da Equação (4.57), foi assumido que as fases em contato são constituídas por fluidos Newtonianos com gás compondo a fase dispersa. O vasto e detalhado desenvolvimento para a obtenção da Equação (4.57), assim como outros fatores estudados, são apresentados em Jajuee *et al.* (2006).

$$k_{\alpha, \text{médio}}^c = \left(\frac{4D_{A\alpha}}{\pi} \sqrt{\frac{V_S g}{\nu_\alpha}} \right)^{1/2} \quad (4.57)$$

Na Equação (4.57), tem-se: $D_{A\alpha}$ é a difusividade do componente A na fase α , ν_α é a viscosidade cinemática da fase α e V_S é a velocidade superficial do gás.

Como pode ser observado na Equação (4.57), um fator importante a ser observado é que não há uma dependência explícita do coeficiente com relação ao diâmetro de bolha. Rahimi *et al.* (2012), após estudar a aplicação do modelo SRS à sistemas nos quais variaram

apenas o diâmetro de bolhas, o autor encontrou que o modelo SRS tem a propriedade de reduzir a sensibilidade dos resultados das simulações com o diâmetro de bolhas.

Assim, nas simulações que utilizaram o modelo SRS, a Equação (4.57) foi aplicada para o coeficiente de transferência de massa da fase líquida e o coeficiente de transferência de massa da fase gasosa foi o mesmo utilizado no modelo de Higbie.

4.4.3 Modelo de Zuiderweg

Zuiderweg (1982) realizou um amplo estudo relacionados à pratos perfurados de coluna de destilação. O autor avaliou diversos aspectos de um prato perfurado, tais como: regimes de escoamento, escoamento sobre as regiões do prato, regiões críticas do escoamento, transferência de massa, eficiência do estágio, entre outros. O autor utilizou como base para o estudo um conjunto de dados fornecidos pela organização FRI (*Fractionation Research Inc.*) para dois tipos de pratos perfurados em escala industrial de 1,2 metros de diâmetro. Para critério de conhecimento, *Fractionation Research Inc.* (FRI) é uma organização que trabalha em cooperação com as indústrias, incluindo muitas das maiores empresas de petróleo, química e engenharia. A unidade experimental está localizada no campus da Universidade Estadual de Oklahoma, em Stillwater, Oklahoma. O principal objetivo dessa organização é pesquisar o desempenho de dispositivos utilizados nas indústrias de separação, visando uma otimização da transferência de massa e energia em escala industrial, proporcionando maiores eficiências dos equipamentos.

Zuiderweg (1982), a partir da análise dos estudos realizados por Ranz e Marshall (1952), a partir do modelo de penetração para a transferência de massa, e baseado juntamente nos dados fornecidos pela FRI, propôs as Equações (4.58) ou (4.59), para o coeficiente de transferência de massa da fase líquida e a Equação (4.60) para o coeficiente de transferência de massa da fase gasosa.

$$k_{\alpha}^C = 0,024D_{A\alpha}^{0,25} \quad (4.58)$$

Ou

$$k_{\alpha}^C = \frac{2,6 \times 10^{-5}}{\mu_{\alpha}^{0,25}} \quad (4.59)$$

$$k_{\beta}^c = \frac{0,13}{\rho_{\beta}} - \frac{0,065}{\rho_{\beta}^2} \quad (4.60)$$

$$(1,0 < \rho_{\beta} < 80 \frac{kg}{m^3})$$

No entanto, Lockett (1986) discute em seu livro um ponto de grande importância a ser observado. O autor ressalta o fato do estudo de Zuiderweg (1982) ter sido totalmente direcionado e validado para dados da FRI, ou seja, para colunas de destilação que operam na separação de hidrocarbonetos, os quais, em sua vasta faixa, podem diferenciar em muito suas propriedades físicas e químicas em relação à outros sistemas. Segundo Lockett (1986), quando as Equações (4.58), (4.59) e (4.60) são aplicadas para sistemas aquosos, que tendem a ser tensão superficial positivo, essas equações predizem baixos valores de eficiências pontuais, com valores em torno de 40%. Esse é um fator que foi avaliado nesse estudo.

4.5 Difusividades

Como pôde ser observado nas equações apresentadas, a difusão do etanol na fase líquida e na fase gasosa influencia diretamente na transferência de massa entre as fases. Dessa forma, é necessário o cálculo dos coeficientes de difusão do etanol em ambas as fases.

O cálculo da difusividade na fase líquida foi realizado de acordo com o método proposto por Leffler e Cullinan (1970) *apud* Treybal (1980). Esse método consiste na Equação (4.61).

$$D_{AB,L}\mu = (D_{BA}^0\mu_A)^{x_A}(D_{AB}^0\mu_B)^{x_B} \left(1 + \frac{d \log \gamma_A}{d \log x_A}\right) \quad (4.61)$$

Na Equação (4.61) o termo D_{AB}^0 representa a difusividade do componente A à diluição infinita no componente B e D_{BA}^0 representa a difusividade de B à diluição infinita em A. O coeficiente de atividade γ_A é obtido a partir do estudo do equilíbrio líquido-vapor do sistema em estudo, como será apresentado na seção do equilíbrio líquido-vapor. O termo $(d \log \gamma_A / d \log x_A)$ pode ser obtido graficamente a partir da inclinação do gráfico de $\log \gamma_A$ versus $\log x_A$. E, por fim, os termos μ_A , μ_B e μ representam as viscosidades das fases A, B e da solução de A e B.

No cálculo das difusividades à diluição infinita utilizou-se a correlação proposta por Wilke e Chang (1955). Ao contrário do caso para a fase gasosa, a difusividade na fase líquida varia apreciavelmente com a concentração. A difusividade em soluções concentradas difere da difusividade para soluções diluídas devido a mudanças na viscosidade com a concentração e também devido a mudanças no grau de não-idealidade das soluções. A correlação proposta por Wilke e Chang (1955) é conforme a Equação (4.62).

$$D_{AB}^0 = \frac{(7,4 \cdot 10^{-8})(\varphi M_B)^{0,5} T}{\mu V_b^{0,6}} \quad (4.62)$$

Na Equação (4.62), o termo φ representa um fator de associação para o solvente, o qual possui valor 2,6 para o caso do solvente ser a água e 1,5 para o caso do solvente ser o etanol, por exemplo. O termo V_b representa o volume molar do soluto no ponto normal de ebulição, T representa a temperatura em Kelvin, M_B representa a massa molecular do solvente e μ a viscosidade da solução.

O volume molar do soluto no ponto normal de ebulição pode ser obtido a partir de correlações presentes na literatura. Neste estudo utilizou-se os métodos de Le Bas (1915) *apud* Poling, Prausnitz e O'Connell (2000) e Tyn e Calus (1975) *apud* Poling, Prausnitz e O'Connell (2000) para critério de comparação.

Para o cálculo da difusividade da fase gasosa utilizou-se a correlação de Wilke e Lee (1955), a qual é apresentada na Equação (4.63).

$$D_{AB,G} = \frac{[3,03 - (0,98/M_{AB}^{1/2})](10^{-3})T^{3/2}}{P M_{AB}^{1/2} \sigma_{AB}^2 \Omega_D} \quad (4.63)$$

O termo Ω_D na Equação (4.63) representa a integral de colisão e, no caso de misturas gasosas binárias contendo um ou mais componentes polares, a integral de colisão pode ser calculada conforme as Equações (4.64) e (4.65).

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} + \frac{0,19\delta_{AB}^2}{T^*} \quad (4.64)$$

$$T^* = \frac{kT}{\varepsilon_{AB}} \quad (4.65)$$

Os parâmetros da Equação (4.64) possuem os seguintes valores: $A = 1,06036$, $B = 0,15610$, $C = 0,19300$, $D = 0,47635$, $E = 1,03587$, $F = 1,52996$, $G = 1,76474$, $H = 3,89411$.

Assim, em complemento à Equação (4.63) à (4.65), seguem as Equações (4.66) à (4.72).

$$\frac{\varepsilon}{k} = 1,18(1 + 1,3\delta^2)T_b \quad (4.66)$$

$$\frac{\varepsilon_{AB}}{k} = \left(\frac{\varepsilon_A}{k} \frac{\varepsilon_B}{k}\right)^{1/2} \quad (4.67)$$

$$\delta = \frac{1,94 \times 10^3 \mu_p^2}{V_b T_b} \quad (4.68)$$

$$\delta_{AB} = (\delta_A \delta_B)^{1/2} \quad (4.69)$$

$$\sigma = \left(\frac{1,585 V_b}{1 + 1,3\delta^2}\right)^{1/3} \quad (4.70)$$

$$\sigma_{AB} = (\sigma_A \sigma_B)^{1/2} \quad (4.71)$$

$$M_{AB} = 2[(1/M_A) + (1/M_B)]^{-1} \quad (4.72)$$

Nas Equações (4.64) à (4.72), o termo ε representa a energia característica de Lennard-Jones, σ representa o comprimento característico de Lennard-Jones, k é a constante de Boltzmann, δ é o parâmetro polar, V_b é o volume molar no ponto normal de ebulição, μ_p é o momento dipolar e T_b é o ponto normal de ebulição (1 atm).

4.6 O Particle Model

A transferência interfacial de momento, massa e energia é diretamente relacionada com a área superficial de contato entre duas fases. Esta área é caracterizada pela área interfacial por unidade de volume entre essas fases, conhecida como densidade de área interfacial, $A_{\alpha\beta}$. Assim, o chamado *Particle Model* é um modelo utilizado para descrever essas transferências de propriedades interfaciais entre duas fases e, para isso, considera uma das fases como contínua (fase α) e a outra como dispersa (fase β). Assim, a área superficial por unidade de volume, $A_{\alpha\beta}$, é calculada assumindo que a fase dispersa está presente no sistema como partículas esféricas de diâmetro característico d_β . Mais informações, assim como as equações utilizadas por esse modelo, são detalhadas em ANSYS CFX 14.0 – *Theory Guide*, 2011.

4.7 Turbulência

O escoamento laminar é um tipo ordenado de escoamento, onde as partículas de um fluido se movem ao longo de trajetórias bem definidas, formando “lâminas”, no qual essas “lâminas” se movem uma sobre as outras de maneira ordenada.

Ao longo do escoamento dos fluidos, pequenas perturbações podem ocorrer e eventualmente conduzir o escoamento a um estado caótico e aleatório. O início da turbulência depende da razão entre as forças de inércia e as forças viscosas, a qual é indicada pelo número de Reynolds. Para baixos números de Reynolds, as forças inerciais são menores que as forças viscosas, e a ocorrência natural das perturbações são dissipadas ao longo do fluxo e o escoamento permanece laminar. Assim, no regime laminar a viscosidade atua no fluido no sentido de amortecer a tendência de surgimento da turbulência. Para altos valores do número de Reynolds, as forças inerciais são suficientemente grandes para amplificar as perturbações, e a transição para o regime turbulento começa a ocorrer (TU; YEOH; LIU, 2008).

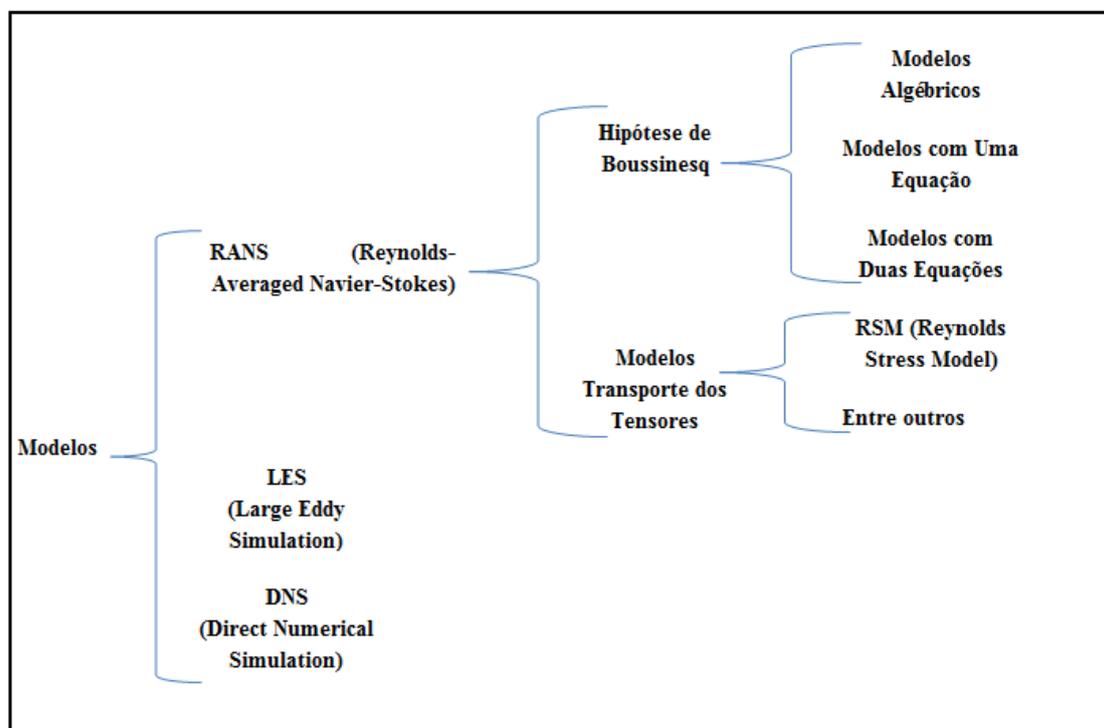
A transição de escoamento laminar para escoamento turbulento faz com que o movimento se torne intrinsecamente instável, onde a velocidade e todas as outras características do escoamento variam de maneira aleatória e caótica. A turbulência está associada com a existência de flutuações aleatórias no fluido. Essas flutuações turbulentas sempre apresentam características espaciais tridimensionais. Uma análise visual dos escoamentos turbulentos revelaram estruturas rotacionais, chamadas turbilhões, que

apresentam uma ampla faixa de escalas de comprimento e de velocidade. Os maiores turbilhões são dominados pelos efeitos inerciais ao invés dos efeitos viscosos, e são, portanto, efetivamente invíscidos (TU; YEOH; LIU, 2008).

4.7.1 Modelos de Turbulência

Os modelos utilizados para o tratamento da turbulência em escoamentos podem ser classificados, de maneira geral, como segue na Figura (4.5).

Figura 4.5 – Classificação geral dos modelos de turbulência.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Neste estudo, utilizou-se um modelo de turbulência contido na classificação RANS que segue a hipótese de Boussinesq e, dessa forma, serão apenas esses modelos discutidos detalhadamente a seguir.

As equações de Navier-Stokes são equações instantâneas nas quais podem ser aplicadas médias estatísticas para serem obtidas soluções numéricas. Uma das médias possíveis de ser aplicada é a média temporal que, aplicada às equações, resultam em termos adicionais conhecidos como fluxos de Reynolds. Para estimar os valores dos fluxos de Reynolds, utilizam-se os modelos de turbulência que, dependendo das hipóteses adotadas,

geram equações de transporte adicionais (NORILER, 2007). Os modelos RANS, termo que significa *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*, estão incluídas nesse contexto. Os modelos RANS podem ser classificados em modelos que seguem a Hipótese de Boussinesq e os modelos que não a seguem. Boussinesq propôs em 1877 que a tensão gerada pela turbulência, representada pelo tensor de Reynolds, fosse tratado de maneira análoga à tensão de origem molecular. Assim, esta hipótese assume que as tensões de Reynolds são proporcionais aos gradientes de velocidade média, implicando no surgimento do conceito de viscosidade turbulenta.

Os modelos RANS podem ser classificados de acordo com o tratamento dado às equações adicionais que surgem quando se efetua a média temporal das equações de Navier-Stokes, como citado anteriormente, e são: modelos algébricos, modelos de uma equação e modelos de duas equações.

Os modelos algébricos são os modelos mais simples existentes, nos quais equações algébricas são utilizadas para avaliar a viscosidade turbulenta. Uma vez avaliada a viscosidade turbulenta, o tensor de Reynolds é avaliado utilizando a hipótese de Boussinesq (DAVIDSON, 2003). Como exemplo de modelo algébrico tem-se o Modelo do Comprimento de Mistura de Prandtl.

Nos modelos de uma equação, uma equação diferencial de transporte é resolvida para uma quantidade turbulenta (geralmente a energia cinética turbulenta) e uma segunda quantidade turbulenta (geralmente uma escala de comprimento turbulenta) deve ser fornecida, e geralmente uma expressão algébrica é utilizada. Uma grande desvantagem desse tipo de modelo, e a razão pela qual ele não é aplicado para os escoamentos em geral, é que não é possível encontrar uma expressão algébrica geral para o comprimento de escala (DAVIDSON, 2003).

Nos modelos de duas equações, como o próprio nome diz, duas equações diferenciais de transporte são utilizadas para descrever duas grandezas escalares, as quais geralmente são a energia cinética turbulenta e sua dissipação. A partir daí o tensor de Reynolds é avaliado a partir da hipótese de Boussinesq, sendo a viscosidade turbulenta obtida a partir das duas grandezas escalares (DAVIDSON, 2003). Como exemplo de modelos de duas equações tem-se os modelos κ - ϵ padrão proposto por Launder e Spalding (1972, 1974) e seus derivados e o modelo κ - ω . Os modelos que utilizam a hipótese de Boussinesq são isotrópicos, devido às condições da própria hipótese.

Os modelos de turbulência apresentados anteriormente foram expostos em uma ordem crescente de complexidade, capacidade de modelar a turbulência e, conseqüentemente,

esforço e custo computacional. Neste estudo utilizou-se o modelo de turbulência SST (*Shear Stress Transport*), o qual é composto pelos modelos κ - ϵ e κ - ω . Dessa forma, primeiramente serão apresentados em detalhes esses dois modelos e, após isso, será apresentado o modelo SST. As equações a seguir são escritas para a fase líquida, sendo que as mesmas equações são aplicadas para a fase vapor.

Neste estudo a turbulência foi considerada apenas para a fase líquida, enquanto a fase vapor foi considerada como laminar. Esta aproximação também foi utilizada por Krishna *et al.* (1999b), Rahimi *et al.* (2006), Gesit *et al.* (2003), Noriler *et al.* (2008) e Noriler *et al.* (2010). Segundo Noriler *et al.* (2010), esta aproximação se justifica pelo fato de a energia cinética turbulenta associada com a fase vapor representar apenas 0,1% da energia cinética turbulenta.

4.7.1.1 O Modelo k- ϵ Padrão

O modelo k- ϵ é um modelo de duas equações amplamente difundido, sendo aplicado e validado para diversas aplicações industriais, entre essas a destilação, conforme apresentado na Tabela (2.2). Este modelo apresenta um bom equilíbrio entre precisão e robustez. O modelo k- ϵ é constituído por duas equações diferenciais de transporte, uma para a energia cinética turbulenta k, e outra para o termo ϵ , que representa a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta por unidade de massa. O modelo k- ϵ padrão foi desenvolvido por Launder e Spalding (1972, 1974) e ambas as equações diferenciais para k e ϵ podem ser obtidas diretamente a partir das equações de Navier-Stokes (ALHO e ILHA, 2006).

O modelo k- ϵ padrão descreve com precisão o escoamento nas regiões de corrente livre. No entanto, as regiões próximas às superfícies são caracterizadas por intensos gradientes das propriedades do escoamento. Dessa forma, uma descrição detalhada das propriedades do escoamento nestas regiões requer um certo grau de refinamento do domínio, aumentando também o esforço computacional requerido. Este fato implica em uma desvantagem para o modelo k- ϵ padrão, pois, em regiões próximas ao ponto de separação do escoamento, o modelo k- ϵ prevê escalas de comprimento ($L_e = k^{3/2}/\epsilon$) muito elevadas. Consequentemente, os níveis de turbulência são superestimados e o escoamento tende a não se separar quando a evidência experimental indica o contrário. Esse problema é ainda mais crítico para baixos números Reynolds (ALHO e ILHA, 2006).

Dessa forma, nota-se que o modelo k- ϵ é falho na previsão de escoamentos afastados da condição de equilíbrio local, sendo essa deficiência considerável o bastante para que esse modelo seja utilizado com cautela na previsão de escoamentos complexos (ALHO e ILHA, 2006).

4.7.1.2 O Modelo κ - ϵ Padrão: Equacionamento

Neste modelo, a viscosidade turbulenta é relacionada à energia cinética turbulenta (k) e sua taxa de dissipação (ϵ) da forma como apresentado na Equação (4.73), escrita para uma fase α qualquer.

$$\mu_{\alpha}^{turb} = C_{\mu} \rho_{\alpha} \frac{k_{\alpha}^2}{\epsilon_{\alpha}} \quad (4.73)$$

Na Equação (4.73), 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.

Dessa forma, necessita-se de duas equações de conservação para os escalares k e ϵ , as quais são representadas pelas Equações (4.74) e (4.75).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} k_{\alpha}) + \nabla \cdot \left\{ f_{\alpha} \left[\rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} k_{\alpha} - \left(\mu_{\alpha} + \frac{\mu_{\alpha}^{turb}}{\sigma_k} \right) \nabla k_{\alpha} \right] \right\} \\ = f_{\alpha} (\mathbf{P}_{\alpha} + P_{kb} - \rho_{\alpha} \epsilon_{\alpha}) \end{aligned} \quad (4.74)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \epsilon_{\alpha}) + \nabla \cdot \left\{ f_{\alpha} \left[\rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \epsilon_{\alpha} - \left(\mu_{\alpha} + \frac{\mu_{\alpha}^{turb}}{\sigma_{\epsilon}} \right) \nabla \epsilon_{\alpha} \right] \right\} \\ = f_{\alpha} \frac{\epsilon_{\alpha}}{k_{\alpha}} (C_{\epsilon 1} (\mathbf{P}_{\alpha} + P_{\epsilon b}) - C_{\epsilon 2} \rho_{\alpha} \epsilon_{\alpha}) \end{aligned} \quad (4.75)$$

Nas equações anteriores, os termos $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, σ_k e σ_{ϵ} são as constantes do modelo, os termos P_{kb} e $P_{\epsilon b}$ representam a influência das forças de flutuação, e o termo \mathbf{P}_{α} representa a produção de turbulência devido às forças viscosas. O termo \mathbf{P}_{α} é representado pela Equação (4.76).

$$\mathbf{P}_\alpha = \mu_\alpha^{turb} \nabla \mathbf{v}_\alpha \cdot [\nabla \mathbf{v}_\alpha + (\nabla \mathbf{v}_\alpha)^T] - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_\alpha (3\mu_\alpha^{turb} \nabla \cdot \mathbf{v}_\alpha + \rho_\alpha k_\alpha) \quad (4.76)$$

Para escoamentos incompressíveis, $\nabla \cdot \mathbf{v}$ é muito pequeno e o segundo termo da Equação (4.76) pode ser desprezado, obtendo-se a Equação (4.77).

$$\mathbf{P}_\alpha = \mu_\alpha^{turb} \nabla \mathbf{v}_\alpha \cdot [\nabla \mathbf{v}_\alpha + (\nabla \mathbf{v}_\alpha)^T] \quad (4.77)$$

Segundo Alho e Ilha (2006), os termos C_μ , $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k e σ_ε , constantes do modelo e presentes das equações anteriores, possuem os seguintes valores: $C_\mu = 0,09$; $C_{\varepsilon 1} = 1,44$; $C_{\varepsilon 2} = 1,92$; $\sigma_k = 1,00$; $\sigma_\varepsilon = 1,30$. Esses valores foram obtidos a partir da correlação de dados experimentais de diversos escoamentos turbulentos.

4.7.1.3 O Modelo k- ω

Em adição à equação de transporte para a energia cinética turbulenta, Kolmogorov (1942) sugeriu como segundo parâmetro a taxa de dissipação de energia por unidade de volume e tempo, ω . O termo ω também pode ser referido como uma “frequência média”. No entanto, a formulação mais extensivamente testada desse modelo é a proposta por Wilcox (1998), usualmente referenciada na literatura por modelo κ - ω padrão (ALHO e ILHA, 2006).

O modelo k- ω apresenta várias vantagens em relação ao modelo k- ε . Entre essas vantagens, Alho e Ilha (2006) citam as seguintes: esse modelo fornece previsões bastante precisas do escoamento em camada limite bidimensional, tanto em condições de gradientes de pressão favoráveis e adversos; esse modelo não requer formulações específicas para baixos números de Reynolds, evitando, assim, a utilização de complexas funções não-lineares de amortecimento requeridas pelo modelo k- ε e por esta razão é mais preciso e robusto; com o modelo κ - ω as equações de transporte do modelo podem ser integradas diretamente na subcamada laminar; formulações para baixos números de Reynolds para o modelo k- ε requerem uma resolução de elementos bem próxima à parede, enquanto que para o modelo k- ω uma resolução da ordem de dez vezes mais distante que a exigida no modelo k- ε já é satisfatória. Conseqüentemente, o refinamento do domínio no modelo k- ω apresenta uma densidade de elementos comparativamente menor do que a requerida pelo modelo k- ε (ALHO e ILHA, 2006).

No entanto, a principal limitação do modelo $k-\omega$ está relacionada à sua sensibilidade a variações nas condições de corrente livre. Em alguns casos, pequenas variações no valor de ω nas condições de contorno de entrada levam a variações significativas nos resultados (ALHO e ILHA, 2006).

4.7.1.4 O Modelo $k-\omega$: Equacionamento

Neste modelo, a viscosidade turbulenta é relacionada à energia cinética turbulenta (k) e à frequência turbulenta (ω) da forma como apresentado na Equação (4.78).

$$\mu_{\alpha}^{turb} = \rho_{\alpha} \frac{k_{\alpha}}{\omega_{\alpha}} \quad (4.78)$$

Dessa forma, necessita-se de duas equações de conservação para os escalares k e ω , as quais são representadas pelas Equações (4.79) e (4.80).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} k_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} k_{\alpha}) \\ = \nabla \cdot \left[f_{\alpha} \left(\mu_{\alpha} + \frac{\mu_{\alpha}^{turb}}{\sigma_k} \right) \nabla k_{\alpha} \right] + f_{\alpha} (\mathbf{P}_{\alpha} + P_{kb} - \beta' \rho_{\alpha} k_{\alpha} \omega_{\alpha}) \end{aligned} \quad (4.79)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \omega_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \omega_{\alpha}) \\ = \nabla \cdot \left[f_{\alpha} \left(\mu_{\alpha} + \frac{\mu_{\alpha}^{turb}}{\sigma_{\omega}} \right) \nabla \omega_{\alpha} \right] \\ + f_{\alpha} \left(\alpha \frac{\omega_{\alpha}}{\kappa_{\alpha}} \mathbf{P}_{\alpha} + P_{\omega b} - \beta \rho_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 \right) \end{aligned} \quad (4.80)$$

Nas equações anteriores, os termos β' , α , β , σ_k e σ_{ω} são as constantes do modelo, os termos P_{kb} e $P_{\omega b}$ representam a influência das forças de flutuação, e o termo \mathbf{P}_{α} representa a produção de turbulência devido às forças viscosas. O termo \mathbf{P}_{α} é representado pela Equação (4.77) apresentada anteriormente.

Segundo Alho e Ilha (2006), os termos β' , α , β , σ_k e σ_{ω} , constantes do modelo e presentes nas equações anteriores, possuem os seguintes valores: $\beta' = 0,09$; $\alpha = 5/9$; $\beta =$

0,075; $\sigma_k = 2,00$; $\sigma_\omega = 2,00$. Esses valores foram obtidos a partir da correlação de dados experimentais de diversos escoamentos turbulentos.

4.7.1.5 O Modelo SST (*Shear Stress Transport*)

As deficiências apresentadas pelo modelo k- ω em relação à sensibilidade a variações nas condições de corrente livre representa uma característica indesejável do modelo. Da mesma forma, as deficiências apresentadas pelo modelo k- ϵ em relação às más estimativas de parâmetros próximos a parede, para escoamentos complexos, também representa uma característica indesejável do modelo. Como solução para esse problema, Menter (1994) desenvolveu o modelo SST – *Shear Stress Transport*, que consiste em um aperfeiçoamento do modelo *Baseline* k- ω (BSL k- ω), proposto originalmente pelo próprio autor (Menter (1994)). O modelo SST não consiste em um novo modelo em si, mas na composição entre os modelos de k- ω e k- ϵ , constituindo, assim, em um modelo composto por dois conjuntos de equações (ALHO e ILHA, 2006).

Este modelo permite um transporte adequado das tensões cisalhantes, resultando assim, em predições acuradas da separação sob condições de adversos gradientes de pressões. Neste modelo, as equações de transporte para o k- ω são mais utilizadas na região próxima à parede, enquanto as equações de transporte para k- ϵ são mais adotadas na região externa. A ponderação da contribuição de cada um dos dois modelos (k- ω e k- ϵ) no modelo SST, é realizada por meio de uma função de mistura da forma apresentada na Equação (4.81). Sendo a função de mistura F_1 equivalente à unidade na parede e decaindo para o valor zero na região externa à camada limite, e os termos ϕ representam as contribuições de cada modelo (ALHO E ILHA, 2006).

$$\phi_3 = F_1\phi_1 + (1 - F_1)\phi_2 \quad (4.81)$$

4.7.1.6 O Modelo SST (*Shear Stress Transport*): Equacionamento

O equacionamento do modelo SST é da forma como apresentado nas Equações (4.82) à (4.86), escritas para uma fase α qualquer.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_\alpha \rho_\alpha k_\alpha) + \nabla \cdot (f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha k_\alpha) \\ = \nabla \cdot \left[f_\alpha \left(\mu_\alpha + \frac{\mu_\alpha^{turb}}{\sigma_{k_2}} \right) \nabla k_\alpha \right] + f_\alpha (\mathbf{P}_\alpha + P_{kb} - \beta' \rho_\alpha k_\alpha \omega_\alpha) \end{aligned} \quad (4.82)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_\alpha \rho_\alpha \omega_\alpha) + \nabla \cdot (f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \omega_\alpha) \\ = \nabla \cdot \left[f_\alpha \left(\mu_\alpha + \frac{\mu_\alpha^{turb}}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega_\alpha \right] \\ + f_\alpha \left[(1 - F_{1\alpha}) 2\rho_\alpha \frac{1}{\sigma_{\omega_2}} \nabla k_\alpha \omega_\alpha + \alpha_2 \frac{\omega_\alpha}{k_\alpha} \mathbf{P}_\alpha - \beta_2 \rho_\alpha \omega_\alpha^2 \right] \end{aligned} \quad (4.83)$$

$$F_{1\alpha} = \tanh(\arg_{1\alpha}^4) \quad (4.84)$$

$$\arg_{1\alpha} = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k_\alpha}}{\beta' \omega_\alpha y}, \frac{500 v_\alpha}{y^2 \omega_\alpha} \right), \frac{4\rho_\alpha k_\alpha}{CD_{k\omega\alpha} \sigma_{\omega_2} y^2} \right] \quad (4.85)$$

$$CD_{k\omega\alpha} = \max \left(2\rho_\alpha \frac{1}{\sigma_{\omega_2} \omega_\alpha} \nabla k_\alpha \nabla \omega_\alpha, 1.10^{-10} \right) \quad (4.86)$$

A proposição sugerida por Menter, de ser adotado um limitador para o valor da viscosidade turbulenta, de modo a corrigir a deficiência do modelo *Baseline k - ω*, o qual ainda falha na previsão do ponto de separação do escoamento em superfícies lisas, é conforme as Equações (4.87) à (4.90). Sendo, nestas equações, o termo S representando uma medida invariante da taxa de deformação e F_2 uma função de mistura semelhante a F_1 , como apresentado na Equação (4.84).

$$v_\alpha^{turb} = \frac{a_1 k_\alpha}{\max(a_1 \omega_\alpha, S F_2)} \quad (4.87)$$

$$v_\alpha^{turb} = \frac{\mu_\alpha^{turb}}{\rho_\alpha} \quad (4.88)$$

$$F_{2\alpha} = \tanh(\arg_{2\alpha}^2) \quad (4.89)$$

$$arg_{2\alpha} = \max\left(\frac{2\sqrt{k_\alpha}}{\beta'\omega_\alpha y}, \frac{500\nu_\alpha}{y^2\omega_\alpha}\right) \quad (4.90)$$

4.8 Sistema Bifásico Líquido-Vapor

Sob o ponto de vista da transferência de massa, o sistema em estudo é composto por duas fases, uma líquida considerada aqui como a fase α e uma fase gasosa considerada aqui como a fase β , ambas compostas por água e etanol, sendo o etanol considerado como um componente A. Sabe-se que, normalmente, a concentração de A em cada fase não é a mesma. No entanto, existe uma curva de equilíbrio relacionando as concentrações de A em ambas as fases no equilíbrio, a qual fornece importantes informações em relação ao sistema em estudo. Para misturas binárias, a curva de equilíbrio depende da temperatura e da pressão e possui a expressão geral apresentada nas Equações (4.91) e (4.92).

$$x_A^\alpha = f(x_A^\beta) \quad (4.91)$$

$$K_A^c = \frac{y_A}{x_A} \quad (4.92)$$

Na Equação (4.92) o termo y_A representa a fração molar de A na fase vapor, o termo x_A representa a fração molar de A na fase líquida e o termo K_A^c a razão de equilíbrio ou constante termodinâmica.

Existem diferentes maneiras e métodos de se calcular a grandeza K_A^c , ou seja, a concentração de um componente A numa fase β em função da concentração do componente A numa fase α . A seguir será apresentado um método baseado no equilíbrio de potenciais químicos entre as fases.

Assumindo a hipótese de que não existe resistência à transferência de massa na interface das fases, tem-se a condição de equilíbrio de potenciais químicos na interface e, assim, as equações de transferência de massa possuem continuidade do lado de uma fase α com o lado de uma fase β . Assumindo esta hipótese, para o caso líquido-vapor contendo o componente A, tem-se a Equação (4.93).

$$\mu_A^L = \mu_A^V, \quad A = 1, N \quad (4.93)$$

Sabe-se que o potencial químico do componente A em cada fase está relacionado com as interações do sistema com o meio ambiente em questão através da troca de massa; sendo que a força motriz para a transferência de massa do componente A de uma fase para a outra é a diferença de potencial químico em cada fase (TESTER e MODELL, 1997).

No entanto, esta abordagem por potencial químico tem o inconveniente de que no caso de baixas pressões o potencial químico do componente tende rapidamente ao infinito ($-\infty$), devido à própria definição do potencial químico, que não será apresentada neste texto pois não é o foco do estudo, porém é descrita em detalhes em Tester e Modell (1997) e Giordano (2013). Assim, as grandes variações sofridas por μ_A a baixas pressões tornam pouco prático o uso direto desta propriedade. Para contornar esse inconveniente, no início do século XX, Lewis propôs um artifício matemático, ou seja, uma mudança de variáveis através da definição da grandeza fugacidade. Todo o desenvolvimento desse artifício é apresentado em Tester e Modell (1997) e Giordano (2013).

A grande vantagem do exposto anterior é o fato de que enquanto o potencial químico tende ao infinito ($-\infty$) à baixas pressões ($P \rightarrow 0$), a fugacidade, por sua vez, tem o comportamento de que quando a pressão tende a zero a fugacidade também tende a zero. Dessa forma, ao invés de resolver a Equação (4.93), tem-se que resolver a Equação (4.94) (GIORDANO, 2013).

$$\hat{f}_A^L = \hat{f}_A^V, \quad A = 1, N \quad (4.94)$$

Na Equação (4.94), o termo \hat{f}_A^L representa a fugacidade do componente A na mistura presente na fase líquida, e assim por diante. Dessa forma, é neste contexto que está contido o modelo utilizado neste estudo para o cálculo da constante de equilíbrio, K_A^c . O modelo utilizado para esta finalidade foi o procedimento $\gamma - \phi$, o qual pode ser escrito na forma da Equação (4.95).

$$y_A \hat{\phi}_A^V P = x_A \gamma_A \phi_A^{sat} P_A^{sat} \quad (4.95)$$

Considerando a fase vapor como sendo ideal ($\hat{\phi}_A^{gi} = 1$), ou ainda, considerando os coeficientes de fugacidade do componente A na mistura da fase vapor e na saturação como sendo iguais ($\hat{\phi}_A^V = \phi_A^{sat}$), tem-se a Equação (4.96) ou a Equação (4.97), que foi a forma do método $\gamma - \phi$ utilizado neste trabalho.

$$y_A P = x_A \gamma_A P_A^{sat} \quad (4.96)$$

$$K_A^c = \frac{\gamma_A P_A^{sat}}{P} \quad (4.97)$$

Nas Equações (4.95) a (4.97), o termo $\hat{\phi}_A^V$ representa o coeficiente de fugacidade do componente A na mistura da fase vapor, ϕ_A^{sat} representa o coeficiente de fugacidade de A na saturação, P_A^{sat} é a pressão de saturação do componente A, γ_A é o coeficiente de atividade do componente A na fase líquida, y_A e x_A são as frações molares do componente A nas fases vapor e líquida, respectivamente, P é a pressão do sistema e K_A^c é a relação das frações molares no equilíbrio.

As equações anteriores foram apresentadas para um componente A qualquer. No entanto, as equações a seguir serão apresentadas para uma mistura binária, sendo os componentes representados pelos índices 1 e 2, por conveniência.

A pressão do sistema pode ser calculada conforme a Equação (4.98), no caso de uma mistura binária. Neste estudo foi considerado o valor de 1 atmosfera.

$$P = x_1 \gamma_1 P_1^{sat} + x_2 \gamma_2 P_2^{sat} \quad (4.98)$$

As pressões de saturação podem ser calculadas pela equação de Antoine, conforme a Equação (4.99) e (4.100), no caso de uma mistura binária. Sendo A_i , B_i e C_i constantes relacionadas aos componentes em estudo, obtidas nesse estudo para os componentes água e etanol a partir de Smith, van Ness e Abbott (2007).

$$\ln P_1^{sat} (kPa) = A_1 - \frac{B_1}{T(^{\circ}C) + C_1} \quad (4.99)$$

$$\ln P_2^{sat} (kPa) = A_2 - \frac{B_2}{T(^{\circ}C) + C_2} \quad (4.100)$$

Sabe-se, da termodinâmica, que para o cálculo do coeficiente de atividade da fase líquida é necessário uma expressão para a energia livre de Gibbs em excesso. O método para o cálculo de γ utilizado neste estudo foi o Método de Wilson. A expressão para a energia livre de Gibbs em excesso, G^E , proveniente do Método de Wilson, é apresentada na Equação (4.101).

$$\frac{G^E}{RT} = -x_1 \ln(x_1 + \Lambda_{12}x_2) - x_2 \ln(x_2 + \Lambda_{21}x_1) \quad (4.101)$$

A relação entre γ e G^E , oriunda da Termodinâmica, é conforme a Equação (4.102).

$$\ln \gamma_i = \left[\frac{\partial \left(\frac{nG^E}{RT} \right)}{\partial n_i} \right]_{T,P,n_j} \quad (4.102)$$

Dessa forma, após a aplicação da Equação (4.101) na Equação (4.102), obtém-se as Equações (4.103) e (4.104), que são as equações do Método de Wilson utilizadas para o cálculo dos coeficientes de atividade numa mistura binária.

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + \Lambda_{12}x_2) + x_2 \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_1 + x_2} \right) \quad (4.103)$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + \Lambda_{21}x_1) - x_1 \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_1 + x_2} \right) \quad (4.104)$$

Os termos Λ_{12} e Λ_{21} são os parâmetros da equação de Wilson e podem ser calculados a partir do coeficiente de atividade à diluição infinita, conforme as Equações (4.105) e (4.106).

$$\ln \gamma_1^{\infty} = -\ln \Lambda_{12} - \Lambda_{21} + 1 \quad (4.105)$$

$$\ln\gamma_2^\infty = -\ln\Lambda_{21} - \Lambda_{12} + 1 \quad (4.106)$$

No cálculo dos parâmetros Λ_{12} e Λ_{21} através do coeficiente γ_i^∞ , Poling, Prausnitz e O'Connell (2001) apresentam as Equações (4.107) e (4.108), cujos parâmetros α , ϵ , ζ e θ são apresentados no mesmo material em função da temperatura e N_1 e N_2 representam o número total de átomos de carbono nas moléculas dos componentes 1 e 2, respectivamente.

$$\log\gamma_1^\infty = \alpha + \epsilon N_1 + \frac{\zeta}{N_1} + \frac{\theta}{N_2} \quad (4.107)$$

$$\log\gamma_2^\infty = \alpha + \epsilon N_2 + \frac{\zeta}{N_2} + \frac{\theta}{N_1} \quad (4.108)$$

4.9 Modelagem do Escoamento Próximo à Parede

A predição do escoamento na camada limite não exerce influência significativa no seio do escoamento multifásico que ocorre em pratos perfurados de destilação, devido à intensa turbulência que ocorre nos mesmos. Assim, para escoamentos multifásicos intensamente turbulentos, como no caso da destilação, a resolução do escoamento próximo à parede e proximidades não tem efeitos significativos sobre a solução, visto que os fenômenos de transferência de quantidade de movimento, calor e massa entre as fases no seio do escoamento são muito mais vigorosos. Assim, um ajuste de y^+ dentro da faixa recomendada pelo modelo de tratamento do escoamento próximo a parede, é em função de garantir estabilidade numérica.

Será discutido em detalhes neste item apenas o modelo utilizado neste estudo, o qual constitui no Tratamento Automático da Parede.

4.9.1 Camada Limite

Devido à presença de rugosidades nas superfícies de grande parte dos equipamentos, regiões junto a essas superfícies são caracterizadas por intensos gradientes das propriedades do escoamento, devido ao fato de que o efeito viscoso nessas regiões tem maior influência sobre o escoamento, reduzindo as flutuações da velocidade próximos às superfícies.

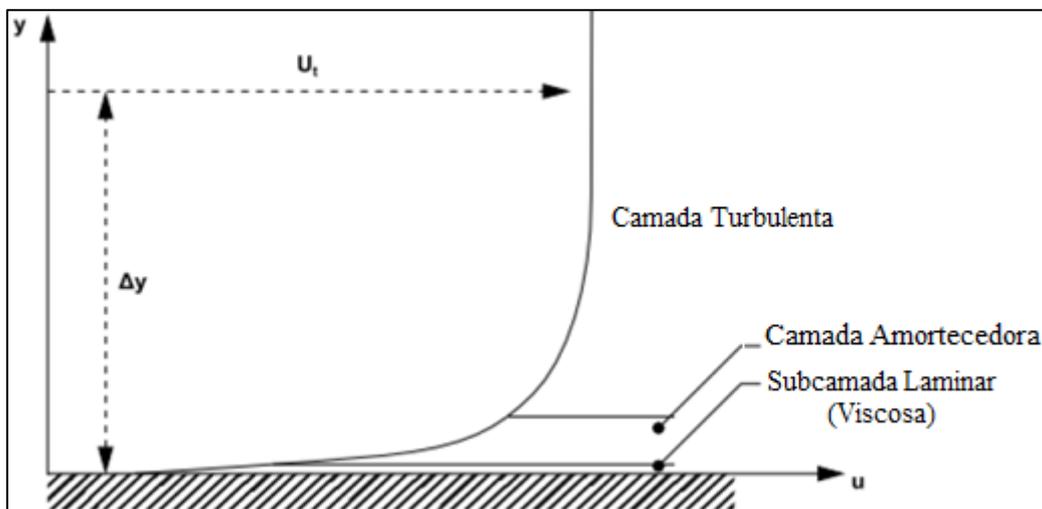
Conforme apresentado por Bird *et al.* (2004), o escoamento de um fluido próximo a uma superfície acarreta em estagnação da camada do fluido próxima a mesma. A estagnação dessa camada atua na redução da velocidade da camada adjacente e superior, que da mesma forma atua na camada superior seguinte e assim por diante. Este processo ocorre até uma distância Δy , conforme apresentado na Figura (4.6), na qual o efeito da redução de velocidade é insignificante. Essa região na qual o fluido é altamente influenciado pela superfície é chamada camada limite.

Uma descrição adequada das propriedades do escoamento nessa região requer um refinamento adequado da malha, juntamente com modelos adequados de tratamento da turbulência e do escoamento próximo à parede, conforme a necessidade fenômeno estudado.

4.9.2 Modelando o Escoamento Próximo à Parede

De acordo com análises experimentais e matemáticas, a região próxima a uma parede pode ser subdividida em três camadas, conforme apresentado na Figura (4.6).

Figura 4.6 - Representação das subcamadas na região próxima da superfície.



Fonte: Adaptado de Ansys CFX 14.0 - *Modeling Guide*, 2011.

Conforme pode ser observado na Figura (4.6), a camada mais próxima da superfície é chamada de subcamada viscosa, na qual o escoamento é preferencialmente laminar e a viscosidade molecular predomina e atua de forma importante sobre a transferência de calor e momento. Mais distante da parede encontra-se a região chamada de camada turbulenta, na

qual os processos de transporte são dominados pela turbulência. Finalmente, entre a subcamada viscosa e a camada turbulenta, existe a região chamada camada amortecedora, na qual os efeitos da viscosidade molecular e os efeitos turbulentos são de igual importância. Essas três camadas constituem a região denominada camada interna do escoamento, enquanto as regiões restantes são chamadas regiões externas (ANSYS CFX 14.0 - *Modeling Guide*, 2011).

O parâmetro y^+ é de fundamental importância no estudo do escoamento em regiões próximas às paredes, e é definido conforme as Equações (4.109) e (4.110) (ANSYS CFX 14.0 - *Modeling Guide*, 2011).

$$y^+ = \frac{\rho \Delta y u_\tau}{\mu} \quad (4.109)$$

$$u_\tau = \left(\frac{\tau_\omega}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.110)$$

Na Figura (4.6) e nas equações anteriores, u_τ é a velocidade de atrito, U_t é a velocidade tangente à parede na distância Δy a partir da parede, Δy é a distância entre o primeiro nó da malha e a parede, y^+ é a distância adimensional a partir da parede e τ_ω é a tensão de cisalhamento na parede.

O termo y^+ , que representa a distância adimensional a partir da parede, é utilizada em CFD para checar a localização do primeiro nó da malha longe da parede, ou seja, para representar a distância na qual o primeiro nó longe da parede está localizado. Dessa forma, quanto menor o valor de y^+ , menor será o tamanho dos volumes finitos que compõem a malha nas regiões próximas às paredes.

Neste estudo foi utilizado o modelo de turbulência SST juntamente com o Tratamento Automático de Parede.

4.9.2.1 Tratamento Automático da Parede

O Tratamento Automático Próximo à Parede alterna o tratamento próximo à superfície automaticamente entre os métodos de funções de parede (escalável) para os

métodos de baixos números de Reynolds, conforme a malha é refinada. Esses dois métodos são descritos brevemente a seguir.

O Método da Função de Parede utiliza fórmulas empíricas para fornecer condições adequadas próximas à parede sem resolver a camada limite, e, assim, utiliza menos tempo computacional. Assim, utiliza-se como uma aproximação numérica, por exemplo, que um perfil logarítmico de velocidades aproxima de forma adequada a distribuição de velocidades próxima à parede, ao invés de se resolver completamente o perfil de velocidades nessa região. No *software* CFX, esse método é utilizado para todos os modelos de turbulência baseados na equação para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ϵ) (ANSYS CFX 14.0 - *Modeling Guide*, 2011).

Já o Método de Baixos Números de Reynolds resolve os detalhes do perfil da camada limite a partir da utilização de malhas com escalas de comprimentos muito pequenas na direção normal à parede. Modelos de turbulência baseados na equação para a frequência média (ω) são adequados para o método de baixo número de Reynolds. Este tipo de método requer malhas muito refinadas na região próxima à parede e, conseqüentemente, grandes números de nós. Conseqüentemente, maiores espaços de armazenamento e maiores tempos computacionais são necessários em comparação ao método da função de parede (ANSYS CFX 14.0 - *Modeling Guide*, 2011).

Assim, como neste estudo o interesse não consiste nos detalhes da camada limite, então não é necessário resolvê-la completamente, devido ao esforço computacional que seria envolvido e às restrições na resolução da malha que seria necessária.

4.10 Critérios para a Geração da Malha

Conforme citado anteriormente, nos escoamentos turbulentos que ocorrem em pratos perfurados, não há o interesse em resolver o perfil completo de velocidades dentro da camada limite. No entanto, embora o tratamento automático da parede seja útil na redução do tempo computacional, há uma limitação de sua aplicabilidade às situações nas quais esse modelo é válido.

Segundo Ansys CFX – *Help Guides* (2007) *apud* Verardi (2008), deve-se construir uma malha com o parâmetro y^+ em acordo com os requeridos pelo modelo de tratamento do

escoamento próximo à parede. O valor de y^+ indicado para o caso da utilização do tratamento automático próximo à parede é de $y^+ < 200$. No caso do tratamento com função de parede escalável a faixa recomendada é $20 \leq y^+ \leq 100$ e para o tratamento à baixo número de Reynolds recomenda-se $y^+ \leq 2$. Assim, as malhas numéricas utilizadas neste estudo foram elaboradas para atender a condição de y^+ especificada para o modelo de parede utilizado, que nesse caso foi o modelo de tratamento automático próximo à parede $y^+ < 200$.

Para o cálculo do y^+ , utilizou-se as Equações (4.109) e (4.110). Pode-se notar que é necessário conhecer a velocidade de atrito u_τ e, conseqüentemente, necessita-se conhecer o fator de atrito. Para o cálculo do fator de atrito utilizou-se o método contido em Coker (2010), conforme apresentado na seqüência.

Coker (2010) apresenta um método de cálculo do número de Reynolds para pratos perfurados. A importância do cálculo do número de Reynolds está em conhecer a relação existente entre as forças de inércia e as forças viscosas atuando sobre os fluidos presentes sobre o prato perfurado. A partir do conhecimento desse número adimensional pode-se conhecer o regime de escoamento sobre o prato. O procedimento indicado por Coker (2010) consiste em utilizar um raio hidráulico (que se relaciona a um diâmetro hidráulico) como comprimento característico no cálculo de Reynolds, de acordo com a Equação (4.111).

$$R_h = \frac{h_f l_{fw}}{2h_f + 12l_{fw}} \quad (4.111)$$

$$l_{fw} = \frac{D_p + l_w}{2} \quad (4.112)$$

Na Equação (4.111), h_f consiste na altura de espuma (massa aerada) sobre o prato e deve ser utilizada em polegada (in); l_{fw} é a largura total do escoamento ao longo do prato e normal ao escoamento, que neste caso pode ser calculado conforme a Equação (4.112) e deve ser utilizada em pés (ft) na Equação (4.111). Na Equação (4.112), o termo D_p é o diâmetro do prato e l_w é o comprimento da represa.

Dessa forma, o número de Reynolds para o escoamento em questão pode ser calculado de acordo com a Equação (4.113) e (4.114).

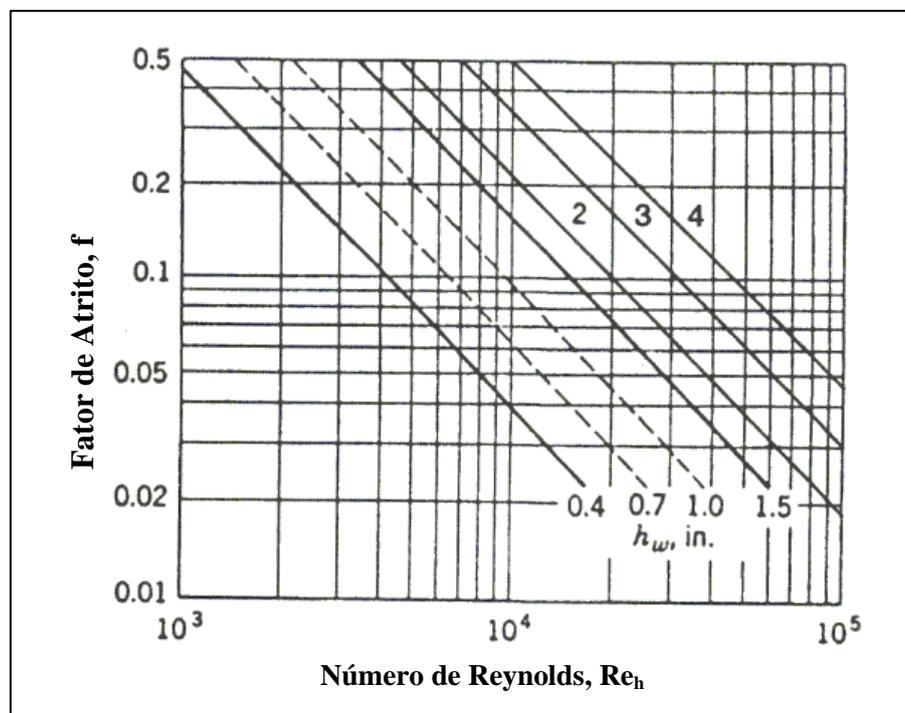
$$Re_h = \frac{R_h v_f \rho_L}{\mu_L} \quad (4.113)$$

$$v_f = \frac{12Q_L}{(h_{cl} l_{fw})} \quad (4.114)$$

Na Equação (4.113), R_h é o raio hidráulico do prato calculado em (ft); ρ_L e μ_L são a densidade e a viscosidade do líquido e devem ser utilizadas em (lb/ft³) e (lb/ft.s), respectivamente; e v_f é a velocidade da espuma (dispersão) em fluxo cruzado e deve ser calculada em unidade de (ft/s). Na Equação (4.114), Q_L é a vazão volumétrica da fase líquida, utilizada em (ft³/s), h_{cl} é a altura de líquido claro sobre o prato em polegada (in) e l_{fw} é a largura total do escoamento ao longo do prato e normal ao escoamento, conforme Equação (4.112).

Dessa forma, a partir do cálculo do número de Reynolds e conhecendo-se a altura da represa h_w (em polegada (in)), pode-se obter o fator de atrito f para o escoamento cruzado da dispersão sobre o prato conforme a Figura (4.7).

Figura 4.7 – Fator de atrito para pratos perfurados.



Fonte: COKER (2010).

E, por fim, o fator de atrito f está relacionado com a tensão de cisalhamento na parede τ_ω , a partir da Equação (4.115), (BIRD *et al.*, 2004).

$$\tau_\omega = \frac{1}{2} \rho_L v_f^2 f \quad (4.115)$$

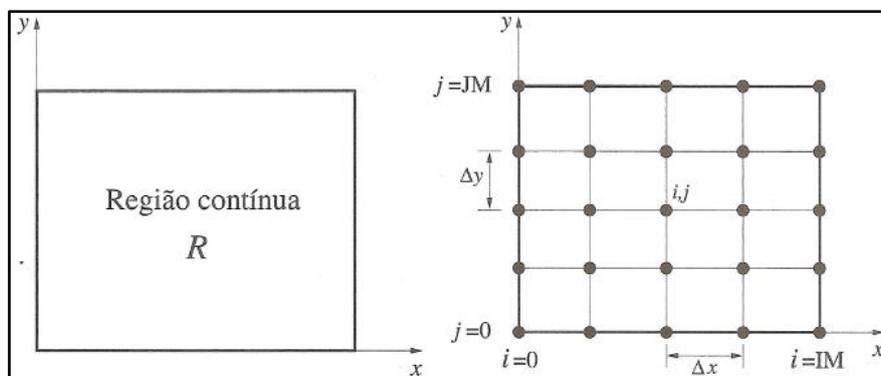
5 PROCEDIMENTO NUMÉRICO

5.1 Malha Numérica

As malhas numéricas utilizadas neste estudo já foram apresentadas na seção de Metodologia. No entanto, será apresentada a seguir uma breve descrição sobre malhas numéricas e os tipos de malhas existentes. Esta descrição tem o intuito de esclarecer o tipo de malha utilizada neste estudo e a forma como o tipo de malha pode influenciar nos resultados.

Com o intuito de tratar um modelo computacionalmente, é necessário expressar de forma adequada as equações e a região contínua R , ou domínio, em que elas são válidas. Como não se podem obter soluções numéricas sobre uma região contínua, devido aos infinitos pontos da mesma, inicialmente o domínio é discretizado, isto é, dividido em pontos, conforme a Figura (5.1). Ao conjunto dos pontos discretos dá-se o nome de malha (FORTUNA, 2012).

Figura 5.1 – Região contínua (esquerda) discretizada por uma malha de pontos (direita).

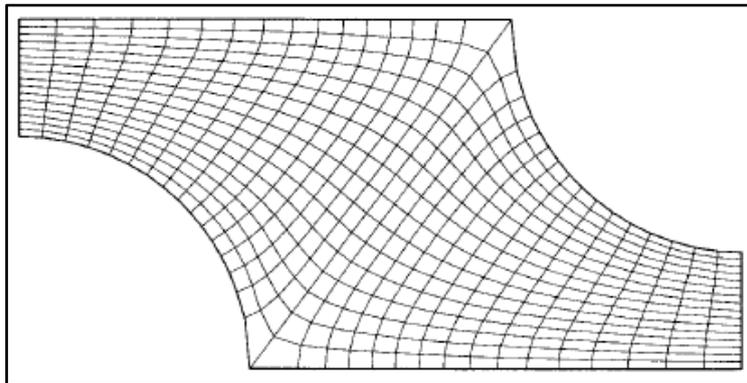


Fonte: Fortuna, (2012).

Dessa forma, a malha numérica consiste em uma representação discreta do domínio computacional através da sua divisão em subdomínios (elementos, volumes de controle, células, etc.) e tem influência direta nos resultados da simulação numérica, sendo que uma boa malha é capaz de evitar instabilidade e divergência (FERZIGER e PERIĆ, 2002, TU; YEOH; LIU, 2008).

Os diferentes tipos de malhas empregadas em CFD são: malhas estruturadas, malhas não estruturadas e malhas híbridas. As malhas estruturadas (ou regulares) são aquelas que apresentam uma estrutura (regularidade) na disposição espacial dos pontos (FORTUNA, 2012). Essas malhas são constituídas de famílias de linhas com a propriedade de que membros da mesma família não se cruzam entre si, e cruzam membros de outras famílias apenas uma vez. Esta conectividade com a vizinhança simplifica a programação e a matriz do sistema das equações algébricas tem uma estrutura regular (FERZIGER e PERIĆ, 2002).

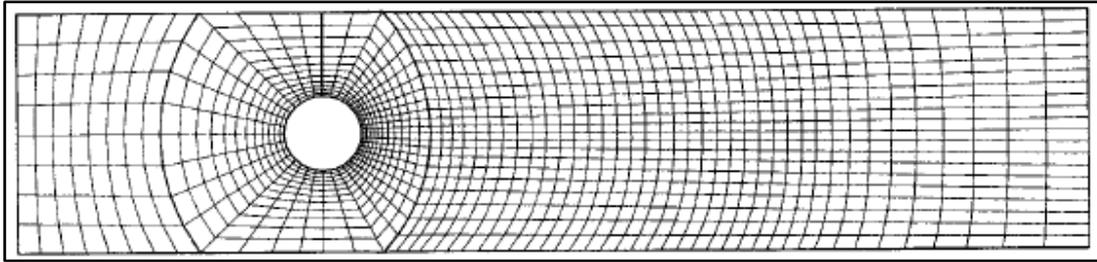
Figura 5.2 – Exemplo de uma malha estruturada em 2D.



Fonte: Ferziger e Peric, (2002).

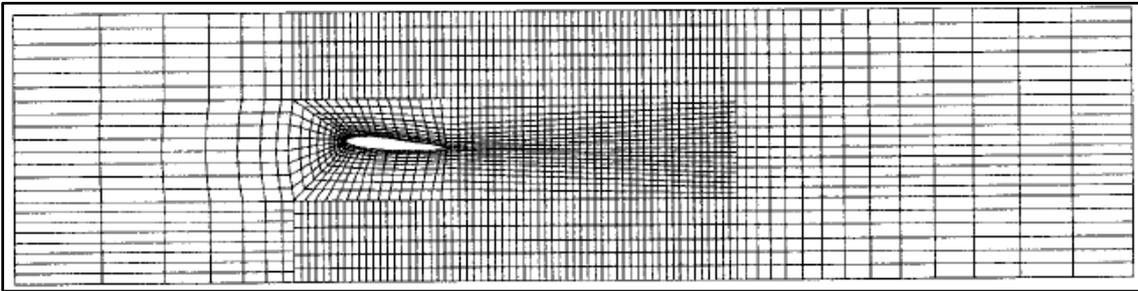
As malhas estruturadas podem também apresentar-se em blocos, ou seja, em uma malha estruturada em blocos existe dois ou mais níveis de subdivisão do domínio. Essas malhas podem apresentar interfaces correspondentes ou não correspondentes (Figuras (5.3) e (5.4)). Este tipo de malha é mais flexível que a malha estruturada simples, pois permite a utilização de blocos de malhas mais finas em regiões onde é requerida uma maior resolução. A desvantagem deste tipo de malha é que a conservação não é tão facilmente aplicada nas fronteiras dos blocos (FERZIGER e PERIĆ, 2002).

Figura 5.3 - Exemplo de uma malha em 2D estruturada em blocos e com as interfaces correspondentes.



Fonte: Ferziger e Peric, (2002).

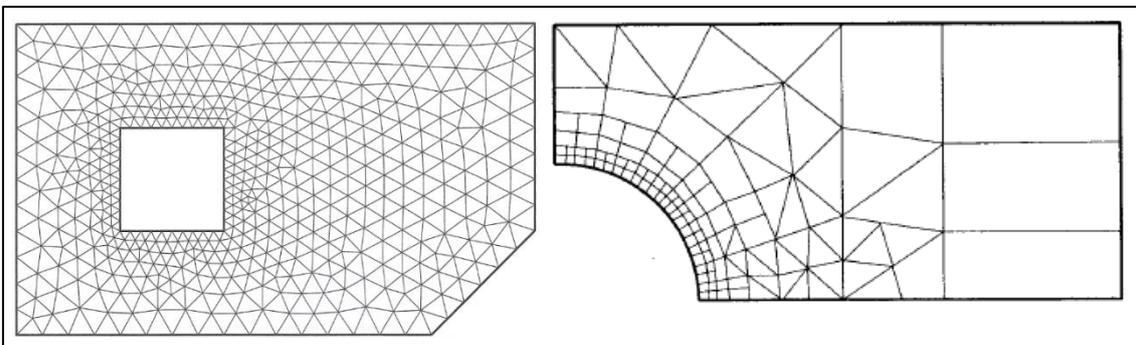
Figura 5.4 - Exemplo de uma malha em 2D estruturada em blocos e com as interfaces não-correspondentes.



Fonte: Ferziger e Peric, (2002).

As malhas não estruturadas são aquelas em que há ausência de regularidade na disposição dos pontos (Figura (5.5)). Em geral, essa classe de malhas permite a discretização de domínios com geometrias complexas de maneira mais direta do que seria possível com malhas estruturadas (FORTUNA, 2012). Frequentemente essas malhas são formadas de triângulos ou quadriláteros para o caso bidimensional, e por tetraedros ou hexaedros no caso tridimensional (FERZIGER e PERIĆ, 2002).

Figura 5.5 - Exemplos de malhas em 2D não estruturadas.



Fonte: Adaptado de Fortuna, (2012) e Ferziger e Peric, (2002).

Como vantagem, as malhas não estruturadas são mais facilmente obtidas que as malhas estruturadas, pois elas se adequam a qualquer tipo de geometria e mais facilmente a geometrias complexas. O adensamento desse tipo de malha em determinada região é possível, sem comprometer o restante do domínio computacional. Contudo, essas vantagens de flexibilidade são compensadas pela desvantagem da irregularidade da estrutura dos dados. A matriz do sistema de equações algébricas já não possui mais estrutura regular (FERZIGER e PERIĆ, 2002).

5.1.1 Malha Numérica Utilizada neste Estudo

A malha utilizada neste estudo foi a Malha 3 apresentada na seção de Metodologia, conforme as Figuras (3.5) e (3.6) e Tabela (3.2). A razão para a escolha da Malha 3 se deu após teste de independência de malha e ficará evidente na seção de Resultados e Discussão. Dessa forma, à vista do que foi apresentado, conclui-se assim que a malha utilizada neste estudo consiste em uma malha híbrida, constituída por blocos de malhas hexaédricas estruturadas e um bloco de malha tetraédrica não-estruturada.

5.2 Método Numérico

Definido o modelo matemático e suas equações, conforme apresentado no capítulo de Modelagem Matemática, é necessário selecionar um método de discretização do conjunto de equações formado pelo modelo, ou seja, um método de aproximação das equações diferenciais por um sistema de equações algébricas. A literatura apresenta vários métodos de discretização, no entanto, no caso do ANSYS CFX, o Método dos Volumes Finitos baseado em elementos (MVF) é o método empregado para essa função.

Os modelos matemáticos utilizados em problemas de fenômenos de transporte são, geralmente, baseados em princípios de conservação, nos quais há uma lei física de preservação de uma dada grandeza. Assim, quando não há a possibilidade da solução analítica do modelo, divide-se o domínio em uma série de subdomínios, com a intenção de ser obtida uma solução numérica aproximada, com um determinado erro, na expectativa de que quanto maior o número de subdomínios, mais próximo se atinge a

resposta exata. Dessa forma, no MVF aplica-se a equação diferencial de conservação a subdomínios da malha através de sua integração em cada volume e, conseqüentemente, substitui-se as expressões que surgem por expressões algébricas que envolvem a função incógnita (PINTO e LAGE, 2001; MALISKA, 2004).

A aproximação destas grandezas utilizando seus valores em pontos discretos da malha e em um dado instante de tempo é o que introduz o erro de aproximação numérica. Geralmente, os valores das variáveis dependentes são armazenados nos centros dos volumes ou em pontos sobre as faces. Os valores destas variáveis em outras posições são obtidos por processos convenientes de interpolação (PINTO e LAGE, 2001).

Existem duas maneiras nas quais o MVF pode ser utilizado para serem obtidas as equações aproximadas. Uma delas é a aplicação de balanços de propriedades nos volumes elementares, a partir dos quais são obtidas as equações diferenciais de conservação, e a outra forma é integrar ao longo do volume elementar, no espaço e no tempo, as equações na forma conservativa (MALISKA, 2004). Ambos os processos são equivalentes, pois a equação da conservação se originou através de um balanço de propriedade em um volume finito. No entanto, geralmente se utiliza a técnica da integração da equação da conservação na forma conservativa para a obtenção da equação aproximada, pois muitas grandezas possuem balanços bem complexos (PINTO e LAGE, 2001).

A forma conservativa (ou divergente) das equações diferenciais parciais de conservação é apresentada de forma geral, para a grandeza conservada ϕ , na Equação (5.1). Essa equação é chamada conservativa devido ao fato dos termos relacionados aos fluxos convectivos $\rho u\phi$, $\rho v\phi$ e $\rho w\phi$, estarem dentro das derivadas em relação às coordenadas espaciais. No membro esquerdo da Equação (5.1), o primeiro termo é o termo de acúmulo, sendo os outros três termos restantes os termos convectivos, relacionados ao transporte da propriedade por convecção. No membro direito, os três primeiros termos são relacionados ao transporte difusivo, e o último termo representa o termo de geração. Nesta equação, ρ é a densidade do fluido, t é o tempo, (x, y, z) são as coordenadas espaciais na forma cartesiana e (u, v, w) são as componentes do vetor velocidade correspondentes às coordenadas x, y e z , respectivamente. Essa equação está

apresentada na forma cartesiana, porém outras formas, como as formas cilíndricas e esféricas, também podem ser obtidas (PINTO e LAGE, 2001).

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w\phi)}{\partial z} \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial z} \right) + S \end{aligned} \quad (5.1)$$

Dessa forma, no MVF, após a discretização do domínio de interesse em subdomínios (volumes elementares), as equações de conservação deverão ser integradas ao longo de todos os volumes elementares, em um processo no qual surgirão equações algébricas para cada volume finito e, portanto, o sistema de equações algébricas procurado. O processo de integração pode ser visto, passo a passo, nos trabalhos de Maliska (2004), Pinto e Lage (2001) e Ferziger e Peric (2002). Aqui serão apresentadas as maneiras de se tratar cada termo durante o processo de integração.

Um fator importante a ser observado, está no fato de que ao se efetuar a integração de face a face ao longo do volume de controle, surgem integrais de superfície (após a aplicação do teorema da divergência de Gauss) e integrais de volume, e conseqüentemente surge a necessidade de aproximar essas equações por expressões algébricas. Algumas técnicas de aproximações, tais como a regra do ponto central, a regra do trapézio e a regra de Simpson, são apresentados em detalhes em Ferziger e Peric (2002).

5.2.1 Formulação no Tempo

Como citado, as equações de conservação deverão ser integradas no tempo e no espaço, ao longo de cada volume elementar. Dependendo da função escolhida para o comportamento do fluxo em questão no intervalo de tempo, têm-se as formulações explícitas, totalmente implícita e implícita.

Neste estudo utilizou-se o esquema de Euler de primeira ordem (*First Order Backward Euler*), o qual é um esquema implícito e possui precisão de primeira ordem.

O comportamento desse esquema é análogo ao esquema *Upwind* utilizado para os termos advectivos, que serão tratados adiante.

Numa formulação implícita, os valores das incógnitas que entram nos cálculos dos fluxos difusivos e convectivos são obtidos por uma média dos valores dessas incógnitas no começo e no fim do intervalo de tempo. Dessa forma, numa formulação implícita as equações ficam acopladas e obtêm-se um sistema linear, devido a esse acoplamento (MALISKA, 2004).

5.2.2 Tratamento do Termo Fonte

O termo fonte das equações de conservação necessita de cuidados especiais para que o processo de solução iterativa dos sistemas de equações não divirja. Uma regra a ser seguida é fazer com que o termo fonte seja levado em consideração o mais implicitamente possível, não o mantendo constante ao longo do passo iterativo ou passo de tempo. Uma forma de fazer isso é linearizá-lo, de forma que a variável em questão, contida no termo fonte, atue implicitamente e não seja simplesmente substituída pelo seu último valor. Porém, diversas vezes, dependendo da importância do termo fonte, apenas a linearização não é suficiente, sendo necessário atualizar seu valor mais frequentemente do que os outros coeficientes (MALISKA, 2004). Um exemplo típico de linearização do termo fonte é do tipo apresentado na Equação (5.2), nos quais os termos S_p e S_c são os coeficientes a serem determinados, sendo desejável que S_p seja negativo.

$$S = S_p \varphi_p + S_c \quad (5.2)$$

5.2.3 Termo Difusivo

No ANSYS CFX, os termos difusivos são avaliados espacialmente a partir de funções de forma, sendo assim dependente do tipo de elemento (hexaedro, tetraedro, prisma, etc.) presente na malha.

5.2.4 Termos Convectivos

Os termos de transporte convectivo são os termos responsáveis pelas maiores dificuldades numéricas na solução de equações diferenciais parciais. Esses termos, ao serem discretizados, necessitam da especificação dos valores da grandeza conservada nas faces dos volumes finitos. A interpolação desses valores necessita de cuidados especiais para evitar a instabilidade do método numérico (PINTO e LAGE, 2001).

5.2.4.1 Funções de Interpolação

Os fluxos convectivos e difusivos devem ser avaliados nas fronteiras (faces) do volume de controle, pois a integração geralmente é realizada de uma face à outra. Dessa forma, o cálculo desses fluxos deve ser realizado em função dos valores da função nos pontos nodais, ou seja, utilizam-se funções de interpolação que possuem a tarefa de conectar os pontos nodais (locais de armazenamento da variável ϕ). Neste sentido, a proposta é sempre utilizar uma função de interpolação com menor erro possível e que, ao mesmo tempo, não envolva muitos pontos nodais, de modo a evitar a criação de uma matriz com estrutura muito complexa (MALISKA, 2004).

Neste estudo foi utilizado o esquema de interpolação *Upwind* de Primeira Ordem para os termos convectivos. Esse esquema opera em função da direção do fluxo convectivo, garantindo assim, a positividade dos coeficientes das equações algébricas resultantes da aplicação do método de aproximação numérica, evitando oscilações numéricas durante a solução (LOPES, 2012).

5.2.5 Solução Segregada e Acoplada

Como citado anteriormente, após a discretização das equações haverá um sistema de equações algébricas para ser resolvido. Para a resolução dessas equações, em um primeiro momento deve-se decidir quanto à natureza da solução, segregada ou acoplada.

A solução acoplada e direta dos sistemas de equações algébricas cria uma única matriz envolvendo todos os coeficientes e resolvendo todas as incógnitas simultaneamente. Dessa forma, desaparecerá o problema do acoplamento entre as

variáveis e restará apenas as não-linearidades, que serão consideradas ao se resolver o sistema iterativamente, atualizando-se a matriz dos coeficientes até a convergência. Assim, pode-se notar que a dimensão da matriz resultante será grande. A solução acoplada do sistema de equações é mais robusta e estável em relação à solução segregada. No entanto, a solução acoplada exige maior memória computacional, além do esforço computacional também ser maior, devido à natureza numérica desta técnica (MALISKA, 2004).

Já a solução segregada dos sistemas de equações consiste em resolver os sistemas lineares um a um, atualizando os coeficientes. Ou seja, a solução segregada do sistema de equações consiste na resolução de cada equação em forma separada e sequencial. Para a solução de cada sistema linear em particular, o proposto é utilizar métodos iterativos, e não métodos diretos, pois os primeiros trabalham apenas com os não-zeros da matriz (MALISKA, 2004).

Na escolha pela solução segregada, o problema dos acoplamentos entre as variáveis se destaca, sendo um dos principais o acoplamento pressão-velocidade para escoamentos incompressíveis e escoamentos em que não se tem forte dependência da massa específica com a pressão. Assim, na solução segregada, surgem também os conceitos de formulação compressível e incompressível, pois cada variável deve ter uma equação evolutiva para ser avançada (MALISKA, 2004).

Neste estudo foi utilizado o software ANSYS CFX 14.5, que utiliza o método de solução acoplado, sendo todas as equações resolvidas simultaneamente como um sistema único.

5.2.6 Métodos para Resolução de Sistemas Lineares

Após a aplicação do método dos volumes finitos, há a necessidade de escolha do método de solução do sistema de equações algébricas lineares originados. Os métodos de solução de um sistema linear podem ser classificados em diretos e iterativos.

Os métodos diretos são aqueles que trabalham com a matriz completa e necessitam de processos equivalentes à inversão da matriz completa. Por serem diretos, esses métodos não necessitam de uma estimativa inicial das variáveis para a solução do sistema. No entanto, as matrizes obtidas com a aplicação dos métodos numéricos são de

grande tamanho e, portanto, as operações realizadas no processo de inversão trabalham, fundamentalmente, com os elementos zeros da matriz. Dessa forma, o esforço computacional é muito grande, e esse tipo de método não é utilizado em aplicações em CFD. Além disso, na maioria das vezes as equações diferenciais são não-lineares e, portanto, a matriz dos coeficientes do sistema linear algébrico deve ser atualizada ao longo do processo, não tendo sentido resolver diretamente um sistema linear cujos coeficientes não são os corretos. Como exemplo de métodos diretos, pode-se citar: Método de Eliminação de Gauss e Método de Decomposição LU (MALISKA, 2004).

Dessa forma, os métodos utilizados em CFD são os métodos iterativos. Os métodos iterativos são métodos que requerem uma estimativa inicial para dar prosseguimento ao processo de solução. Como exemplo de métodos iterativos para sistemas tridimensionais, pode-se citar: Método de Jacobi, Método de Gauss-Siedel, Método Linha a Linha, como o método TDMA (*TriDiagonal Matrix Algorithm*) e os Métodos *Multigrid* (MALISKA, 2004).

No caso do *software* ANSYS CFX, a técnica utilizada é o *Multigrid* Algébrico. A taxa de convergência de muitas técnicas de inversão de matriz pode ser melhorada através da utilização de uma técnica chamada de “*Multigrid*”. De um ponto de vista numérico, a abordagem *Multigrid* oferece uma vantagem significativa. O *Multigrid* Algébrico forma um sistema de equações discretas para uma malha mais grosseira a partir da soma das equações da malha mais refinada. Isto resulta em um “engrossamento” virtual do espaçamento da malha durante o decorrer das iterações, e, em seguida, “re-refinando” a malha para obter uma solução precisa. Esta técnica melhora significativamente as taxas de convergência (ANSYS CFX 14.0 – *Theory Guide*, 2011). Assim, conforme Lopes (2012) cita em seu trabalho, o uso do esquema *Multigrid* Algébrico pode reduzir significativamente o número de iterações e, conseqüentemente, o tempo de processamento requerido para a obtenção da convergência da solução, principalmente para os casos nos quais se utilizam malhas numéricas mais refinadas. O método *Multigrid* é descrito em mais detalhes em ANSYS CFX 14.0 – *Theory Guide*, 2011.

5.3 Resumo da Metodologia Numérica

Dessa forma, de acordo com as definições apresentadas anteriormente, será apresentado a seguir um resumo da metodologia numérica utilizada neste estudo.

Conforme apresentado na Tabela (5.1), para as equações da continuidade, momento e massa, o esquema de interpolação *Upwind* foi empregado para os termos advectivos e o esquema *First Order Backward Euler* foi empregado para os termos transientes. Para as equações relacionadas à turbulência, empregou-se o esquema *High Resolution*. Em relação à natureza da solução, o software ANSYS CFX 14.5 utiliza o método de solução acoplado, sendo todas as equações resolvidas simultaneamente como um sistema único.

Tabela 5.1 – Configuração dos modelos utilizados

Modelagem	Configuração dos Modelos
Regime	Transiente
Escoamento	Multifásico
Dimensão	3D
Abordagem Multifásica	Euleriano-Euleriano <i>Particle Model</i>
Tratamento das Fases Fluidas	Fase Líquida: Contínua Fase Vapor: Dispersa
Modelo de Turbulência	Fase Líquida: Modelo SST (κ - ϵ + κ - ω) Fase Gasosa: Laminar
Esquema de Interpolação	Termos Advectivos: <i>Upwind</i> de Primeira Ordem Termos Transientes: <i>First Order Backward Euler</i> Turbulência: <i>High Resolution</i>

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Em complemento à Tabela (5.1), utilizou-se intervalos de tempo (*time steps*) de $5,0 \times 10^{-4}$ s, $1,0 \times 10^{-3}$ s e $2,5 \times 10^{-3}$ s, os quais foram variados gradativamente conforme o decorrer e a estabilidade das simulações.

5.3.1 Critério de Convergência

O critério de convergência utilizado neste trabalho está relacionado ao resíduo de cada equação ao final de cada passo de tempo (*timestep*). O resíduo é uma medida do

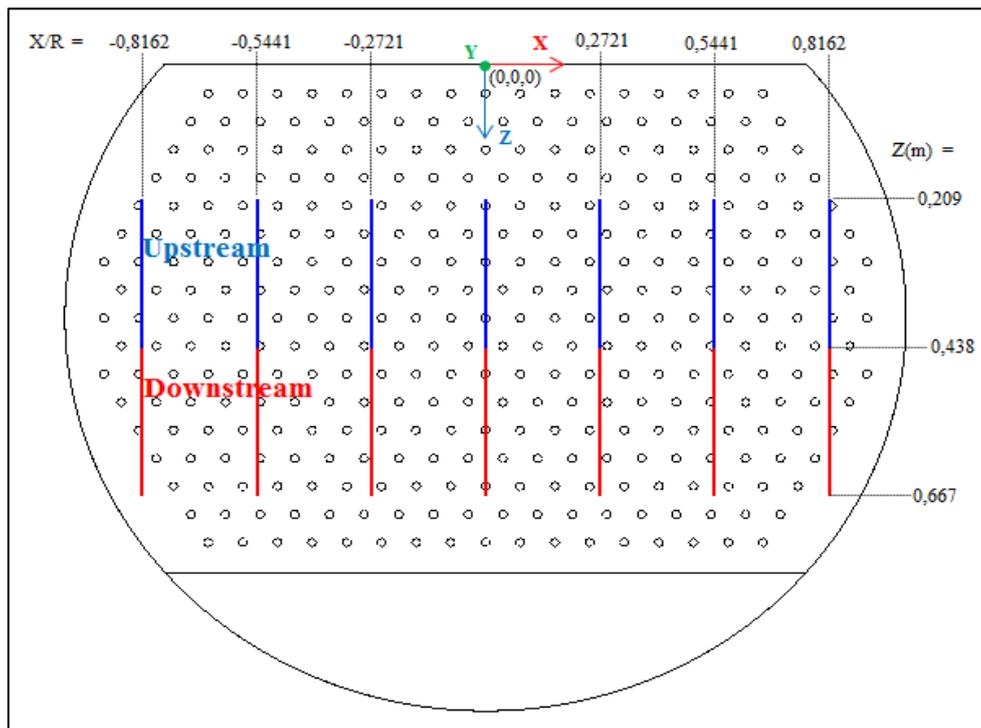
desequilíbrio local de cada equação de conservação do volume de controle. É uma medida importante de convergência, a qual se refere diretamente no fato das equações terem sido resolvidas coerentemente. Utilizou-se neste trabalho os valores RMS (*Root-Mean-Square*) dos resíduos das equações para a verificação da convergência. Os valores RMS podem ser entendidos como os valores da raiz quadrada da média dos resíduos gerados, sendo este cálculo realizado para cada equação e para cada passo de tempo (*timestep*). Dessa forma, o CFX-Solver finaliza o passo de tempo quando os resíduos da equação calculados usando o método especificado (nesse caso o RMS) estão abaixo do valor alvo selecionado. Conforme ANSYS CFX 14.5 – *Theory Guide*, valores da raiz quadrada da média residual abaixo de 10^{-4} são considerados suficientes para muitas aplicações na engenharia, sendo este o valor adotado como alvo neste estudo.

6 RESULTADOS E ANÁLISE

Neste capítulo serão apresentados e analisados os resultados obtidos através dos experimentos numéricos realizados ao longo deste trabalho. Estes experimentos tiveram por objetivos a análise da hidrodinâmica e da transferência de espécies químicas em um prato perfurado de uma coluna de destilação. Dessa forma, este capítulo consiste basicamente em três seções: análise da malha numérica, análise da hidrodinâmica sobre o prato e a análise da transferência de espécies químicas.

Antes da apresentação dos resultados, é apresentado na Figura (6.1) um esquema semelhante ao apresentado na Figura (3.11) do capítulo Metodologia. No entanto, as linhas de medição são apresentadas em função de uma coordenada adimensional (x/R), a qual foi obtida através da divisão entre a coordenada x pertencente à cada linha de análise e o raio do prato ($R = 0,6065$ m). Assim, o valor zero indica o centro do prato e os valores -1 e 1 indicam as paredes do prato, lembrando que as linhas de medição estão situadas a 0,038 m acima da base do prato ($y = 0,038$ m). Essa figura será utilizada no item de análise das velocidades.

Figura 6.1 – Regiões e linhas utilizadas na análise da velocidade do líquido.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

6.1 Análise das Malhas Numéricas

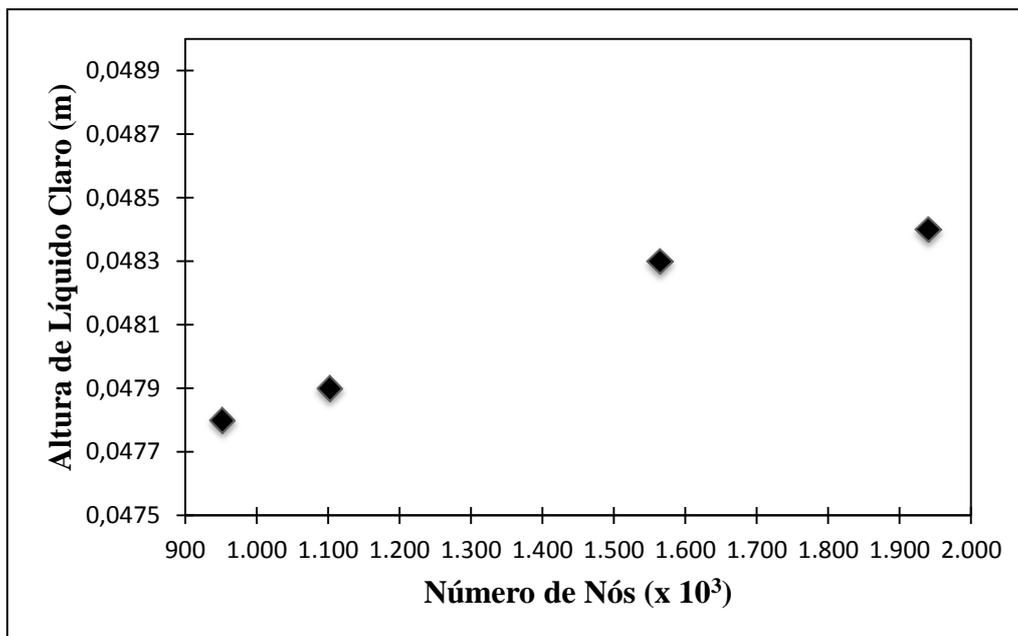
Conforme citado anteriormente, é de fundamental importância o conhecimento do grau de influência que uma malha possui sobre os resultados de acordo com o seu nível de refinamento. Assumindo esse objetivo, foi escolhido o parâmetro hidráulico altura de líquido claro como variável global e a componente w da velocidade do líquido como variável local. Dessa forma, foram geradas as malhas apresentadas no capítulo de Metodologia e feito o acompanhamento dessas variáveis, local e global, para cada malha.

A Figura (6.2) apresenta a altura de líquido claro em função do número de nós das malhas e as Figuras (6.3) e (6.4) apresentam a componente w da velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) para as regiões *upstream* e *downstream*, respectivamente, para todas as malhas em estudo. Os resultados apresentados nessas figuras são valores médios em relação ao tempo. Sendo que a componente w da velocidade do líquido gerada em cada instante de tempo e utilizada para o cálculo da média temporal apresentada nas Figuras (6.3) e (6.4), foi obtido a partir de médias realizadas ao longo das linhas de medição para cada instante, conforme

apresentadas na Figura 6.1. Para a análise das malhas numéricas, realizou-se simulações de 30 segundos do escoamento real.

Conforme apresentado na Figura (6.2), pode-se notar que o valor da altura de líquido claro tende a assumir um valor aproximadamente constante após certo nível de refinamento, mostrando assim, que após esse nível de refinamento a influência deste sobre a malha não acarreta em mudanças significativas nos resultados apresentados.

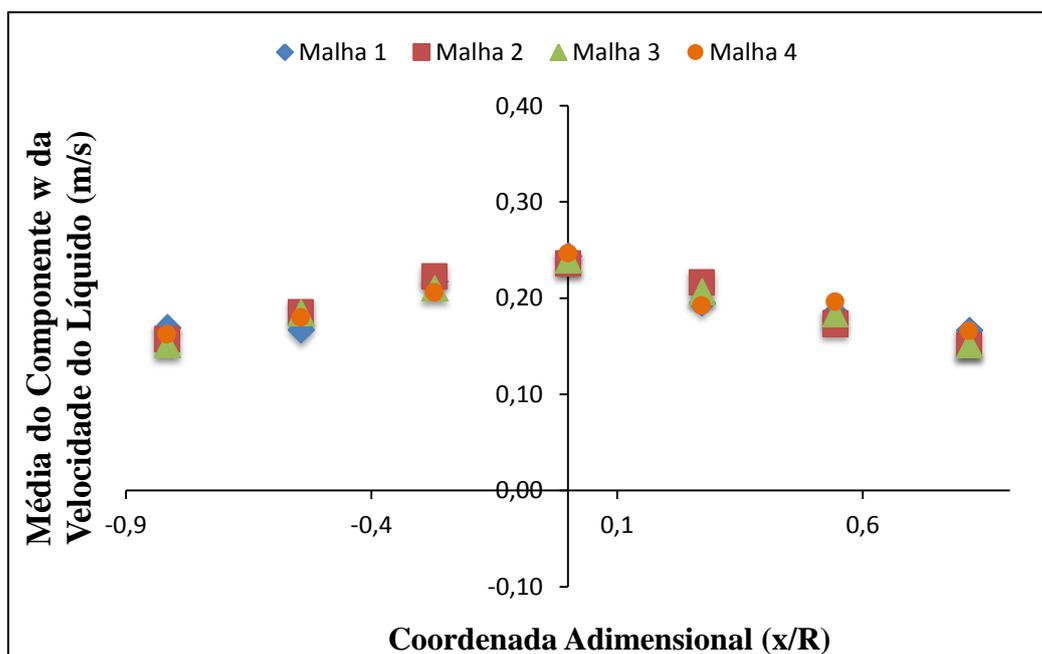
Figura 6.2 – Altura de líquido claro no prato em função da quantidade de nós das malhas.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

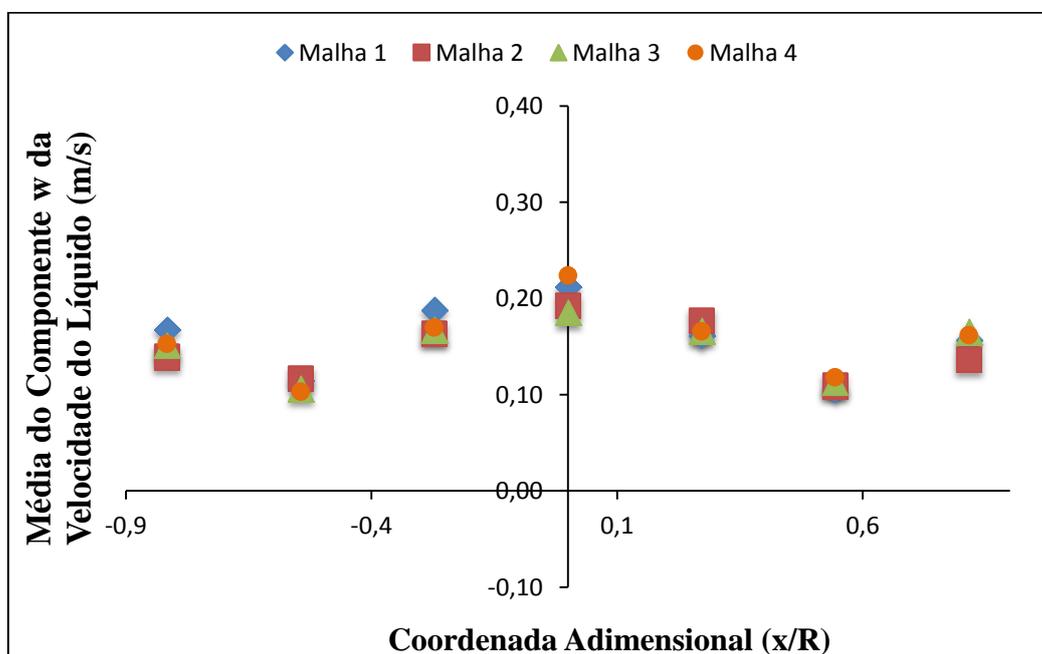
Da mesma forma como apresentado na Figura (6.2), as Figuras (6.3) e (6.4) mostram a baixa influência do grau de refinamento de cada malha sobre as velocidades medidas.

Figura 6.3 - Componente w da velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) na região *upstream* avaliada em um plano ZX ($y = 0,038$ m) para cada malha.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.4 - Componente w da velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) na região *downstream* avaliada em um plano ZX ($y = 0,038$ m) para cada malha.



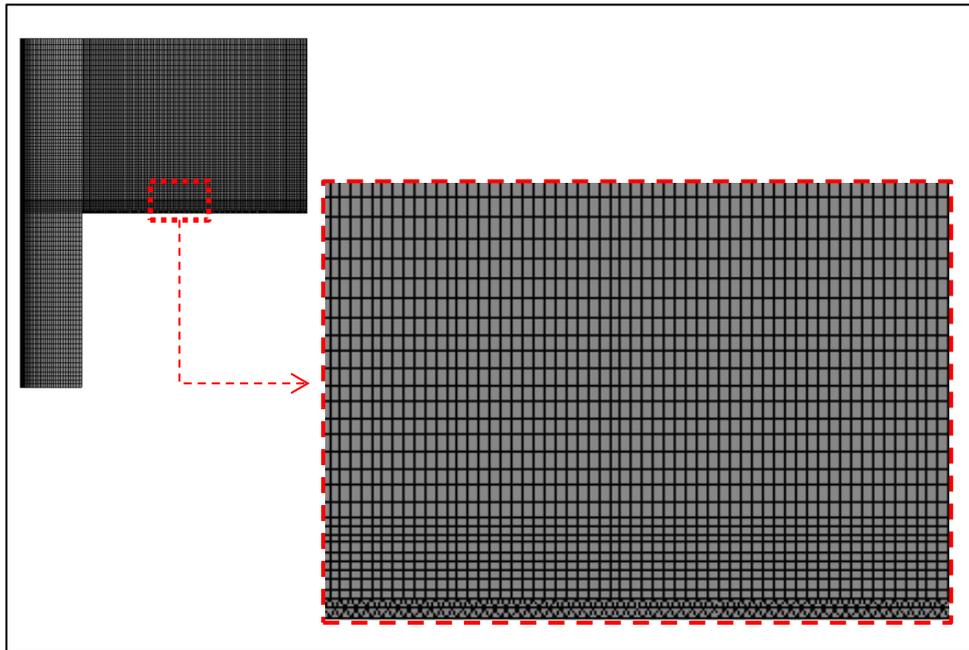
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Dessa forma, devido ao fato da Malha 3 possuir um menor número de nós e valores das variáveis de análise próximos do valor o qual os valores tendem, escolheu-

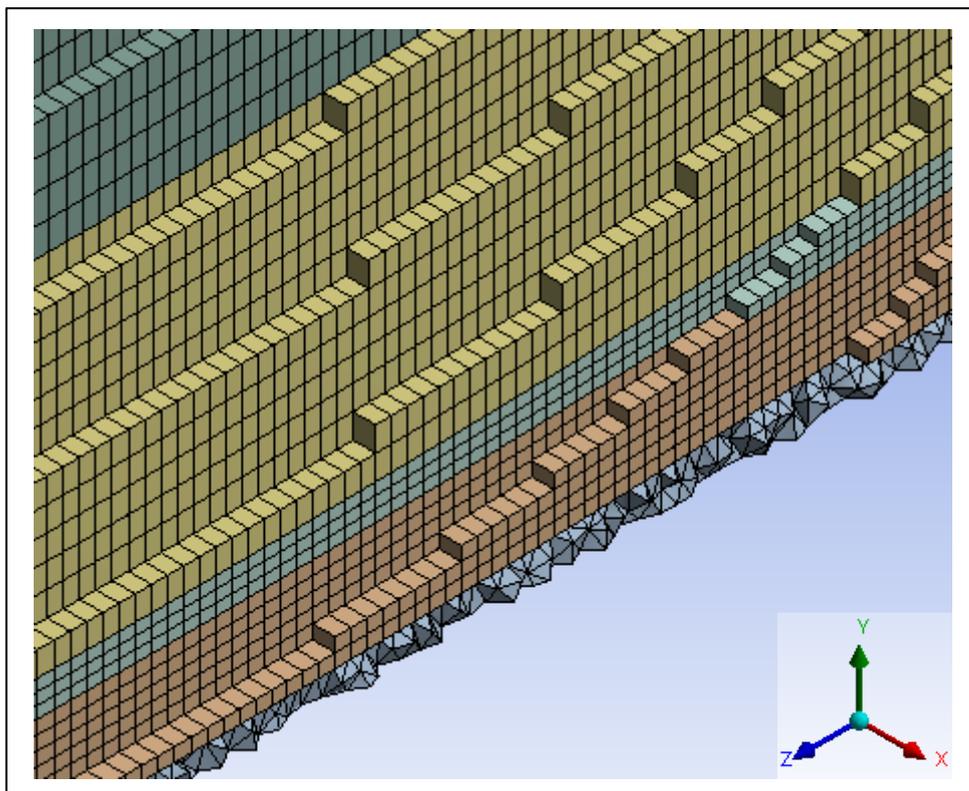
se a Malha 3 para o prosseguimento do trabalho e assim evitar possíveis desvios dos resultados em relação ao refinamento da malha numérica. Tomando-se a Malha 3 como referência, que foi a malha numérica escolhida, pode-se avaliar a diferença percentual dos resultados. Em relação à altura de líquido claro, ao se comparar as Malhas 1 e 3, o desvio apresentou valor de aproximadamente 1%, ao se comparar as Malhas 2 e 3, o desvio apresentou valor de aproximadamente 0,85%, e ao se comparar as Malhas 3 e 4, o desvio apresentou valor de aproximadamente 0,18%.

Já em relação à variável local (componente w da velocidade do líquido), para a região *upstream*, ao se comparar as Malhas 1 e 3, o maior desvio ocorreu na coordenada $x/R = -0,8162$ e apresentou valor de aproximadamente 10%, e ao se comparar as Malhas 2 e 3, o maior desvio ocorreu na coordenada $x/R = -0,2721$ e apresentou valor de aproximadamente 5%, e assim por diante. O mesmo procedimento foi feito para a região *downstream*. Vale ressaltar que a maior parte dos desvios foi inferior a 10%.

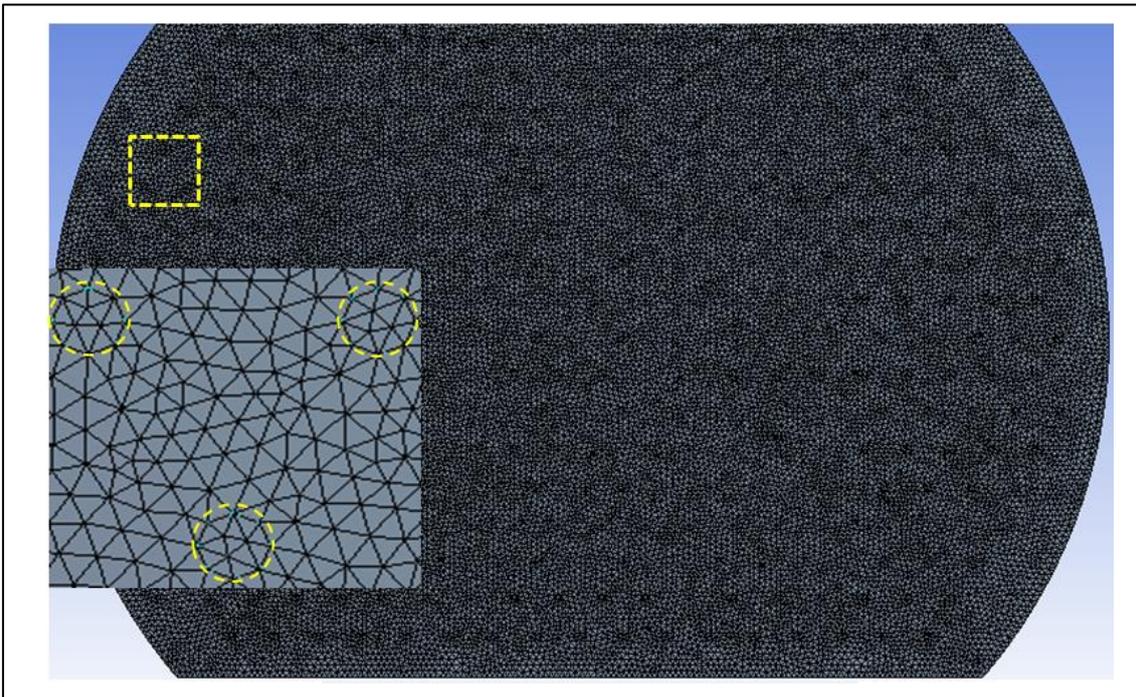
Conforme citado anteriormente, a Malha 3 foi a malha utilizado neste estudo. Dessa forma, a seguir são apresentados alguns detalhes dessa malha (Figuras (6.5) à (6.7)). Como pode ser visto utilizou-se um fator de crescimento na malha de tal forma que o crescimento entre os elementos não fosse brusco, de modo a evitar erros numéricos e manter as propriedades dos elementos dentro dos limites satisfatórios. Outro fator importante é apresentado na Figura (6.7), que apresenta a malha gerada na região dos orifícios. Pode-se notar que cada orifício possui vários elementos e vários nós. Este é um fator de grande importância, pois um maior número de nós propicia um melhor perfil de entrada do gás no domínio computacional. Sendo a altura (espaçamento) do prato de 61 cm, a camada tetraédrica possui 1 cm de altura, enquanto que a camada hexaédrica possui 60 cm de altura. A camada tetraédrica foi construída com elementos de 4,5 a 5 mm de tamanho.

Figura 6.5 – Vista lateral da malha numérica.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.6 – Detalhes dos elementos da malha numérica.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.7 – Vista inferior da malha numérica na região dos orifícios.

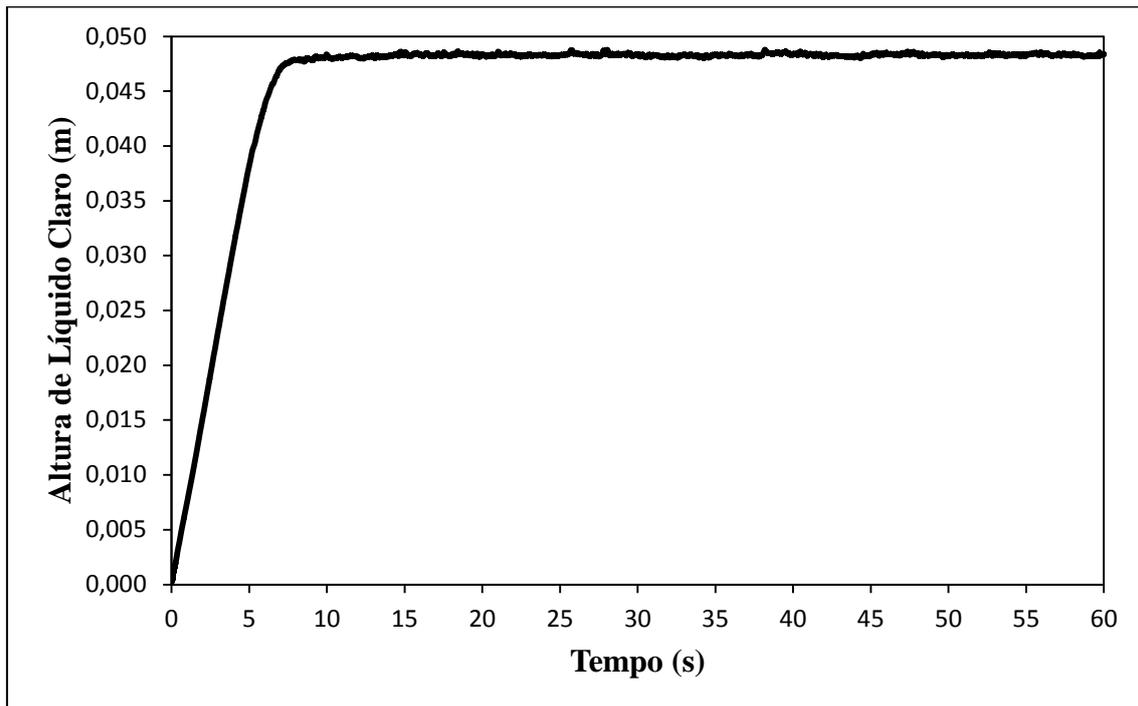
Fonte: Elaborado pelo Autor.

6.2 Análise da Hidrodinâmica

Nesta seção do trabalho serão apresentados os resultados para a verificação e validação do modelo utilizado nos experimentos numéricos relacionados ao estudo da hidrodinâmica do prato perfurado. Nesse intuito, os resultados serão comparados com outros estudos apresentados na literatura.

6.2.1 Altura de Líquido Claro

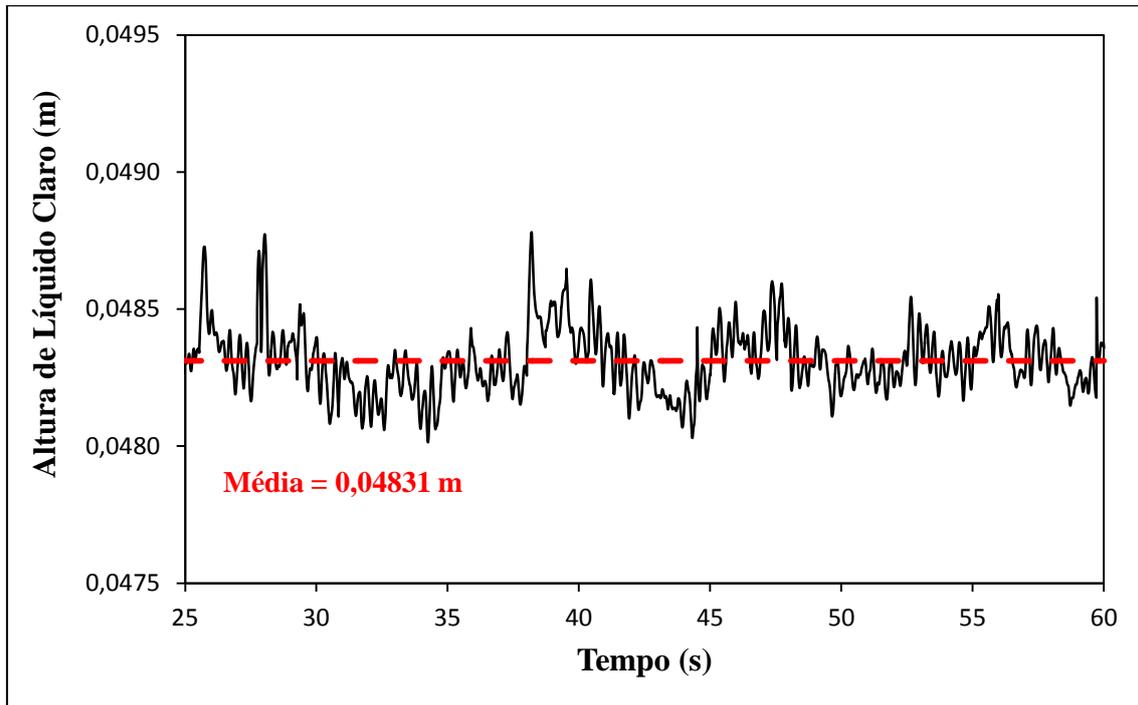
Conforme citada e definida no capítulo de Metodologia, a variável macroscópica altura de líquido claro é de extrema importância no estudo de pratos perfurados. A Figura (6.8) apresenta o monitoramento da altura de líquido claro em função do tempo. Pode-se verificar um rápido crescimento nos 7 segundos iniciais do escoamento real, após os quais é atingido um estado com pequenas oscilações em torno de uma média. Esse rápido crescimento inicial ocorre devido ao período de enchimento do prato. A altura de líquido claro foi monitorada durante a simulação de acordo com a Equação (3.8).

Figura 6.8 - Altura de líquido claro em função do tempo real de escoamento.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Analisando a Figura (6.9), apresentada num intervalo de tempo de 25s a 60s do escoamento real, observa-se que o comportamento do escoamento assume um perfil oscilatório e, portanto, não é atingido um estado estacionário estável. No entanto, o escoamento tende a um estado “quasi-estacionário” onde as propriedades flutuam em torno de um valor médio (média temporal entre 25s e 60s), sendo esse comportamento típico de pratos perfurados, conforme já apresentado por van Baten e Krishna (2000), Gesit *et al.* (2003), Noriler (2007), Muniz (2014), Oliveira (2014), entre outros.

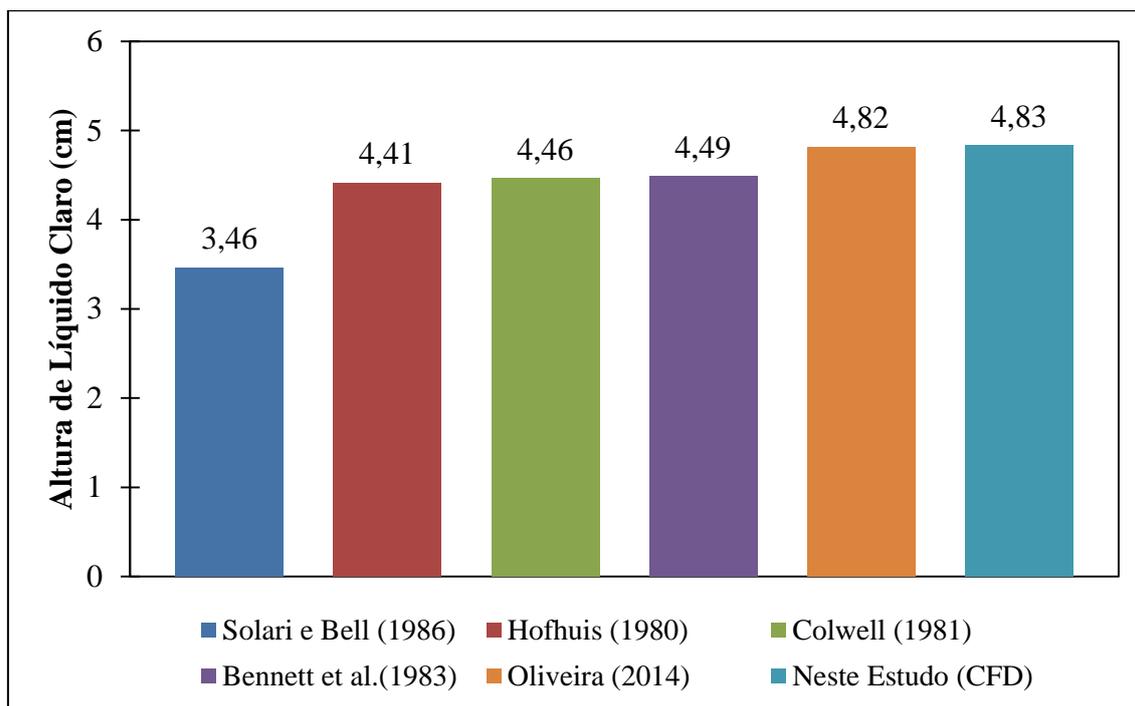
Figura 6.9 – Valor médio da altura de líquido claro e sua flutuação em função do tempo real de escoamento, calculada entre os instantes 25s e 60s.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

A Figura (6.10) apresenta uma comparação entre o resultado de altura de líquido claro obtido neste estudo, o resultado apresentado pelo estudo via CFD de Oliveira (2014) e obtida por correlações empíricas encontradas na literatura, conforme apresentadas nas Equações (3.9), (3.10), (3.13) e (3.15). Essa comparação é importante, pois é essencial que o resultado obtido via CFD apresente a mesma tendência que os resultados obtidos por correlações confiáveis presentes na literatura.

Figura 6.10 - Comparação entre as alturas de líquido claro obtidas por correlações da literatura e a simulada neste estudo.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Dessa forma, observa-se na Figura (6.10) a proximidade entre o resultado obtido neste estudo, o resultado via CFD de Oliveira (2014) e os valores das correlações propostas por Hofhuis (1980), Colwell (1981) e Bennett *et al.* (1983), com desvios de aproximadamente 0,28%, 9,61%, 8,26% e 7,77%, respectivamente, sendo que todos esses desvios estão dentro da faixa de erro envolvidos na própria correlação, conforme apresentado anteriormente no capítulo de Metodologia.

Já em relação à correlação proposta por Solari e Bell (1986), correlação esta desenvolvida a partir dos estudos experimentais realizados no trabalho citado, houve um desvio considerável com valor aproximado de 39%. No entanto, esse desvio já era esperado, como apresentado e discutido nos trabalhos de van Baten e Krishna (2000), Gesit *et al.* (2003) e Oliveira (2014).

van Baten e Krishna (2000) e Gesit *et al.* (2003) comentaram sobre o fato de tanto o CFD quanto a correlação de Bennett *et al.* (1983) possuírem a tendência de fornecer valores de altura de líquido claro maiores que os valores experimentais. A justificativa para isso está no fato de a correlação de Bennett *et al.* (1983) para a fração volumétrica média de líquido ignorar o fenômeno de coalescência prevenido por

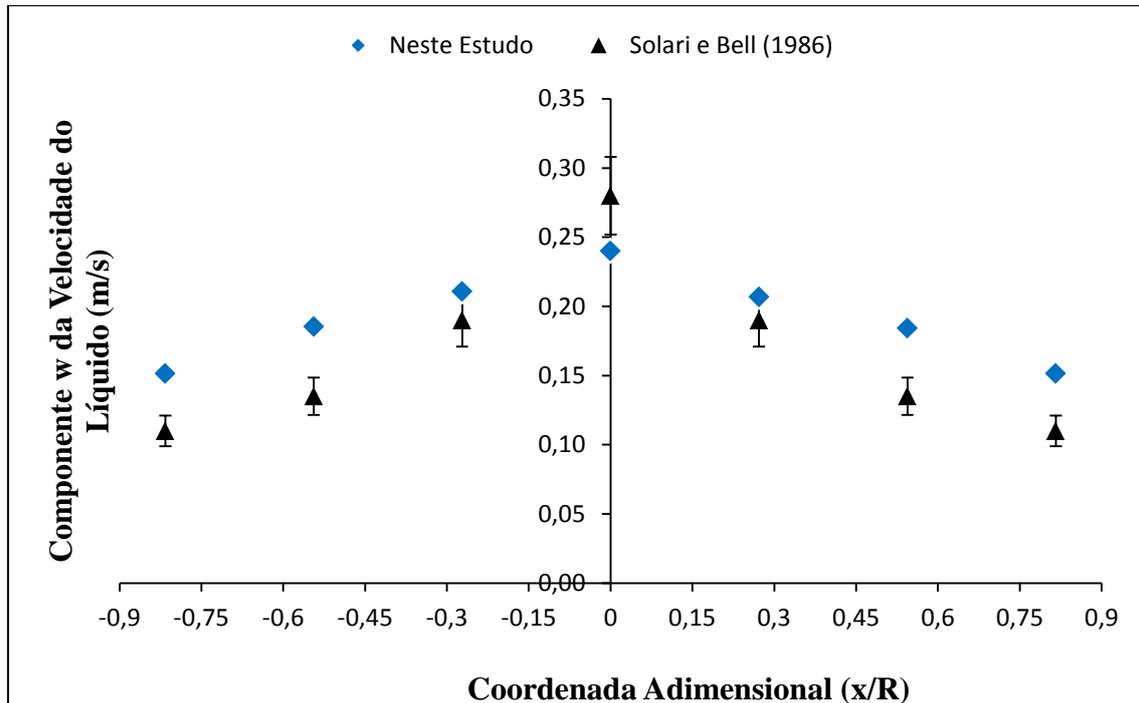
impurezas contidas na fase líquida. Pois é conhecido que pequenas impurezas tendem a prevenir o efeito de coalescência conduzindo a uma maior fração volumétrica média de gás na dispersão e, conseqüentemente, fazendo com que a altura de líquido claro seja menor (van Baten e Krishna, 2000). Ao ocorrer o fenômeno de coalescência, uma bolha de gás, por exemplo, tende a abandonar o estágio mais rapidamente do que na ausência de coalescência. Assim, a tendência de impurezas e outras interferências de prevenir o fenômeno de coalescência, acarretam em um aumento da retenção gasosa e, conseqüentemente, implicando em redução na altura de líquido claro. E, nesse caso, vale ressaltar que Bennet *et al.* (1983) não consideraram a presença de impurezas na fase líquida no desenvolvimento da correlação, do mesmo modo que este estudo de CFD também desconsidera a presença de impurezas ou outras interferências durante a simulação.

Outro fator importante relacionado ao maior desvio em relação ao estudo de Solari e Bell (1986) está no fato de os autores terem utilizado várias sondas ao longo do prato, as quais também podem se comportar como impurezas (ou interferências), e assim evitar o fenômeno de coalescência e provocar uma diminuição da altura de líquido claro.

6.2.2 Distribuição de Velocidades

As Figuras (6.11) e (6.12) apresentam o comportamento da média do componente w da velocidade do líquido ao longo das coordenadas adimensionais das regiões *upstream* e *downstream*, conforme apresentado anteriormente, sendo que o valor 0 representa o centro do prato e os valores -1 e 1 representam as paredes do prato. Selecionou-se o intervalo de tempo de 25 a 60 segundos para o cálculo dos valores médios apresentados na figura para cada coordenada. Este intervalo foi escolhido devido ao fato de o escoamento já ter atingido o regime pseudo-estacionário. Em ambos os gráficos estão apresentados também os perfis de velocidade encontrados por Solari e Bell (1986) para as regiões *upstream* e *downstream*, juntamente com a faixa de erro envolvido nos experimentos, sendo esta faixa de erro (10%) estimada pelos próprios autores. Através da observação das Figuras (6.11) e (6.12), nota-se que o modelo numérico proposto nas simulações apresentou resultados satisfatórios tanto qualitativamente como quantitativamente.

Figura 6.11 - Perfil do componente w da velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) para a região *upstream*.

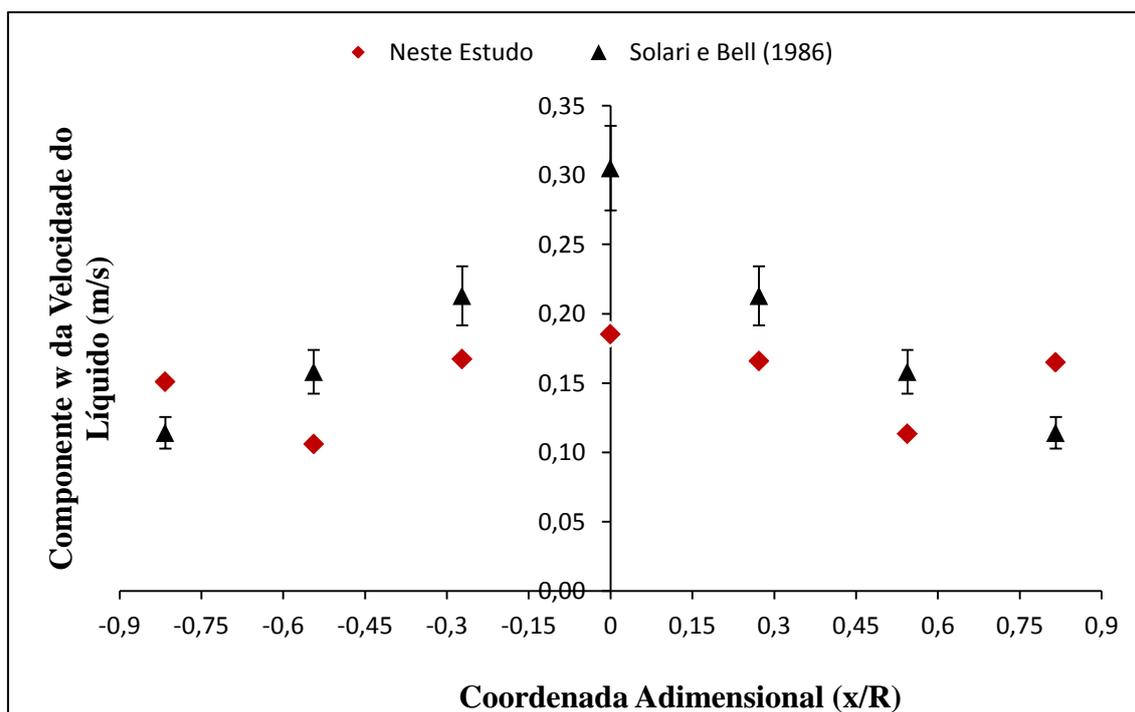


Fonte: Elaborado pelo Autor.

Analisando a Figura (6.11), nota-se que a velocidade do líquido decresce do centro do prato em direção às paredes do mesmo, conforme obtido por Solari e Bell (1986). Um fator importante observado por Gesit *et al.* (2003) é a falta de informação sobre o perfil de velocidade de entrada de líquido no trabalho experimental. Gesit *et al.* (2003) realizaram um estudo no qual utilizaram perfis planos e parabólicos de velocidade de entrada do líquido. Assim, conforme citado por Kister (1992) e analisado por Gesit *et al.* (2003), o perfil de velocidade de entrada de líquido possui uma forte influência sobre o perfil do escoamento do líquido ao longo do prato.

O perfil assumido neste estudo foi um perfil plano de velocidades, e esse pode ser um dos fatores dos desvios encontrados. Outros fatores que podem ter influenciado nos desvios apresentados são as correlações de Bennett *et al.* (1983) e van Baten e Krishna (1999c), utilizadas para a fração volumétrica de líquido e para o coeficiente de arraste, respectivamente, e utilizados no cálculo da transferência de momento na interface.

Figura 6.12 - Perfil do componente w da velocidade do líquido em função da coordenada adimensional (x/R) para a região *downstream*.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

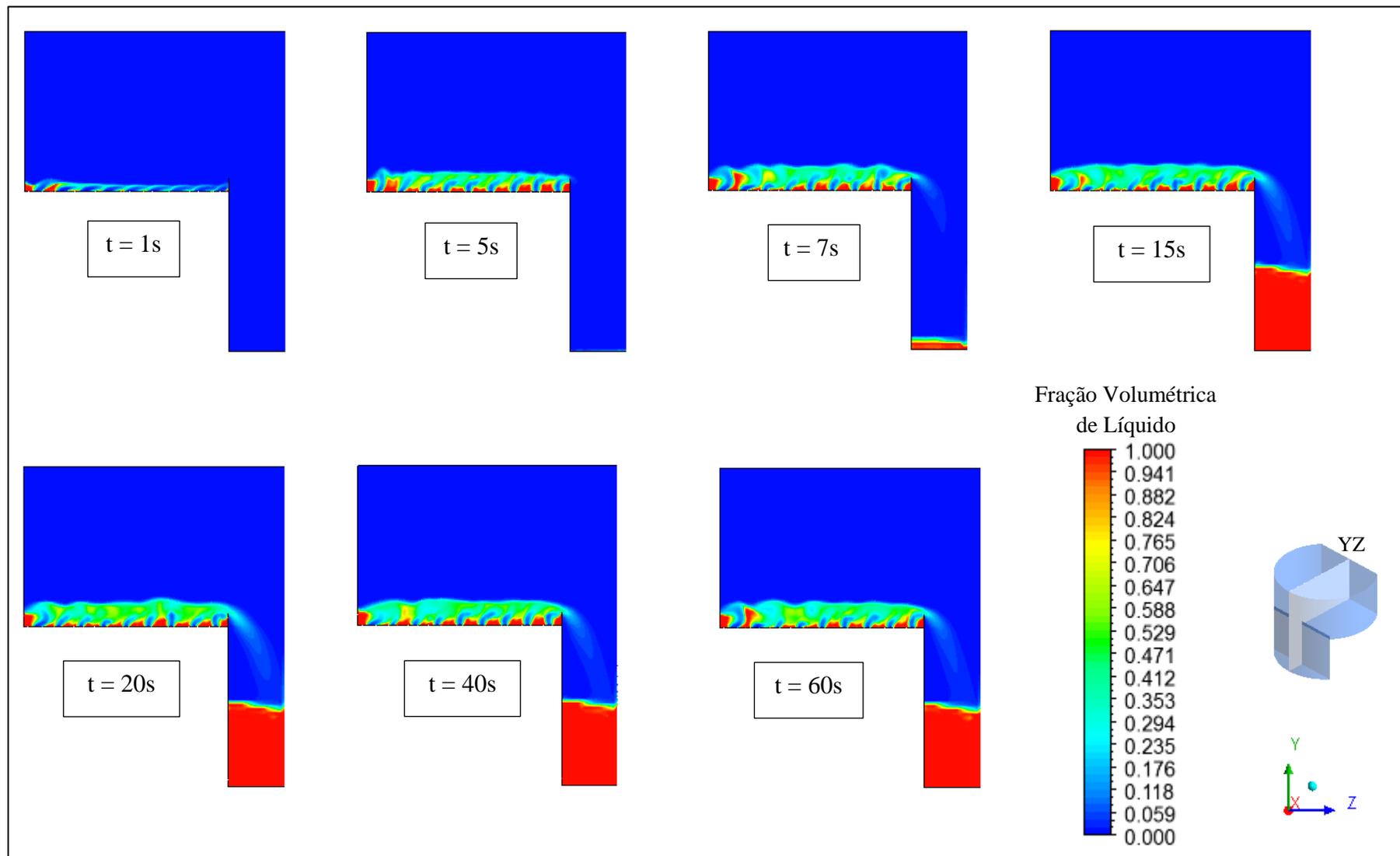
Ao analisar a Figura (6.12), nota-se que a região *downstream* apresentou maiores desvios que a região *upstream*, tanto na região central do prato como nas regiões das paredes. A região *downstream* é uma região que possui maior potencial de apresentar desvios devido ao fato de englobar maior número de regiões “críticas” do prato, tais como as regiões de recirculação e de estagnação, além do efeito gerado pela represa sobre o escoamento.

Como serão apresentadas nos resultados a seguir, algumas regiões próximas à represa possuem certa tendência a formar turbilhões, os quais conduzem à recirculação, estagnação e até fluxos retrógrados de líquido. Isto se deve ao fato de o líquido que colide com a represa possuir uma tendência a recuar sobre o prato e assim influenciar o escoamento do líquido que está indo de encontro à represa, conduzindo ao surgimento das chamadas regiões “críticas”. Esses fatores podem explicar os menores valores de velocidades obtidos pelas simulações na região central da região *downstream*, quando comparados com os valores experimentais, pois esses fatores geram maiores dificuldades numéricas e assim podem levar a uma maior diferença entre o resultado experimental e o simulado. Uma maior discussão dessas regiões será apresentada mais adiante.

6.2.3 Fração Volumétrica

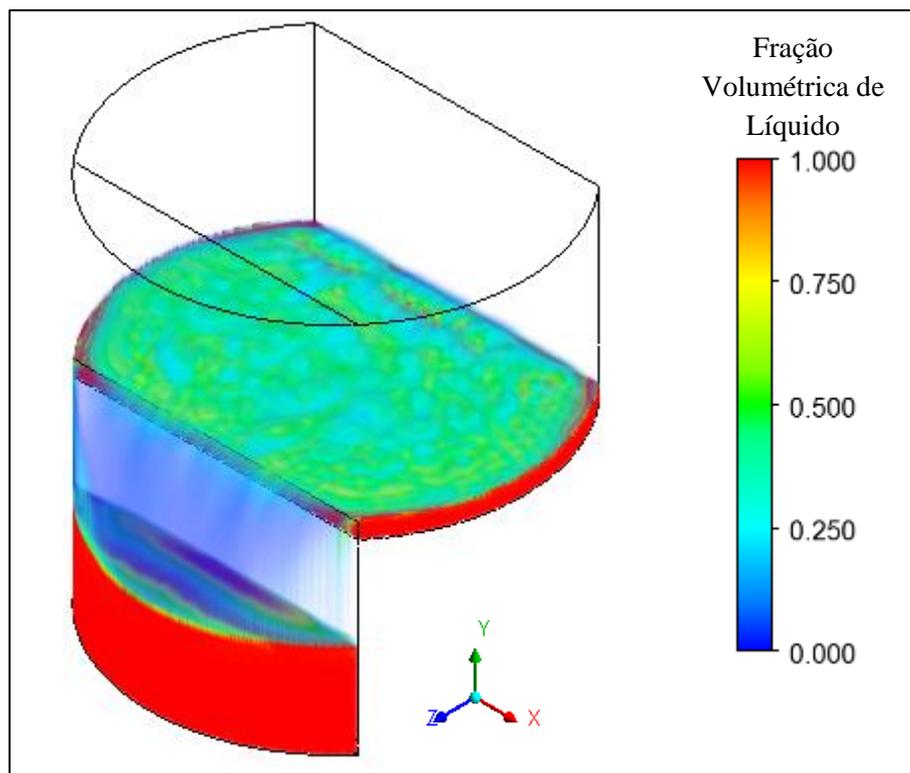
Na Figura (6.13) está apresentada a distribuição das frações volumétricas do líquido para certos instantes de tempo. Através destes contornos pode-se efetuar uma análise qualitativa do escoamento sobre o prato. Nota-se que o período de enchimento do prato está em torno de 7 segundos do tempo real, após o qual já se pode verificar que o líquido começa a descer pelo *downcomer*. A medida que o líquido começa a descer pelo *downcomer* se inicia a formação de um acúmulo de líquido sobre o mesmo, muitas vezes referenciado na literatura como “piscina”. Este acúmulo de líquido foi forçado pela condição de contorno de saída de líquido, na qual foi aplicada uma condição de pressão com a intenção de simular o prato inferior, conforme já explicado anteriormente. Verifica-se que a altura do acúmulo de líquido se estabilizou após aproximadamente 15 segundos do tempo real, e os contornos apresentados nos tempos posteriores mostram uma pequena variação na distribuição de fração volumétrica do líquido, confirmando o estado “quasi-estacionário” ao qual tendem os escoamentos sobre pratos perfurados.

Observando-se, por exemplo, o tempo de 40 segundos, percebe-se a influência de algumas regiões sobre o prato. Ao analisar a legenda do contorno no tempo citado, observa-se uma alta concentração de líquido na entrada do prato e, ao começar a cruzar a chamada área de borbulhamento, chamada também de área ativa, há um decréscimo dessa concentração de líquido devido ao encontro com a fase gasosa, e ambos formam uma dispersão (espuma), ocorrendo o arraste de parcelas do líquido pelo gás. Ao longo da área de borbulhamento a fração de líquido permanece mais baixa e volta a aumentar no limite da área de borbulhamento, quando o escoamento atinge a represa. Outra região que se pode observar é a região do *downcomer* que, devido ao fato de parte do vapor ser arrastado junto com o líquido ao longo da represa, o *downcomer* tem como importante função a de garantir que o máximo possível de vapor arrastado seja recuperado e assim líquido com poucas bolhas atinja o prato inferior. O contorno no tempo de 40 segundos mostra este fenômeno, no qual a fração de líquido na “piscina” é consideravelmente maior que a de vapor. Analogamente à Figura (6.13), na Figura (6.14) podem ser analisados os mesmos resultados discutidos anteriormente, sendo a Figura (6.14) construída pela ferramenta de renderização de volume, a qual possibilita uma importante visão tridimensional do escoamento sobre o prato. Esta figura possibilita visualizar claramente a região de espuma formada pela mistura entre a fase líquida e gasosa, mostrando o perfil de regime intensamente turbulento que ocorre sobre pratos perfurados.

Figura 6.13 - Fração volumétrica de líquido ao longo prato em um plano YZ ($x = 0$ m).

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.14 – Fração volumétrica de líquido para o instante de 60s a partir da ferramenta *Volume Rendering* (Renderização de Volume).



Fonte: Elaborado pelo Autor.

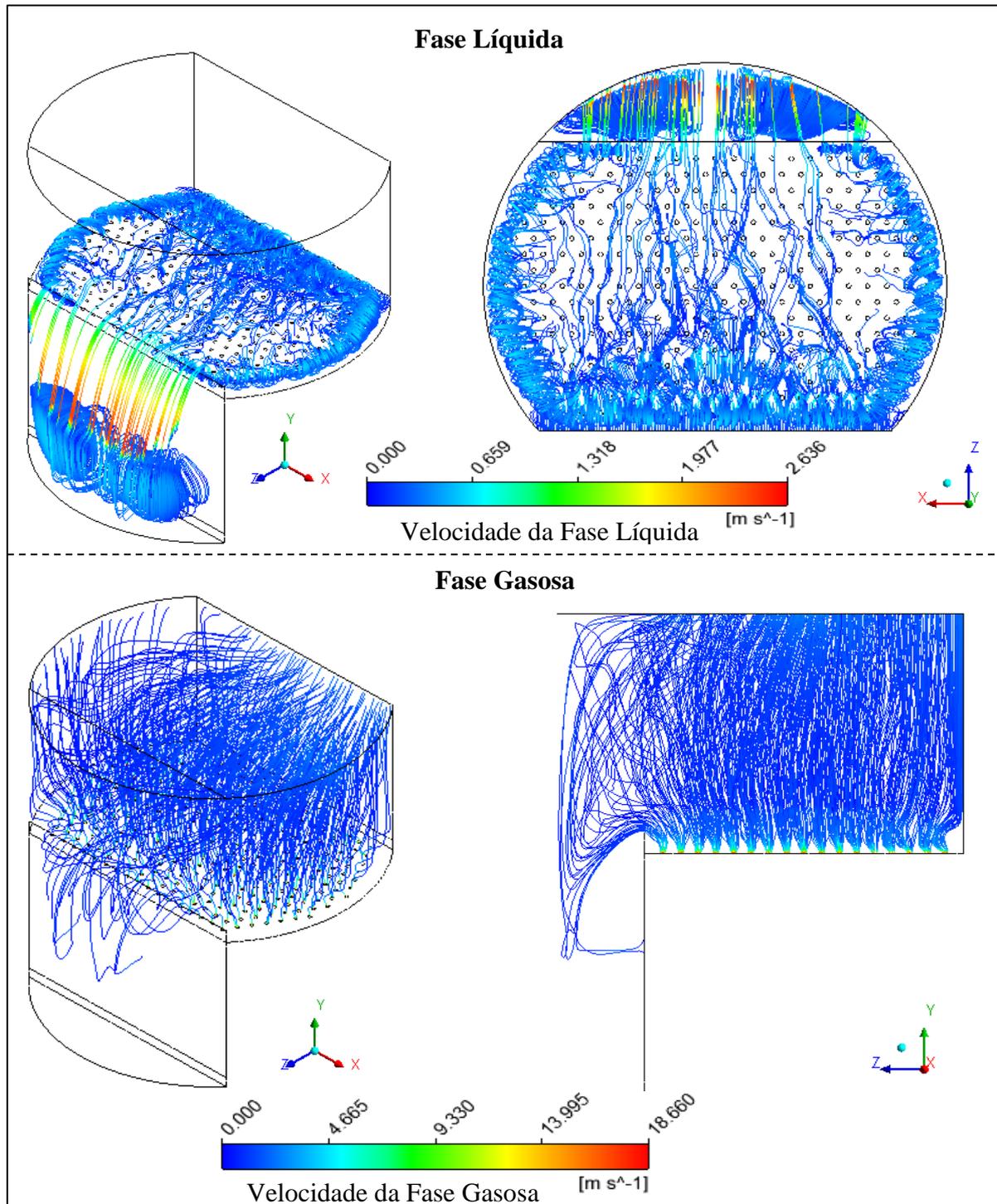
6.2.4 Linhas de Corrente

Na Figura (6.15) são apresentadas as linhas de corrente das fases líquida e gasosa. A partir destas pode-se conhecer tanto a trajetória percorrida pelas fases ao longo do prato, assim como a variação da velocidade das fases durante o escoamento sobre o estágio. Ao analisar as linhas de corrente da fase líquida observa-se um deslocamento dessas linhas em direção às paredes do prato, que persiste até o líquido percorrer a represa, fazendo com que as linhas de corrente se concentrem mais nos locais periféricos do prato. Os locais periféricos do prato são as regiões sem perfurações, o que pode indicar que o líquido está apresentando caminhos preferenciais devido ao vapor que entra pela área de borbulhamento. Os caminhos preferenciais são indesejados no sentido de diminuir o contato líquido-vapor e, assim, interferir na transferência de massa e energia do estágio. Assim, uma possibilidade de reduzir esse fenômeno seria a utilização de mais perfurações nas regiões periféricas do prato.

Além dessa tendência apresentada pela fase líquida, nota-se também que as linhas de corrente do líquido tendem a formar turbilhões próximos às paredes, os quais indicam possíveis zonas de recirculação e estagnação, dois fatores que interferem nos fenômenos de

transferência sobre o prato. Já a fase gasosa apresenta um movimento ascendente até atingir o prato superior, com a observação da importância do *downcomer*, cuja principal função pode ser analisada, devido ao fato de não ocorrer linhas de corrente da fase gasosa em direção ao prato inferior.

Figura 6.15 - Linhas de corrente da fase líquida e da fase gasosa.

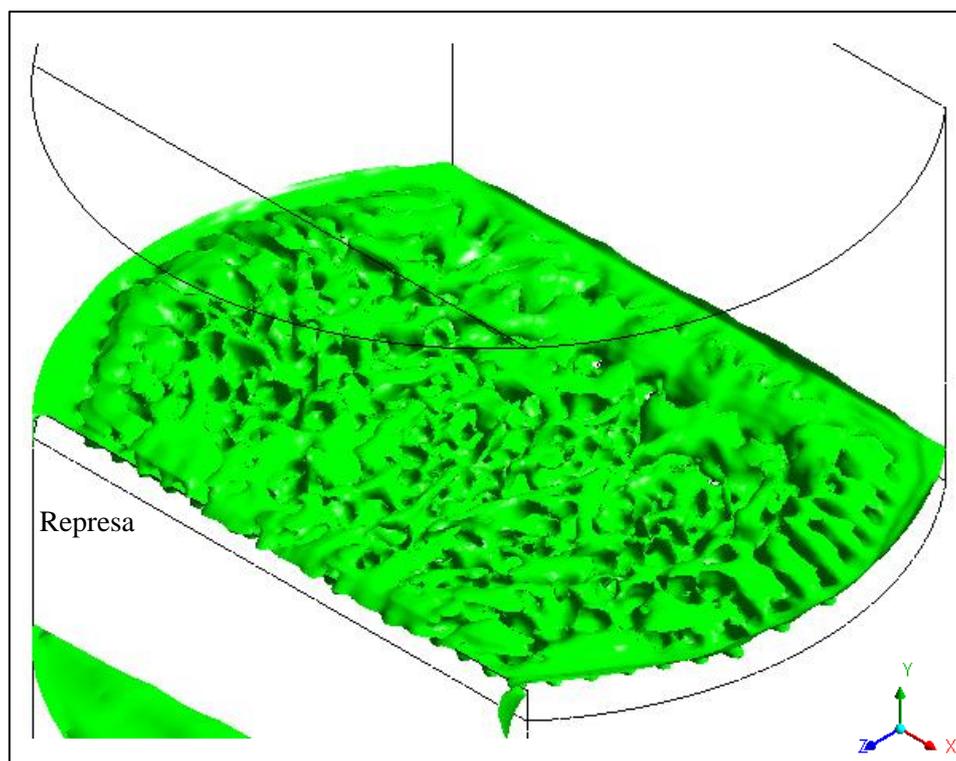


Fonte: Elaborado pelo Autor.

6.2.5 Isosuperfície

A análise do grau de mistura entre as fases é uma variável importante e pode ser observada na Figura (6.16), a qual apresenta uma isosuperfície com fração volumétrica de líquido igual a 0,5. Através da Figura (6.16) pode-se visualizar uma superfície bastante irregular, porém observa-se também que junto às paredes do prato o líquido tende a formar uma região sem borbulhamento com baixo grau de mistura. Na região ativa do prato (região central) nota-se uma condição de vigorosa mistura entre o líquido e o vapor, variando de intensidade conforme a posição ocupada no prato. Conforme Noriler (2007) cita em seu trabalho, as regiões nas quais ocorre um aglomerado de líquido com baixo grau de mistura, possivelmente afetará o desempenho da transferência de calor e massa entre as fases, conforme pode ser observado nas periferias do prato.

Figura 6.16 – Isosuperfície com fração volumétrica de líquido de 0,5.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

6.2.6 Mapas de Contorno do Componente w da Velocidade do Líquido

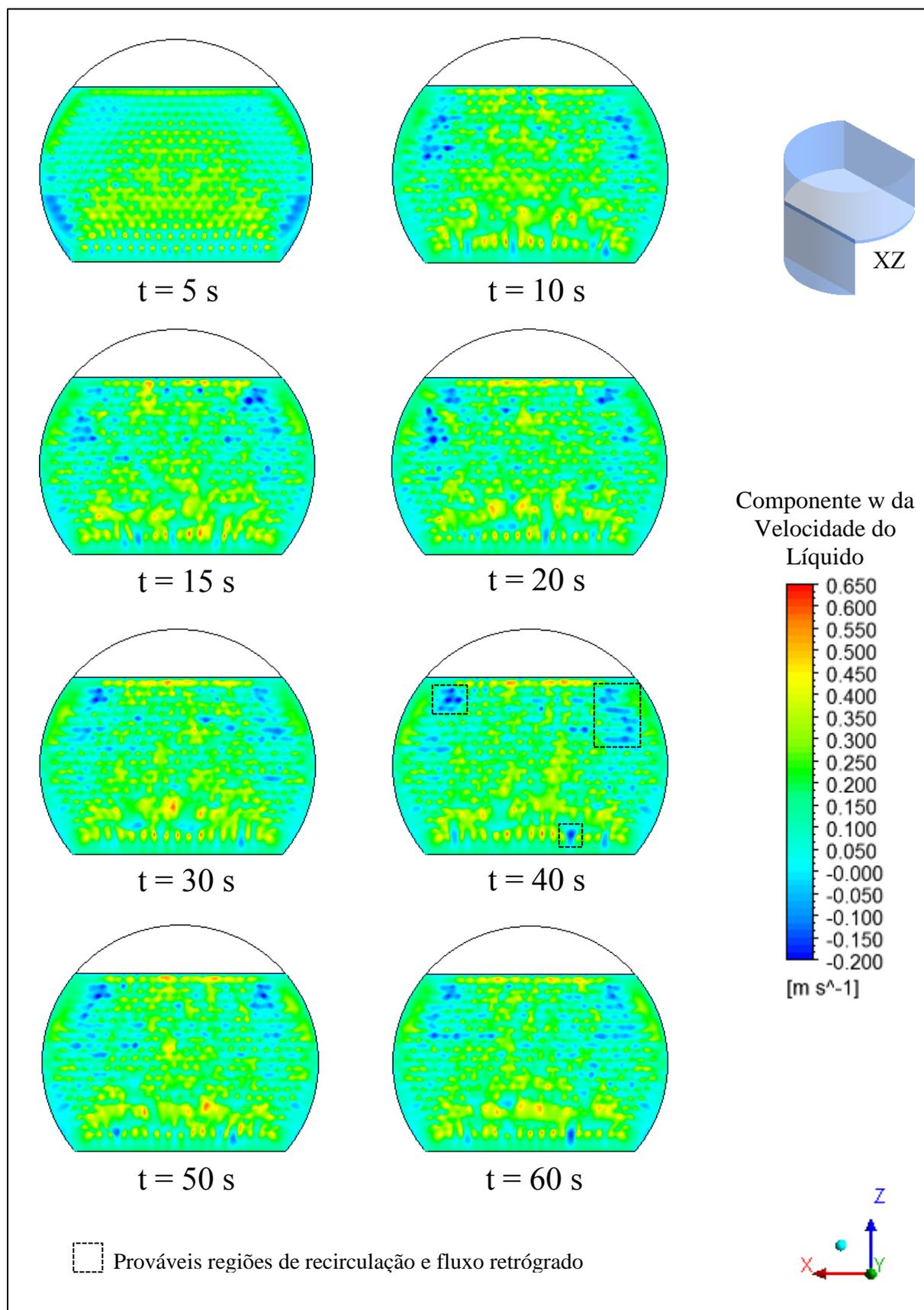
Conforme discutido anteriormente, Solari e Bell (1986) avaliaram o perfil de velocidades sobre o prato em diversas posições a 0,038 metros acima da base do prato. Dessa

forma, construiu-se contornos do componente w da velocidade da fase líquida em um plano XZ a 0,038 metros acima da base do prato ($y = 0,038$ m), com o intuito de analisar a variação da velocidade ao longo do escoamento sobre o prato perfurado. A Figura (6.17) mostra esses contornos para diferentes instantes de tempo, nos quais se nota que a velocidade do líquido varia conforme as regiões do prato no qual o mesmo se encontra. É importante verificar também que as regiões tendem a possuir perfis de velocidades muito similares com o decorrer do tempo.

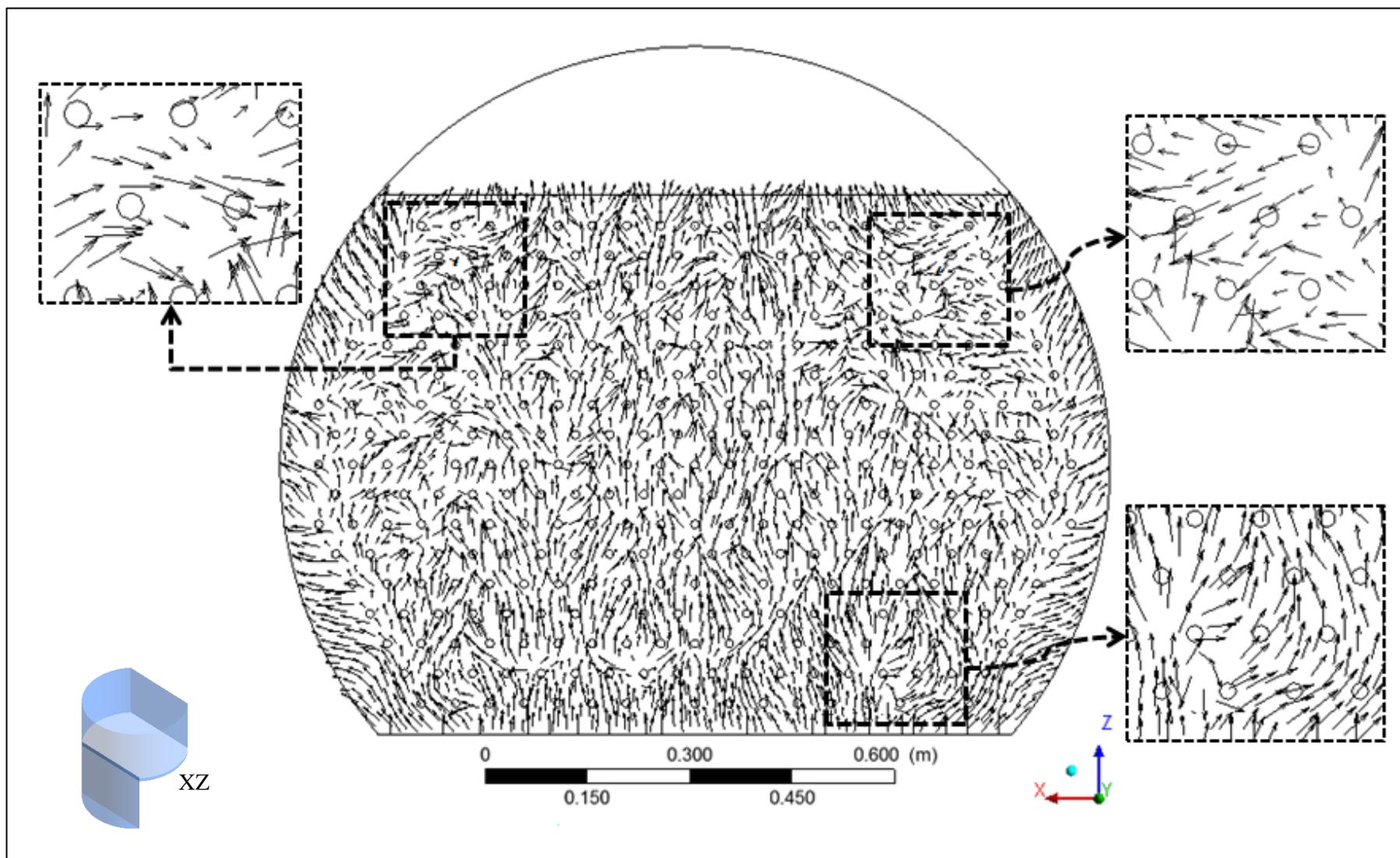
No entanto, um fator importante presente nesses contornos é a prevalência de algumas regiões de coloração azul claro e escuro. Essas regiões, como pode ser observado na legenda da Figura (6.17), são regiões de velocidades baixas e até mesmo negativas. As regiões de coloração azul claro indicam possíveis regiões de estagnação e/ou velocidades baixas, estando presentes em locais mais próximos às paredes, confirmando os resultados já encontrados pelas linhas de corrente. As regiões de coloração azul mais escuro são locais com velocidades negativas de maior magnitude, ou seja, o escoamento nesses locais possui sentido negativo ao eixo de referência, e assim indicam um escoamento contrário ao que era esperado para o escoamento, indicando possíveis locais de recirculação e fluxo estagnado.

A Figura (6.18) apresenta o mapa de vetores para o componente w da velocidade do líquido no instante de 40 segundos e comparou-se com o contorno apresentado na Figura (6.17) para o mesmo instante de tempo. Ao se analisar as regiões de coloração azul escuro no mapa de vetores, pode-se notar que alguns vetores de velocidade possuem sentido contrário ao escoamento, conforme observado pelo mapa de contornos. Ainda pode-se observar certa tendência a se formar turbilhões nesses locais, indicando regiões com potencial de recirculação e fluxo retrógrado. Outra observação importante na Figura (6.18) é a forte tendência da fase líquida se direcionar às regiões periféricas do prato, orientando-se às paredes do mesmo, caracterizando a existência de caminhos preferenciais. Uma possível explicação para este fato é a falta de orifícios próximos às paredes, fazendo com a fase líquida, ao encontrar a fase gasosa na área ativa, apresente a tendência de seguir um escoamento em regiões mais amenas sobre o prato, diminuindo o contato líquido-vapor e prejudicando a transferência de calor e massa.

Uma forma de se evitar esses caminhos preferenciais da fase líquida seria colocar mais perfurações nas regiões periféricas do prato, evitando ao máximo deixar regiões sem orifícios. Outra alternativa, seria a utilização de chicanas na entrada do prato, para forçar o escoamento da fase líquida na direção da área de borbulhamento, e também chicanas na saída do prato, com a intenção de evitar a formação de regiões críticas próximo à represa.

Figura 6.17 - Contornos do componente w da velocidade do líquido em um plano XZ ($y = 0,038$ m).

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.18 - Mapa de vetores da velocidade do líquido para o instante de 40s em um plano XZ ($y = 0,038$ m).

Fonte: Elaborado pelo Autor.

6.3 Análise da Transferência de Espécies Químicas

Os resultados provenientes das simulações de transferência de espécies químicas serão apresentadas em sequência, conforme o modelo utilizado para a obtenção dos coeficientes de transferência de massa de ambas as fases, sendo: Modelo de Higbie, Modelo SRS e Modelo de Zuiderweg.

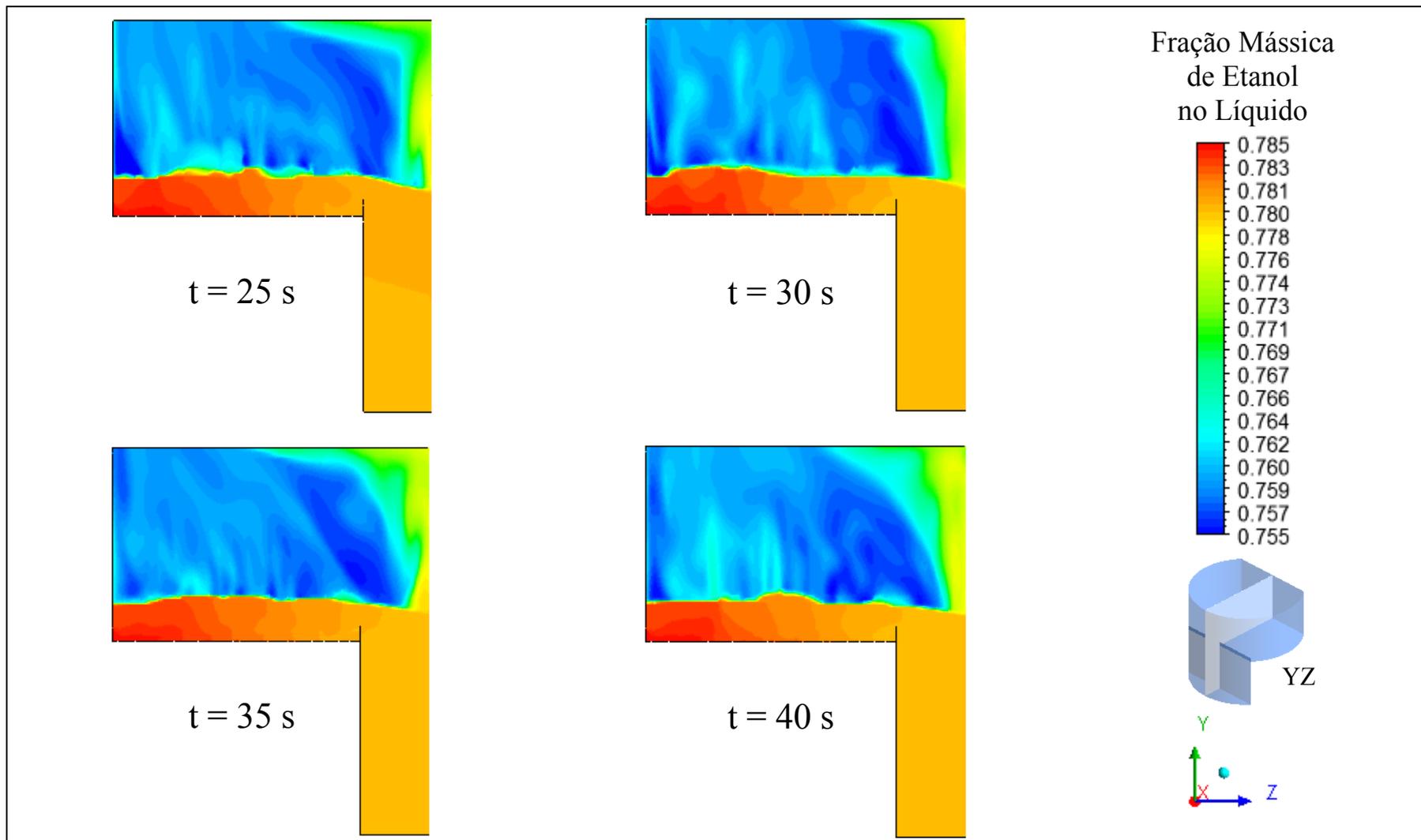
6.3.1 Campo de Frações Mássicas

A partir das Figuras (6.19), (6.21) e (6.23), visualiza-se a variação da fração mássica de etanol na fase líquida ao longo do prato em um plano YZ localizado no centro do prato ($x = 0$) para diversos instantes de tempo. Optou-se pelos instantes de tempo presentes na figura devido a essa faixa já estar contida no regime “quasi-estacionário”. A partir dessas figuras observa-se que o líquido entra no prato com uma maior fração de etanol e à medida que escoo sobre o prato em direção à represa, apresenta uma diminuição na concentração de etanol, que nesse caso é o mais volátil, enquanto que possui um aumento na concentração do componente menos volátil, nesse caso a água, devido à transferência de espécies químicas com a fase vapor. Analisando essas figuras, nota-se que os maiores gradientes de concentração estão na direção do fluxo de líquido, enquanto que na direção perpendicular ao fluxo principal não existem grandes variações. Outro fator a ser observado, é a pouca diferença que existe nos campos de frações mássicas apresentadas em cada instante de tempo, caracterizando assim o estado pseudo-estacionário.

As mesmas observações se aplicam para as Figuras (6.20), (6.22) e (6.24), que apresenta o campo de frações mássicas de etanol na fase líquida ao longo do prato em um plano XZ localizado a uma altura de 0,038 metros acima da base do prato ($y = 0,038$ m) para diversos instantes de tempo. Vale também ressaltar o fato de a mistura líquida apresentar variações de frações ao longo de seu inventário, o que implica no fator já comentado anteriormente de eficiências de troca de espécies químicas diferentes ao longo do mesmo estágio. Assim, nota-se que não ocorre uma mistura perfeita da fase líquida, ou seja, a fase líquida não possui um valor constante de fração mássica ao longo de seu inventário, como é considerado em alguns modelos macroscópicos. Ressaltando que os modelos macroscópicos são modelos essenciais no estudo global de colunas de destilação. No entanto, em estudos de

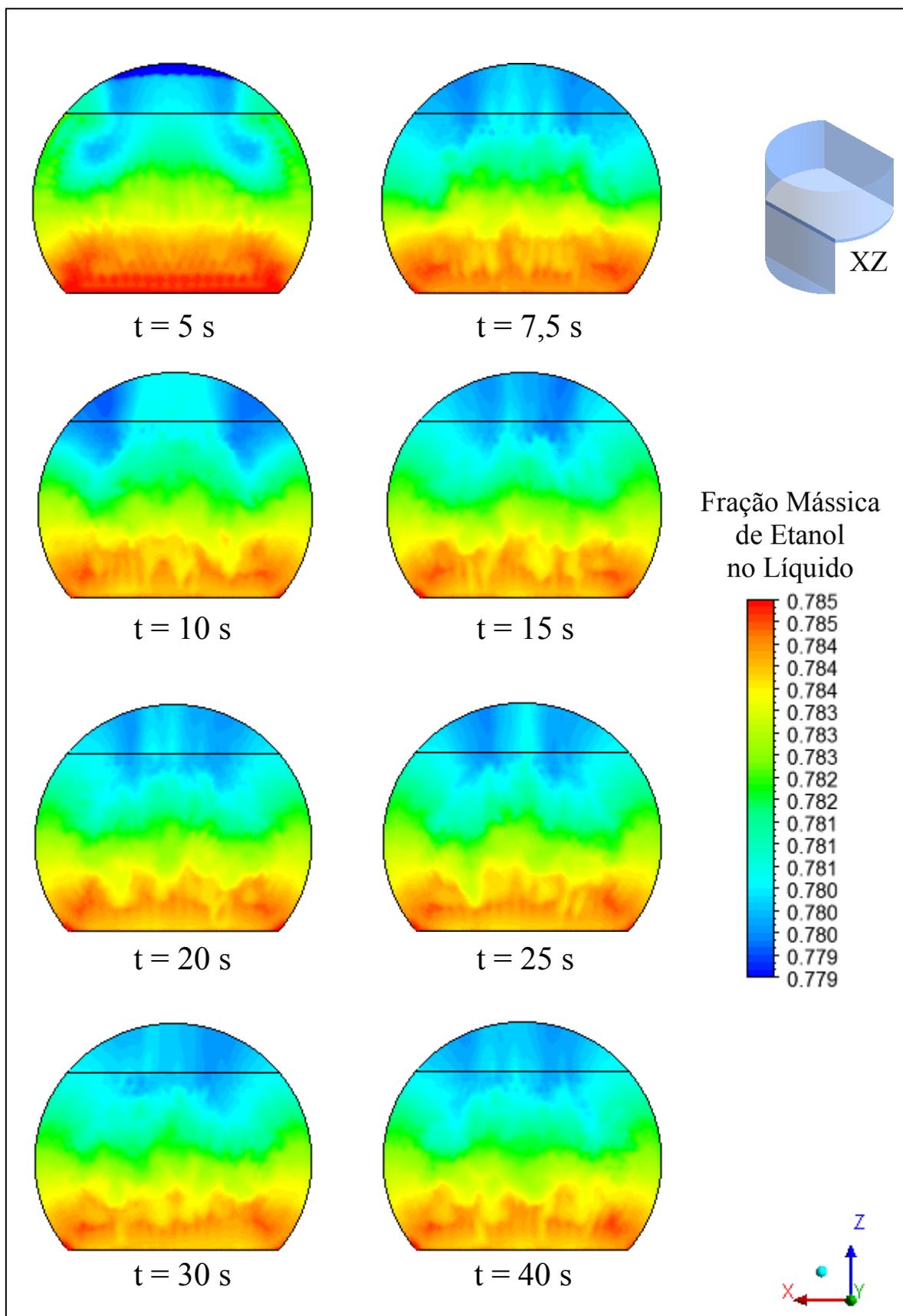
otimização e análise mais aprofundada do escoamento, esses modelos não conseguem capturar a existência de propriedades importantes do escoamento, tornando-se necessário um estudo da forma como o apresentado neste trabalho.

A discussão anteriormente citada vale para todos os modelos utilizados, apresentados nas Figuras de (6.19) à (6.24). Sendo que as maiores variações de fração mássica ocorreram para o modelo SRS, o qual também apresentou maior transferência de espécies químicas, conforme será apresentado adiante.

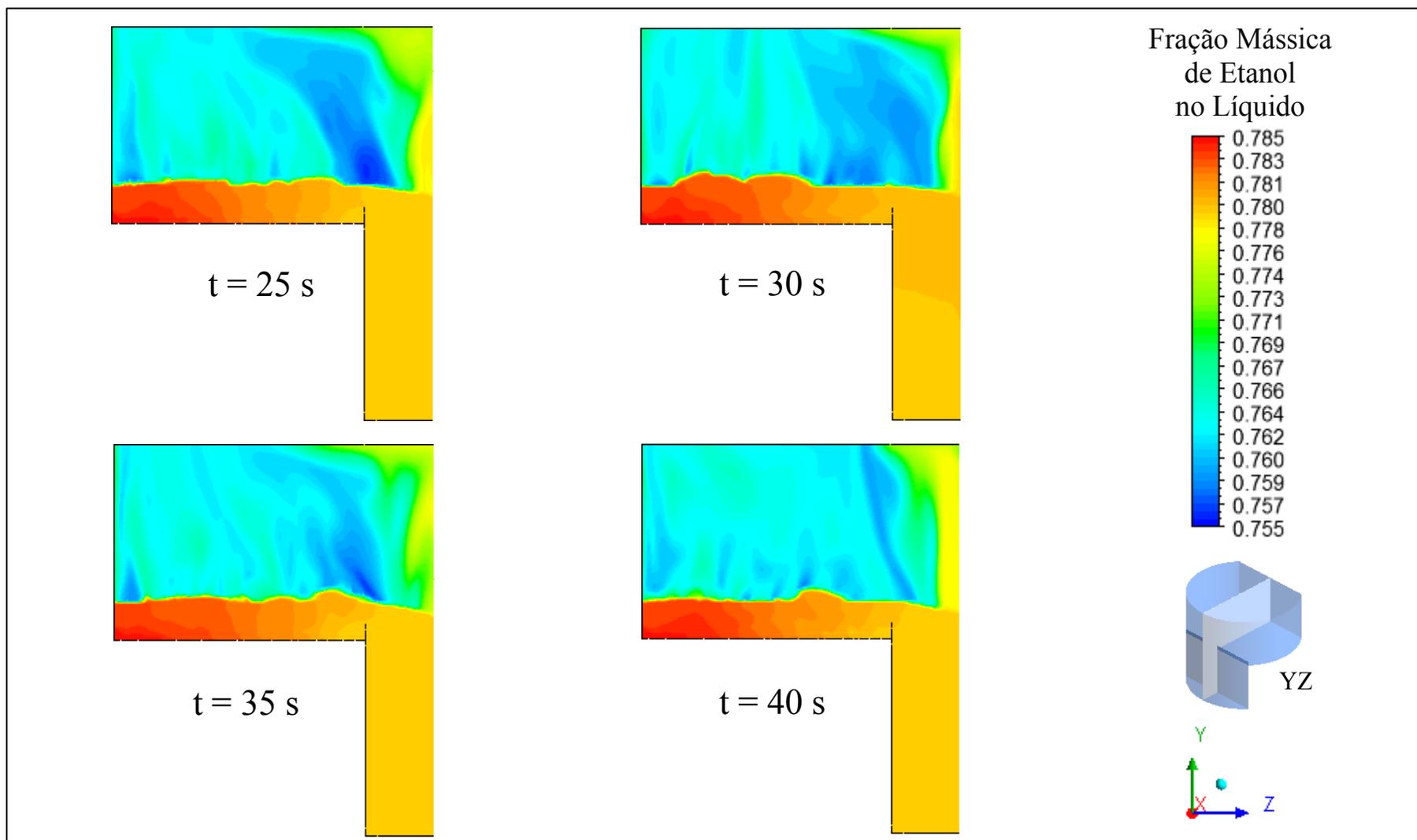
Figura 6.19 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo de Higbie.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.20 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano XZ ($y = 0.038$ m), para o modelo de Higbie.

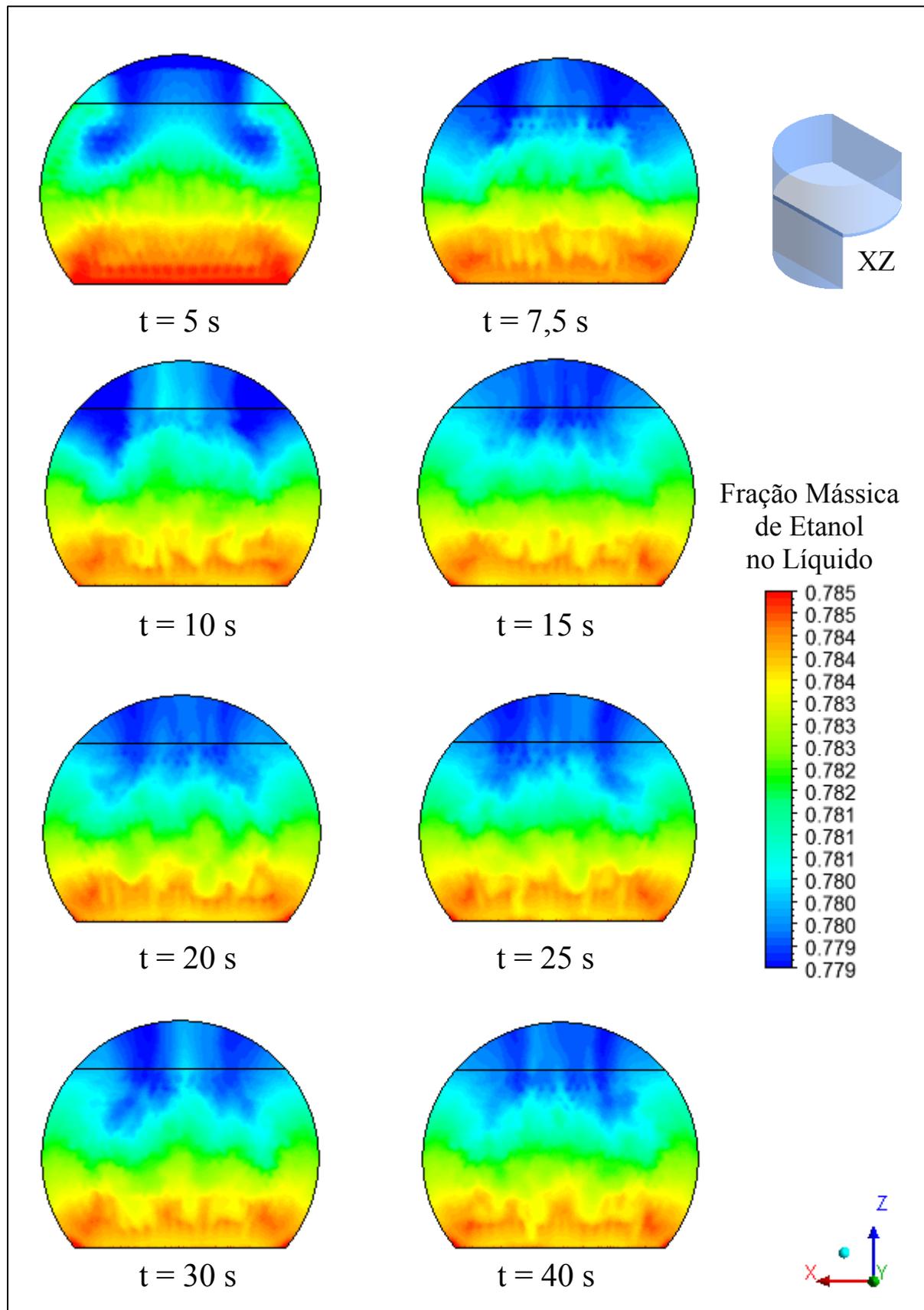


Fonte: Elaborado pelo Autor.

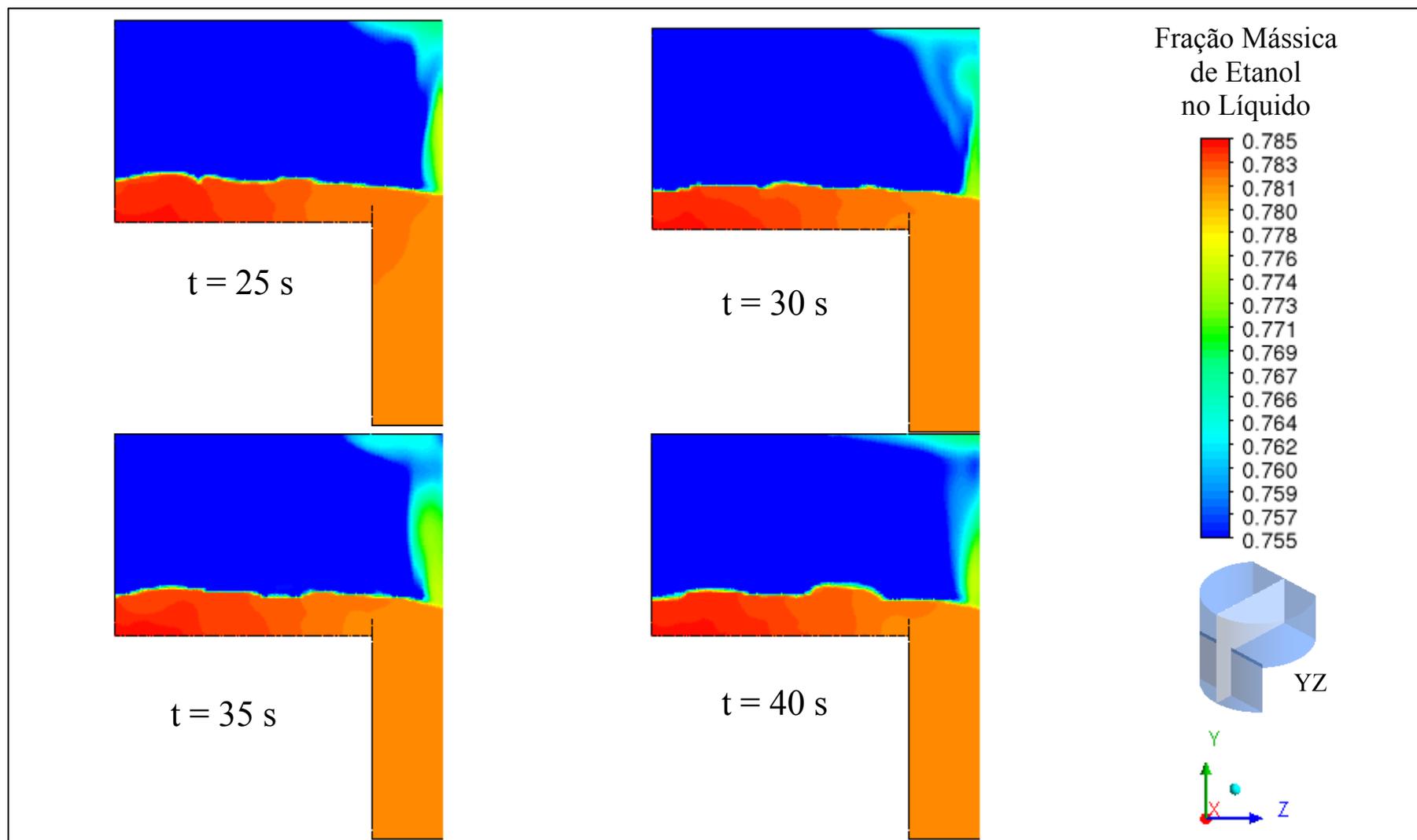
Figura 6.21 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo SRS.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.22 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano XZ ($y = 0.038$ m), para o modelo SRS.

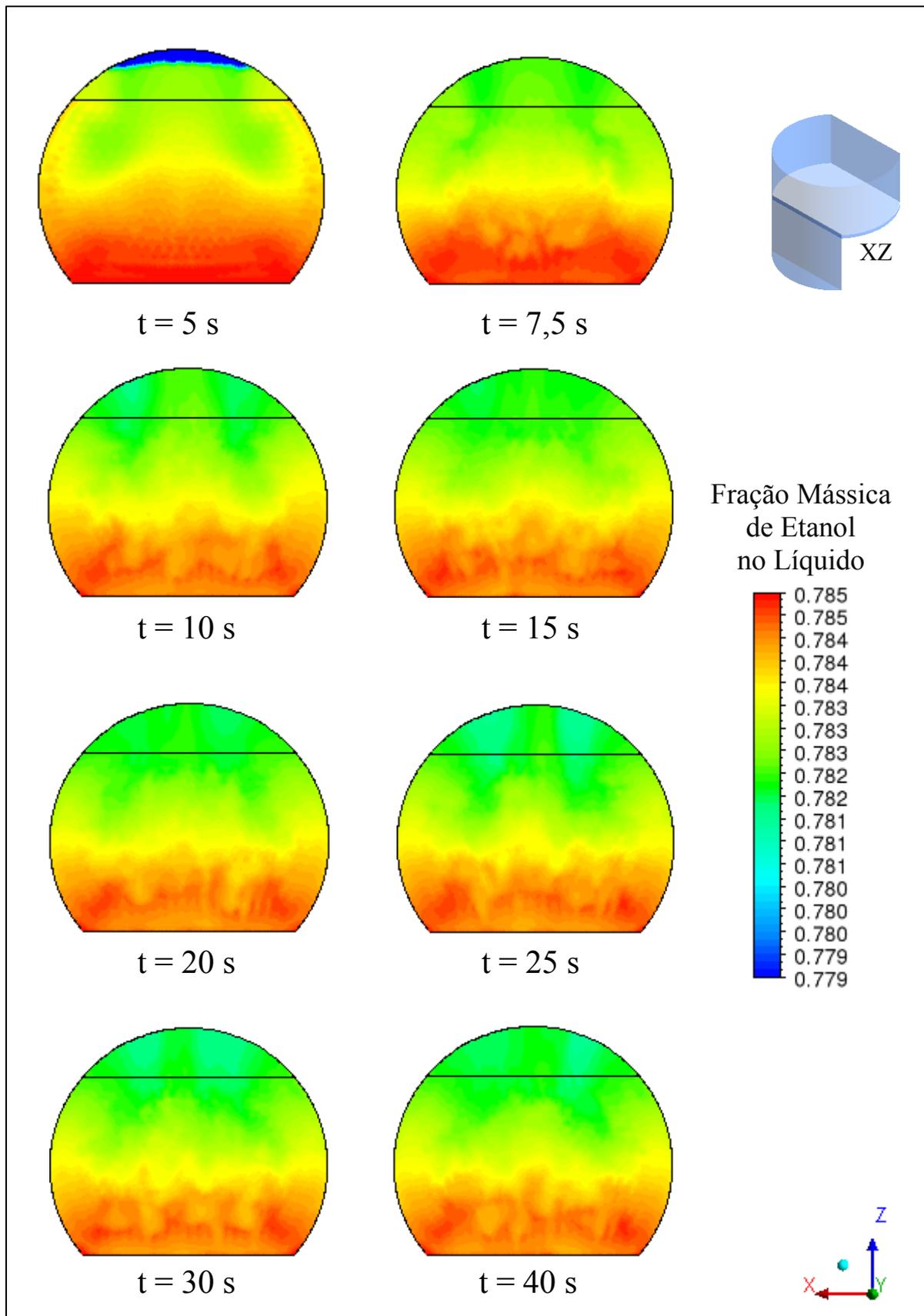


Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.23 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo de zuiderweg.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

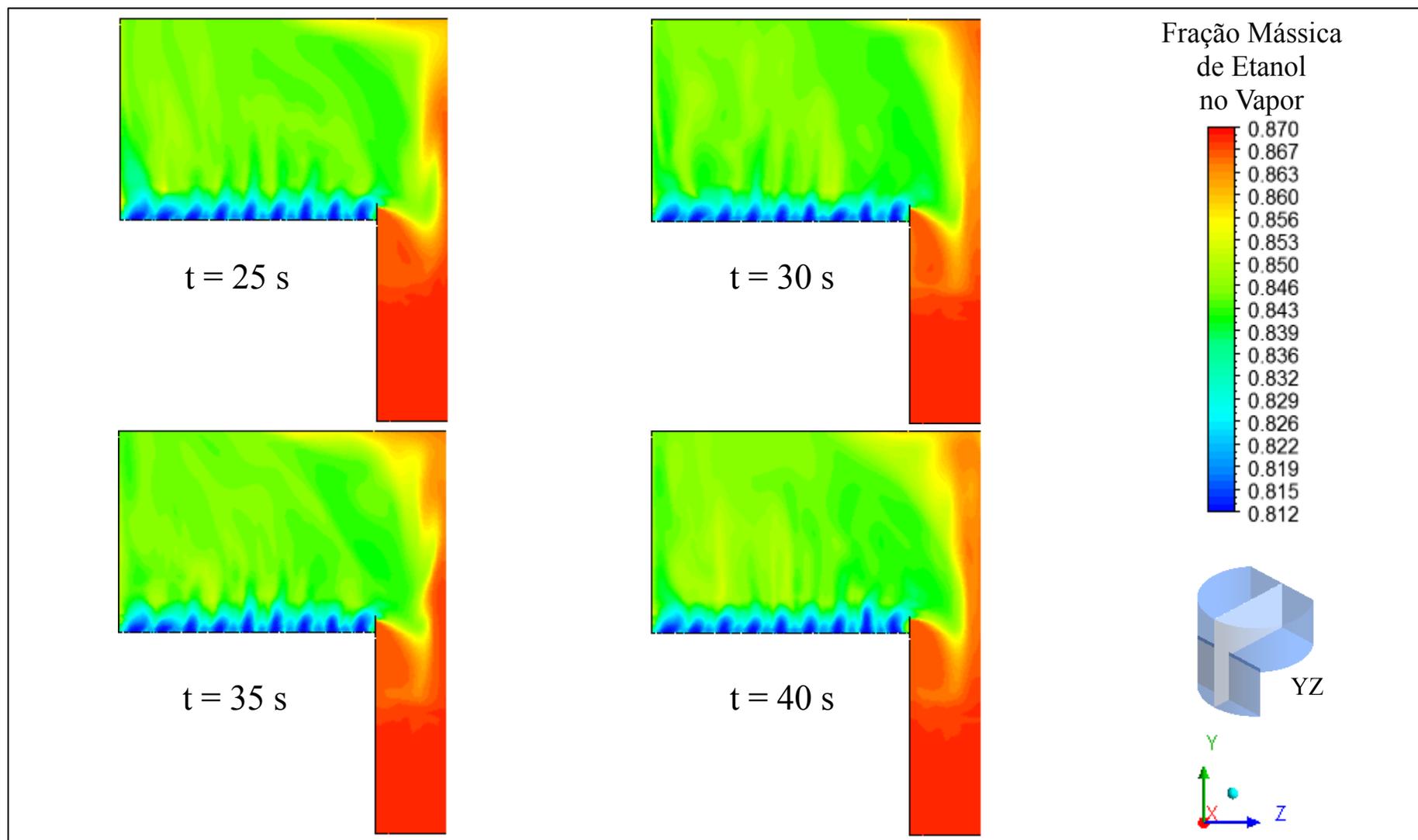
Figura 6.24 - Fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano XZ ($y = 0.038$ m), para o modelo de Zuiderweg.



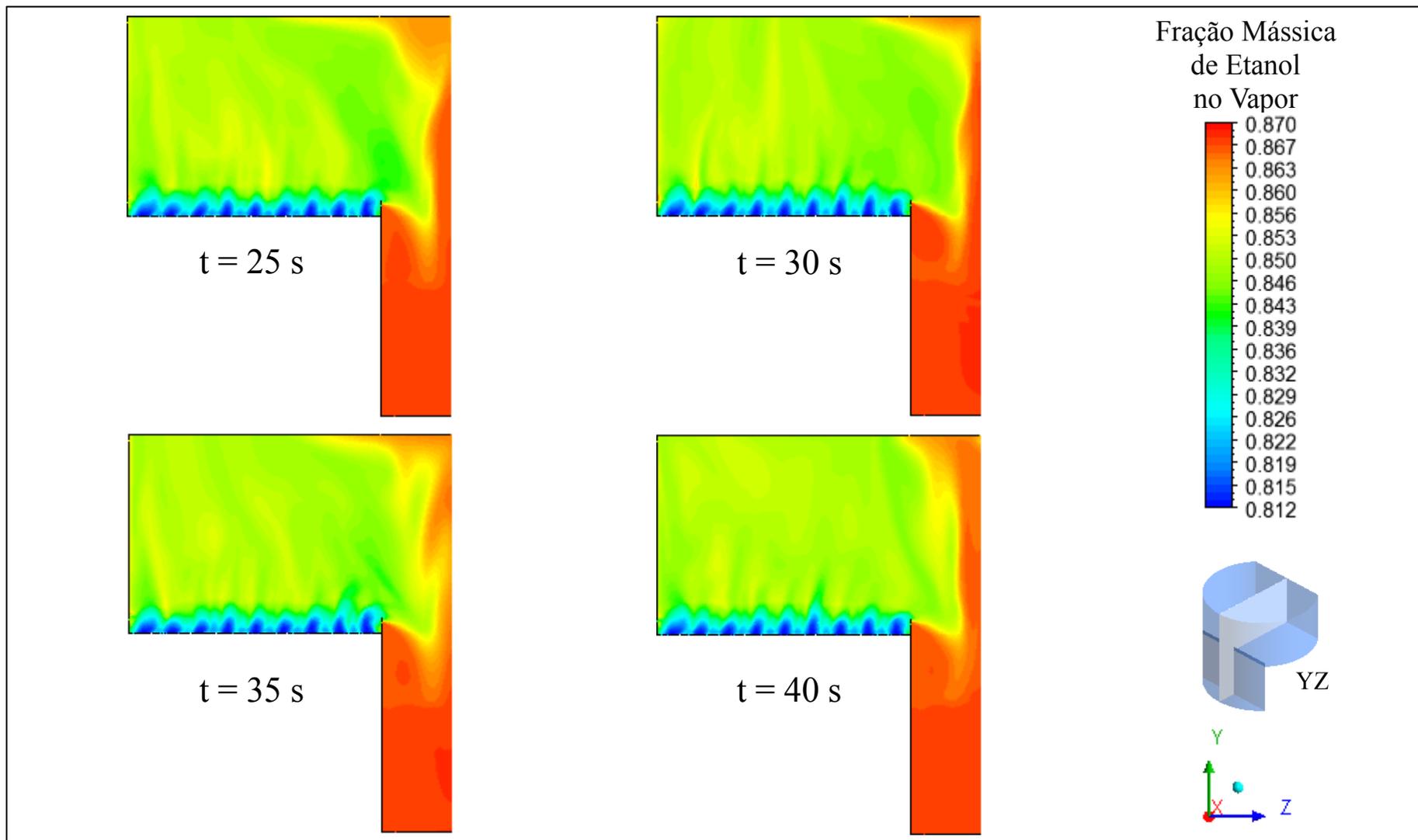
Fonte: Elaborado pelo Autor.

As Figuras (6.25) à (6.27) apresentam o campo de frações mássicas de etanol na fase vapor ao longo do prato em um plano YZ localizado no centro do prato ($x = 0$) para diversos instantes de tempo. Conforme pode ser analisado, a fração mássica de etanol no vapor aumenta conforme o vapor percorre o prato em sentido ascendente, ou seja, o vapor se torna mais concentrado no componente mais volátil, enquanto que a fração mássica da água diminui. Vale ressaltar também, como pode ser observado, que a concentração de etanol no vapor que sai do prato possui variações na direção do fluxo da fase líquida. Esta variação indica, mais uma vez, que ocorrem variações nas concentrações dos componentes ao longo do estágio para ambas as fases, afetando diretamente a eficiência de transferência de massa ao longo do mesmo prato, mostrando a importância de ser avaliada a eficiência em diferentes pontos sobre o mesmo. Mais sobre essa variação de fração mássica de etanol no vapor na saída do prato será discutida no próximo item.

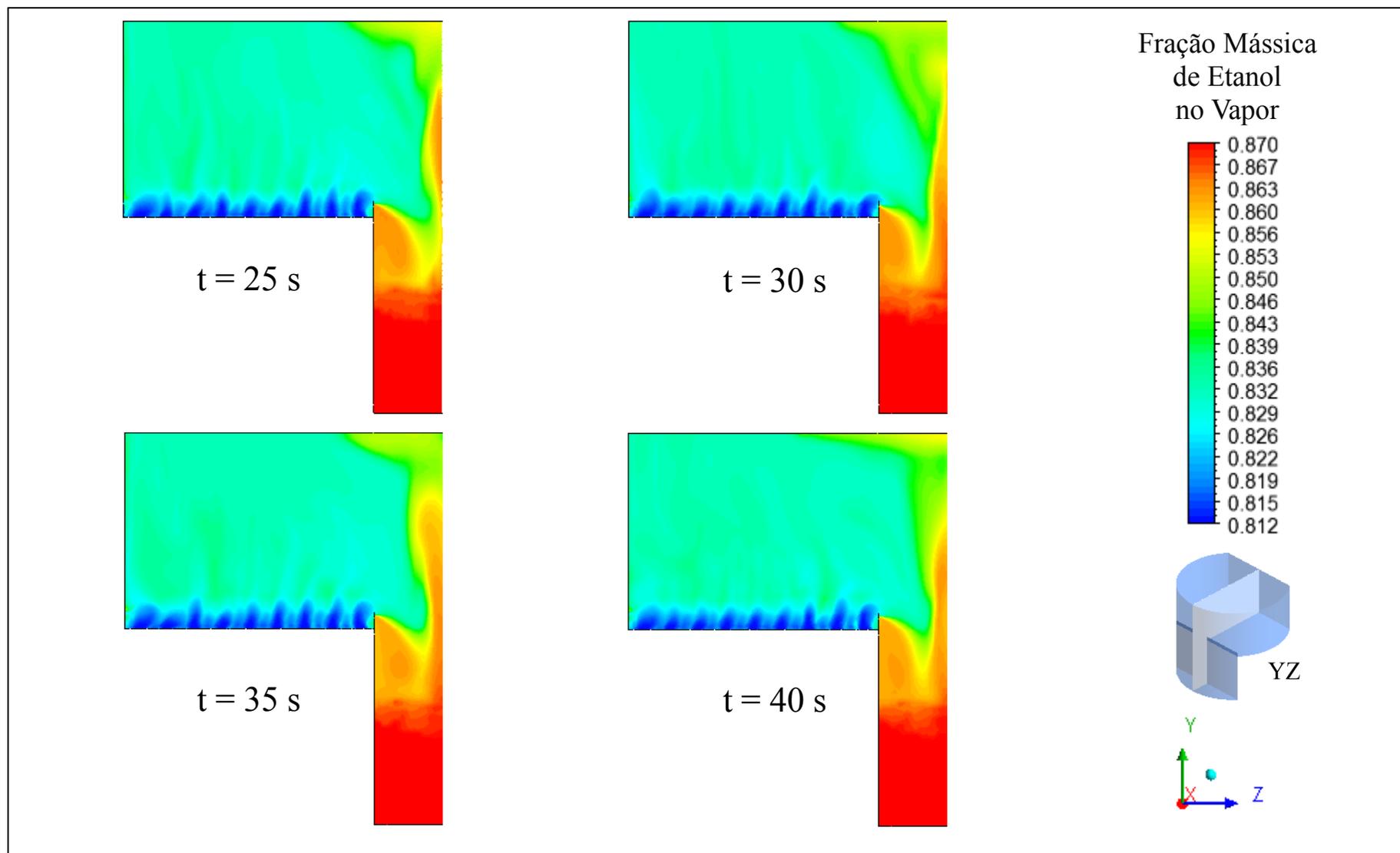
A discussão citada anteriormente vale para todos os modelos utilizados, apresentados nas Figuras de (6.25) à (6.27).

Figura 6.25 - Fração mássica de etanol no vapor ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo de Higbie.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.26 - Fração mássica de etanol no vapor ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo SRS.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

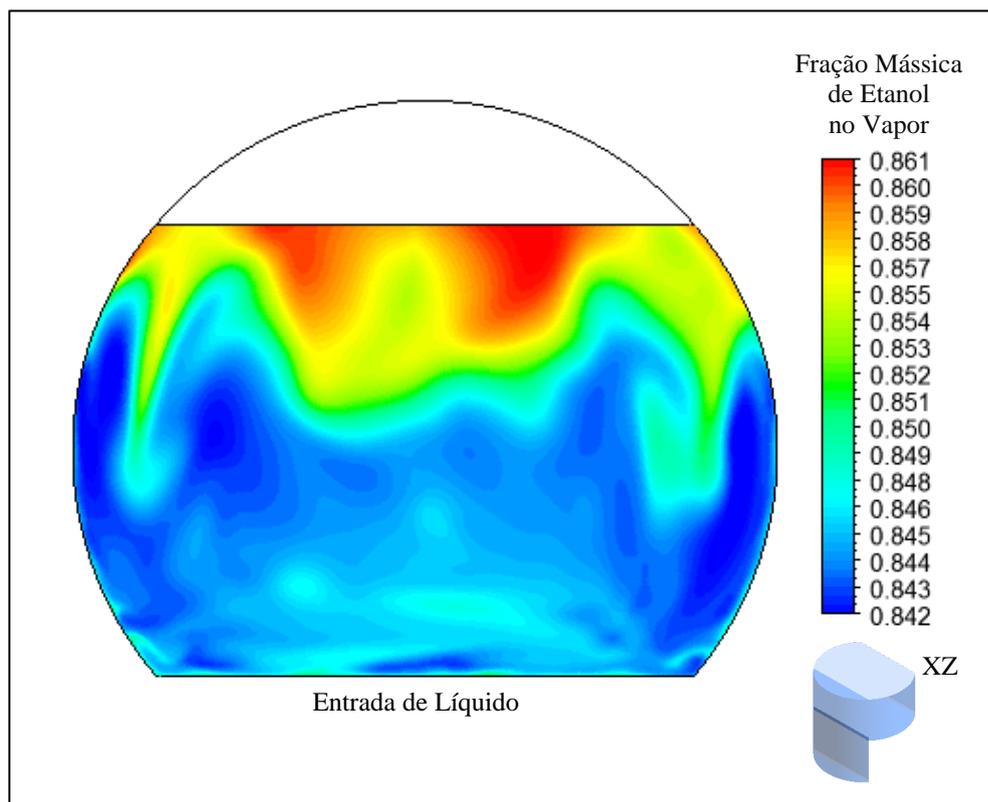
Figura 6.27 - Fração mássica de etanol no vapor ao longo do tempo em um plano central YZ ($x = 0$ m), para o modelo de Zuiderweg.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

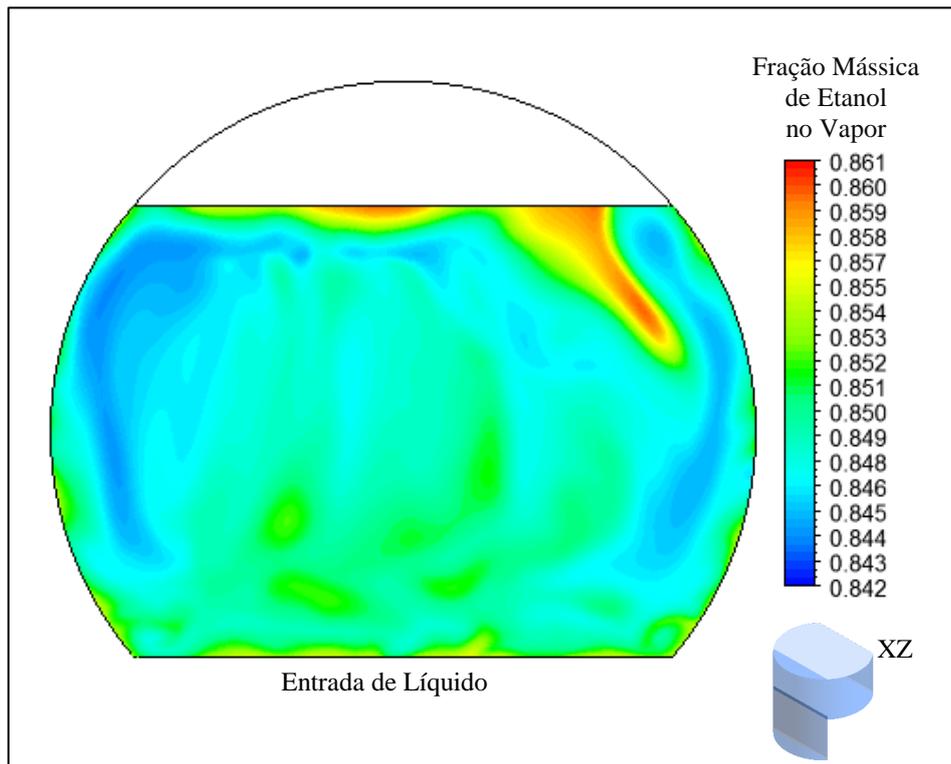
6.3.1.1 Fração Mássica de Etanol na Saída do Prato

As Figuras (6.28) à (6.30) apresentam a variação da fração mássica de etanol no vapor na região de saída do vapor, ou seja, no topo do prato, para o tempo final de 40s. Esta análise constitui um importante resultado, pois possibilita a visualização da não uniformidade do perfil de fração mássica na saída do prato. Assim, como será apresentado adiante, esta não-uniformidade, juntamente com a não-uniformidade ocorrida na fase líquida, implica em diferentes eficiências ao longo do prato, tornando importante a análise da chamada eficiência de ponto. Através dessa eficiência pode-se notar em quais regiões a transferência de massa é mais acentuada.

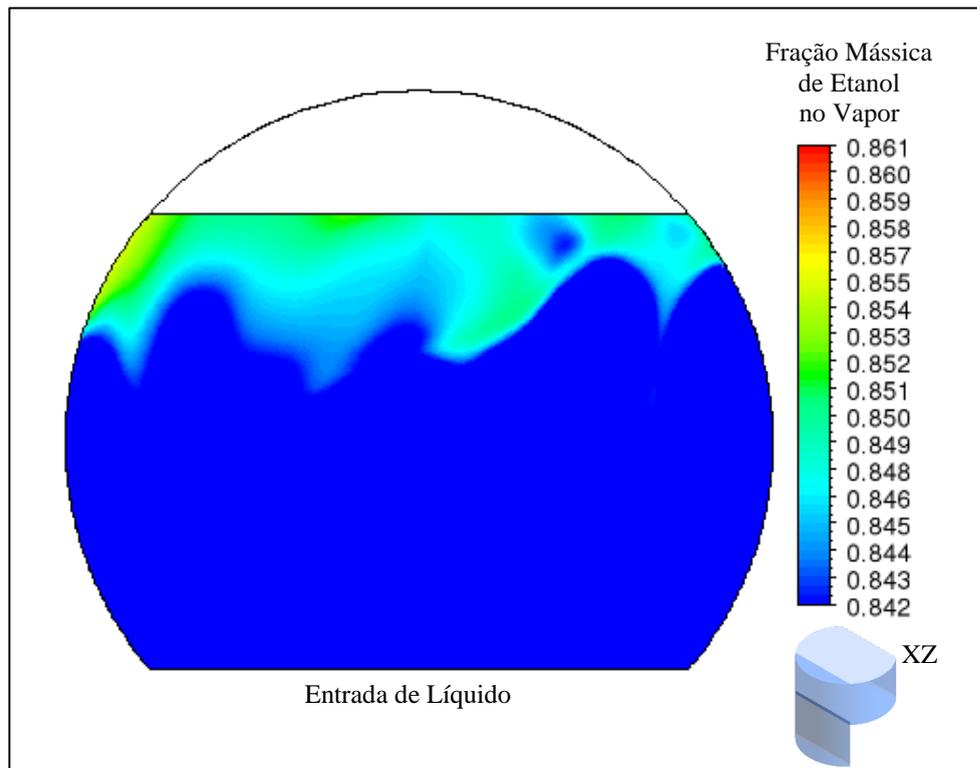
Figura 6.28 – Fração mássica de etanol no vapor na região de saída de vapor (topo), para o modelo de Higbie.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.29 – Fração mássica de etanol no vapor na região de saída de vapor (topo), para o modelo SRS.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.30 – Fração mássica de etanol no vapor na região de saída de vapor (topo), para o modelo de Zuiderweg.

Fonte: Elaborado pelo Autor.

6.3.2 Perfis Médios de Frações Mássicas

As Figuras (6.31) à (6.38) apresentam os perfis médios das frações mássicas de etanol no vapor e no líquido na saída do prato em função do tempo de escoamento real. As retas pontilhadas de cor vermelha representam a média desse perfil da fração mássica de etanol e foi calculada em um intervalo de tempo no qual o escoamento já atingiu o estado “quasi-estacionário”, sendo neste caso escolhida a faixa entre 25 e 40 segundos. As Figuras (6.32), (6.33), (6.35), (6.36) e (6.38) apresentam os perfis da fração mássica de etanol no vapor e no líquido na saída do prato entre os intervalos 25 e 40 segundos, juntamente com o valor médio calculado entre os instantes. A partir dessas figuras, nota-se que as composições do etanol na fase vapor e na fase líquida possuem um comportamento aleatório, da mesma forma como o comportamento apresentado pela altura de líquido claro, o que mostra mais uma vez a complexidade do escoamento sobre pratos perfurados. Vale ressaltar que esta oscilação é aleatória, e não periódica.

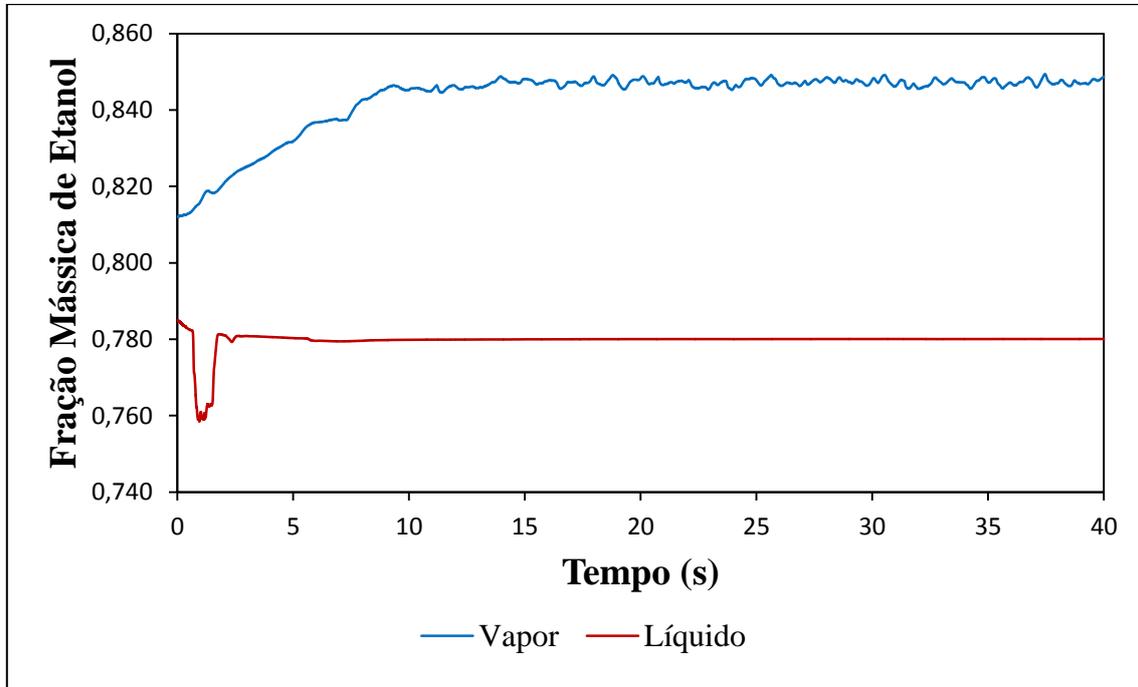
Para critério de conhecimento, no intuito de serem obtidas as frações de etanol na saída das fases líquida e vapor, foram utilizadas médias (baseadas em área) dessas frações nas regiões (superfícies) de entrada e saída do prato para ambas as fases e em cada passo de tempo. Assim, após esses valores médios serem calculado em cada passo de tempo, pode-se calcular a média temporal desses valores.

Analisando as figuras a seguir, nota-se que até aproximadamente o tempo de 10s de simulação ocorre uma grande variação de fração mássica de etanol, após o qual o valor da fração oscila em torno de um valor definido. Essa maior variação é devido ao período de enchimento do prato pela fase líquida. Ao longo da simulação, a fase vapor, como era esperado, torna-se mais concentrada no componente mais volátil (etanol) e a fase líquida torna-se mais concentrada no componente menos volátil (água). Ou seja, ocorre uma transferência de etanol do líquido para o vapor.

Nota-se também, nas Figuras (6.31) e (6.34), que ocorre um decaimento (pico) na fração mássica de etanol na saída do líquido no intervalo de 1s a 2s. Acredita-se que esse pico ocorre devido ao fato do líquido só começar a descer pelo *downcomer* em torno de 7 segundos de simulação. Assim, no início do escoamento, devido à intensa turbulência que ocorre entre as fases líquida e vapor, pequenas frações de líquido (gotículas) são deslocadas para a região do *downcomer* e, como essa quantidade é mínima, qualquer variação na fração

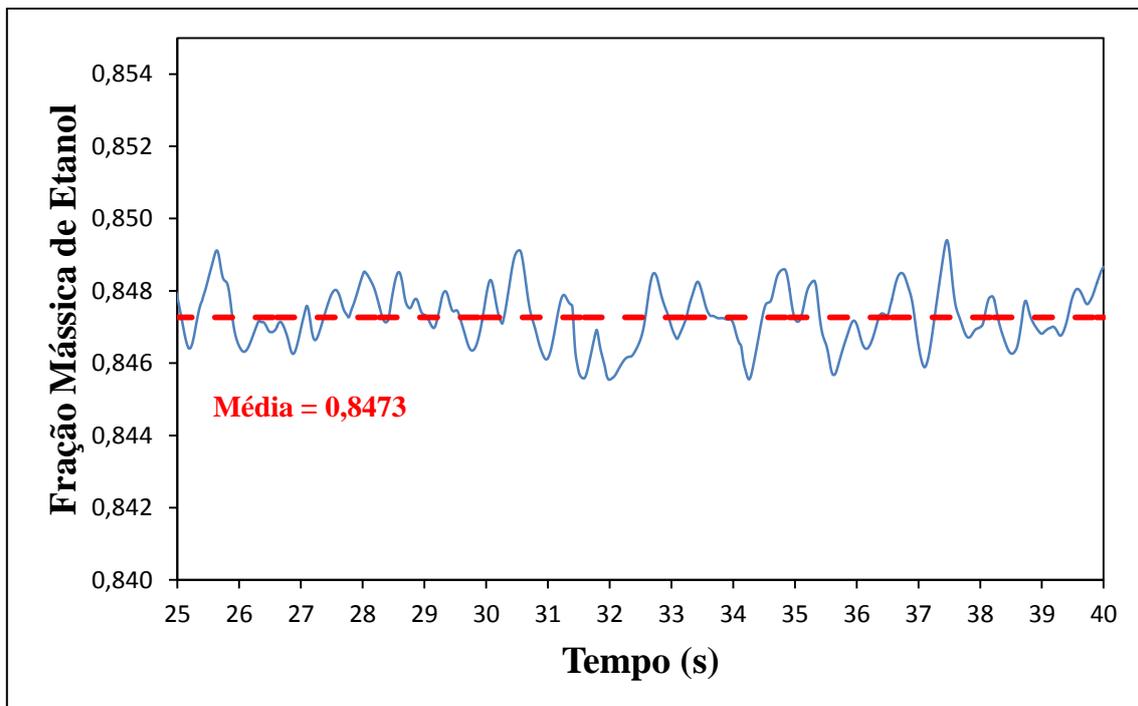
mássica de etanol nessa região ocasiona grandes variações no cálculo da fração mássica média (média baseada em área) de etanol.

Figura 6.31 - Variação da fração mássica de etanol avaliada na saída do prato para as fases líquida e vapor em função do tempo, para o modelo de Higbie.



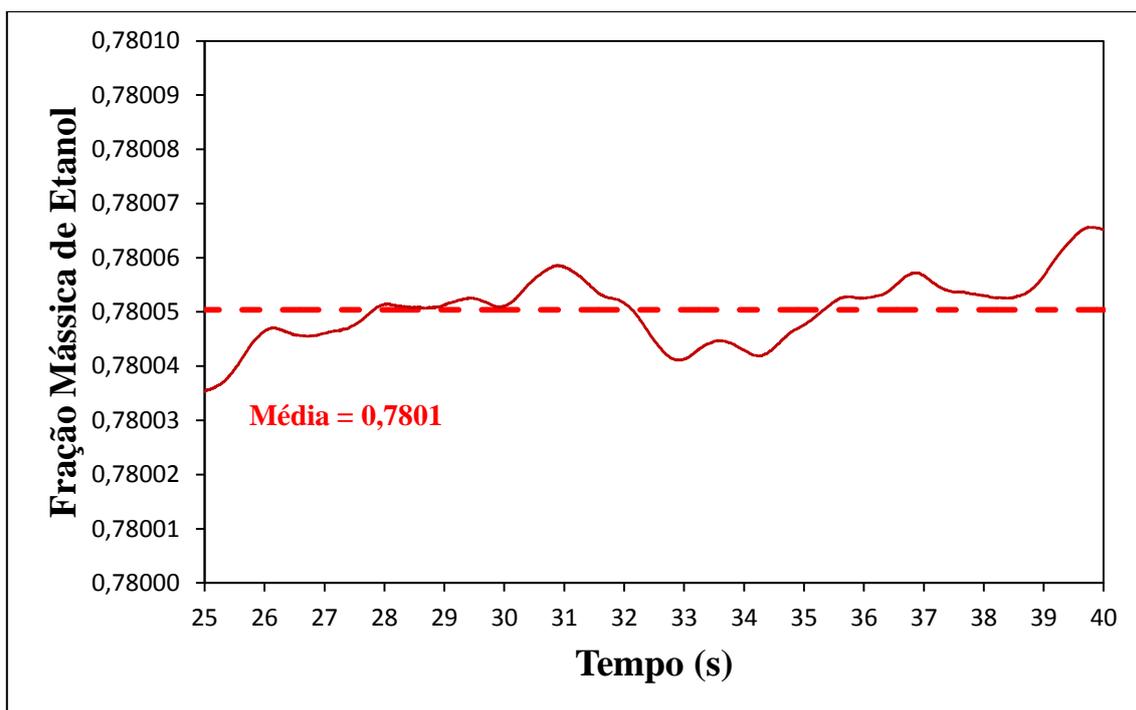
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.32 – Valor médio da fração mássica de etanol no vapor na saída do prato e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo de Higbie.



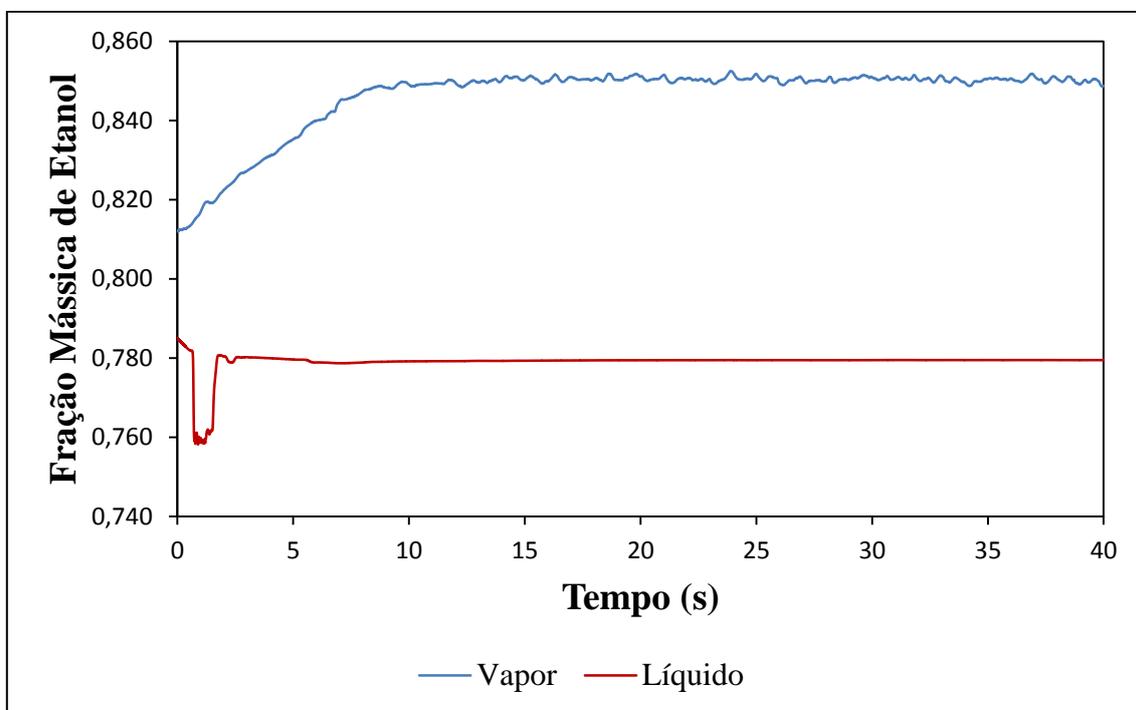
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.33 – Valor médio da fração mássica de etanol no líquido na saída do prato e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo de Higbie.



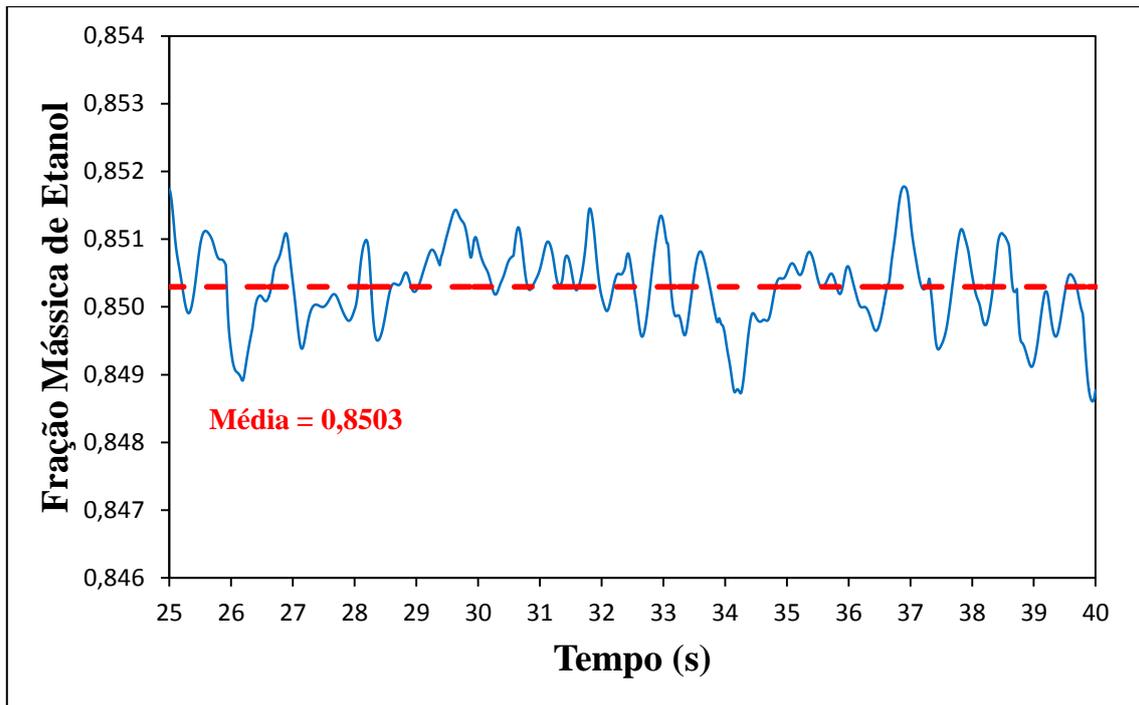
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.34 - Variação da fração mássica de etanol avaliada na saída do prato para as fases líquida e vapor em função do tempo, para o modelo SRS.



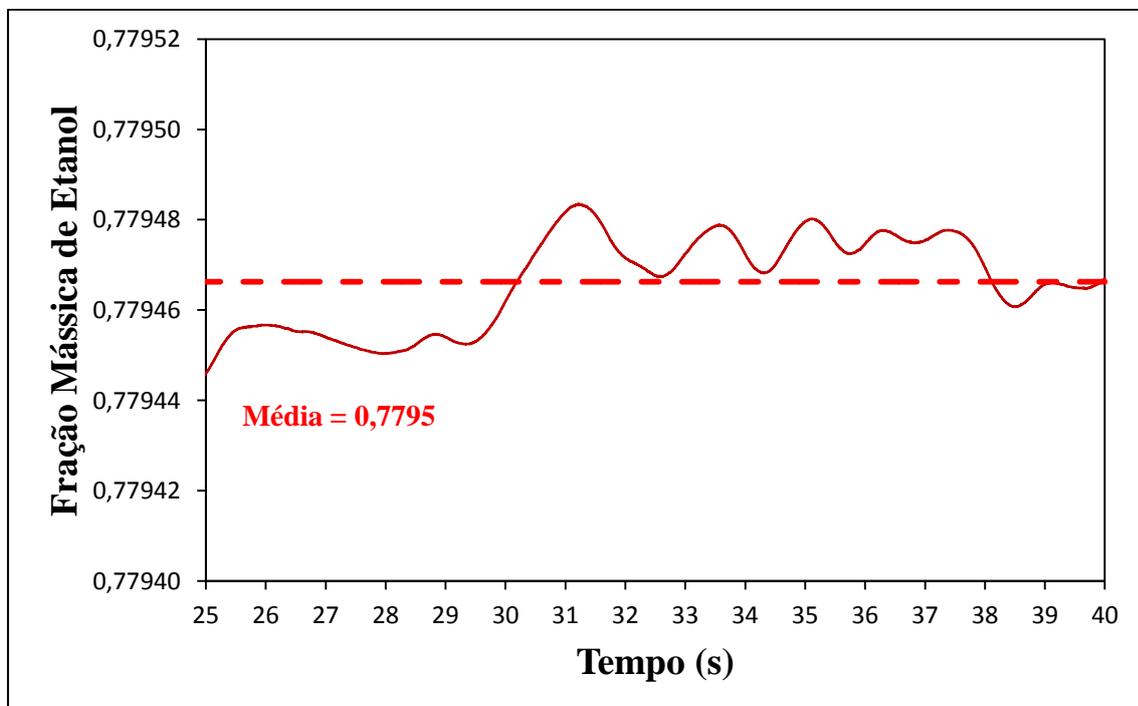
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.35 - Valor médio da fração mássica de etanol no vapor na saída do prato e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo SRS.



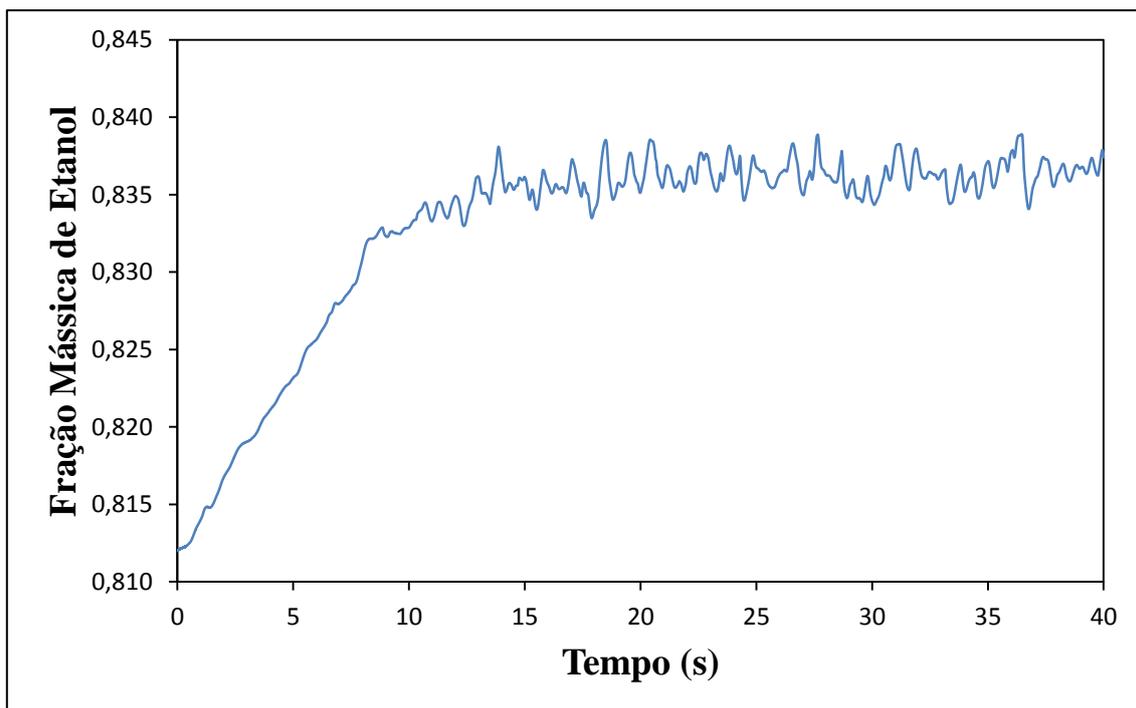
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.36 - Valor médio da fração mássica de etanol no líquido na saída do prato e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo SRS.



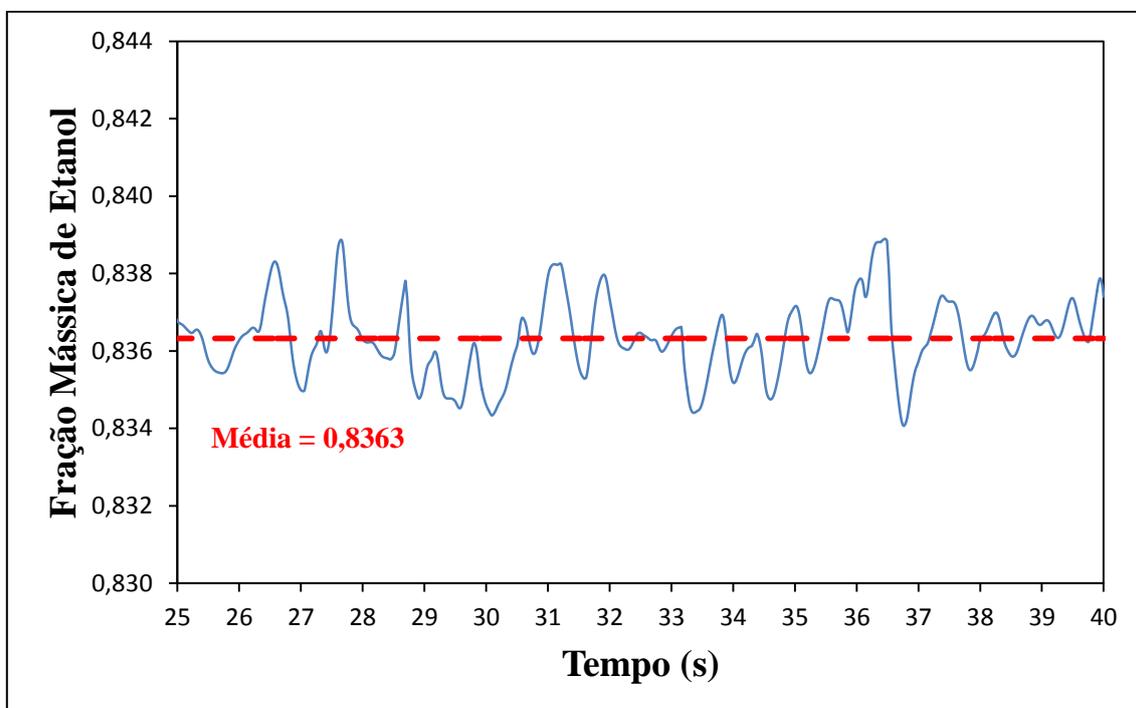
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.37 - Variação da fração mássica de etanol avaliada na saída do prato para a fase vapor em função do tempo, para o modelo de Zuiderweg.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.38 - Valor médio da fração mássica de etanol no vapor na saída do prato e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo de Zuiderweg.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

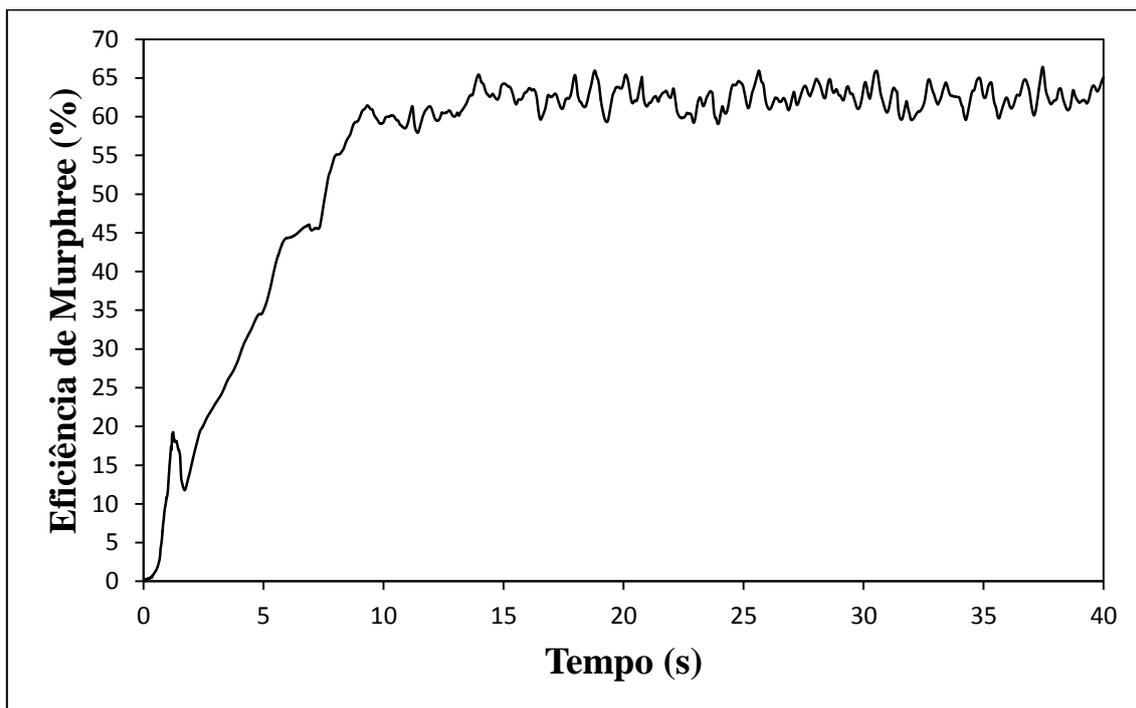
Na Figura (6.37), para o modelo de Zuidweg (1982), não é apresentado o perfil de fração mássica de etanol na saída do líquido devido ao não monitoramento da mesma durante a simulação.

6.3.3 Eficiência de Murphree do Prato Perfurado

Conforme citado no item anterior, no intuito de serem obtidas as frações de etanol na saída e na entrada das fases líquida e vapor, conforme já foi apresentado nas Figuras (6.31) a (6.38), foram utilizadas médias dessas frações nas regiões (superfícies) de entrada e saída do prato para ambas as fases e em cada passo de tempo. Assim, para o cálculo da eficiência de Murphree do prato, conforme explicado no capítulo de Metodologia, relacionou-se as médias de fração de etanol no vapor que entra e sai do prato, com a média de fração de etanol que sairia do prato se estivesse em equilíbrio com o líquido que sai do estágio. Apenas lembrando que utilizou-se a faixa de 25 a 40 segundos para a obtenção das frações médias para garantir o regime pseudo-estacionário. Os valores da eficiência de Murphree do prato, para cada modelo de transferência de massa estudado, são apresentados nas Figuras (6.39) a (6.44). Mais uma vez essas figuras confirmam a ideia de estado “quasi-estacionário” ao qual tende o escoamento sobre pratos perfurados.

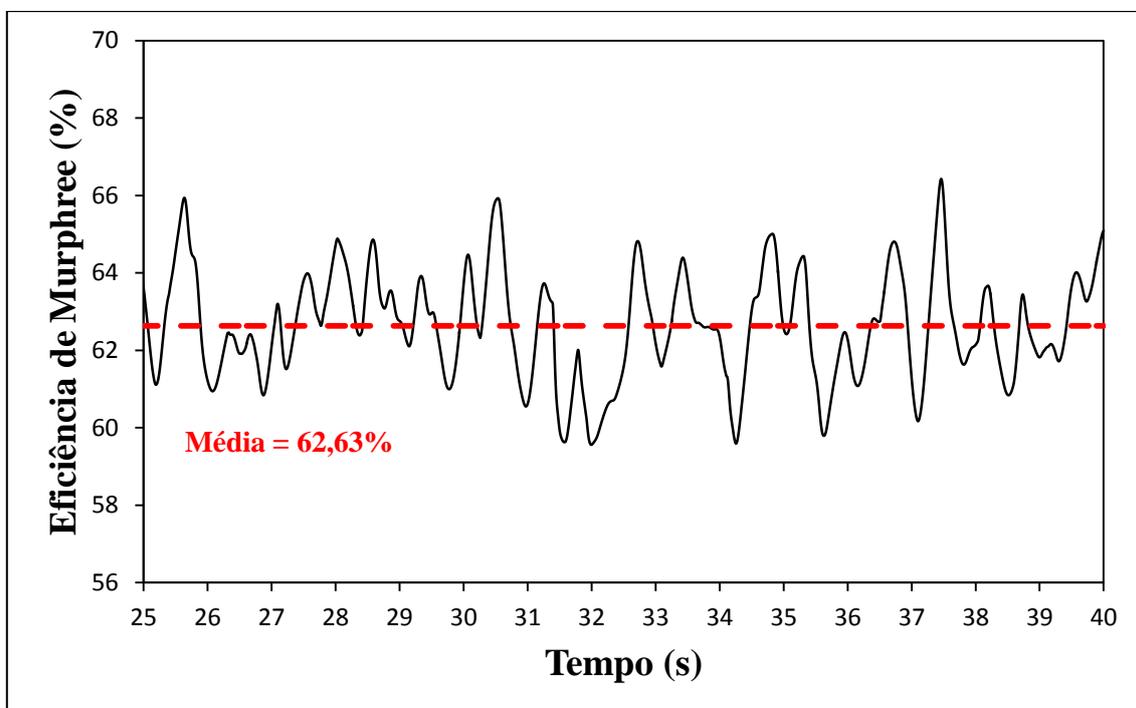
Analisando as figuras a seguir, nota-se que até aproximadamente o tempo de 10s de simulação ocorre uma grande variação da eficiência de Murphree, após o qual o valor da fração oscila em torno de um valor definido. Essa maior variação é devido ao período de enchimento do prato pela fase líquida

Figura 6.39 - Variação da eficiência de Murphree do prato em função do tempo para o modelo de Higbie.



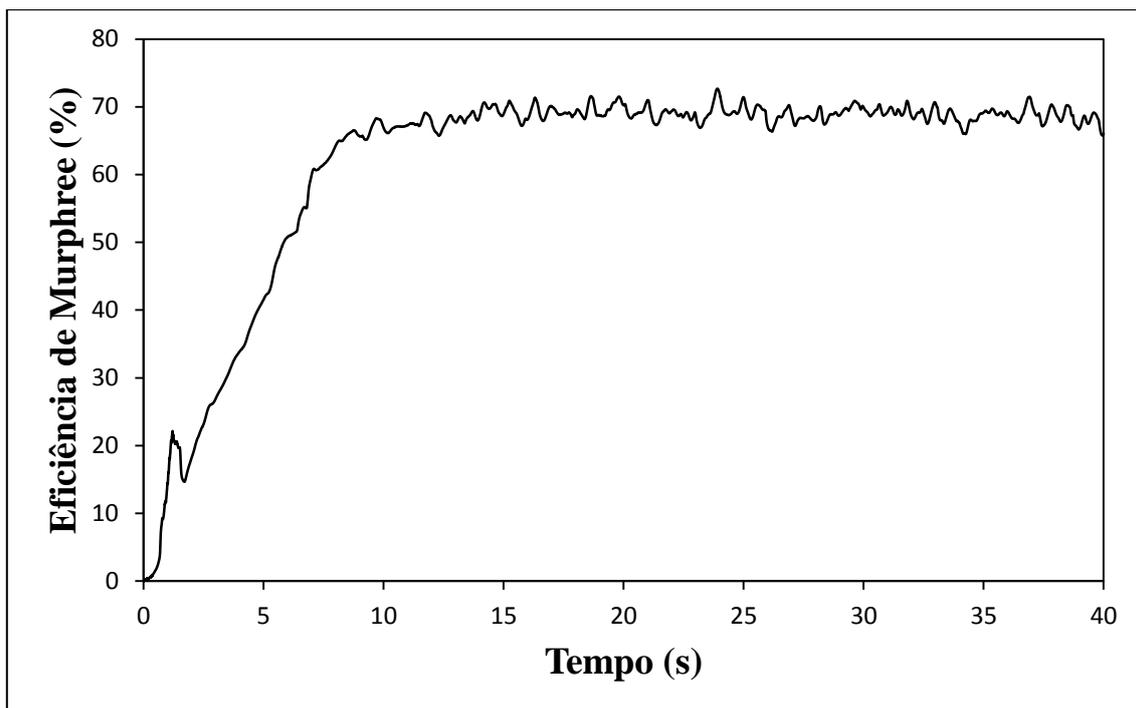
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.40 – Valor médio da eficiência de Murphree e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo de Higbie.



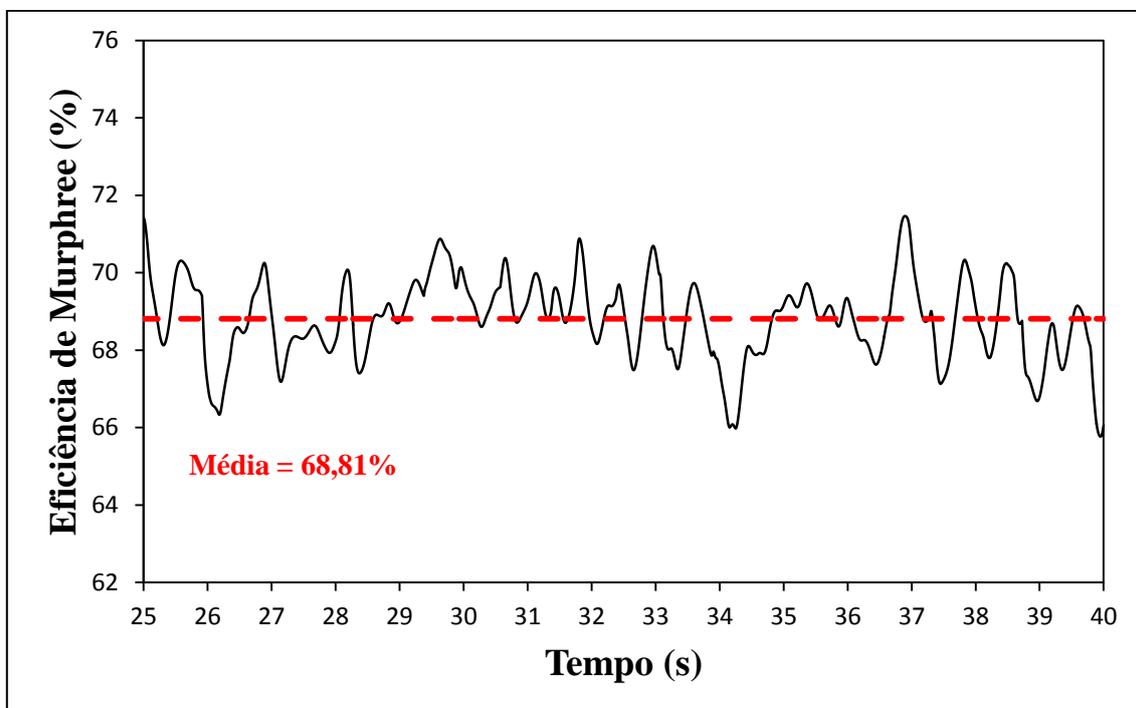
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.41 - Variação da eficiência de Murphree do prato em função do tempo para o modelo SRS.



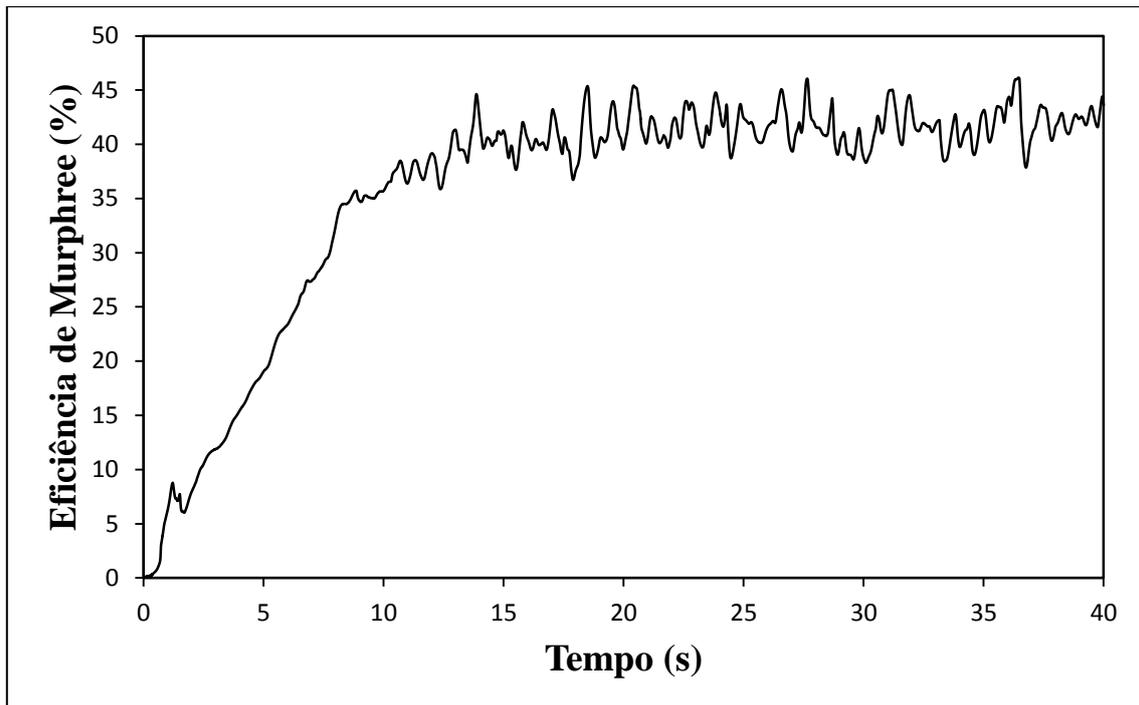
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.42 – Valor médio da eficiência de Murphree e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo SRS.



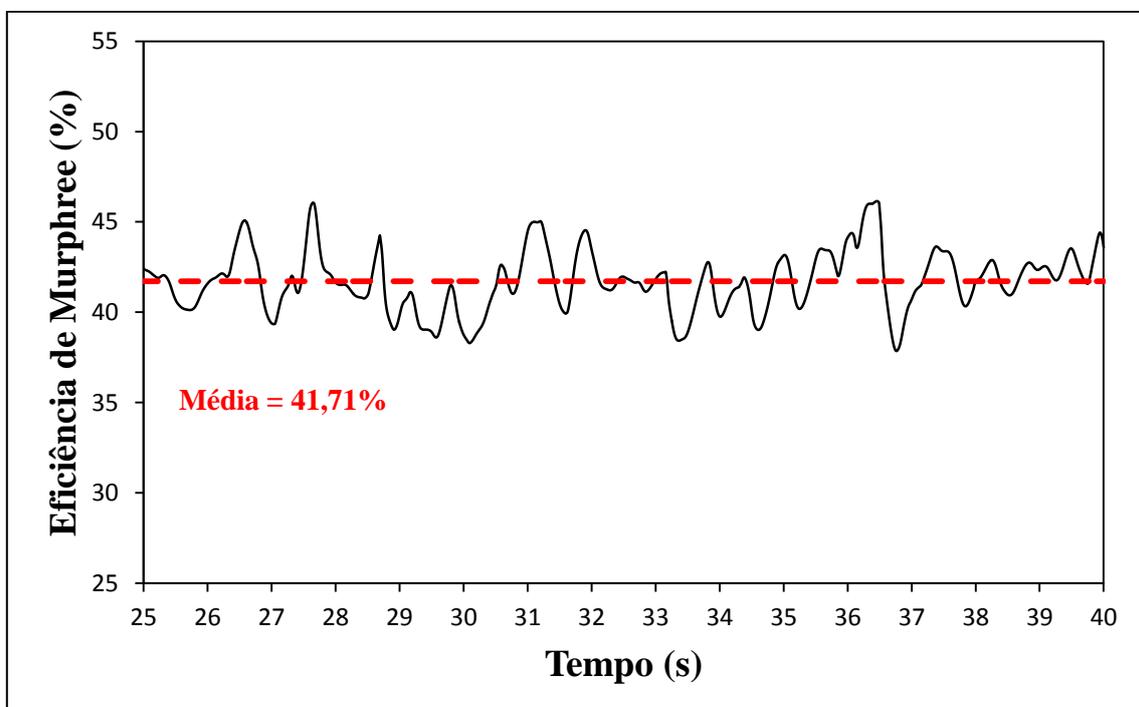
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.43 - Variação da eficiência de Murphree do prato em função do tempo para o modelo de Zuiderweg.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.44 - Valor médio da eficiência de Murphree e sua flutuação em função do tempo, calculado entre os instantes 25s e 40s para o modelo de Zuiderweg.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

6.3.4 Perfis Pontuais de Frações Mássicas e Eficiência de Ponto

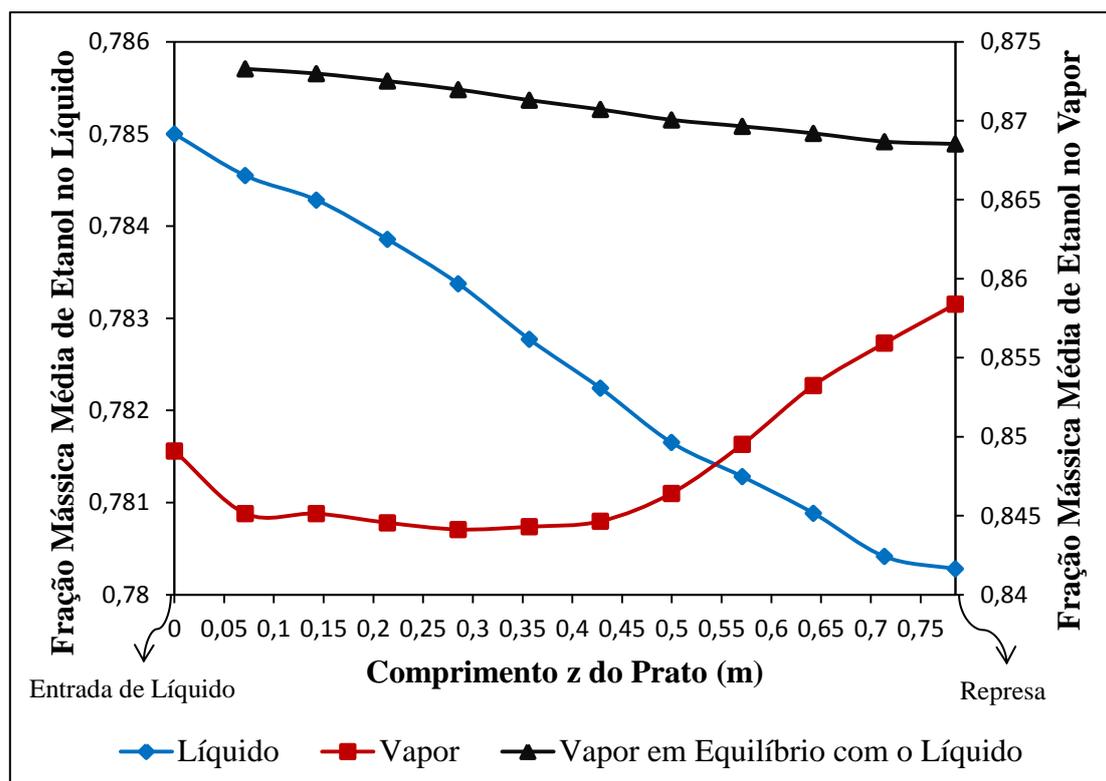
Além da análise das frações mássicas médias de etanol nas entradas e saídas do prato, outra análise importante é a avaliação da fração mássica de etanol no vapor e no líquido em função da posição (ponto) ocupada no prato. Assim, as Figuras (6.45) à (6.47) apresentam os perfis das frações mássicas de etanol na fase vapor e na fase líquida como função da posição ocupada no prato, e também apresentam a fração mássica de etanol na fase vapor que estaria em equilíbrio com a fase líquida, todos para o instante de tempo de 40 segundos. Ao observar as Figuras (6.45) à (6.47), nota-se que a fração mássica de etanol na fase líquida decai ao longo de todo o prato em direção à represa do mesmo. Já a fração mássica de etanol na fase vapor possui um valor aproximadamente constante ao longo do prato e aumenta na região próxima à represa.

A fração mássica de etanol na fase vapor que estaria em equilíbrio com a fase líquida que sai do prato, apresenta-se sempre com maior fração do que a fração de etanol no vapor que verdadeiramente sai do prato, indicando que a transferência de massa real do prato está distante da transferência que ocorreria no caso de um prato ideal. Essa diferença é outro resultado importante fornecido pelas técnicas de CFD, nas quais observa-se qualitativamente e quantitativamente o quanto não é ideal a mistura entre as fases líquidas e gasosa num prato perfurado de destilação.

Além disso, conforme Noriler (2007) ressalta, ao se observar a fração de etanol no líquido e no vapor que saem do prato (leitura efetuada em seus respectivos eixos), verifica-se que a transferência de espécies na região da represa não é nula, existindo gradiente de potenciais químicos que pode promover a transferência de espécies entre as fases, evidenciando o que já foi discutido em relação ao sistema não atingir o equilíbrio termodinâmico. Dessa forma, o prato não atingirá a máxima eficiência que poderia atingir. Os valores médios apresentados nas figuras a seguir são médias baseadas em área.

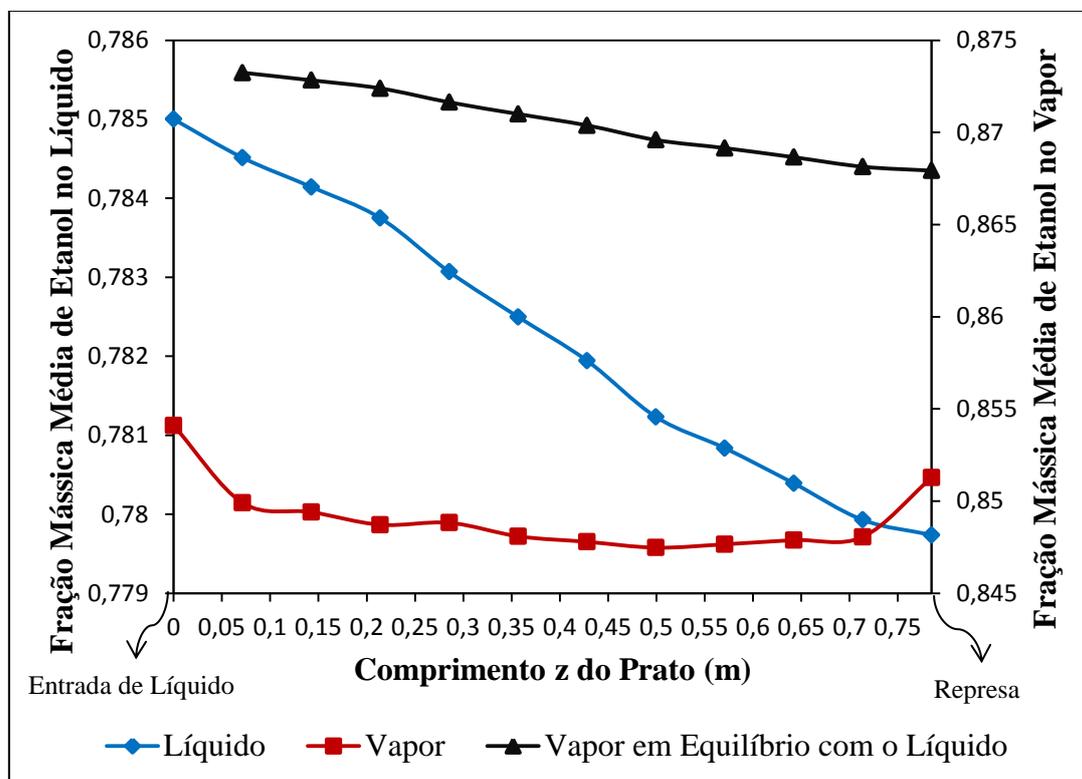
Os valores pontuais de fração mássica foram obtidos ao se dividir o domínio em 11 subdomínios, conforme explicado no capítulo de Metodologia e também citado a seguir.

Figura 6.45 - Perfis da fração mássica de etanol no líquido, no vapor e no vapor que estaria em equilíbrio com o líquido como função da posição (ponto) ocupada no prato, para o modelo de Higbie.



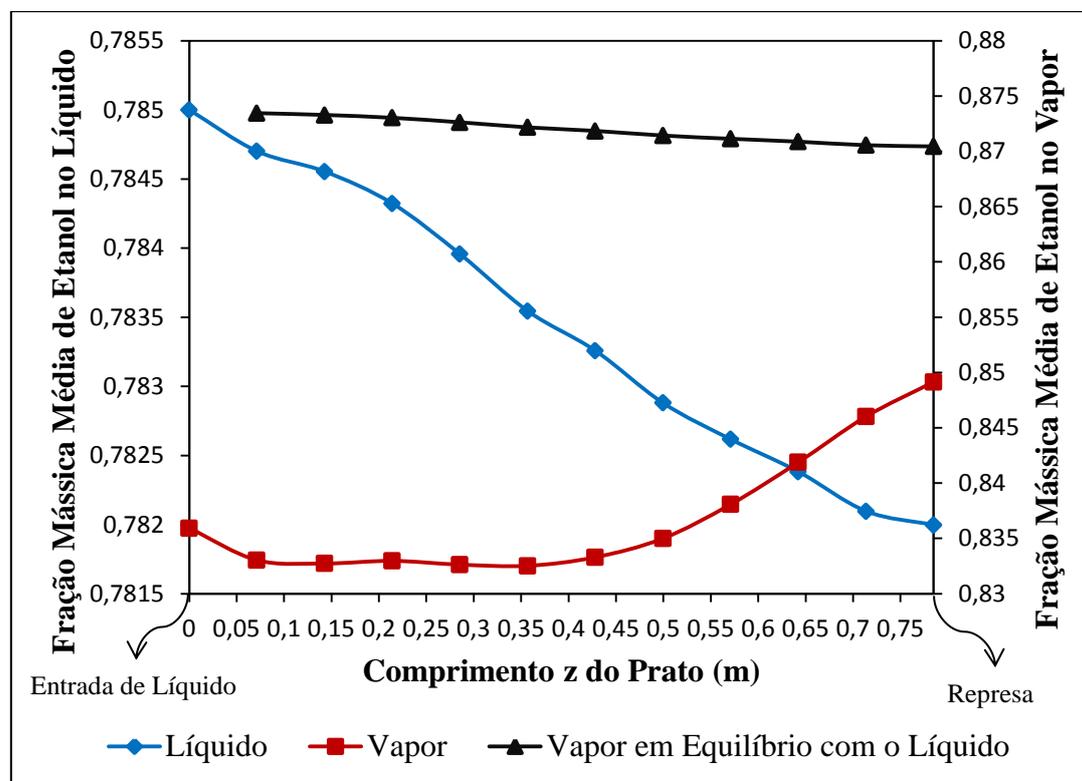
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.46 - Perfis da fração mássica de etanol no líquido, no vapor e no vapor que estaria em equilíbrio com o líquido como função da posição (ponto) ocupada no prato, para o modelo SRS.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.47 - Perfis da fração mássica de etanol no líquido, no vapor e no vapor que estaria em equilíbrio com o líquido como função da posição (ponto) ocupada no prato, para o modelo de Zuiderweg.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

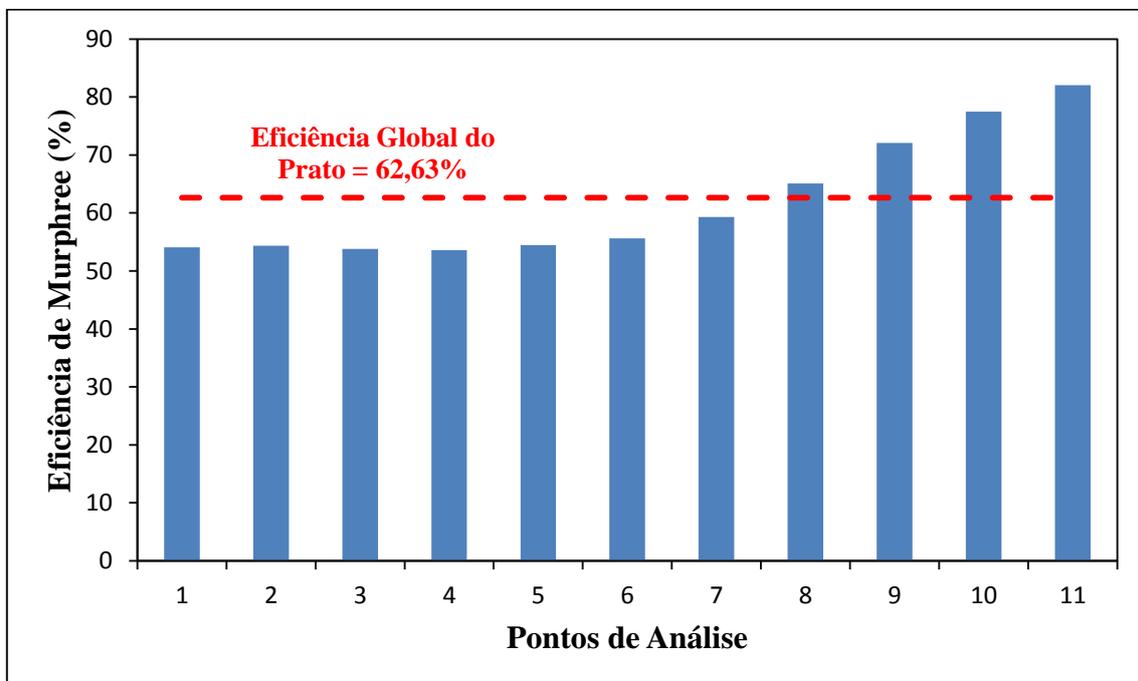
Dessa forma, a partir da avaliação das frações mássica de etanol no vapor e no líquido em função da posição ocupada no prato, pode-se estimar os valores da eficiência de ponto no prato, conforme discutido no capítulo de Metodologia. Os valores calculados estão apresentados nas Figuras (6.48) à (6.50), mostrando assim a variação da eficiência de ponto ao longo do prato. Nessas figuras, o subdomínio 1 compreende a região de entrada de líquido no prato e o subdomínio 11 compreende a região do *downcomer*.

A partir dessas figuras, nota-se em geral que a eficiência aumenta na direção da represa. Uma explicação para esse aumento gradativo quando o líquido se aproxima da represa é baseado no conceito de tempo de residência. Assim, o líquido próximo à entrada do prato possui, evidentemente, um menor tempo de residência no estágio que o líquido próximo à represa. Sendo a transferência de massa fortemente influenciada pelo tempo de contato líquido-vapor, pode-se concluir que o líquido próximo à represa terá efetuado uma maior transferência de massa. Outro fator a ser observado é a tendência que o líquido possui de retornar em direção ao centro do prato devido ao contato com a represa. Quando o escoamento se aproxima da barragem, a represa passa a funcionar como um obstáculo para o

escoamento da fase líquida, proporcionando um efeito de retorno do líquido, produzindo uma região de maior tempo de contato líquido-vapor e, assim, aumentando a eficiência na região da represa. A mesma tendência de variação da eficiência de ponto foi encontrado nos trabalhos de Noriler (2007) e Rahimi *et al.* (2012).

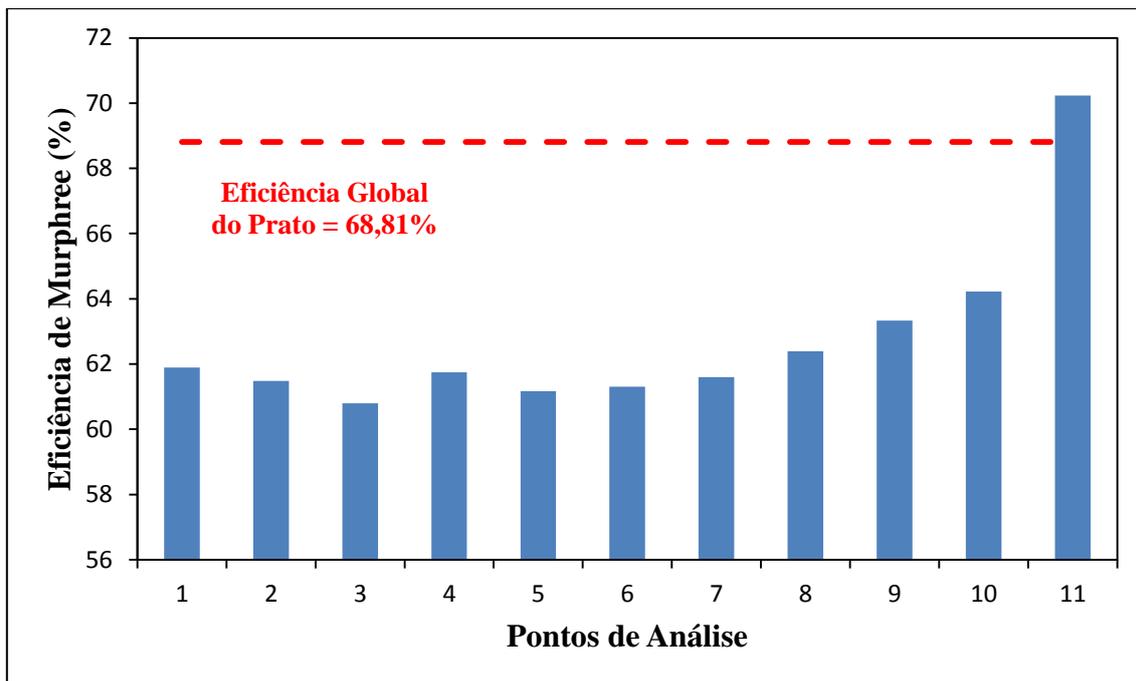
Os valores pontilhados apresentados nas Figuras (6.48) à (6.50) são os valores da eficiência global de Murphree calculados e apresentados no item anterior. Estes valores foram apresentados para critério de comparação entre a eficiência global do prato e as eficiências pontuais.

Figura 6.48 - Eficiências de ponto avaliadas ao longo dos subdomínios e a média da eficiência de prato, para o modelo de Higbie.



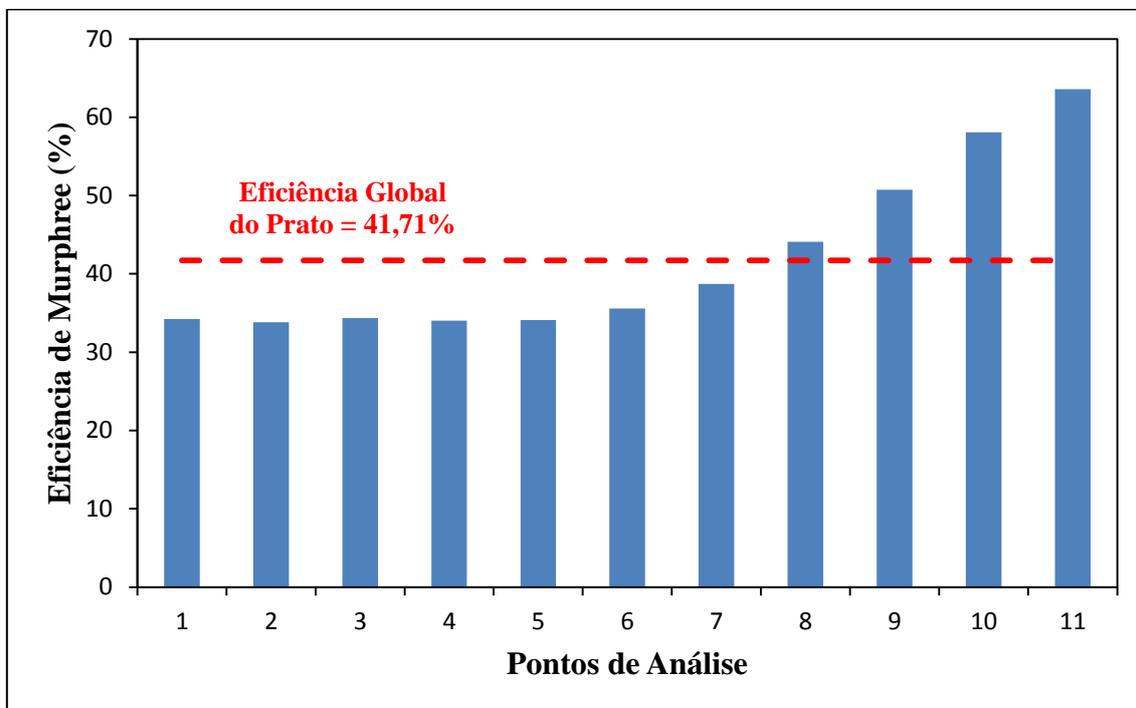
Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.49 - Eficiências de ponto avaliadas ao longo dos subdomínios e a média da eficiência de prato, para o modelo SRS.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Figura 6.50 - Eficiências de ponto avaliadas ao longo dos subdomínios e a média da eficiência de prato, para o modelo de Zuiderweg.

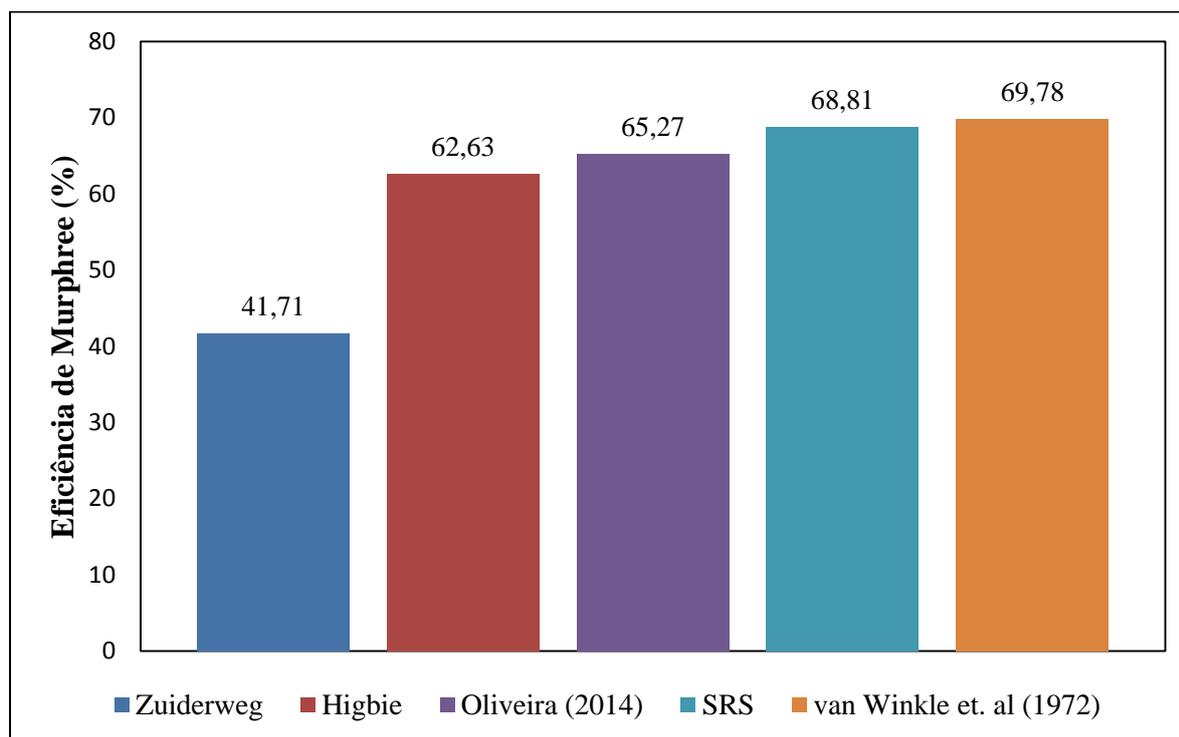


Fonte: Elaborado pelo Autor.

6.3.5 Comparação dos Modelos utilizados na Predição dos Coeficientes de Transferência de Massa

Dessa forma, após apresentados os resultados obtidos pelas simulações numéricas, é importante comparar e discutir alguns fatores relacionados aos modelos utilizados. A seguir é apresentado um gráfico comparando os rendimentos globais do prato dos modelos utilizados neste estudo, assim como o rendimento de prato obtido por outro estudo de CFD e um valor obtido pela correlação de van Winkle *et al.* (1972) *apud* Sinnott e Towler (2009), conforme citado no capítulo de Metodologia. O estudo via CFD realizado por Oliveira (2014) foi a partir de um prato perfurado com a mesma geometria deste estudo (em detalhes no capítulo de Metodologia) e utilizando o modelo de Higbie para a transferência de massa. No entanto, Oliveira (2014) utilizou uma malha numérica diferente da utilizada neste estudo, sendo uma malha não estruturada e com nós não coincidentes, sendo esse um dos motivos pelo qual há diferenças entre os resultados.

Figura 6.51 - Comparação de eficiências de Murphree.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Conforme apresentado na Figura (6.51), os resultados de eficiência de prato obtidos neste estudo, com exceção da correlação de Zuiderweg (1982), utilizando os modelos de Higbie e SRS, estão situados na mesma faixa de valores (60 a 70%) que as eficiências obtidas

por Oliveira (2014) e a correlação de Winkle *et al.* (1972). O trabalho realizado por Oliveira (2014) é um estudo muito similar com o estudo realizado neste texto, sendo a aplicação de técnicas de CFD ao escoamento líquido-vapor sobre pratos perfurados.

Agora vale uma discussão sobre a diferença entre os resultados obtidos neste estudo. Segundo Locket (1986), a utilização da correlação de Zuiderweg (1982) para sistemas aquosos, o qual situa-se este estudo, tende a predizer baixos valores de eficiências de ponto, fornecendo valores de aproximadamente 40%. Uma explicação para essa discrepância está no fato de Zuiderweg ter utilizado como base para o estudo um conjunto de dados fornecidos pela organização FRI (*Fractionation Research Inc.*). Assim, o autor efetuou o estudo totalmente direcionado e validado para dados da FRI, ou seja, para colunas de destilação que operam na separação de hidrocarbonetos, os quais, em sua vasta faixa, podem diferenciar em muito suas propriedades físicas e químicas em relação à outros sistemas.

Os modelos de Higbie e SRS (*Surface-Renewal-Stretch*) forneceram valores condizentes com os dados encontrados na literatura. Rahimi *et al.* (2012) realizaram um estudo comparando os modelos de Higbie e SRS. Os autores utilizaram esses dois modelos para diferentes diâmetros de bolhas. Como resultado, os autores verificaram que ao utilizar o modelo SRS a sensibilidade das simulações em relação ao diâmetro de bolha diminuiu. Este fato é devido ao modelo SRS ser independente do diâmetro de bolha, enquanto o modelo de Higbie é dependente do diâmetro de bolha. Ou seja, se estiverem envolvidos sistemas nos quais o diâmetro de bolha é um fator importante, por exemplo, quando ocorre coalescência de bolhas, grande variação no diâmetro de bolhas ou altos valores desta propriedade, o modelo SRS deve ser utilizado com cautela ou até mesmo deve ser evitado. No entanto, para baixos valores de diâmetro de bolhas (até valores de aproximadamente 10 mm, fornecidos no próprio artigo), o modelo SRS tende a fornecer resultados mais próximos do experimental do que o modelo de Higbie.

7 CONCLUSÕES

Neste estudo realizou-se a análise da hidrodinâmica e da transferência de espécies químicas em pratos perfurados de colunas de destilação. Ao longo do trabalho notou-se a importância das várias etapas nas quais um estudo de CFD é constituído. Assim, pode-se citar:

- A construção adequada do domínio computacional e a geração da malha numérica deste domínio são de fundamental importância. A malha numérica deve ser construída de forma que os elementos constituintes da malha sejam de boa qualidade. Além desse critério, outro fator importante foi o estudo do grau de espaçamento necessário para o bom funcionamento do modelo de turbulência e do método de modelagem do escoamento próximo à parede, através da análise do parâmetro y^+ ;
- Em relação ao estudo da hidrodinâmica do prato, o escoamento sobre esses dispositivos mostrou-se bastante complexo, possuindo variações temporais e espaciais. No entanto, mesmo sendo um escoamento complexo, mostrou-se que os escoamentos sobre pratos perfurados tendem a um regime "quasi-estacionário", com variações aleatórias em torno de um valor bem definido. Este regime já foi reportado diversas vezes na literatura;
- A análise da hidrodinâmica do prato também possibilitou a verificação de regiões com potenciais de prejudicar a transferência de massa e calor sobre esse tipo de dispositivo, indicando possíveis regiões para modificações sobre o prato;
- A simetria demonstrada pelos perfis de velocidades das regiões *upstream* e *downstream*, perfis de frações volumétricas e mássicas, indicam a possibilidade de se utilizar a análise baseada na técnica de simetria do prato;

- Visualizou-se a importância do *downcomer*, permitindo o movimento do líquido para o prato inferior sem o arraste de grande quantidade de vapor pela fase líquida;
- Os modelos de duas resistências, com exceção do modelo de Zuidegweg, utilizados na análise de transferência de espécies químicas se mostraram eficientes. No entanto, mostrou-se a importância de ser utilizado um modelo de duas resistências que seja propício para o sistema em estudo;
- A partir da comparação dos modelos de Higbie e SRS, pode-se analisar a influência da consideração do diâmetro de bolha na análise da transferência de espécies químicas;
- Visualizou-se a correta transferência de massa entre as fases líquida e vapor. A transferência de massa entre as fases, juntamente com as eficiências pontuais e de Murphree, foram compatíveis com os resultados apresentados na literatura;
- Observou-se o grau de não-uniformidade da mistura nas fases líquida e vapor, demonstrando a importância da análise da eficiência em diferentes regiões do estágio;
- A fluidodinâmica computacional demonstrou-se como uma ferramenta poderosa na análise dos fenômenos presentes em pratos perfurados de destilação.

8 SUGESTÕES

A seguir são apresentadas algumas sugestões julgadas interessantes na continuidade dos estudos dos escoamentos multifásicos ocorrendo em pratos perfurados de destilação.

- Diversos estudos já foram elaborados analisando a hidrodinâmica sobre o prato. No entanto, poucos estudos foram elaborados sob a consideração dos três fenômenos que ocorrem simultaneamente sob os pratos: transferência de massa, energia e momento;
- A principal contribuição deste estudo foi uma análise mais detalhada da transferência de massa ao longo do escoamento em pratos perfurados. No entanto, este estudo foi realizado sob a consideração de diâmetro constante da fase dispersa. Outra alternativa seria abordar a fase dispersa sob uma análise polidispersa, trabalhando com uma faixa diâmetro de bolhas;
- Realizar testes computacionais com os modelos de Higbie e SRS variando-se o diâmetro de bolha, com a intenção de se entender melhor a influência desta propriedade que é de extrema importância em escoamentos multifásicos líquido-vapor;
- Caso haja a disponibilidade de equipamentos, seria extremamente interessante o estudo experimental dos escoamentos ao redor de bolhas de diferentes escalas de comprimento, como por exemplo, bolhas de grande escala (bolhas de Taylor) e de pequena escala (bolhas dispersas). Este estudo forneceria uma melhor compreensão do escoamento ao redor das bolhas, e com a utilização de técnicas tais como a PIV (*Particle Image Velocimetry*) e a PLIF (*Planar Laser Induced Fluorescence*), que fornecem informações sobre os campos de velocidade, concentração e temperatura do escoamento ao redor das bolhas, haveria um melhor entendimento de como ocorre os fenômenos de transferência nesses escoamentos. Assim, poderiam ser propostas mudanças nas correlações dos coeficientes de transferências interfásicas, ou até mesmo a proposição de novas correlações;

- Por mais que a turbulência na fase líquida seja mais vigorosa do que na fase vapor, uma proposta seria a consideração de modelos de turbulência para ambas as fases;
- Neste estudo considerou-se os fenômenos de condensação e evaporação como sendo equivalentes, o que implica em uma taxa líquida de transferência de massa nula por convecção. Seria interessante uma abordagem sem essa consideração para visualizar o impacto sob os resultados;
- Sob o ponto de vista de eficiência, seria interessante propor modificações nas geometrias dos pratos perfurados e realizar novas simulações, visando obter uma melhor transferência de massa e energia ao longo desses dispositivos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALHO, A. T. P.; ILHA, A. Simulação Numérica de Escoamentos Complexos. **Turbulência: Anais da 5ª Escola de Primavera em Transição e Turbulência**. Associação Brasileira de Ciências Mecânicas – ABCM. Rio de Janeiro. p. 405-466, 2006.

ANDERSON, J. D. Jr. **Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications**. 1ª ed. New York: McGraw-Hill, Inc. 1995. 547 p.

ANSYS Inc. **ANSYS CFX-Help Guides**. Canonsburg, 2007.

ANSYS Inc. **ANSYS CFX-Solver Modeling Guide**. Canonsburg, 2011. 594 p.

ANSYS Inc. **ANSYS CFX-Solver Theory Guide**. Canonsburg, 2011. 402 p.

ANSYS Inc. **ANSYS Meshing Help**. Canonsburg, 2009. 244 p.

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 (Doutorando em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1997.

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

CALDAS, J. N. *et al.* **Interno de Torres: pratos e recheios**. 2ªed., Rio de Janeiro: Interciência Petrobras. 2007. 510 p.

COKER, A. K. **Ludwig's Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants**. 4ª ed., v. 2. Burlington: GPP - Gulf Professional Publishing. 2010. 961 p.

COLWELL, C. J. Clear liquid height and froth density on sieve tray. **Industrial Engineering Chemistry Process Design Development**, v. 20, n. 2, p. 298–307, 1981.

DAVIDSON, L. **An Introduction to Turbulence Models**, Göteborg: Chalmers University of Technology, 2003. 48 p.

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

DRICKAMER, H. G.; BRADFORD, J. R. Overall plate efficiency of commercial hydrocarbon fractionating columns as a function of viscosity. **Trans. AIChE**, v. 39, p. 19–60, 1943.

ENGLISH, G. E.; WINKLE, M. van. Efficiency in bubble cap distillation columns. **Chemical Engineering Science**, v. 70, n. 23, p. 241–246, 1983.

FARIA, S. H. B. **Estudo energético de colunas de destilação através de análise exergetica - sistemas não ideais**. 2003. 199 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 2003.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. **Computational Methods of Fluid Dynamics**, 3^a ed. Berlin: Springer Verlag, 2002. 423 p.

FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmicas dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações**. 2^a ed. São Paulo: Edusp, 2012. 426 p.

FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. **Introduction to fluid mechanics**. 6th ed. John Wiley & Sons, 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, p. 910-924, 2003.

GIORDANO, R. C. **Notas de aula**. 2013.

HIMMELBLAU, D. M.; BISCHOFF, K. B. **Process analysis and simulation. Deterministic systems**, 1st edition. ed. New York: John Wiley & Sons Inc., 1968.

HOFHUIS, P. A. M. **Flow regimes on sieve-trays for gas/liquid contacting**. 1980. 196 p. Tese (Doutorado em Ciências Técnicas) – Technische Hogeschool Delft, Delft, 1980.

JAJUEE, B.; MARGARITIS, A.; KARAMANEV, D.; BERGOUGNOU, M. A. Application of surface-renewal-stretch model for interface mass transfer. **Chemical Engineering Science**, v. 61, p. 3917-3929, 2006.

- KISTER, H. Z. **Distillation design**. Boston: McGraw-Hill, 1992. 710 p.
- KRISHNA, R. *et al.* CFD simulations of sieve tray hydrodynamics. **Transactions IChemE**, v. 77, p. 639-646, 1999a.
- 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, 1999b.
- KRISHNA, R. *et al.* Rise velocity of a swarm of large gas bubbles in liquid. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 171-183, 1999c.
- LAUNDER, B.E.; SPALDING, D.B. The Numerical Computation of Turbulent Flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, p.269-289, 1974.
- LAUNDER, B.E.; SPALDING, D.B. **Mathematical Models of Turbulence**. London: Academic Press, (1972).
- LEWIS, W. K., **Ind. Eng. Chem.**, v. 14, p. 492, 1922.
- LEWIS, W. K. Rectification of binary mixtures. Plate efficiency of bubble cap columns. **Journal Industrial Engineering Chemistry**, v. 28, n. 4, p. 399-402, 1936.
- 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.
- LOPES, G. C. **Estudo computacional da dinâmica do escoamento reativo em risers industriais de FCC**. 2012. 108 p. (Doutorado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 2012.
- MACFARLE, e. a. S. A. Predict distillation efficiency. **Hydrocarbon Processing**, v. 51, p. 111–114, 1972.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**, 2ª ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004. 453 p.

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

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

MENTER, F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. **AIAA Journal**, v. 32, p. 1598-1605, 1994.

MUNIZ, M. **Análise do escoamento Multifásico e Não-Isotérmico em Pratos Perfurados de Destilação**. 2014. 233 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade de Blumenau – FURB, Blumenau-SC, 2014.

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. **Modelagem matemática e simulação numérica do escoamento líquido-vapor num prato de destilação**. 2003. 114 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 2003.

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, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 2007.

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

O'CONNELL, H. E. Plate efficiency of fractionating columns and absorbers. **Trans. AIChE**, v. 42, p. 741–755, 1946.

OLIVEIRA, G. C. **Aplicação de Técnicas de CFD na Melhoria da Eficiência de Estágio em Colunas de Destilação para Produção de Etanol**. 2014. 152 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos – UFSCar, São Carlos – SP, 2014.

PALADINO, E. E. **Estudo do Escoamento Multifásico em Medidores de Vazão do Tipo Pressão Diferencial**. 2005. 263 p. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC, Florianópolis – SC, 2005.

PESCARINI, M. H. **Desenvolvimento de um algoritmo para simulação de colunas de destilação multicomponente em estado estacionário utilizando a modelagem de estágio de não equilíbrio**. 1996. 341 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 1996.

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, 2001.

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

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

RAHIMI, R. *et al.* The effect of tray geometry on the sieve tray efficiency. **Chemical Engineering Science**, v. 76, p. 90-98, 2012.

RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, n. 3, p. 141, 1952.

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

SMITH, R., LINNHOFF, B. The Design of Separators in The Context of Overall Processes. **Chem. Eng. Res. Des.**, Vol 66, pp. 195-228, 1988.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. 7ªed. Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., 2007. 626 p.

SOARES, C. **Avaliação experimental dos coeficientes de transferência de massa e calor em uma coluna com pratos perfurados**. 2000. 231 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 2000.

SOARES, C. **Desenvolvimento de uma metodologia para avaliação numérica e experimental do escoamento líquido/vapor em colunas de destilação**. 2005. 213 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 2005.

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

SOREL, E. **Distillation et rectification industrielle**. Paris: Carré and Naud, 1899. Disponível em: <<http://archive.org/stream/distillationetr00soregoog#page/n5/mode/2up>>. Acesso em: outubro 2013.

SPOGIS, N. **Desenvolvimento de um impelidor de alta eficiência através da dinâmica dos fluidos computacional e otimização multi-objetivo**. 2007. 121 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas-SP, 2007.

SUN, Z. et al. A modified model of computational mass transfer for distillation column. **Chemical Engineering Science**, 62, p. 1839-1850, 2007.

TESTER, J. W.; MODELL, M. **Thermodynamics and Its Applications**, 3^a ed. Prentice Hall, 1996.

TREYBAL, R. E. **Mass-Transfer Operations**, 3^a ed. Singapore: McGraw-Hill, 1981, 784 p.

TU, J.; YEOH, G. H.; LIU, C. **Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach**, 1^a ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2008, 459 p.

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

VERARDI, M. **Análise do Escoamento e da Geração de Ruído no Sistema de Ventilação Externo de um Motor de Indução Trifásico**. 2008. 160 p. Dissertação (Mestrado em

Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC, Florianópolis – SC, 2008.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**, 2^a ed. New York: Prentice Hall, 2007. 503 p.

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

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.

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.

WILCOX, D. C. Simulation of transition with a two-equation turbulence model. **AIAA Journal**, v. 32, p. 247-255, 1994.

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

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

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