

Gabriel Henrique Justi

Avaliação da transferência de quantidade de movimento, energia e das espécies químicas em um prato perfurado de destilação através da fluidodinâmica computacional

São Carlos-SP

Março, 2016

Gabriel Henrique Justi

Avaliação da transferência de quantidade de movimento, energia e das espécies químicas em um prato perfurado de destilação através da fluidodinâmica computacional

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como requisito para obtenção do grau de Doutor em Engenharia Química.

Universidade Federal de São Carlos – UFSCar

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia – CCET

Departamento de Engenharia Química – DEQ

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – PPG-EQ

Orientador: Prof. Dr. José Antônio Silveira Gonçalves

Coorientador: Prof^a. Dr^a. Gabriela Cantarelli Lopes

São Carlos-SP

Março, 2016

Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da Biblioteca Comunitária UFSCar
Processamento Técnico
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

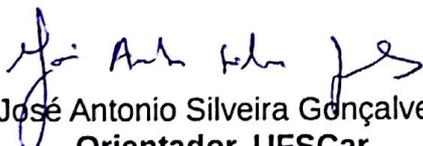
J964a Justi, Gabriel Henrique
Avaliação da transferência de quantidade de movimento, energia e das espécies químicas em um prato perfurado de destilação através da fluidodinâmica computacional / Gabriel Henrique Justi. -- São Carlos : UFSCar, 2016.
159 p.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2016.

1. Destilação. 2. Prato perfurado. 3. Fluidodinâmica computacional. 4. Multifásico. I. Título.

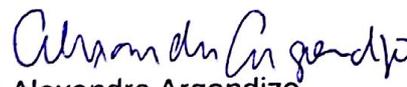
MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE TESE DE GABRIEL HENRIQUE JUSTI APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 24 DE MARÇO DE 2016.

BANCA EXAMINADORA:


José Antonio Silveira Gonçalves
Orientador, UFSCar


Gabriela Cantarelli Lopes
Coorientadora, UFSCar


Dirceu Noriler
FURB


Alexandre Argondizo
UNIFESP


Efraim CeKinski
IMT


Thiago Faggion de Pádua
UFSCar

Dedico esta tese a minha família
cujo o apoio foi integral e que me
ensinaram a praticar a honestidade
e *in memoriam* da minha madrinha...

—

E também a todas às crianças adultas que,
quando pequenas, sonharam em se tornar cientistas.

Agradecimentos

Agradeço,

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

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

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

A minha namorada, Ana Clara, pelo companheirismo e por me ajudar a trilhar e acreditar na minha vida profissional e pessoal. E também, por acreditar em mim e me apoiando nos momentos difíceis ao longo do doutorado.

Aos professores e orientadores José Antônio Silveira Gonçalves e Gabriela Cantarelli Lopes, pela amizade construída durante esses anos e por ter orientado este trabalho com muita atenção e dedicação.

Aos amigos Carlos Eduardo Crestani, Vinícius Vescovi pela amizade e pelo companheirismo durante esses anos de pós-graduação. E também aos amigos Alfredo Weber e Valdemir Cardoso.

Aos grandes amigos de graduação, Diego Lemos, Heder Martins, Helio de Oliveira, Lourenço Cunha e Winício Alves pela amizade e pelas reuniões ao longo desses anos após a graduação.

Aos companheiros da área de pesquisa (AP-4“6”) e amigos da pós-graduação do DEQ, pela amizade feita ao longo desses dois anos.

Ao técnico de informática do DEQ, Eudoro Lemos.

À Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química (PPG-EQ), ao Departamento de Engenharia Química (DEQ) juntamente com a agência de fomento Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) possibilitou-me a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

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

(Steve Jobs)

*“...99% anjo, perfeito
Mas aquele 1% é vagabundo...”*

(Marcos e Belutti part. Wesley Safadão)

Resumo

O desenvolvimento de projetos de processos químicos tem recebido aperfeiçoamento cada vez maior, incorporando modelos matemáticos mais sofisticados, os quais possibilitam uma maior aproximação do seu comportamento real. A destilação é uma das mais importantes técnicas de separação de componentes empregada a nível industrial nos mais diversos processos e o seu perfeito funcionamento e otimização são fatores economicamente cruciais. Sua importância dá-se na capacidade de separar os componentes de uma mistura utilizando a diferença de volatilidade entre eles como força motriz. Entretanto, trata-se de uma técnica que representa cerca de 40% da energia consumida em uma planta industrial. Alguns modelos utilizados nesses dispositivos, 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. Com o avanço da Tecnologia de Informação (TI), dos métodos numéricos e aperfeiçoamento em modelos de fluxos multifásicos, é possível a investigação de problemas complexos de escoamentos turbulentos. Uma das formas de investigar esses problemas é a aplicação das técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD). Dessa maneira, foi adotado para o presente trabalho um modelo de CFD, tendo como objetivo principal a avaliar os fenômenos de transportes para os escoamentos isotérmico (água-ar) e não isotérmico (etanol-água) através das técnicas de CFD na simulação de um prato perfurado de destilação. Os modelos propostos, possuem em geral, as seguintes características em comum: modelo heterogêneo, tridimensional, modelo de turbulência *shear stress transport* e abordagem Euleriana-Euleriana a 1 atm. As equações da continuidade e de conservação da quantidade de movimento foram empregadas no modelo isotérmico e para o modelo não isotérmico foram adicionadas as equações de conservações de energia e das espécies químicas. Os domínios computacionais foram baseados no trabalho de [Solari e Bell \(1986\)](#), onde foram observados a influência da presença ou não do *downcomer* de entrada no prato perfurado. Os resultados para o escoamento isotérmico mostraram os perfis de velocidades de líquido, as frações volumétricas e a altura de líquido claro sob a influência do *downcomer* de entrada. Para o escoamento não isotérmico, os resultados mostraram, além dos parâmetros hidráulicos, os perfis de temperatura e das frações mássicas de etanol para várias vazões de vapor. Assim, as simulações do sistema isotérmico indicaram uma forte influência do perfil de velocidade de líquido na entrada prato para o domínio com *downcomer*. No sistema não isotérmico foi possível determinar a eficiência de separação, a qual variou com a vazão de vapor no prato. A metodologia proposta neste trabalho foi adequada para aplicações em internos de coluna de destilação, mostrando-se uma ferramenta viável e importante no desenvolvimento e otimização de pratos perfurados.

Palavras-chave: destilação, prato perfurado, fluidodinâmica computacional, multifásico.

Abstract

The development of the design of chemical processes has received increasing improvement, incorporating sophisticated mathematical models, which allowed better simulation of its real behavior. Distillation is one of the most important and used separation techniques of components at industrial level, applied in a wide range of processes and its perfect working and optimization are economically crucial factors. Its great importance is due to the capacity of purify components of a mixture using the volatility difference among them as driving force. However, this technique represents 40% of the total energy consumption of an industrial facility. 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. Due to the development of the Information Technology (IT), in the numerical methods and improvement in models of multiphase flows, the investigation of complex turbulent flow problems is possible. One way to investigate these problems is to use the Computational Fluid Dynamics (CFD) techniques. Therefore, it was adopted for this study a CFD model, with the main objective of evaluating the transport phenomena for the isothermal (water-air) and non-isothermal (ethanol-water) flows through the CFD techniques to simulate a distillation sieve tray. The proposed models had the following characteristics in common in the modeling: heterogeneous, three-dimensional, shear stress transport as turbulence model, and Eulerian-Eulerian approach at 1 atm. The continuity and momentum conservation equations were used to describe the isotherm model and for non-isothermal model it was added the energy and chemical species conservations equations. The simulated sieve trays geometries were based on experimental work of [Solari e Bell \(1986\)](#), to which it were observed the influence of the inlet downcomer presence or not on sieve tray. The results for isotherm flow showed the velocity profiles, the volume fractions, and clear liquid height under the influence of the inlet downcomer. For the non-isotherm flow, the results showed moreover the hydraulic parameters, the temperature profiles and ethanol mass fractions for vapor flow rates. Thus, the simulations of the isothermal system indicated a strong influence of the liquid velocity profile for the domain with downcomer inlet. In the non-isothermal system it was possible to determine the separation efficiency, which varied with the vapor flow rates on the sieve tray. The proposed methodology in this work proved to be appropriate and the computational fluid dynamics techniques presented to be an important tool in the design and optimization of sieve trays.

Keywords: computational fluid dynamic, distillation, multiphase flow, sieve tray.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Esquema de uma unidade de destilação simples.	29
Figura 2 – Escoamento caótico em um prato perfurado.	30
Figura 3 – Características de um prato perfurado convencional de coluna de destilação.	31
Figura 4 – Características de um prato perfurado convencional de coluna de destilação.	31
Figura 5 – Esquema representativo de avaliação da eficiência Murphree em um estágio de destilação: (a) eficiência global e (b) eficiência pontual.	34
Figura 6 – Representação do modelo de um estágio n de não equilíbrio.	36
Figura 7 – As diferentes disciplinas que compõe a CFD.	39
Figura 8 – Visão geral das etapas do <i>solver</i>	41
Figura 9 – Definição do volume de controle de uma malha bidimensional.	43
Figura 10 – Discretização de uma região arbitrária: (a) região contínua e (b) região discretizada (malha numérica).	44
Figura 11 – Diferentes tipos de malhas numéricas empregadas em CFD. Malha ortogonal: (a) estruturada e malhas não ortogonais: (b) estruturada, (c) não estruturada, (d) mista (ou híbrida) e (e) poliédrica.	45
Figura 12 – Evolução da pesquisa em pratos de coluna de destilação.	48
Figura 13 – Hierarquia dos modelos de turbulência.	64
Figura 14 – Representação de transferência de massa entre as fases.	80
Figura 15 – Etapas comumente percorridas durante a simulação de CFD.	89
Figura 16 – Dimensões do estágio simulado baseado no trabalho de Solari e Bell (1986): (a) domínio computacional e (b) detalhes geométricos.	90
Figura 17 – Domínios computacionais utilizados na simulação para o escoamento isotérmico: (a) sem o <i>downcomer</i> de entrada e (b) com o <i>downcomer</i> de entrada.	91
Figura 18 – Estrutura dos blocos do domínio computacional para a criação da malha numérica: (a) sem o <i>downcomer</i> de entrada e (b) com o <i>downcomer</i> de entrada.	92
Figura 19 – Malhas utilizadas no teste de sensibilidade dos resultados para o escoamento isotérmico: (a) malha 1, (b) malha 2 e (c) malha 3.	94
Figura 20 – Regiões demarcadas na aplicação das condições de contorno adotadas para a simulação do escoamento isotérmico: (a) sem o <i>downcomer</i> de entrada e (b) com o <i>downcomer</i> de entrada.	98
Figura 21 – Localização dos pontos de referência para o cálculo da condição de contorno na saída de líquido.	99
Figura 22 – Regiões demarcadas na aplicação das condições de contorno adotadas para a simulação do escoamento não isotérmico.	104
Figura 23 – Estrutura do cluster computacional do DEQ/UFSCar.	107

Figura 24 – <i>Layout</i> dos sensores e as regiões <i>upstream</i> e <i>downstream</i> do trabalho experimental de Solari e Bell (1986).	108
Figura 25 – Linhas utilizadas na análise da componente <i>w</i> de velocidade de líquido nas regiões <i>upstream</i> e <i>downstream</i> do prato perfurado.	109
Figura 26 – Metodologia GCI em função das malhas no estado estacionário: (a) o valor médio da altura de líquido claro e (b) o tempo de processamento computacional consumido.	112
Figura 27 – Perfil da componente <i>w</i> de velocidade de líquido médio em função da distância adimensional na região <i>upstream</i> para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$	114
Figura 28 – Perfil da componente <i>w</i> de velocidade de líquido médio em função da distância adimensional na região <i>downstream</i> para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$	115
Figura 29 – Mapas de contorno da componente <i>w</i> de velocidade de líquido para os instantes de tempo igual a 0, 5 e 10 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ no plano ZX (em $y = 0,038 \text{ m}$): (a) sem DE e (b) com DE.	117
Figura 30 – Mapas de contorno da componente <i>w</i> de velocidade de líquido para os instantes de tempo igual a 15, 20 e 25 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ no plano ZX (em $y = 0,038 \text{ m}$): (a) sem DE e (b) com DE.	118
Figura 31 – Comparação dos perfis de velocidade de líquido na região de entrada do prato perfurado em função da distância adimensional para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$: (a) os perfis de velocidade de líquido médio para ambas as geometrias e os contornos de velocidade de líquido para as geometrias (b) sem DE e (c) com DE.	119
Figura 32 – Monitoramento da altura de líquido claro em função das iterações para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ para as geometrias sem DE e com DE.	120
Figura 33 – Flutuações da variável altura de líquido claro em função do tempo computacional (estado transiente) e valor médio para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ para as geometrias: (a) sem DE e (b) com DE.	120
Figura 34 – Comparação da altura de líquido claro obtida nas simulações sem DE e com DE com os resultados da literatura para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ para as geometrias sem DE e com DE.	121

Figura 35 – Mapas de contorno da fração volumétrica de líquido para os instantes de tempo igual a 15, 17 e 19 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ situado no plano YZ (em $x = 0 \text{ m}$): (a) sem DE e (b) com DE.	124
Figura 36 – Mapas de contorno da fração volumétrica de líquido para os instantes de tempo igual a 21, 23 e 25 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ situado no plano YZ (em $x = 0 \text{ m}$): (a) sem DE e (b) com DE.	125
Figura 37 – Distribuição da fração volumétrica de líquido através da utilização da ferramenta de renderização de volumes no instante de 25 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$: (a) sem DE e (b) com DE.	126
Figura 38 – Isosuperfície para uma fração volumétrica de líquido constante igual a 0,5 no instante de tempo de 25 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$: (a) sem DE e (b) com DE.	127
Figura 39 – Perfil médio dos parâmetros hidráulicos do prato em função do fator F_s para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$: (a) altura de líquido claro e (b) altura de espuma.	128
Figura 40 – Perfil de fração volumétrica média (<i>holdup</i>) de líquido na espuma em função do fator F_s para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$	129
Figura 41 – Distribuição de fração volumétrica de líquido no instante de 10 segundos através da renderização de volume para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e de F_s igual à: (a) 0,462, (b) 0,801, (c) 1,015 e (d) $1,464 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$	130
Figura 42 – Perfil de temperatura média das fases líquida e vapor em função do fator F_s	131
Figura 43 – Mapas de contorno de distribuição de temperatura de líquido situado no plano-ZX a 3,8 cm da base do prato perfurado no instante de 10 segundos para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e de F_s igual à: (a) 0,462, (b) 0,801, (c) 1,015 e (d) $1,464 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$	133
Figura 44 – Perfil de fração mássica média de etanol na fase líquida e na vapor em função do fator F_s	134
Figura 45 – Campos de fração mássica do etanol no líquido situado no plano-ZX a 3,8 cm da base do prato perfurado no instante de 10 segundos para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e de F_s igual à: (a) 0,462, (b) 0,801, (c) 1,015 e (d) $1,464 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$	135

Figura 46 – Variação pontual da fração mássica média de etanol no líquido, no vapor e no vapor que estaria em equilíbrio com o líquido em função da distância adimensional z (comprimento da região de borbulhamento, l_{rb}) para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e de F_s igual à: (a) 0,462, (b) 0,801, (c) 1,015 e (d) $1,464 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$	137
Figura 47 – Perfis de eficiência de Murphre da fase vapor em função do fator F_s	138
Figura 48 – Variação pontual da eficiência de Murphree do vapor em função dos subdomínios para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e de F_s igual à: (a) 0,462, (b) 0,801, (c) 1,015 e (d) $1,464 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$	139

Lista de tabelas

Tabela 1 – Variáveis que afetam a eficiência da coluna de destilação.	35
Tabela 2 – Características da geometria do estudo experimental de Solari e Bell (1986).	52
Tabela 3 – Tabela das constantes dos modelos de turbulência.	68
Tabela 4 – Características geométricas do prato perfurado utilizado nas simulações.	90
Tabela 5 – Qualidade das malhas utilizadas no teste de sensibilidade dos resultados.	93
Tabela 6 – Informações das malhas numéricas para o procedimento GCI.	96
Tabela 7 – Características e configurações das simulações utilizadas para o escoamento isotérmico (água-ar).	97
Tabela 8 – Condições operacionais utilizadas na simulação do escoamento isotérmico.	100
Tabela 9 – Propriedades físicas da água e do ar utilizadas na simulação do escoamento isotérmico.	101
Tabela 10 – Configurações adicionais utilizadas nas simulações do escoamento isotérmico.	101
Tabela 11 – Características e configurações das simulações utilizadas para o escoamento não isotérmico (etanol-água).	103
Tabela 12 – Condições operacionais utilizadas na simulação do escoamento não isotérmico.	105
Tabela 13 – Propriedades físicas de mistura das fases líquida e vapor utilizadas na simulação do escoamento não isotérmico.	106
Tabela 14 – Propriedades físicas das espécies puras para as fases líquida e vapor calculadas à 82,7 °C utilizadas na simulação do escoamento não isotérmico.	106
Tabela 15 – Estimativa da incerteza numérica da altura de líquido claro utilizando o método GCI.	113
Tabela 16 – Erro relativo da altura de líquido claro para o sistema isotérmico (ar-água) entre as geometrias propostas e as correlações da literatura.	122
Tabela 17 – Erro relativo da altura de líquido claro para o sistema não isotérmico (etanol-água) entre o modelo de CFD e as correlações da literatura.	129
Tabela 18 – Valores dos coeficientes da equação da capacidade calorífica.	153
Tabela 19 – Valores dos coeficientes da equação da condutividade térmica.	154
Tabela 20 – Valores das constante da integral de colisão (Equação B.21).	156
Tabela 21 – Valores dos coeficientes das equações da massa específica.	157
Tabela 22 – Valores dos coeficientes da equação de pressão de vapor.	157
Tabela 23 – Valores das constante do modelo de tensão superficial.	158
Tabela 24 – Valores dos coeficientes da equação da viscosidade dinâmica.	158
Tabela 25 – Propriedades das substâncias puras e em mistura.	159
Tabela 26 – Parâmetros UNIQUAC.	159

Lista de abreviaturas e siglas

BSL	<i>Baseline</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i> (Fluidodinâmica Computacional)
DE	<i>Downcomer</i> de Entrada
DEQ	Departamento de Engenharia Química
DES	<i>Teached Eddy Simulation</i> (Simulação dos Vórtices Desprendidos)
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i> (Simulação Numérica Direta)
E	Energia
EsQ	Espécies Químicas
FT	Fenômenos de Transporte
GCI	<i>Grid Convergence Index</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i> (Simulação de Grandes Escalas)
MVF	Método dos Volumes Finitos
MVfbE	Método dos Volumes Finitos baseados em Elementos
QM	Quantidade de Movimento
RANS	<i>Reynolds-average Navier-Stokes</i> (Equações médias de Reynolds)
RMS	<i>Root Mean Square</i> (Desvio Quadrático Médio)
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i>
SIMPLEC	<i>SIMPLE-Consistent</i>
SRS	<i>Surface Renewal Stretch</i>
SST	<i>Shear Stress Transport</i>
TDMA	<i>TriDiagonal Matrix Algorithm</i>
UFSCar	Universidade Federal de São Carlos
2D	Bidimensional
3D	Tridimensional

Lista de símbolos

Letras latinas

A, B, C	Constantes do modelo de Antoine de pressão de vapor
A_B	Área de borbulhamento do prato perfurado, [m ²]
A_C	Área de secção transversal da coluna de destilação, [m ²]
A_H	Área de total das perfurações (ou orifícios) do prato perfurado, [m ²]
A_{kj}	Área interfacial por unidade de volume, [m ² .m ⁻³]
A_{in}	Área da região de entrada de líquido no prato, [m ²]
A_o	Área dos orifícios
$A_{o,i}$	Área de um orifício
A_p	Área projetada por uma única partícula
a	Constante do modelo de Bennett, Agrawal e Cook (1983)
C	Parâmetro da correlação de Bennett, Agrawal e Cook (1983)
$C_{A,k}$	Concentração molar do componente A na fase k , [mol.m ⁻³]
$C_{A,ks}$	Concentração molar do componente A na interface, [mol.m ⁻³]
C_D	Coefficiente de arraste
C_d	Coefficiente de represa da correlação de Colwell (1981)
C_k	Concentração molar total na fase k , [mol.m ⁻³]
C_p	Capacidade calorífica, [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
C_3	Coefficiente de dissipação
$C_{\epsilon 1}, C_{\epsilon 2}, C_\mu$	Constantes dos modelos de turbulência k - ϵ padrão
Co	Número adimensional de Courant
$c_{kj}^{(d)}$	Coefficiente volumétrico de transferência de quantidade de movimento devido ao arraste
$c_{kj}^{(h)}$	Coefficiente volumétrico de transferência de calor
c_v	Coefficiente de descarga
D	Magnitude da força de arraste
D_p	Força de arraste sofrido por uma partícula; Diâmetro do prato perfurado
D_{AB}	Difusividade mássica do componente A em relação a B , [m.s ⁻¹]
d	Diâmetro da partícula (ou bolha), [m]
d_{max}	Diâmetro máximo de bolha, [m]
E_A^M	Eficiência de Murphree para o componente A
E_1, E_2	Erros fracionados de Richardson
F_s	Fator- F de vazão (ou carga de gás), [m.s ⁻¹ (kg.m ⁻³) ^{0,5}]
F_{sec}	Fator de segurança do método GCI

F_2	Função mistura do modelo de turbulência SST
Fr	Número adimensional de Froude
f	Fração volumétrica, [-]
\bar{f}	Fração volumétrica média, [-]
f_1, f_2	Valor das soluções 1 e 2
\mathbf{g}	Vetor de aceleração da gravidade, [$\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$]
\mathcal{H}_A	Constante de Henry para o componente A , [Pa]
h	Entalpia, [$\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$]; Tamanho representativo dos elementos utilizado no método GCI
h_{cl}	Altura de líquido claro, [m]
h_{cf}	Altura de dispersão acima da represa
h_f	Altura de espuma (ou dispersão)
h_{kj}	Coefficiente global de transferência de calor, [$\text{J}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$]
h_{dc}	Altura do <i>downcomer</i>
h_{in}, h_{out}	Altura de entrada e de saída de líquido no prato
h_H	Perda de carga devido a passagem do gás pelos orifícios
h_p	Espaçamento (ou altura) do prato perfurado
h_T	Perda de carga total no prato perfurado
h_w	Altura da represa
h_σ	Perda de carga devido às forças de tensão superficial do gás
\mathbf{J}^{eff}	Fluxo de massa efetivo, [$\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$]
K^c	Constante de proporcionalidade; Constante de equilíbrio termodinâmico
k	Energia cinética turbulenta, [$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}$]
k^c	Coefficiente de transferência de massa
k_{kj}^c	Coefficiente global de transferência entre as espécies químicas, [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
Lw	Razão entre a vazão volumétrica e as características geométricas do prato perfurado
l_{dc}	Comprimento do <i>downcomer</i>
l_o	Comprimento dos orifícios
l_{rb}	Comprimento da região de borbulhamento
l_w	Comprimento da represa
\mathbf{M}_{kj}	Taxa de transferência de quantidade de movimento entre as fases, [$\text{N}\cdot\text{m}^{-3}$]
m_A	Fluxo mássico do componente A
N_o	Número total de orifícios no prato
N_T	Número total de elementos
Nu	Número adimensional de Nusselt
n_A	Fluxo molar do componente A
n_c	Número de componentes ou de espécies químicas

n_f	Número de fases
n_p	Número de partículas por unidade de volume
P	Ordem formal da precisão do algoritmo
\mathbf{P}_k	Produção de turbulência devido às forças viscosas e gravitacionais
$P_{kb}, P_{eb}, P_{\omega b}$	Produção de turbulência por convecção térmica natural
P^{vap}	Pressão de vapor, [Pa]
PM	Peso molecular, [kg.kmol ⁻¹]
PO	Fator de Poynting
Pr	Número adimensional de Prandtl
p	Pressão, [Pa]
p'	Pressão modificada, [Pa]
p_t	Espaçamento triangular (ou <i>pitch</i>) dos orifícios, [m]
Q	Vazão volumétrica, [m ³ .s ⁻¹]
\mathbf{Q}_{kj}	Transferência de calor entre as fases, [J.s ⁻¹ .m ⁻³]
\mathbf{q}^{eff}	Fluxo de energia efetivo, [J.s ⁻¹ .m ⁻²]
R	Constante universal dos gases; Raio
Re	Número adimensional de Reynolds
r	Razão de refinamento
S	Termo fonte da equação de conservação; Medida invariante da taxa de deformação (modelo SST)
S_E	Fonte de energia
S_M	Fonte de quantidade de movimento devido às forças externas atuando sobre o fluido
S_{MS}	Fonte de massa
S_c, S_p	Coefficientes da linearização do termo fonte
Sc	Número adimensional de Schmidt
T	Temperatura, [K]
$T_{kj}^{(k)}$	Taxa de transferência de energia cinética turbulenta entre fases por unidade de volume, [J.s ⁻¹ .m ⁻³]
$T_{kj}^{(\epsilon)}$	Taxa de transferência da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta entre fases por unidade de volume, [J.s ⁻² .m ⁻³]
\mathbf{T}^{eff}	Tensor de quantidade de movimento, [N.m ⁻²]
t	Tempo, [s]
U_s	Velocidade superficial da fase dispersa, [m.s ⁻¹]
V_i	Volume de cada elemento da malha numérica
V_p	Volume de uma partícula
\mathbf{v}	Vetor velocidade, [m.s ⁻¹]
v_A, v_B	Volumes molares dos componentes A e B

v_{slip}	Velocidade de deslizamento das partículas (bolhas), [m.s ⁻¹]
v_x, v_y, v_z	Componentes de velocidade na direção x , y e z , [m.s ⁻¹]
$X_{A,k}$	Fração mássica do componente A na fase k , [-]
x	Coordenada x
$x_{A,k}, x_{A,\alpha}$	Fração molar do componente A na fase k /líquida, [-]
Y_{kj}	Transferência de espécies químicas entre as fases, [kg.s ⁻¹ .m ⁻³]
y	Coordenada y
y_A	Fração mássica do componente A , [-]
$y_{A,\beta}$	Fração molar do componente A na fase vapor, [-]
$y_{A,s}$	Fração mássica do componente A na interface, [-]
z	Coordenada z

Letras gregas

α_1	Constante do modelo de turbulência <i>Shear Stress Transport</i> (SST)
$\alpha_\omega, \beta, \beta'$	Constantes do modelo de turbulência k - ω
β	Coefficiente de expansão térmica;
Γ	Termo difusivo da equação de conservação
Γ_{kj}	Taxa de transferência de massa por unidade de volume entre as fases, [kg.m ⁻³ .s ⁻¹]
γ	Coefficiente de atividade
ϵ	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, [m ² .s ⁻³]
ϵ_{12}	Erro absoluto entre as soluções 1 e 2
ζ	Viscosidade dinâmica <i>bulk</i> da fase
η	Parâmetro de densidade de espuma
θ	Tempo de contato das fases, [s]
$\Lambda_{AB}, \Lambda_{BA}$	Parâmetros de Wilson para o coeficiente de atividade
λ	Condutividade térmica, [J.s ⁻¹ .m ⁻¹ .K ⁻¹]
$\lambda_{AB}, \lambda_{BA}$	Parâmetros experimentais de interação molecular dos componentes A e B
μ	Viscosidade dinâmica, [kg.m ⁻¹ .s ⁻¹]
π	Constante de proporção numérica pi ($\pi = 3, 14159\dots$)
ρ	Massa específica, [kg.m ⁻³]
$\rho_{A,k}$	Concentração mássica do componente A na fase k , [kg.m ⁻³]
$\rho_{A,ks}$	Concentração mássica do componente A na interface, [kg.m ⁻³]
ρ_k	Concentração mássica total na fase k , [kg.m ⁻³]
σ	Tensão superficial, [N.m ⁻¹]
$\sigma_{k\epsilon 1}, \sigma_{k\epsilon 2}$	Constantes do modelo de turbulência k - ϵ padrão
$\sigma_{k\omega 1}, \sigma_{k\omega 2}$	Constantes do modelo de turbulência k - ω

ϕ	Propriedade conservativa; Coeficiente de fugacidade
ϕ^{sat}	Coeficiente de fugacidade na saturação
ω	Frequência turbulenta

Subscritos

A, B	Componente ou espécie química
exp	Refere-se ao experimental
grosseira	Refere-se a malha com menor densidade de elementos
k	k ésima fase; Fase contínua
in	Refere-se a região de entrada
j	Fase dispersa
n	Refere-se ao estágio
out	Refere-se a região de saída
refinada	Refere-se a malha com maior densidade de elementos
S	Força de interface devido a força de pressão dos sólidos
sim	Refere-se ao simulado
1, 2	Posições de referência
α	Fase líquida
β	Fase gasosa/vapor

Sobrescritos

B	Refere-se a fração volumétrica <i>holdup</i> de Bennett, Agrawal e Cook (1983)
C	Refere-se a fração volumétrica <i>holdup</i> de Colwell (1981)
D	Força de interface devido ao arraste
eff	Propriedade efetiva
grosseira	Refere-se a malha com menor densidade de elementos
L	Força de interface devido a força de sustentação
LUB	Força de interface devido a força de lubrificação
M	Refere-se a eficiência de Murphree
p	Refere-se a eficiência de Murphree no ponto
refinada	Refere-se a malha com maior densidade de elementos
sat	Refere-se a saturação da propriedade
TD	Força de interface devido a força de dispersão turbulenta
tp	Transposta do vetor
turb	Propriedade turbulenta
VM	Força de interface devido a força de massa virtual

vap Refere-se a pressão de vapor

Operadores e outros símbolos

exp() Função exponencial natural
max() Função de máximo
 ∂ Diferencial parcial
+ Direção positiva do fenômeno
- Média da propriedade
* Refere-se a condição de equilíbrio
% Porcentagem

Sumário

1	INTRODUÇÃO	24
1.1	Objetivos	25
1.1.1	Objetivo geral	25
1.1.2	Objetivos específicos	25
1.2	Organização da tese de doutorado	25
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	27
2.1	Destilação	27
2.1.1	Histórico	27
2.1.2	Coluna de destilação	28
2.1.2.1	Destilação fracionada	28
2.1.2.2	Prato perfurado	30
2.2	Modelos de equilíbrio	32
2.2.1	Estágio de equilíbrio	32
2.2.2	Estágio de não equilíbrio	36
2.3	Fluidodinâmica computacional (CFD)	37
2.3.1	Como funciona CFD	40
2.3.1.1	Pré-processamento	40
2.3.1.2	Processamento	40
2.3.1.3	Pós-processamento	41
2.4	Procedimento numérico	41
2.4.1	Modelo matemático	42
2.4.2	Método de discretização	42
2.4.3	Sistema de coordenadas e base vetorial	43
2.4.4	Malha numérica	43
2.4.5	Aproximações finitas	44
2.4.5.1	Termo difusivo	46
2.4.5.2	Termo convectivo	46
2.4.5.3	Termo fonte	46
2.4.5.4	Termo transiente	46
2.4.5.5	Abordagem segregada e acoplada	46
2.4.6	Método de resolução de sistemas lineares	47
2.4.7	Critério de convergência	47
2.5	Estudos em pratos perfurados de coluna de destilação	47
2.5.1	Abordagem experimental	49

2.5.2	Abordagem numérica	53
3	MODELAGEM MATEMÁTICA	59
3.1	Equações de conservação	59
3.1.1	Equação de conservação da massa	59
3.1.2	Equação de conservação da quantidade de movimento	59
3.1.3	Equação de conservação da energia	60
3.1.4	Equação de conservação de espécies químicas	60
3.1.5	Equações de restrição	60
3.1.5.1	Restrição de pressão	61
3.1.5.2	Restrição de volume	61
3.1.5.3	Restrição de massa	61
3.2	Equações de fechamento	61
3.2.1	Fluxos efetivo	61
3.2.2	Turbulência	62
3.2.2.1	Modelos de turbulência	63
3.2.2.2	Viscosidade turbulenta	64
3.2.2.3	Condutividade térmica turbulenta	68
3.2.2.4	Difusividade turbulenta	68
3.2.3	Transferência quantidade de movimento entre as fases	68
3.2.4	Transferência de calor entre as fases	72
3.2.5	Transferência de massa entre as fases	75
3.2.6	Transferência de espécies químicas entre as fases	76
3.2.6.1	Potenciais químicos	78
3.2.6.2	Modelo de duas resistências	79
3.3	Síntese da modelagem matemática	84
3.3.1	Modelagem matemática aplicada no sistema líquido-gás (água-ar) em pratos perfurados	84
3.3.2	Modelagem matemática aplicada no sistema líquido-vapor (mistura etanol-água) em pratos perfurados	86
4	METODOLOGIA NUMÉRICA	89
4.1	Pré-processamentos dos modelos	89
4.1.1	Domínio computacional	90
4.1.2	Malha numérica	92
4.1.3	Configurações das simulações	96
4.1.3.1	Sistema isotérmico (água-ar)	96
4.1.3.2	Sistema não isotérmico (etanol-água)	102
4.2	Processamento dos modelos	107
4.3	Pós-processamento dos modelos	107

4.3.1	Análise GCI	108
4.3.2	Validação da modelagem matemática	108
4.3.3	Eficiência de separação	111
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	112
5.1	Teste de sensibilidade das malhas numéricas	112
5.2	Escoamento isotérmico (água-ar)	113
5.2.1	Distribuição dos campos de velocidade de líquido	113
5.2.2	Altura de líquido claro	119
5.2.3	Campos de fração volumétrica	123
5.3	Escoamento não isotérmico (etanol-água)	127
5.3.1	Análise dos fenômenos de transporte em função do fator F_s no prato perfurado	127
5.3.1.1	Transferência de quantidade de movimento	127
5.3.1.2	Transferência de energia	131
5.3.1.3	Transferência de espécies químicas	134
5.3.2	Eficiência de separação dos componentes	137
6	CONCLUSÕES	140
7	SUGESTÕES PARA TRABALHO FUTUROS	142
	REFERÊNCIAS	143
	ANEXOS	149
	ANEXO A – PROCEDIMENTO GCI	151
	ANEXO B – CÁLCULO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS	153
	ANEXO C – PROPRIEDADES FÍSICAS	159

1 INTRODUÇÃO

A indústria sucroalcooleira no brasileira vem encarando grandes dificuldades para enfrentar um mercado cada vez mais competitivo. Além da grande concorrência com o mercado mundial, o setor depara-se com rígidas regulamentações ambientais, processo de produção muitas vezes sucateado, endividamentos e problemas governamentais.

Por outro lado, um dos grandes debates mundiais é a questão do uso de combustíveis fósseis e seus danos ao meio ambiente. Uma das principais formas de diminuir a emissão de gases poluentes é a utilização de energia “mais limpa”, como por exemplo, os biocombustíveis. Logo, com a necessidade de tornar a matriz energética menos dependente do petróleo e seus derivados, o etanol ganha destaque como alternativa promissora e combustível renovável mais limpo. O setor de produção do combustível etanol hidratado teve um aumento de 37% de 2014 para 2015. Isso nos mostra a importância do setor para desenvolvimento nacional e mundial, sendo assim, a busca de melhorias de se obter processos mais eficientes e sustentáveis (UNICA, 2016).

Uma preocupação constante das indústrias está relacionada com a busca de processos mais eficientes. Os processos de separação, como a evaporação e a destilação, são processos que consomem uma grande quantidade de energia. A destilação é a técnica de separação mais comumente utilizada nas indústrias de processos químicos, contabilizando entre 90% e 95%. 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. Segundo o autor, as plantas químicas possuem entre 40% a 70% custos de capital e custos operacionais em técnicas de separação (WANKAT, 2012). Diante destes detalhes, 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.

O desempenho de pratos perfurados de coluna de destilação está intimamente relacionado ao comportamento hidrodinâmico das fases no equipamento de separação. Os seguintes fatores influenciam na performance do prato, e conseqüentemente, no *layout* do prato: regime de escoamento, mecanismos de restrição de capacidade, corrosão, incrustação, condições operacionais, complexidade geométrica, entre outros (KISTER, 1989). O projeto de internos deve levar em consideração tais itens, principalmente o comportamento fluidodinâmico. Dentro deste contexto se enquadram as técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD) para avaliar o comportamento dos fluidos em colunas de destilação.

A CFD tem sido empregada em aplicações industriais e em pesquisa acadêmica para otimizar projetos e identificar processos e projetos. Portanto, ela envolve a solução numérica das equações da continuidade (massa) e de conservação da quantidade de movimento, de energia e

das espécies química. A aplicação desta ferramenta, em colunas de destilação, pode melhorar a descrição do comportamento hidrodinâmico em pratos perfurados.

Por fim, é dentro deste contexto que se desenvolveu a metodologia proposta neste trabalho, que visa aperfeiçoar o estudo em pratos perfurados de colunas de destilação em escala comercial, analisando os fenômenos de transporte para os escoamentos isotérmico (água-ar) e não isotérmico (etanol-água).

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo geral

Este trabalho teve como objetivo geral a avaliação dos fenômenos de transporte através das técnicas de CFD na simulação de um prato perfurado de destilação com o auxílio do *software* de CFD.

1.1.2 Objetivos específicos

Os objetivos específicos alcançados neste trabalho foram:

- Apresentar um estudo sobre a incerteza numérica de uma malha através da aplicação do método GCI (*Grid Convergence Index*);
- Comparar e verificar o modelo de CFD proposto com os dados experimentais de [Solari e Bell \(1986\)](#) e observar a influência da inclusão do *downcomer* de entrada no prato perfurado do escoamento isotérmico;
- Descrever a fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de coluna de destilação, verificando a influência da carga de vapor (fator F_s) nos orifícios na transferência de quantidade de movimento, energia e das espécies químicas para o escoamento não isotérmico (etanol-água);
- Avaliar a eficiência de separação através da eficiência de Murphree para a mistura líquida etanol-água.

1.2 Organização da tese de doutorado

A organização deste trabalho consiste nos seguintes assuntos:

- **Capítulo 2:** Levantamento bibliográfico relativo a aos processos de separação via destilação, aplicações e procedimento numérico utilizados em códigos de CFD e estudos experimentais e teóricos em colunas de destilação;

- **Capítulo 3:** Modelagem matemática aplicada em sistema tridimensional, transiente, multifásico e multicomponente com transferência de calor e das espécies químicas, como também as equações de fechamento dos modelos associadas aos fenômenos de turbulência e de transporte entre fases;
- **Capítulo 4:** Detalhamento da metodologia numérica aplicada para o escoamento isotérmico (água-ar) e não isotérmico (etanol-água), desde a criação do domínio computacional até o processo de obtenção dos resultados obtidos via CFD;
- **Capítulo 5:** Apresentação e discussão dos resultados obtidos a partir da metodologia aplicada, realizando primeiramente o teste de sensibilidade das malhas numérica através da procedimento GCI. Em seguida, observar o comportamento hidrodinâmico com a inclusão do *downcomer* de entrada no prato perfurado para o escoamento isotérmico (água-ar) e a influência velocidade de vapor na entrada dos orifícios na transferência de calor e das espécies químicas no estágio;
- **Capítulo 6:** As principais conclusões obtidas neste trabalho de doutorado são apresentadas, de acordo com a metodologia proposta e os resultados obtidos;
- **Capítulo 7:** Apresentação das sugestões futuras, visando a evolução em pesquisas de pratos de coluna de destilação.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

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

2.1 Destilação

2.1.1 Histórico

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

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

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

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

2.1.2 Coluna de destilação

A destilação é uma operação unitária na qual uma mistura é separada em seus componentes devido a uma diferença de volatilidade dos mesmos. De acordo com [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 diferença de volatilidade existente entre os componentes da mistura em uma destilação é a força motriz efetiva da separação neste processo, na qual o agente que promove esta separação é o calor, aliado aos internos do equipamento de separação. Podem-se ter os seguintes tipos de destilação ([CALDAS, 2003](#)):

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

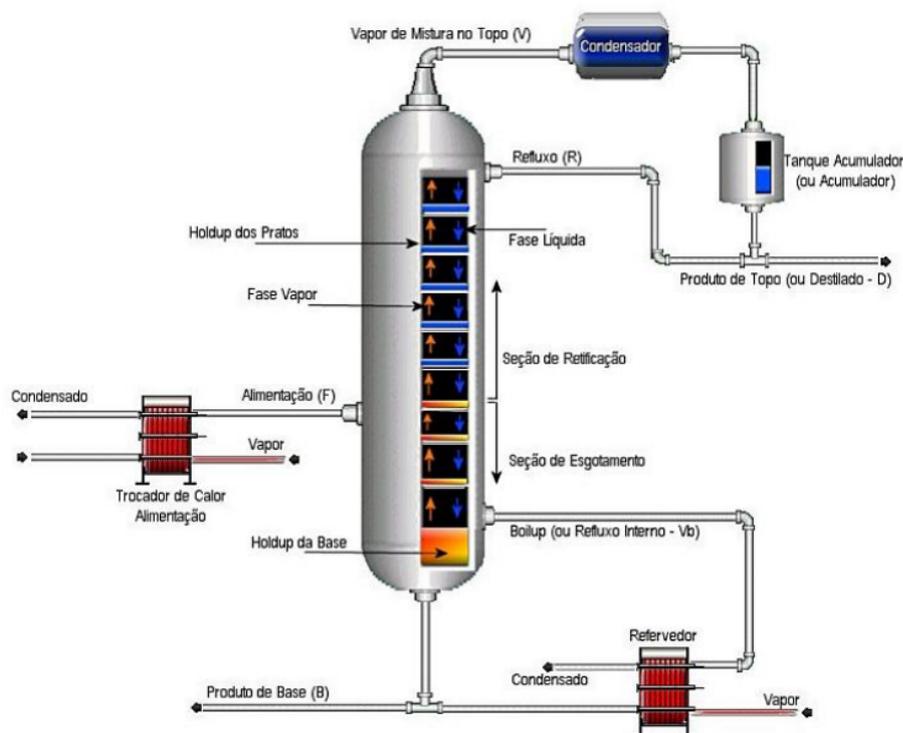
De acordo com os diversos tipos de destilação, será abordada a seguir, a destilação fracionada, na qual serviu de base os conhecimentos teóricos para o presente estudo.

2.1.2.1 Destilação fracionada

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

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 condensador, que usa

Figura 1 – Esquema de uma unidade de destilação simples.



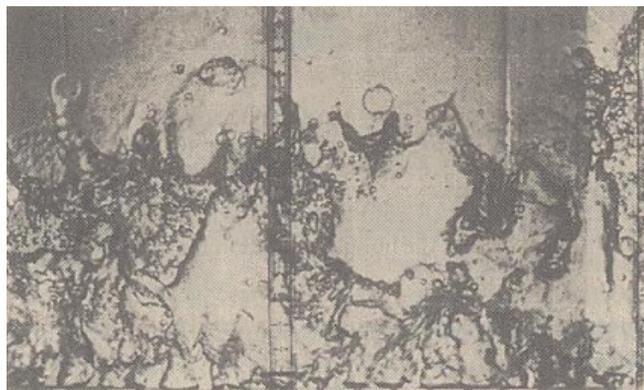
Fonte: Marangoni (2005).

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 (WANKAT, 2012).

A hidrodinâmica de uma coluna de destilação é complexa. Na base da coluna é gerado um vapor com uma pressão suficientemente elevada para vencer o peso da coluna de líquido em cada prato. Já para o topo da coluna em direção à base da coluna escoo o líquido, na mesma direção do gradiente positivo de pressão, devido à diferença de densidade. A mudança de pressão na coluna deve ser suave, pois uma súbita diminuição da pressão provoca uma brusca vaporização do líquido no prato (*flashing*) e o aumento da vazão de vapor pode ocasionar uma formação excessiva de espuma (FOUST et al., 1982). A Figura 2 ilustra o escoamento caótico em um prato perfurado.

A destilação fracionada pode ser operada em diversos tipos de colunas de destilação, que são classificadas 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.

Figura 2 – Escoamento caótico em um prato perfurado.



Fonte: Lockett (1986).

Podem-se citar três classes principais de colunas de destilação deste tipo:

- Colunas de pratos;
- Colunas recheadas;
- Colunas mistas, compostas por seções de pratos e de recheios.

Os internos das torres de pratos podem ser classificados como:

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

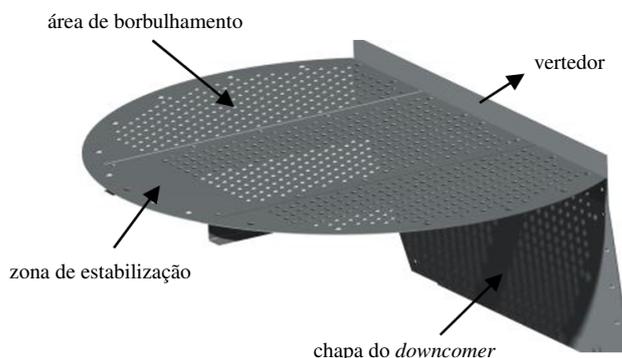
O emprego de internos em colunas de destilação tem por finalidade garantir o bom funcionamento das mesmas, aumentando a área efetiva de contato entre as fases líquida e vapor. Dos tipos de internos de pratos apresentados acima, o prato perfurado é o mais simples e o mais comum, em virtude da facilidade de construção, versatilidade e baixo custo. Por estes motivos, o estudo numérico foi aplicado em um prato do tipo perfurado.

2.1.2.2 Prato perfurado

Os pratos são geralmente empregados para colunas de grandes diâmetros (por exemplo, maiores que um metro) e vários *downcomers* (regiões que permitem a descida do líquido de um prato superior ao inferior) são às vezes necessários (CALDAS, 2003). A Figura 3 apresenta a estrutura de um prato perfurado convencional de coluna de destilação.

A Figura 4 apresenta um esboço do comportamento dos fluidos durante a operação. O líquido, ao entrar no prato, cruza a zona de estabilização de área A_{dc} , que tem como finalidade abrandar o fluxo líquido proveniente do prato superior e uniformizar o escoamento pela área

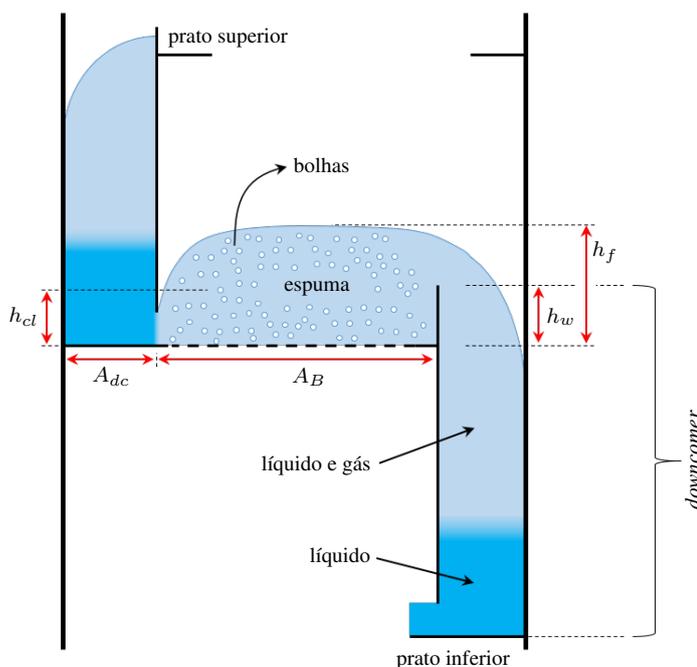
Figura 3 – Características de um prato perfurado convencional de coluna de destilação.



Fonte: Adaptado de Sulzer (2015).

de borbulhamento (A_B) – conhecida também de área ativa, onde há o encontro com a fase gasosa (ou vapor). Em seguida o líquido transpõe o vertedor de altura h_w e atinge a região do *downcomer*, por onde o líquido flui em direção ao prato inferior. Como parte do gás é arrastada junto com o líquido durante a descida, formando uma mistura de líquido com gás e líquido com bolhas, o *downcomer* tem como principal função garantir que a carga gasosa arrastada seja recuperada e não atinja o estágio de baixo (PERRY; GREEN, 2008; WANKAT, 2012).

Figura 4 – Características de um prato perfurado convencional de coluna de destilação.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Ainda na Figura 4, o parâmetro altura de líquido claro (h_{cl}), que representa a altura

de líquido desareado no prato, ou seja, a altura que a carga líquida ocuparia se não houvesse a injeção de gás, trata-se de um parâmetro hidráulico muito utilizado no projeto de pratos e na validação de estudos numéricos (PERRY; GREEN, 2008; WANKAT, 2012). Na literatura, como por exemplo Lockett (1986), pode-se encontrar diversas correlações para o cálculo desse parâmetro.

2.2 Modelos de equilíbrio

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

2.2.1 Estágio de equilíbrio

Uma consideração básica empregada na modelagem de estágio de equilíbrio é que as correntes que abandonam o estágio estão em equilíbrio termodinâmico entre si. Por isso é necessário à introdução do conceito de eficiência para corrigir os desvios oriundos da consideração do equilíbrio termodinâmico, pois na prática, dificilmente as correntes que abandonam os estágios alcançam o equilíbrio termodinâmico entre as fases (PESCARINI, 1996).

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

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

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

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

- **Conceito de eficiência:**

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

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

$$E_{oc} = \frac{N_T}{N_R} \quad (2.1)$$

onde E_{oc} é a eficiência global, N_T é o número de estágios teóricos ou ideais e N_R é o número de pratos reais.

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

Como comentado anteriormente, a avaliação da eficiência de separação dos componentes de um estágio foi proposto por Murphree (1925), na qual a equação leva seu nome. A eficiência de Murphree é definida para um estágio e não para toda a coluna. Conceitualmente, é diferente da eficiência global porque a sua definição se aplica a um estágio genérico n , no qual as vazões são as mesmas e as concentrações reais são comparadas com as de equilíbrio.

Na Figura 5 é representado esquematicamente como podem ser obtidos os equacionamentos da eficiência de Murphree. As equações de Murphree 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. Deste modo, as Equações 2.2 e 2.3 fornecem as eficiências de Murphree baseadas nas fases vapor ($E_{A,\beta}^M$) e líquida ($E_{A,\alpha}^M$), respectivamente, e podem ser expressas por:

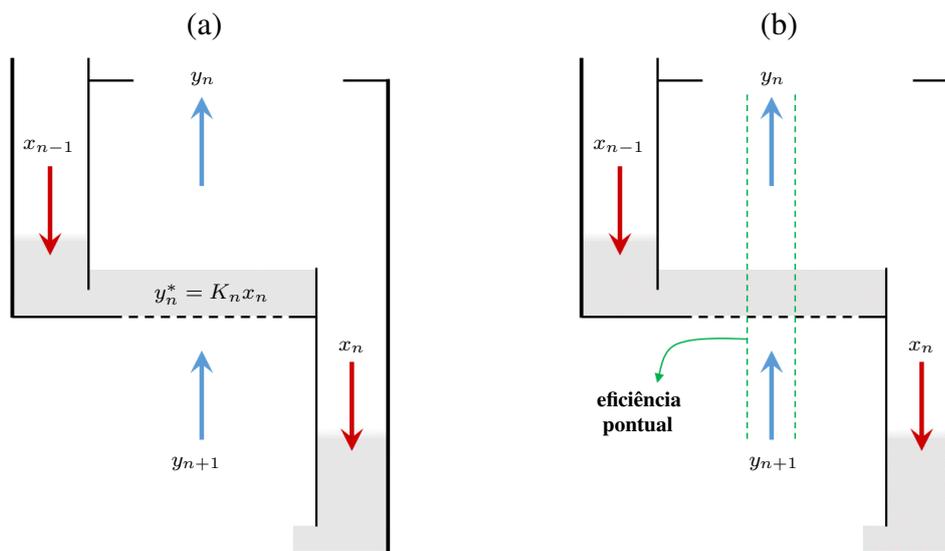
$$E_{A,\beta}^M = \frac{y_{A,n} - y_{A,n+1}}{y_{A,n}^* - y_{A,n+1}} \quad (2.2)$$

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

onde $y_{A,n}$ é a fração molar do componente A na fase vapor que deixa o estágio, $y_{A,n+1}$ é a fração molar do componente A na fase vapor que entra no estágio, $y_{A,n+1}^*$ é a fração molar do

componente A na fase vapor em equilíbrio com o mesmo componente na fase líquida que deixa o estágio, $x_{A,n-1}$ é a fração molar do componente A na fase líquida que entra no estágio, $x_{A,n}$ é a fração molar do componente A na fase líquida que deixa o estágio e $x_{A,n}^*$ é a fração molar do componente A na fase líquida em equilíbrio com o mesmo componente na fase vapor que deixa o estágio.

Figura 5 – Esquema representativo de avaliação da eficiência Murphree em um estágio de destilação: (a) eficiência global e (b) eficiência pontual.



Fonte: Adaptado de Barros (1997).

De acordo com 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. O autor ressalta ainda 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. Desta maneira, será avaliada no presente estudo a eficiência de Murphree para a fase vapor. Na prática, sabe-se que no escoamento sobre o prato perfurado não ocorre a mistura completa e nem perfeita entre o líquido e o vapor. Assim, conforme analisa Barros (1997), como efeito dessa não-idealidade ocorrem regiões de contato líquido-vapor em diversas regiões do estágio que possuem diferentes concentrações tanto da fase vapor quanto da fase líquida. Dessa maneira, é possível percorrer certos locais nos quais o vapor abandona o prato com uma composição mais rica no componente mais volátil em relação a outros locais. A partir desta constatação, surgiu o conceito de eficiência no ponto, fornecendo a possibilidade de avaliar a eficiência ao longo de diversos locais do prato.

Como apresentado acima, 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. Como apresentado acima, a Figura 5b ilustra um estágio de destilação esquematizando as composições molares do componente A para se obter a eficiência no ponto.

Assim, [West, Gilbert e Shimizu \(1952\)](#) propuseram a aplicação da eficiência de Murphree em pontos ($E_{A,\beta}^{M,p}$) sobre o prato, de acordo com a expressão a seguir:

$$E_{A,\beta}^{M,p} = \frac{y_{A,n} - y_{A,n+1}}{y_{A,n}^* - y_{A,n+1}} \Bigg|_{\text{ponto}} \quad (2.4)$$

Os termos presentes na Equação 2.4 possuem os mesmos significados que os termos apresentados na Equação 2.2, com a exceção de que agora a análise é para o ponto. Assim, o termo $y_{A,n}^*$ é a fração molar do componente j na fase vapor em equilíbrio com o componente A na fase líquida que sai do ponto no prato n .

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

Assim, como listado por [Barros \(1997\)](#), o autor abordou o conceito de eficiência e suas mais variadas formas, enumerando diversas variáveis/fatores que afetam a eficiência de destilação, as quais estão apresentadas na Tabela 1.

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

Tipo de variável	Prato perfurado
Operação	Pressão Razão de refluxo, L/V Temperatura
Sistema	Densidade do líquido Densidade do vapor Tensões superficiais do líquido (na temperatura de bolha) Viscosidade do líquido Viscosidade do vapor Volatilidades relativas
Projeto	Altura do vertedor Altura da represa Área livre do prato Diâmetro das perfurações Distribuição dos orifícios
Coluna	Espaçamento entre pratos Formato do vertedor

Fonte: Adaptado de [Barros \(1997\)](#).

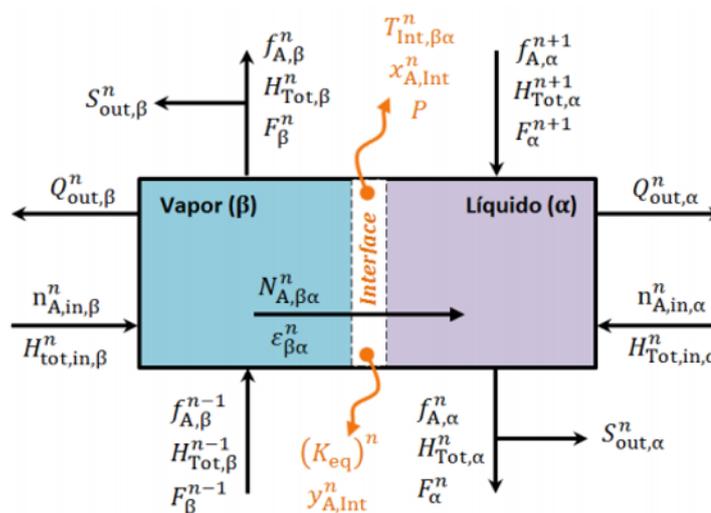
A eficiência de pratos bem projetados varia de 40 a 80%, sendo o valor mais elevado atingido em colunas de menor diâmetro devido à melhor homogeneidade da mistura. A eficiência de prato de [Murphree \(1925\)](#) é definida pela comparação entre um prato real e um prato ideal mediante o grau de contato entre o líquido e o vapor, admitindo-se que o líquido esteja completamente homogeneizado sobre o prato. Trata-se da definição mais bem aceita e difundida

na literatura. Para ampliar a abrangência da equação de Murphree, os autores [West, Gilbert e Shimizu \(1952\)](#) sugeriram o conceito de eficiência local, servindo como base para minimizar as limitações da equação de Murphree. Este conceito aplica-se para um ponto particular do prato com uma determinada composição líquida. Ainda hoje, após tantas definições e críticas, a eficiência de Murphree é uma das mais empregadas nos cálculos que envolvem os processos de separação. A eficiência depende da transferência de massa entre a fase líquida e a fase vapor, sendo que o aumento neste parâmetro tem sido obtido com longos períodos de contato ([CALDAS, 2003](#)).

2.2.2 Estágio de não equilíbrio

Uma consideração básica da modelagem de estágios de não equilíbrio é a consideração da existência do não equilíbrio termodinâmico entre as fases, líquida e vapor, que deixam cada estágio de destilação, assumindo-se o equilíbrio termodinâmico somente na interface líquido-vapor. As equações de conservação são escritas para cada fase independentemente e resolvidas juntamente com as equações de transporte que descrevem os fenômenos de transferência de massa e energia em misturas de multicomponentes. Na Figura 6 é apresentado um esquema de um estágio n de uma coluna de destilação com escoamento em contracorrente e multicomponente, apresentando duas fases, líquido e vapor, que não estão em equilíbrio. Há, portanto, transferência de massa e energia através da interface ([PESCARINI, 1996](#)).

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



Fonte: Adaptado de [Noriler \(2007\)](#).

onde $N_{A,\beta\alpha}$ é o fluxo total de transferência de massa entre as fases, $\varepsilon_{\beta\alpha}$ é o fluxo total de transferência de calor entre as fases, $S_{out,\beta\alpha}$ é o fluxo total na saída lateral das fases vapor e líquida, $f_{A,\beta\alpha}$ é o fluxo molar do componente A das fases vapor e líquida, $H_{Tot,\beta\alpha}$ é a entalpia total das fases vapor e líquida, $Q_{out,\beta\alpha}$ é o calor removido das fases vapor e líquido, $F_{\beta\alpha}$ é o fluxo

molar total da fase vapor e da fase líquida, $n_{A,\text{in},\beta\alpha}$ é o fluxo do componente A na alimentação nas fases vapor e líquida, K^c é a constante de equilíbrio termodinâmica, $x_{A,\text{Int}}$ é a fração molar do componente A de líquido na interface, $y_{A,\text{Int}}$ é a fração molar do componente A de vapor na interface, $T_{\text{Int},\beta\alpha}$ é a temperatura das fases vapor e líquida na interface, p é a pressão, n refere-se ao estágio genérico e os subscritos α e β representam as fases líquida e vapor, respectivamente.

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

A modelagem apresentada na Figura 6 descrita por [Pescarini \(1996\)](#) incorpora no modelo de estágios de não equilíbrio os efeitos de resistência à transferência de calor e massa para o cálculo dos fluxos na interface, a partir de equações constitutivas para os coeficientes globais de transferência de calor e massa e de equações que relacionam o equilíbrio termodinâmico na interface líquido-vapor.

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

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

2.3 Fluidodinâmica computacional (CFD)

Ao longo dos anos, o tratamento da modelagem matemática que descreve os fenômenos de transporte seguiram um avanço tanto em ordem cronológica quanto em nível de detalhamento. Os modelos matemáticos podem ser classificados segundo o nível de detalhamento da forma que

segue (HIMMELBLAU, 1970):

- Modelagem atômica e molecular: 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;
- Modelagem microscópica: considera-se 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 de quantidade de movimento. O balanço é realizado em um elemento de volume infinitesimal, tendo dessa forma suas equações baseadas em balanços diferenciais. Essa hipótese do contínuo é aplicada também para as modelagens múltiplo e máximo gradiente e macroscópica;
- 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;
- 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;
- 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.

A modelagem microscópica se enquadra na CFD, onde a CFD é a técnica numérica de sistemas que envolvem o fluxo de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados, tais como reações químicas, por meio da simulação computacional (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). 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, 2000).

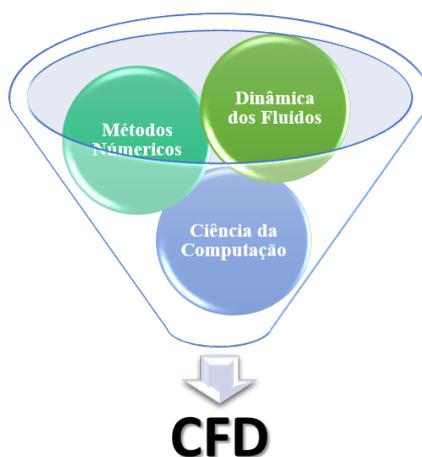
A técnica de CFD é muito poderosa e abrange um amplo leque de áreas de aplicações industriais e não industriais, tais como (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007):

- Aerodinâmica de espaçonaves e veículos;

- Combustão em motores e turbinas a gás;
- Fluxo dentro de difusores;
- Engenharia de meio-ambiente: distribuição dos poluentes e efluentes;
- Engenharia biomédica: fluxo de sangue através de artérias e veias;
- Rotores de bombas visando à otimização da geometria;
- Reatores de tanques agitados como modelo não ideal para a previsão de zonas mortas e de circulação e dos efeitos das chicanas e dos agitadores nas condições de mistura;
- Trocadores de calor, com o intuito de se maximizar a troca térmica por análise dos efeitos da utilização de chicanas e aletas e de configurações geométricas alternativas;
- Ciclones com a finalidade de se desenvolver projetos com alta eficiência de coleta e reduzida queda de pressão;
- Esportes e muitos outros mais.

A CFD tem sido empregada em aplicações industriais e em pesquisa acadêmica. No início, este campo de estudo foi limitado principalmente às áreas de alta tecnologia de engenharia de aeronáutica, mas agora é uma técnica amplamente adotada para resolver problemas complexos em muitos campos da engenharia moderna. A CFD vem sendo utilizada em processos químicos, civil e na engenharia ambiental. A CFD vem sendo empregada no intuito de criar novos projetos e otimizar equipamentos existentes através de simulações computacionais que resultem em maior eficiência e menores custos operacionais. A CFD tornou-se certamente um novo ramo da ciência, integrando não só as disciplinas de mecânica dos fluidos com a matemática, mas também com a informática (TU; YEOH; LIU, 2008). A Figura 7 esquematiza as diferentes áreas que compõem a CFD.

Figura 7 – As diferentes disciplinas que compõem a CFD.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Além disso, as características físicas do movimento dos fluidos podem geralmente ser descritas através de equações matemáticas fundamentais, geralmente em forma de equações

diferenciais parciais, em um domínio de interesse. Estas equações parciais são convertidas em equações algébricas na discretização utilizando métodos numéricos. (TU; YEOH; LIU, 2008).

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), algumas das principais vantagens da aplicação das técnicas de CFD são:

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

2.3.1 Como funciona CFD

2.3.1.1 Pré-processamento

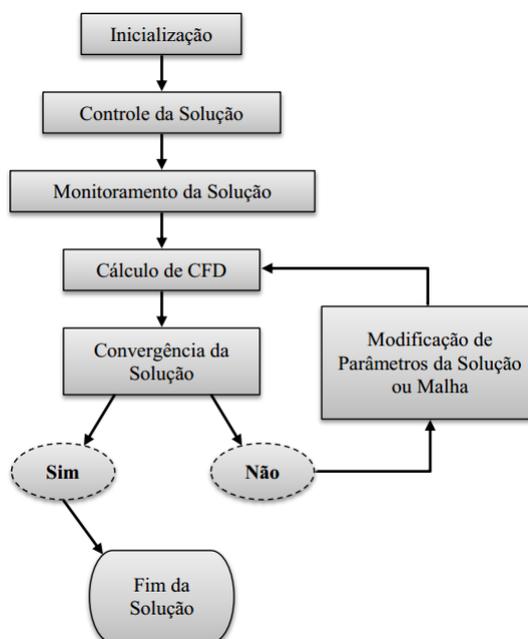
A etapa de pré-processamento consiste na formulação do problema, na qual é definido e modelado fisicamente. Esta etapa envolve:

- Criação da geometria de interesse (domínio computacional);
- Geração da malha (subdivisão do domínio computacional);
- Seleção dos fenômenos físicos e químicos envolvidos que precisam ser modelados;
- Fornecimento das propriedades do fluido envolvido no problema;
- Especificação das condições de contorno apropriadas.

A criação da geometria e da malha numérica exige muita habilidade para projetá-las, na qual deve-se haver o compromisso entre o custo e a precisão desejada da solução.

2.3.1.2 Processamento

O uso apropriado de qualquer código de CFD requer a compreensão dos aspectos numéricos dentro do *solver*. Os procedimentos que compõem o *solver* são a inicialização, controle da solução, monitoramento da solução, cálculo de CFD e a convergência da solução (TU; YEOH; LIU, 2008). Os procedimentos descritos nesta etapa são apresentados na Figura 8.

Figura 8 – Visão geral das etapas do *solver*.

Fonte: Traduzido de [Tu, Yeoh e Liu \(2008\)](#).

2.3.1.3 Pós-processamento

Na etapa do pós-processamento é permitida a visualização gráfica dos resultados obtidos na etapa anterior (*solver*) em diversos pontos do domínio computacional. Os principais pacotes de CFD estão equipados com poderosas ferramentas de visualização gráfica dos resultados gerados da simulação. Esses resultados podem ser representados por ([VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007](#)):

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

2.4 Procedimento numérico

Na modelagem matemática de escoamentos encontrados em diversos problemas de engenharia, são utilizadas Equações Diferenciais Parciais (EDP's) não lineares que não possuem

solução analítica, ou que a solução analítica é aplicável somente mediante hipóteses simplificadoras que se afastam do fenômeno físico real. De acordo com [Ferziger e Perić \(2002\)](#), para a obtenção de uma solução computacional é necessária a adoção de uma abordagem numérica e os componentes de um método de solução numérica são:

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

2.4.1 Modelo matemático

O modelo matemático é a primeira etapa de qualquer método numérico, isto é, a definição das EDP's além das condições de contorno. O modelo matemático dependerá das características do escoamento, tais como, dimensão, compressibilidade, turbulência, abordagem multifásico, entre outros atributos ([FERZIGER; PERIĆ, 2002](#)).

2.4.2 Método de discretização

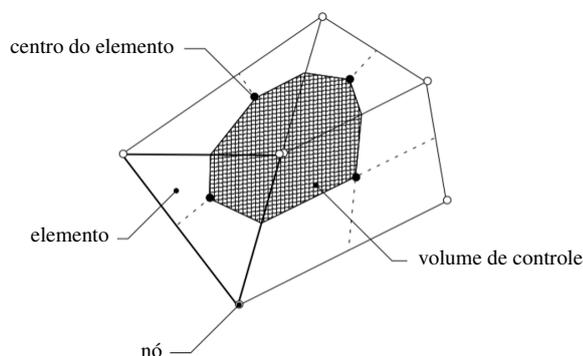
Após selecionar a modelagem matemática, há a necessidade de se escolher um método de discretização adequado, ou seja, um método de aproximação das equações diferenciais por um sistema de equações algébricas, para as variáveis em um conjunto de pontos discretos no espaço e no tempo. Segundo [Maliska \(2004\)](#), existem muitas abordagens no contexto dos pacotes comerciais de abrangência industrial e acadêmica que utilizam o Método dos Volumes Finitos (MVF) na discretização das equações diferenciais.

A abordagem do MVF tem como ponto de partida a discretização da forma integral das equações de conservação diretamente em um local físico. O domínio computacional é subdividido em uma série de volumes de controle finitos, sobre os quais devem ser aplicadas as equações aproximadas, de forma que estas representem a conservação das propriedades relevantes em cada um desses volumes ([MALISKA, 2004](#); [VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007](#)).

O Método dos Volumes Finitos baseados em Elementos (MVFbE)¹ aborda a criação de volumes de controle para os balanços a partir de discretizações bidimensionais (triangulares ou paralelogramos) e tridimensionais (tetraedros e hexaedros) pelo método das medianas. A Figura 9 ilustra o método para uma malha bidimensional.

¹ De acordo com [ANSYS, Inc. \(2012a\)](#), o *software* CFX do pacote ANSYS, Inc. utiliza o MVFbE.

Figura 9 – Definição do volume de controle de uma malha bidimensional.



Fonte: Traduzido de [ANSYS, Inc. \(2012a\)](#).

Todas as variáveis e propriedades do fluido da solução são armazenados nos nós (malha vértices). Um volume de controle (área hachurada) é construído em torno de cada nó de malha utilizando as medianas (linhas que unem os centros das bordas e centros de elementos circundantes do nó) ([ANSYS, Inc., 2012a](#)). Dessa maneira, os nós da malha tornam-se os centroides dos volumes de controle utilizados no MVF. Cada centroide representa o nó computacional onde os valores das variáveis são calculados. Estratégias de interpolação são utilizadas para expressar os valores das variáveis na superfície dos volumes de controle em termos de valores nodais (centroide dos elementos).

2.4.3 Sistema de coordenadas e base vetorial

As equações de conservação podem ser descritas nas mais diversas formas, dependendo do sistema de coordenadas e a base vetorial utilizada, isto é, coordenadas cartesianas $(x; y; z)$, cilíndricas $(r; \theta; z)$ e esféricas $(r; \theta; \phi)$.

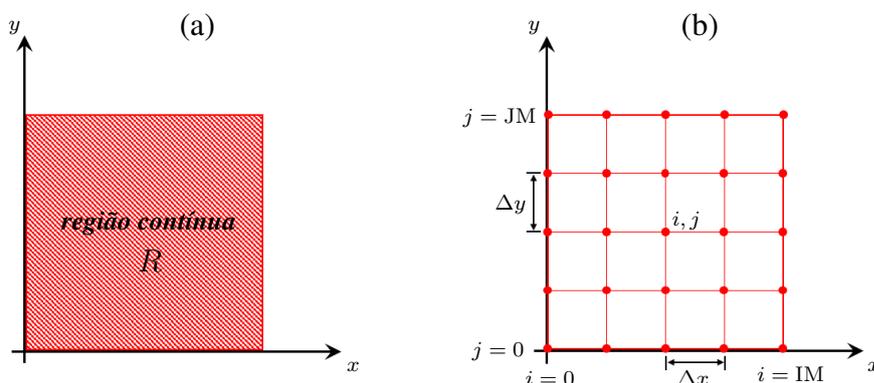
2.4.4 Malha numérica

Com o propósito de tratar um modelo computacional, é necessário expressar as equações e a região (ou domínio) contínua R , em que elas são válidas. Devido aos infinitos pontos da mesma, não se podem obter soluções numéricas sobre uma região contínua. Dessa forma, inicialmente o domínio é discretizado, dividido-o em pontos, como ilustrado na Figura 10. Ao conjunto dos pontos discretizados, refere-se a malha numérica ([FORTUNA, 2000](#)).

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

De acordo com [Tu, Yeoh e Liu \(2008\)](#), para um caso em estudo de CFD a precisão da

Figura 10 – Discretização de uma região arbitrária: (a) região contínua e (b) região discretizada (malha numérica).



Fonte: Adaptado de Fortuna (2000).

solução pode ser determinada pelo modo de como é organizado os elementos que compõe o domínio computacional, isto é, aumentando a densidade de elementos na região de interesse. Entretanto, a precisão de uma solução é fortemente dependente das limitações do custo computacional e pelo número de operações efetuadas. Assim, as malhas podem ser representadas de acordo com a sua estrutura em um domínio geométrico, conforme apresentado a seguir (FERZIGER; PERIĆ, 2002):

- Ortogonais:
 - Estruturadas.
- Não ortogonais:
 - Estruturadas;
 - Não estruturadas;

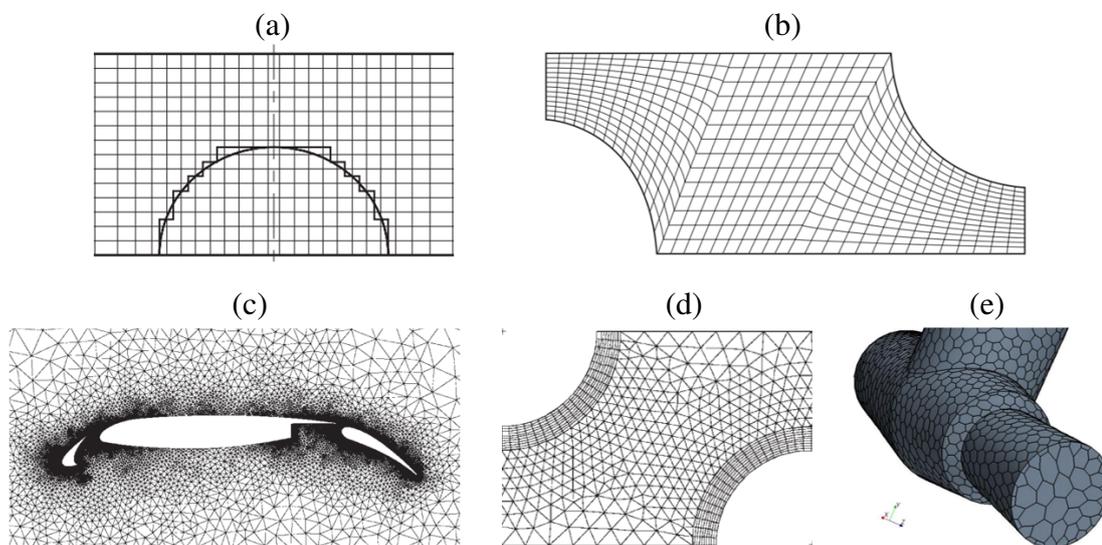
Na Figura 11 são apresentados alguns tipos de malhas (*grid* ou *mesh*) utilizadas normalmente em códigos de CFD.

De acordo com Ferziger e Perić (2002), as malhas não estruturadas são utilizadas para geometrias mais complexas enquanto as malhas estruturadas para geometrias mais simplificadas. Atualmente, com a melhoria dos algoritmos de geração de malhas numéricas, pode-se construir malhas estruturadas em geometrias complexas, sem que perca a qualidade dos resultados da simulação. Na literatura pode-se encontrar diversos materiais a respeito de malhas e suas vantagens e desvantagens na aplicação em CFD (FERZIGER; PERIĆ, 2002; BLAZEK, 2005; VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007; TU; YEOH; LIU, 2008).

2.4.5 Aproximações finitas

Após a definição e construção da malha numérica, faz-se a escolha das aproximações a serem usadas no processo de discretização do conjunto de equações formado pelo modelo,

Figura 11 – Diferentes tipos de malhas numéricas empregadas em CFD. Malha ortogonal: (a) estruturada e malhas não ortogonais: (b) estruturada, (c) não estruturada, (d) mista (ou híbrida) e (e) poliédrica.



Fonte: [Versteeg e Malalasekera \(2007\)](#); [CD-adapco \(2016\)](#).

ou seja, um método de aproximação das equações diferenciais por um sistema de equações algébricas ([FERZIGER; PERIĆ, 2002](#)). 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 centroides (centros dos volumes) ou em pontos sobre as faces. Os valores destas variáveis em outras posições são obtidos por processos convenientes de interpolação ([PINTO; LAGE, 2001](#)). De acordo com [ANSYS, Inc. \(2012a\)](#), o *software* CFX utiliza aproximações de segunda ordem sempre que possível, balanceando a precisão com o esforço computacional.

A forma conservativa das equações diferenciais parciais de conservação para grandeza conservada ϕ , é expressa como ([PATANKAR, 1980](#)):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) = \nabla \cdot [\Gamma \nabla (\phi)] + S \quad (2.5)$$

onde os quatro termos da equação representam o termo transiente, o convectivo, o difusivo e o termo de geração (ou fonte), respectivamente.

A integração de cada um desses termos sobre a malha gera variáveis localizadas em diferentes posições espaciais e temporais. Assim, para que essas variáveis estejam convenientemente localizadas no tempo e no espaço de modo que se possa relacioná-las, faz-se necessário o uso de funções de interpolação. Há vários esquemas de interpolação para definir as variáveis nas faces dos volumes de controle, tais como esquemas tradicionais (diferença central), esquemas de ordem superior, entre outras abordagens e a melhor escolha desses esquemas irá depender do

modelo adotado (FERZIGER; PERIĆ, 2002; MALISKA, 2004).

2.4.5.1 Termo difusivo

Os termos difusivos são avaliados espacialmente a partir de funções de forma (*shape function*). Portanto, dependente do tipo de elemento da malha (hexaedro, tetraedro, prima ou poliedro).

2.4.5.2 Termo convectivo

Os termos convectivo, $\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi)$, são 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; LAGE, 2001).

2.4.5.3 Termo fonte

O termo fonte, S , necessita de cuidados especiais para que o processo de solução iterativa dos sistemas de equações não divirja. Uma forma de fazer isso é linearizá-lo, de modo que a variável em questão, contida no termo fonte, atue implicitamente e não seja simplesmente substituída pelo seu último valor (MALISKA, 2004). Dessa maneira, a linearização do termo fonte pode ser expresso abaixo:

$$S = S_p \phi_p + S_c \quad (2.6)$$

onde S_p e S_c são os coeficiente a serem determinados.

Por questões de instabilidade numérica, supõe-se que $S_p < 0$. Mais detalhes sobre a linearização do termo fonte, pode ser encontrado por Fortuna (2000). Portanto, no presente trabalho não houve a inclusão do termo fonte nas simulações.

2.4.5.4 Termo transiente

Análogo pelo o que já se foi apresentado, as equações de conservação precisam também ser integradas no tempo ao longo de cada volume de controle. Dependendo da função escolhida para escoamento em questão no intervalo de tempo, têm-se as seguintes formulações: explícitas, totalmente implícita e implícita (MALISKA, 2004).

2.4.5.5 Abordagem segregada e acoplada

Após a discretização das equações e a definição dos esquemas, haverá um sistema de equações algébricas para ser resolvido. Para a resolução dessas equações, deve-se decidir qual a abordagem de solução, isto é, segregada ou acoplada.

De maneira geral, e simplificada, a abordagem acoplada dos sistemas de equações algébricas cria uma única matriz envolvendo todos os coeficientes e resolve todas as incógnitas simultaneamente. Já para a abordagem segregada, os sistemas de equações consistem em resolver os sistemas lineares um a um, ou seja, na resolução de cada equação em forma separada e sequencial. No entanto, a abordagem acoplada é mais robusta e estável em relação à segregada. Em contrapartida, exige-se um maior recurso (memória RAM) e esforço computacional (MALISKA, 2004).

2.4.6 Método de resolução de sistemas lineares

Os métodos de solução de um sistema linear podem ser classificados em diretos e iterativos. De acordo com Maliska (2004), os métodos iterativos são os métodos empregados em CFD. 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, podemos exemplificar o método de Jacobi, o método de Gauss-Siedel, o método Linha a Linha, como o método TDMA (*TriDiagonal Matrix Algorithm*) e os métodos *Multigrid*.

2.4.7 Critério de convergência

De modo a finalizar todos os passos de um procedimento numérico em CFD, há a necessidade de adotar um critério de convergência para cada processo de iteração (*timestep*). Assim, para cada processo de iteração, gera-se um resíduo. 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. O valor de RMS abaixo de 10^{-4} é considerado suficiente para muitas aplicações na engenharia.

2.5 Estudos em pratos perfurados de coluna de destilação

A descrição da hidrodinâmica de pratos perfurados é de grande importância na prática industrial. Para uma série de condições operacionais, de geometrias do prato e de propriedades do sistema, é necessário predizer o regime de escoamento que prevalece sobre o prato, como o *holdup* do líquido, a altura de líquido claro, a densidade da espuma, a área interfacial, a queda de pressão, o tempo de residência da fase líquida e da fase vapor e os coeficientes de transferência de massa em cada uma das fases (LOCKETT, 1986; KISTER, 1992).

No entanto, há muitos trabalhos publicados na literatura sobre este assunto, e a seguir, serão comentados alguns estudos experimentais e estudos numéricos aplicados em pratos perfurados de colunas de destilação que serviram de base para desenvolvimento teórico deste trabalho. Um panorama geral é apresentado na Figura 12, na qual se observa a evolução da pesquisa juntamente com a evolução de processamento computacional com o aumento de trabalhos teóricos publicados.

Figura 12 – Evolução da pesquisa em pratos de coluna de destilação.



Fonte: Elaborado pelo autor.

2.5.1 Abordagem experimental

A partir da década de 20, iniciou-se os estudos experimentais em busca de uma melhoria na eficiência em pratos perfurados. Muitos pesquisadores, como Lewis (1922), Colwell (1981), Yanagi e Sakata (1982), Bennett, Agrawal e Cook (1983), Solari e Bell (1986), Lavin e Urua (1992), Zhang et al. (1998), Fair, Trutna e Seibert (1999), Lopez e Castells (1999), Kaeser e Pritchard (2006), Sakata et al. (2007) e Noriler (2007) desenvolveram pesquisas com abordagem experimental.

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

Dentre esses trabalhos citados, será dado maiores detalhes para os trabalhos de Colwell (1981), Bennett, Agrawal e Cook (1983) e Solari e Bell (1986), os quais foram utilizados como suporte da presente pesquisa.

- **Colwell (1981):**

Colwell (1981) propôs uma correlação para a altura de líquido claro (h_{cl}) através de uma análise experimental do escoamento gás-líquido em um prato perfurado, associando-a aos dados apresentados na literatura de perda de carga e de fração volumétrica média de líquido na dispersão (densidade da espuma). Dois sistemas foram utilizados pelo autor: ar-água e ar-óleo Isopar-M. Os dados experimentais obtidos foram incorporados aos da literatura, para o desenvolvimento e avaliação das equações semi-empíricas baseadas na equação de Francis (Equação 2.7).

$$h_{cl} = h_w + 6,65 \left(\frac{Q_\alpha}{l_w} \right)^{2/3} \quad (2.7)$$

onde h_{cl} é a altura de líquido claro, h_w a altura de represa, Q_α a vazão volumétrica de líquido e l_w o comprimento de represa.

A partir da equação acima, Colwell (1981) propôs a seguinte correlação semi-empírica para o cálculo da altura de líquido claro (Equação 2.8), que deve ser usada juntamente com a equação para a densidade de espuma e com os outros parâmetros que serão apresentados a seguir.

$$h_{cl} = \bar{f}_\alpha^C h_w + 7,8 \left[\left(\bar{f}_\alpha^C \right)^{1/2} \frac{Q_\alpha}{C_d l_w} \right]^{2/3} \quad (2.8)$$

onde \bar{f}_α^C é a fração volumétrica média de líquido na espuma (*holdup*) e C_d o coeficiente de represa. Assim, o coeficiente de represa deve atender a seguinte condição:

$$C_d = 0,61 + 0,08 \frac{h_{cf}}{h_w}, \quad \text{se } \frac{h_{cf}}{h_w} \leq 8,315$$

$$C_d = 1,06 \left(1 + \frac{h_{cf}}{h_w}\right), \quad \text{se } \frac{h_{cf}}{h_w} > 8,315$$

onde h_{cf} é a altura de dispersão acima da represa.

Os parâmetros h_{cf} e \bar{f}_α^C do modelo de Colwell (1981) são apresentados abaixo, pelas Equações 2.9 e 2.10, respectivamente:

$$h_{cf} = h_f - h_w \quad (2.9)$$

onde h_f é a altura de espuma.

$$\bar{f}_\alpha^C = \frac{1}{\eta + 1} \quad (2.10)$$

$$\eta = 12,6 \text{ Fr}^{0,4} \left(\frac{A_H}{A_B}\right)^{-0,25} \quad (2.11)$$

$$\text{Fr} = \frac{U_s^2}{h_{cl} \left(\frac{\rho_\alpha - \rho_\beta}{\rho_\beta}\right) g} \quad (2.12)$$

onde η é o parâmetro de densidade de espuma, Fr o número de adimensional de Froude, A_H a área total dos orifícios, A_B a área de borbulhamento do prato, U_s a velocidade superficial do gás, ρ_α e ρ_β são as massas específicas de líquido e de gás (kg m^{-3}), respectivamente, e g é a aceleração da gravidade.

Como apresentado no trabalho de Colwell (1981), a utilização desta correlação para colunas com seção retangular apresentou resultados muito satisfatórios, tanto na predição da altura de líquido claro com erros em torno de 7%, quanto para o cálculo da densidade de espuma com erros em torno de 8%. O uso da equação proposta 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.

Ainda assim, Colwell (1981) realizou testes em uma geometria circular com diâmetro de 1,22 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 boa primeira aproximação para colunas de geometrias circulares com diâmetros iguais ou superiores

a 1,22 m. 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, [Colwell \(1981\)](#) 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 coluna (retangular ou circular), para operações no regime de espuma.

- **[Bennett, Agrawal e Cook \(1983\)](#):**

[Bennett, Agrawal e Cook \(1983\)](#) desenvolveram uma correlação para a perda de carga total em colunas de destilação utilizando pratos perfurados. Durante o estudo, eles comentam o fato de estudos anteriores não terem trabalhado com represas de alturas entre zero e 25 mm, e com pratos apresentando orifícios de pequenos diâmetros. Segundo [Bennett, Agrawal e Cook \(1983\)](#), orifícios de pequenos diâmetros geram grandes perdas de cargas devido a forças de tensões superficiais.

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 organizaram um extenso banco de dados contendo dados experimentais realizados por eles próprios e dados obtidos de trabalhos anteriores. Foram utilizados dois sistemas no estudo experimental, ar-água e ar-solução aquosa de etileno glicol 80%. Assim, a equação de perda de carga total no prato, h_T , proposta pelos autores podem ser expressa como:

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

onde h_H é a perda de carga devido a passagem do gás pelos orifícios e h_σ a perda de carga devido às forças de tensão superficial do gás. Os três últimos termos da equação acima podem ser definidos como:

$$h_{cl} = \bar{f}_\alpha^B \left[h_w + C \left(\frac{Q_\alpha}{l_w \bar{f}_\alpha^B} \right)^{2/3} \right] \quad (2.14)$$

$$\bar{f}_\alpha^B = \exp \left[-12,55 \left(U_s \sqrt{\frac{\rho_\beta}{\rho_\alpha - \rho_\beta}} \right)^{0,91} \right] \quad (2.15)$$

$$C = 0,0327 + 0,0286 \exp(-137,8h_w) \quad (2.16)$$

$$h_H = \frac{a \rho_\beta V_{\beta,y}^2}{c_v^2 \rho_\alpha g} \quad (2.17)$$

$$h_\sigma = \frac{6 \sigma^{2/3}}{1,27 g^{2/3} \rho_\alpha} \sqrt[3]{\frac{\rho_\alpha - \rho_\beta}{d_o}} \quad (2.18)$$

onde $v_{\beta,y}$ é a velocidade de gás através dos orifícios, a a constante do modelo (Equação 2.17) e possui valor igual a 0,499, c_v o coeficiente de descarga, σ a tensão superficial e d_o o diâmetro do orifício no prato.

Conforme apresentado na Equação 2.14, Bennett, Agrawal e Cook (1983) observaram que a equação da altura de líquido claro neste estudo é muito similar às outras equações propostas na época, como também a proposta por Colwell (1981), com a importante exceção de não demandar de observações visuais no cálculo da densidade de espuma e, assim, não incorporar na correlação proposta os grandes erros envolvidos nessa prática visual. Dessa forma, ao invés da altura de espuma observada, os autores propuseram o uso de uma altura de dispersão efetiva e, assim, uma fração volumétrica de líquido efetiva contida nessa dispersão efetiva.

- **Solari e Bell (1986):**

Solari e Bell (1986) realizaram um estudo experimental em uma coluna de destilação constituída por 5 pratos perfurados, onde as fases líquida e gasosa foram representadas pelo sistema ar-água operando a 1 atm. Neste estudo, os autores observaram o tempo de residência do líquido e a distribuição de velocidade de líquido no prato perfurado, para identificar alguns fatores que afetam a hidrodinâmica, tais como, distribuição de velocidade não uniforme, zonas de estagnação e recirculação de líquido) e também a eficiência do prato perfurado.

O trabalho desenvolvido pelos autores foi de extrema importância para o desenvolvimento do estudo numérico em CFD. Assim, a Tabela 2 ilustra com mais detalhes as características do aparato experimental.

Tabela 2 – Características da geometria do estudo experimental de Solari e Bell (1986).

Características geométricas	Valores	Unidades
Diâmetro do prato	1,213	[m]
Espaçamento do prato	0,61	[m]
Diâmetro do orifício	$1,27 \times 5\Delta$	[cm]
Altura da represa	0,05	[m]
Comprimento da represa	0,925	[m]
Altura da represa	0,05	[m]
% Área de borbulhamento	76	[%]
% Área perfurada	5	[%]
% Área de <i>downcomer</i>	12,5	[%]

Fonte: Elaborado pelo autor.

Solari e Bell (1986) realizaram dois tipos de experimentos. O primeiro foi para mensurar a distribuição do tempo de residência no prato, e o segundo foi para avaliar a velocidade linear do líquido que atravessa o prato perfurado, na qual utilizaram um corante fluorescente onde era detectado pelos sensores distribuídos ao longo do prato. Assim, os autores utilizaram duas vazões volumétricas de líquido, sendo $6,94 \times 10^{-3}$ e $17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, e quatro valores diferentes de

carga de vapor (fator F_s), sendo 1,015 e 1,464 para a vazão $6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ e 0,462 e 0,801 para $17,8 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. A expressão para se determinar o fator F_s pode ser obtida assim,

$$F_s = U_s \sqrt{\rho_\beta} \quad (2.19)$$

onde F_s é carga de vapor e possui as seguintes unidades $\text{m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$.

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

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

Tido como base para desenvolver o presente trabalho, o estudo experimental dos autores é utilizado até hoje como referência na validação de simulações de pratos perfurados através das técnicas de CFD.

2.5.2 Abordagem numérica

O desenvolvimento de modelos mais detalhados foi impulsionado pelo crescimento, tanto acadêmico quanto industrial, de uso da CFD na modelagem de fenômenos de transporte e também pelos avanços obtidos na área de simulação numérica de escoamentos. Dessa maneira, foi possível iniciar estudos numéricos de modelos de equilíbrio e de não equilíbrio e em CFD em pratos de coluna de destilação, empregando desde de uma modelagem mais simplificada, como a consideração de uma mistura homogênea para o sistema ar-água, até uma modelagem mais complexa, como análise simultânea dos três fenômenos de transporte para um sistema heterogêneo, multifásico e multicomponente.

A partir da década de 90, houve uma demanda maior em publicações relacionado aos estudos numéricos em pratos de destilação em busca de se entender os fenômenos que afetam, de forma negativa, a eficiência de separação. Assim, muitos pesquisadores, como [Bell e Solari \(1974\)](#), [Kler e Lavin \(1988\)](#), [Wijn \(1996\)](#), [Barros \(1997\)](#), [Zhang et al. \(1998\)](#), [Mehta, Chuang e Nandakumar \(1998\)](#), [Fischer e Quarini \(1998\)](#), [Yu et al. \(1999\)](#), [Krishna et al. \(1999b\)](#), [Van Baten e Krishna \(2000\)](#), [Liu et al. \(2000\)](#), [Gesit, Nandakumar e Chuang \(2003\)](#), [Wang et al.](#)

(2004), Hirschberg, Wijn e Wehrli (2005), Rahimi et al. (2006), Rahimi et al. (2006), Noriler (2007), Noriler et al. (2008), Teleken et al. (2009), Zarei, Rahimi e Zivdar (2009), Malvin, Chan e Lau (2010), Rahimi e Karimi (2010), Noriler et al. (2010), Sun et al. (2011), Rahimi, Ameri e Setoodeh (2011), Justi (2012), Rahimi, Sotoodeh e Bahramifar (2012), Zarei, Hosseini e Rahimi (2013a), Zarei, Hosseini e Rahimi (2013b), Oliveira (2014) e Zanutto (2015) desenvolveram pesquisas com abordagem teórica.

Dentre todos esses trabalhos citados acima, será detalhado a seguir os trabalhos de Mehta, Chuang e Nandakumar (1998), Van Baten e Krishna (2000), Gesit, Nandakumar e Chuang (2003), Rahimi et al. (2006), Noriler et al. (2010), Justi (2012), Oliveira (2014) e Zanutto (2015).

- **Mehta, Chuang e Nandakumar (1998):**

Mehta, Chuang e Nandakumar (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 continuidade e da conservação de quantidade de movimento foram aplicadas apenas para a fase líquida. Os efeitos do escoamento da fase gasosa foram incorporados usando-se termos adicionais calculados, utilizando correlações empíricas. O coeficiente de transferência de quantidade de movimento na interface foi estimado a partir da correlação de Colwell (1981). 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.

Mehta, Chuang e Nandakumar (1998) 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.

- **Van Baten e Krishna (2000):**

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 utilizando um prato perfurado circular. O objetivo desse trabalho foi avaliar o comportamento hidrodinâmico do escoamento sobre prato perfurado. Dessa forma os autores trabalharam apenas com as equações da continuidade e da conservação de quantidade de movimento, sendo estas escritas para as duas fases. O coeficiente de arraste foi estimado a partir das correlações de Krishna et al. (1999a) e Bennett, Agrawal e Cook (1983). Os autores utilizaram malhas estruturadas e o modelo de turbulência $k-\epsilon$ 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.

- **Gesit, Nandakumar e Chuang (2003):**

Gesit, Nandakumar e Chuang (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 conservação de quantidade de movimento, sendo estas escritas para as duas fases. O coeficiente de arraste foi estimado a partir das correlações de Krishna et al. (1999a), Bennett, Agrawal e Cook (1983) e Colwell (1981). O modelo de turbulência utilizado foi o $k-\epsilon$ (apenas para a fase líquida). A geometria do prato utilizada foi um prato perfurado circular e as condições experimentais foram baseadas no trabalho experimental de 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.

- **Rahimi et al. (2006):**

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 metanol/*n*-propanol, etanol/*n*-propanol 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 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 conservação de quantidade de movimento, os autores também utilizaram as equações de conservação de energia e de espécies químicas, todas estas escritas para as duas fases. O coeficiente de arraste foi estimado a partir das correlações de Krishna et al. (1999a) e Bennett, Agrawal e Cook (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 (1935). O modelo de turbulência utilizado foi o $k-\epsilon$ (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.

- **Noriler et al. (2010):**

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 conservação de quantidade de movimento, os autores também utilizaram as equações de conservação de energia e de espécies químicas, todas estas escritas para as duas fases. O coeficiente de arraste foi estimado a partir das correlações de Krishna et al. (1999a) e Bennett, Agrawal e Cook (1983). O coeficiente de transferência de calor foi estimado a partir da correlação de Ranz e Marshall (1952) para o número de Nusselt, e o coeficiente de transferência de espécies químicas foi estimado a partir da relação empírica de Zuiderweg (1982). O modelo de turbulência utilizado foi o $k-\epsilon$ (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 subrotinas 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.

- **Justi (2012):**

Justi (2012) propôs um modelo tridimensional e em estado estacionário para o sistema água-ar utilizando uma abordagem Euleriana-Euleriana. A geometria foi baseada no trabalho de Solari e Bell (1986), na qual foi proposto também modificações geométricas, mantendo a altura da represa e alterando seu forma geométrica. O autor avaliou a fluidodinâmica de um sistema multifásico formada por água e ar em um prato perfurado de 1,213 m de diâmetro. No fechamento do modelo, o autor fixou o coeficiente de arraste em 0,44 e o modelo de turbulência $k-\epsilon$ para ambas as fases. Foi verificada que a nova configuração apresentou um perfil de velocidade de líquido mais uniforme e influenciou positivamente na hidrodinâmica do prato, pois resultou na redução das regiões de recirculação e estagnação.

O autor concluiu que as condições geométricas do prato e as condições operacionais tem grande impacto no comportamento dos fluidos.

- **Oliveira (2014):**

[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 conservação de quantidade de movimento. O autor também utilizou as equações de conservação de espécies químicas, todas estas escritas para as duas fases. O coeficiente de arraste foi estimado a partir das correlações de [Krishna et al. \(1999a\)](#) e [Bennett, Agrawal e Cook \(1983\)](#). O coeficiente de transferência de espécies químicas foi estimado a partir do modelo de [Higbie \(1935\)](#). O modelo de turbulência utilizado foi o *Shear Stress Transport* (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.

- **Zanutto (2015):**

[Zanutto \(2015\)](#) propôs um modelo de CFD semelhante ao de [Oliveira \(2014\)](#) para avaliar o comportamento hidrodinâmico do escoamento, assim como a distribuição de concentração sobre pratos perfurados e o cálculo da eficiência. O autor, como também [Justi \(2012\)](#) e [Oliveira \(2014\)](#), se baseou no prato perfurado de [Solari e Bell \(1986\)](#). O coeficiente de arraste foi estimado a partir das correlações de [Krishna et al. \(1999a\)](#) e [Bennett, Agrawal e Cook \(1983\)](#). O autor realizou um estudo mais severo sobre os modelos de transferência de espécies químicas, tais como, [Higbie \(1935\)](#), SRS (*Surface Renewal Stretch*) e [Zuiderweg \(1982\)](#), verificando a influência dos modelos na eficiência de separação da mistura líquida etanol-água. O modelo de turbulência utilizado foi o SST. O autor utilizou malha híbrida não estruturada e com os nós (*nodes*) coincidente nas simulações. Os resultados obtidos com os modelos de transferência de espécies químicas foram comparados com a literatura, onde o modelo de [Higbie \(1935\)](#) e SRS apresentaram melhores concordâncias com as correlações da literatura.

Por fim, a partir do levantamento bibliográfico apresentado nas seções [2.5.1](#) e [2.5.2](#), é possível identificar algumas lacunas sobre o estudo em estágios perfurados em colunas de destilação através das técnicas da CFD:

- Geometria: inclusão do *downcomer* de entrada no estágio, diferentes alturas de represa e diâmetro dos orifícios;
- Condições operacionais: influência da variação de velocidade de gás que entra nos orifícios na transferência de quantidade de movimento, calor e massa;

- Coeficiente de arraste: testar outros modelos de coeficiente de arraste;
- Modelos de transferência de massa: além dos modelos de transferência de massa entre as fases utilizados pelos autores acima, propor ou testar outros modelos de transferência, verificando assim sua influência no escoamento;
- Diâmetro de bolha: definir um único tamanho de bolha pode ser uma aproximação válida, mas pode não caracterizar o escoamento devido aos fenômenos de quebra e coalescência das bolhas;
- Modelos de turbulência: além do $k-\epsilon$ e do SST, utilizar outros modelos de turbulência;
- Esquemas de interpolação: propor esquema de alta ordem, pois na maioria dos trabalhos é utilizado o esquema *upwind* devido a facilidade da convergência da solução;
- Condições de contorno: simulação de múltiplos estágio, evitando a influência das condições de contorno próximo a região de estudo.

3 MODELAGEM MATEMÁTICA

O CFD é fundamentalmente baseado nas equações governantes (*governing equations*) da fluidodinâmica. Obviamente, além das equações governantes, muitas outras equações não fundamentais estão implementadas, ou podem ser implementadas, nos *softwares* de CFD. Tais como, as equações de turbulência, modelos desenvolvidos para a transferência de massa, modelos termodinâmicos, entre outras, para auxiliarem na resolução de inúmeros fenômenos de transporte presentes nas engenharias.

3.1 Equações de conservação

3.1.1 Equação de conservação da massa

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k) + \nabla \cdot (f_k \rho_k \mathbf{v}_k) = S_{MS,k} + \sum_{k \neq j}^{n_f} \Gamma_{kj} \quad (3.1)$$

$$k = 1, \dots, n_f$$

onde f_k , ρ_k , e \mathbf{v}_k representam a fração volumétrica, massa específica e vetor velocidade para a k ésima fase, respectivamente. O $S_{MS,k}$ refere-se ao termo fonte de massa. O termo $\sum_{k \neq j}^{n_f} \Gamma_{kj}$ descreve a taxa de transferência de massa por unidade de volume entre as fases e “ n_f ” é o número de fases.

3.1.2 Equação de conservação da quantidade de movimento

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k \mathbf{v}_k) + \nabla \cdot (f_k \rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) = & -f_k \nabla p_k + \nabla \cdot (f_k \mathbf{T}_k^{\text{eff}}) + \\ & \sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{M}_{kj} + S_{M,k} + \sum_{k \neq j}^{n_f} (\Gamma_{kj}^+ \mathbf{v}_j - \Gamma_{jk}^+ \mathbf{v}_k) \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$k = 1, \dots, n_f$$

onde p_k e $\mathbf{T}_k^{\text{eff}}$ representam o campo de pressão e o tensor efetivo de quantidade de movimento da k ésima fase, respectivamente. O $\sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{M}_{kj}$ representa a transferência de quantidade de movimento entre as fases. O termo $\sum_{k \neq j}^{n_f} (\Gamma_{kj}^+ \mathbf{v}_j - \Gamma_{jk}^+ \mathbf{v}_k)$ representa a transferência de quantidade de movimento induzida pela transferência de massa entre as fases e o termo $S_{M,k}$ da equação de

quantidade de movimento refere-se às forças externas atuando sobre o fluido, e sua modelagem é apresentada abaixo,

$$S_{M,k} = f_k \rho_k \mathbf{g} \quad (3.3)$$

onde \mathbf{g} é o vetor de aceleração da gravidade.

3.1.3 Equação de conservação da energia

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k h_k) + \nabla \cdot (f_k \rho_k \mathbf{v}_k h_k) = & \nabla \cdot (f_k \mathbf{q}_k^{\text{eff}}) + \\ & \sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{Q}_{kj} + S_{E,k} + \sum_{k \neq j}^{n_f} (\Gamma_{kj}^+ h_{s,j} - \Gamma_{jk}^+ h_{s,k}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$k = 1, \dots, n_f$$

onde h_k e $\mathbf{q}_k^{\text{eff}}$ representam a entalpia total e o fluxo de energia efetivo da k ésima fase, respectivamente. $\sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{Q}_{kj}$ representa a transferência de calor entre as fases e $S_{E,k}$ representa fontes externas de calor sobre a k ésima fase. O termo $\sum_{k \neq j}^{n_f} (\Gamma_{kj}^+ h_{s,j} - \Gamma_{jk}^+ h_{s,k})$ representa a transferência de calor induzida pela transferência de massa entre as fases.

3.1.4 Equação de conservação de espécies químicas

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k y_{A,k}) + \nabla \cdot (f_k \rho_k \mathbf{v}_k y_{A,k}) = & \nabla \cdot (f_k \mathbf{J}_{A,k}^{\text{eff}}) + \\ & \sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{Y}_{A,kj} + \sum_{k \neq j}^{n_f} (\Gamma_{kj}^+ y_{A,k} - \Gamma_{jk}^+ y_{A,k}) \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$k = 1, \dots, n_f, \quad A = 1, \dots, n_c$$

onde $y_{A,k}$ e $\mathbf{J}_{A,k}^{\text{eff}}$ representam a fração mássica e o fluxo de massa efetivo para o componente A na k ésima fase, respectivamente. $\sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{Y}_{A,kj}$ representa a transferência das espécies químicas entre as fases. O termo $\sum_{k \neq j}^{n_f} (\Gamma_{kj}^+ y_{A,k} - \Gamma_{jk}^+ y_{A,k})$ representa a quantidade transferida do componente A da fase k para fase j devido aos efeitos de transferência de massa total entre as fases “ n_c ” é o número de espécies químicas.

3.1.5 Equações de restrição

As equações de restrição de pressão, volume e de massa são descritas abaixo.

3.1.5.1 Restrição de pressão

Na restrição de pressão, considera-se que todas as fases compartilham o mesmo campo de pressão, isto é,

$$p_k = p_j = p \quad (3.6)$$

3.1.5.2 Restrição de volume

As frações volumétricas das fases envolvidas estão relacionadas pela equação de restrição de volume abaixo,

$$\sum_{k=1}^{n_f} f_k = 1 \quad (3.7)$$

3.1.5.3 Restrição de massa

Na restrição de massa, a fração mássica do componente A na fase k , $y_{A,k}$, é relacionada pela equação de restrição abaixo, onde “ n_c ” é o número de componentes presentes na k ésima fase.

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

$$A = 1, \dots, n_c$$

3.2 Equações de fechamento

A modelagem matemática apresentada anteriormente ainda possui graus de liberdade, ou seja, termos que precisam ser definidos por equações constitutivas e/ou empíricas para que seja possível a resolução dos modelos. Essas equações adicionais requeridas serão apresentadas nos itens abaixo.

3.2.1 Fluxos efetivo

Os fluxos efetivos relacionam a difusão e a dispersão das propriedades devido aos efeitos de turbulência. Portanto, os fluxos efetivo de quantidade de movimento, $\mathbf{T}_k^{\text{eff}}$, de energia, $\mathbf{q}_k^{\text{eff}}$, e das espécies químicas, $\mathbf{J}_k^{\text{eff}}$, podem ser escritos como uma combinação entre o fluxo difusivo e o fluxo turbulento, onde o sobrescrito “turb” representa o fluxo turbulento, conforme apresentado abaixo.

$$\mathbf{T}_k^{\text{eff}} = \mathbf{T}_k + \mathbf{T}_k^{\text{turb}} \quad (3.9)$$

$$\mathbf{q}_k^{\text{eff}} = \mathbf{q}_k + \mathbf{q}_k^{\text{turb}} \quad (3.10)$$

$$\mathbf{J}_{A,k}^{\text{eff}} = \mathbf{J}_{A,k} + \mathbf{J}_{A,k}^{\text{turb}} \quad (3.11)$$

Considerando os fluidos como Newtoniano e a hipótese da viscosidade turbulenta, os fluxos efetivos podem ser escritos como,

$$\mathbf{T}_k^{\text{eff}} = -\mu_k^{\text{eff}} \left[\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_k)^{\text{tp}} \right] \quad (3.12)$$

$$\mathbf{q}_k^{\text{eff}} = -\lambda_k^{\text{eff}} \nabla T_k \quad (3.13)$$

$$\mathbf{J}_{A,k}^{\text{eff}} = -D_{AB,k}^{\text{eff}} \nabla y_{A,k} \quad (3.14)$$

onde μ_k^{eff} , λ_k^{eff} e D_{AB}^{eff} representa a viscosidade efetiva, a condutividade térmica efetiva e a difusividade efetiva do componente A para o B na k ésima fase, respectivamente. O sobrescrito “tp” indica a transposta do vetor.

Essas propriedades efetivas, como já explicadas anteriormente, podem ser combinadas como:

$$\mu_k^{\text{eff}} = \mu_k + \mu_k^{\text{turb}} \quad (3.15)$$

$$\lambda_k^{\text{eff}} = \lambda_k + \lambda_k^{\text{turb}} \quad (3.16)$$

$$D_{AB,k}^{\text{eff}} = D_{AB,k} + D_{AB,k}^{\text{turb}} \quad (3.17)$$

onde μ_k é a viscosidade dinâmica, λ_k é a condutividade térmica e D_{AB} é a difusividade do componente A para o B na k ésima fase, respectivamente. O μ_k^{turb} , λ_k^{turb} e $D_{AB,k}^{\text{turb}}$ representam a viscosidade turbulenta, a condutividade térmica turbulenta e a difusividade turbulenta do componente A para B na k ésima fase, respectivamente.

As três primeiras propriedades físicas (μ_k , λ_k e $D_{AB,k}$) podem ser calculadas através de correlações ou encontradas em tabelas. As últimas propriedades de dispersão (ou turbulentas) podem ser preditas usando um modelo de turbulência. Na seção 3.2.2.1 será apresentada com detalhes a modelagem das propriedades turbulentas através de modelos de turbulência.

3.2.2 Turbulência

A turbulência ocorre quando as forças de inércia no fluido tornam-se significativas em comparação com as forças viscosas, e é caracterizada por um número de Reynolds elevado. 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 maior parte dos escoamentos encontrados na natureza e em aplicações práticas são turbulentos. Consequentemente, é muito importante compreender os mecanismos físicos que governam este tipo de fenômeno. Os escoamentos turbulentos são instáveis e contêm flutuações

que são dependentes do tempo e da posição no espaço. Entre as características mais importantes dos escoamentos turbulentos, destaca-se a multiplicidade de escalas que os caracterizam. As maiores estruturas (baixas frequências), são controladas pela geometria que as geram, e as menores estruturas (altas frequências) são controladas pela viscosidade do fluido (NETO, 2004).

3.2.2.1 Modelos de turbulência

Para representar os efeitos da turbulência em escoamentos de uma forma aproximada, uma grande variedade de modelos de turbulência foram desenvolvidos. Deve-se estar ciente do fato de que não existe um modelo único de turbulência que pode prever com segurança todos os tipos de escoamentos turbulentos. Cada um dos modelos tem seus pontos fortes e fracos. Por exemplo, se um modelo específico funciona perfeitamente no caso associado de camadas limite, ele pode falhar completamente para fluxos de separação. Assim, é importante sempre perguntar se o modelo inclui todas as importantes características do fluxo que está sendo investigado. Outro ponto que deve ser tido em consideração é o esforço computacional contra a precisão requerida do modelo utilizado em particular, isto é, que em muitos casos, um modelo de turbulência numericamente mais leve pode prever algumas medidas globais com a mesma precisão que um modelo mais complexo (BLAZEK, 2005).

A turbulência provoca no escoamento o aparecimento de turbilhões ou redemoinhos com uma ampla faixa de escalas de comprimento e de tempo que interagem de uma forma dinamicamente complexo. Deste modo, não é nenhuma surpresa que uma quantidade substancial de esforço de pesquisa é dedicado ao desenvolvimento de métodos numéricos para captar os efeitos importantes devido à turbulência (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

De maneira geral, os modelos de turbulência podem ser agrupados em três níveis:

- Equações médias de Reynolds (*Reynolds-average Navier-Stokes* – RANS);
- Simulação de grandes escalas (*Large Eddy Simulation* – LES);
- Simulação numérica direta (*Direct Numerical Simulation* – DNS).

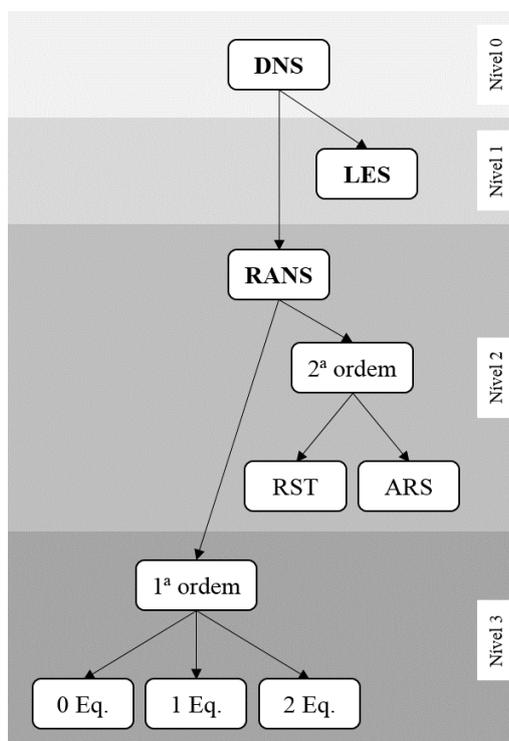
As equações RANS são obtidas através de um conjunto de médias das equações de Navier-Stokes e da continuidade. O elemento crítico da modelagem RANS é a representação das tensões de Reynolds ou tensões turbulentas que descrevem os efeitos das flutuações turbulentas de pressão e velocidade.

No modelo LES, as grandes escalas de turbulências que contém energia são calculadas diretamente e para as pequenas escalas utilizam-se modelos de escalas de sub-malha. Neste caso, a formulação é necessariamente transiente e tridimensional.

No modelo DNS, as equações de Navier-Stokes tridimensionais e transientes são resolvidas sem modelagem, com malhas muito refinadas com e passos de tempos bem pequenos, afim de capturar toda a faixa de escalas turbulentas.

Uma visão geral das classes de modelos de turbulência, que estão classificados de acordo com seu nível decrescente de complexidade, é apresentado na Figura 13 abaixo.

Figura 13 – Hierarquia dos modelos de turbulência.



Fonte: Adaptado de Blazek (2005).

Uma vez que a turbulência é quantificada por um grande número de escalas temporais e espaciais, as quais aumentam rapidamente com o número de Reynolds, o DNS se torna inviável do ponto de vista prático e as simulações RANS e LES tornam-se as melhores opções de predição numérica (WILCOX, 2004).

Um campo relativamente “novo” na pesquisa é a utilização de um modelo híbrido RANS/LES denominado Simulação dos Vórtices Desprendidos (*Detached Eddy Simulation – DES*), onde a técnica de simulação de grande escalas é usada em regiões fora da camada limite e dentro desta região utiliza-se um modelo RANS (BLAZEK, 2005).

3.2.2.2 Viscosidade turbulenta

O modelo *Shear Stress Transport* (SST) é composto pelos modelos de turbulência $k-\epsilon$ e $k-\omega$. O modelo $k-\epsilon$ ou também conhecido como $k-\epsilon$ padrão, é um modelo de duas equações amplamente difundido, sendo aplicado e validado para diversas aplicações industriais. O modelo $k-\epsilon$ foi proposto por Launder e Spalding (1972). Este modelo apresenta um bom equilíbrio entre precisão e robustez e é composto por duas equações diferenciais de transporte, sendo uma para energia cinética turbulenta, k , e a outra para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, ϵ . (WILCOX, 2004).

A principal característica do modelo k - ϵ é a capacidade de descrever com precisão o escoamento nas regiões de corrente livre. Matematicamente, o modelo k - ϵ é expresso abaixo:

$$\mu_k^{\text{turb}} = C_\mu \rho_k \frac{k_k^2}{\epsilon_k} \quad (3.18)$$

C_μ , k e ϵ representa a constante do modelo de turbulência, a energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, respectivamente.

Como citado acima, há a necessidade de duas equações de transporte para o k e ϵ , as quais são apresentadas abaixo pelas Equações 3.19 e 3.20.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k k_k) + \nabla \cdot \left\{ f_k \left[\rho_k \mathbf{v}_k k_k - \left(\mu_k + \frac{\mu_k^{\text{turb}}}{\sigma_{k\epsilon 1}} \right) \nabla k_k \right] \right\} = \\ f_k (\mathbf{P}_k - \rho_k \epsilon_k + P_{kb}) + T_{kj}^{(k)} \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k \epsilon_k) + \nabla \cdot \left\{ f_k \left[\rho_k \mathbf{v}_k \epsilon_k - \left(\mu_k + \frac{\mu_k^{\text{turb}}}{\sigma_{k\epsilon 2}} \right) \nabla \epsilon_k \right] \right\} = \\ f_k \frac{\epsilon_k}{k_k} [C_{\epsilon 1} (\mathbf{P}_k + P_{\epsilon b}) - C_{\epsilon 2} \rho_k \epsilon_k] + T_{kj}^{(\epsilon)} \end{aligned} \quad (3.20)$$

$\sigma_{k\epsilon 1}$, $\sigma_{k\epsilon 2}$, $C_{\epsilon 1}$ e $C_{\epsilon 2}$ representam as constantes do modelo k - ϵ . O termo \mathbf{P}_k representa a produção de turbulência devido às forças viscosas e gravitacionais. P_{kb} e $P_{\epsilon b}$ representam a produção de turbulência por convecção térmica natural e os termos adicionais¹ $T_{kj}^{(k)}$ e $T_{kj}^{(\epsilon)}$ representam transferência entre as fases para k e ϵ , respectivamente.

A produção de turbulência, \mathbf{P}_k pode ser descrita como:

$$\mathbf{P}_k = \mu_k^{\text{turb}} \nabla \mathbf{v}_k \cdot \left[\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_k)^{\text{tp}} \right] - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_k \left(3\mu_k^{\text{turb}} \nabla \cdot \mathbf{v}_k + \rho_k k_k \right) \quad (3.21)$$

Para escoamento incompressível, $\nabla \cdot \mathbf{v}_k$ é muito pequeno e o segundo termo do lado direito da Equação 3.21 pode ser ignorado por não contribuir significativamente para a produção de turbulência, isto é,

$$\mathbf{P}_k = \mu_k^{\text{turb}} \nabla \mathbf{v}_k \cdot \left[\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_k)^{\text{tp}} \right] \quad (3.22)$$

Citados acima, os termos que estão relacionados à produção de turbulência por convecção térmica natural, P_{kb} e $P_{\epsilon b}$, podem ser modelado como:

¹ Os termos $T_{kj}^{(k)}$ e $T_{kj}^{(\epsilon)}$ são omitidos pelo *software* ANSYS CFX, embora possam ser adicionados como termo fonte de turbulência.

$$P_{kb} = \frac{\mu_k^{\text{turb}}}{\rho_k \text{Sc}_k^{\text{turb}}} \rho_k \beta_k \mathbf{g} \cdot \nabla T_k \quad (3.23)$$

$$P_{eb} = C_3 \cdot \max(0, P_{kb}) \quad (3.24)$$

onde $\text{Sc}_k^{\text{turb}}$, β_k e T_k representam o número de Schmidt turbulento, o coeficiente de expansão térmica e a temperatura da k ésima fase, respectivamente. C_3 é o coeficiente de dissipação e tem valor igual a 1.

O modelo k - ω foi desenvolvido por Wilcox (1988), e nele foi sugerido a adição do termo ω na equação de transporte da energia cinética turbulenta. O ω refere-se a taxa de dissipação de energia por unidade de volume e tempo, podendo ser descrita também como “frequência média turbulenta” (ANSYS, Inc., 2012a).

O modelo k - ω apresenta várias vantagens em relação ao modelo k - ϵ . Segundo Alho e Ilha (2006), as principais vantagens do modelo são:

- fornece previsões bastante precisas do escoamento em camada limite bidimensional, tanto em condições de gradientes de pressão favoráveis e adversos;
- 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;
- as equações de transporte do modelo podem ser integradas diretamente na sub-camada 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.

Como todo modelo de turbulência tem suas limitações, o modelo k - ω apresenta algumas, isto é, a sua principal limitação é relacionada à sua sensibilidade a variações nas condições de corrente livre. De acordo com Alho e Ilha (2006), pequenas alterações no valor de ω nas condições de contorno de entrada, podem levar a variações significativas nos resultados simulados.

Portanto, o equacionamento do modelo k - ω pode ser descrito abaixo:

$$\mu_k^{\text{turb}} = \rho_k \frac{k_k}{\omega_k} \quad (3.25)$$

Por se tratar também de um modelo de duas equações, há a necessidade de duas equações de transporte para resolver o modelo k - ω , uma para a energia cinética turbulenta, k e outra para a frequência turbulenta, ω .

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k k_k) + \nabla \cdot \left\{ f_k \left[\rho_k \mathbf{v}_k k_k - \left(\mu_k + \frac{\mu_k^{\text{turb}}}{\sigma_{k\omega 1}} \right) \nabla k_k \right] \right\} = f_k (\mathbf{P}_k - \beta' \rho_k k_k \omega_k + P_{kb}) \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_k \rho_k \omega_k) + \nabla \cdot \left\{ f_k \left[\rho_k \mathbf{v}_k \omega_k - \left(\mu_k + \frac{\mu_k^{\text{turb}}}{\sigma_{k\omega 2}} \right) \nabla \omega_k \right] \right\} = f_k \left(\alpha_\omega \frac{\omega_k}{k_k} \mathbf{P}_k - \beta \rho_k \omega_k^2 + P_{\omega b} \right) \quad (3.27)$$

onde $\sigma_{k\omega 1}$, $\sigma_{k\omega 2}$, β' , β e α_ω representam as constantes do modelo k - ω . P_{kb} e $P_{\omega b}$ representam a produção de turbulência por convecção térmica natural.

O termo P_{kb} , da equação anterior, pode ser modelada utilizando a Equação 3.23 do modelo k - ϵ . Por fim, o termo $P_{\omega b}$ pode ser expresso por,

$$P_{\omega b} = \frac{\omega_k}{k_k} [(\alpha_\omega + 1) C_3 \max(P_{kb}, 0) - P_{kb}] \quad (3.28)$$

Para suprir as deficiências ou as desvantagens dos modelos apresentados acima, [Menter \(1994\)](#) desenvolveu um modelo de turbulência que consiste em um aperfeiçoamento do modelo Baseline k - ω (BSL k - ω), proposto pelo próprio autor. O modelo SST não consiste em um novo modelo em si, mas sim em um modelo composto por dois conjunto de equações ([NETO, 2004](#); [WILCOX, 2004](#)).

O modelo SST 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 no modelo SST, é realizada por meio de uma função de mistura (*blending function*) ([ALHO; ILHA, 2006](#)).

Deste modo, o equacionamento do modelo SST é apresentado abaixo:

$$\mu_k^{\text{turb}} = \frac{a_1 \rho_k k_k}{\max(\alpha_1 \omega, SF_2)} \quad (3.29)$$

onde o α_1 é a constante do modelo SST, o S é uma medida invariante da taxa de deformação e F_2 é a função de mistura.

As constantes dos modelos de turbulência são apresentados a seguir pela Tabela 3.

Tabela 3 – Tabela das constantes dos modelos de turbulência.

Modelo de turbulência	Constante	Valor
$k-\epsilon$	C_μ	1,92
	$C_{\epsilon 1}$	0,09
	$C_{\epsilon 2}$	1,44
	$\sigma_{k\epsilon 1}$	1
	$\sigma_{k\epsilon 2}$	1,3
$k-\omega$	α_ω	5/9
	β	0.075
	β'	0,09
	$\sigma_{k\omega 1}$	2
	$\sigma_{k\omega 2}$	2
SST	α_1	5/9

Fonte: Elaborado pelo autor.

3.2.2.3 Condutividade térmica turbulenta

A partir da predição da viscosidade turbulenta e o conceito do número de Prandtl turbulento, é possível calcular a condutividade térmica turbulenta através da Equação 3.30:

$$\lambda_k^{\text{turb}} = \frac{\mu_k^{\text{turb}}}{\text{Pr}_k^{\text{turb}}} \quad (3.30)$$

onde $\text{Pr}_k^{\text{turb}}$ representa número de Prandtl turbulento da k ésima fase, respectivamente.

3.2.2.4 Difusividade turbulenta

Análogo a definição da condutividade térmica turbulenta, a difusividade turbulenta pode ser expressa a partir dos conceitos de viscosidade turbulenta e o conceito do número de Schmidt turbulento,

$$D_{AB,k}^{\text{turb}} = \frac{\mu_k^{\text{turb}}}{\text{Sc}_k^{\text{turb}}} \quad (3.31)$$

3.2.3 Transferência quantidade de movimento entre as fases

A transferência de quantidade de movimento entre as fases, \mathbf{M}_k , ocorre devido à forças interfaciais agindo em cada fase, devido à interação com a outra fase. A força total agindo sobre a fase k (fase contínua) devido à interação com a fase j (fase dispersa) é denotada por \mathbf{M}_k , e é dada por:

$$\mathbf{M}_k = \sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{M}_{kj} \quad (3.32)$$

Note que, as forças entre as duas fases são iguais e opostas, de modo que a soma das forças de interface é zero:

$$(\mathbf{M}_{kj} = -\mathbf{M}_{jk}) \Rightarrow \sum_k \mathbf{M}_k = 0 \quad (3.33)$$

A força de interface total agindo entre as duas fases pode se apresentar devido à vários efeitos físicos independentes, tem-se:

$$\mathbf{M}_{kj} = \mathbf{M}_{kj}^D + \mathbf{M}_{kj}^L + \mathbf{M}_{kj}^{LUB} + \mathbf{M}_{kj}^{VM} + \mathbf{M}_{kj}^{TD} + \mathbf{M}_S + \dots \quad (3.34)$$

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

Em escoamento multifásicos em pratos perfurados de coluna de destilação, a força de arraste destaca-se por possuir maior importância nos fenômenos de transferência de quantidade de movimento entre as fases em contato. Neste contexto, foi considerada apenas a força de arraste como transferência de quantidade de movimento entre as fases e a sua modelagem matemática será detalhada a seguir.

A força de arraste é a força exercida pelo fluido sobre um corpo imerso ou pelo corpo imerso sobre um fluido. De maneira geral, a Equação 3.36 é usada para modelar a força de arraste na interface agindo sobre a fase contínua (k) devido à fase dispersa (j).

$$\mathbf{M}_{kj}^D = c_{kj}^{(d)} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k) \quad (3.35)$$

onde $c_{kj}^{(d)}$ é o coeficiente volumétrico de transferência de momento devido ao arraste e $(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k)$ é a velocidade relativa do escoamento.

Nota-se que, $c_{kk}^{(d)} = c_{jj}^{(d)} = 0$ e $c_{kj}^{(d)} = c_{jk}^{(d)}$. Assim, a soma sobre todas as fases de todos os termos de transferência na interface é zero.

A força total de arraste é mais convenientemente expressa em termos do coeficiente de arraste adimensional, C_D , conforme apresentado abaixo:

$$C_D = \frac{D}{\frac{1}{2} \rho_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_j)^2 A_p} \quad (3.36)$$

o termo D representa a magnitude da força de arraste e A_p é a área projetada por uma única partícula (fase dispersa) na direção do fluxo.

Assumindo neste estudo as bolhas como partículas esféricas, os coeficientes volumétricos $c_{kj}^{(d)}$ podem ser calculados analiticamente. A área projetada por uma única partícula na direção do escoamento e o volume de uma única partícula, V_p , são apresentados abaixo:

$$A_p = \frac{\pi d_j^2}{4} \quad (3.37)$$

$$V_p = \frac{\pi d_j^3}{6} \quad (3.38)$$

onde d_j é o diâmetro médio da fase dispersa.

O número de partículas por unidade de volume, n_p , é dado por:

$$n_p = \frac{f_j}{V_p} = \frac{6f_j}{\pi d_j^3} \quad (3.39)$$

onde f_j é a fração volumétrica da fase dispersa.

O arraste sofrido por uma partícula, D_p , escoando em uma fase contínua é dado por:

$$D_p = \frac{1}{2} C_D \rho_k A_p |\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k| (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k) \quad (3.40)$$

Dessa forma, o arraste total por unidade de volume na fase contínua pode ser expressa por:

$$\mathbf{M}_{kj}^D = n_p D_p \quad (3.41)$$

Substituindo as Equações 3.39 e 3.40 na Equação 3.41, têm-se uma nova expressão para força de arraste:

$$\mathbf{M}_{kj}^D = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_j} f_j \rho_k |\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k| (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k) \quad (3.42)$$

Comparando as Equações 3.35 e 3.42, o coeficiente volumétrico de transferência de quantidade de movimento, pode ser expresso por,

$$c_{kj}^{(d)} = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_j} f_j \rho_k |\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k| \quad (3.43)$$

Afim de fechar a modelagem matemática da Equação 3.42, há ainda a necessidade de incluir um modelo que represente o coeficiente de arraste (C_D) no escoamento multifásico. Citado por [Noriler \(2007\)](#), o coeficiente de arraste depende do regime de escoamento e é função da intensidade do contato entre as fases contínua e dispersa e se a fase discreta é deformável ou não. É possível encontrar na literatura diversas correlações para o coeficiente de arraste ([CLIFT; GRACE; WEBER, 1978](#); [ISHII; ZUBER, 1979](#); [KRISHNA et al., 1999a](#)) de acordo com a particularidade de cada estudo.

No presente estudo, o modelo utilizado para o coeficiente de arraste foi a correlação de [Krishna et al. \(1999a\)](#). Os autores propuseram uma correlação para estimar o coeficiente de

arraste para escoamentos em regime de intenso borbulhamento, como ocorre nos escoamentos em pratos perfurados de destilação e colunas de borbulhamento. A correlação de [Krishna et al. \(1999a\)](#) é expressa como,

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{\rho_k - \rho_j}{\rho_k} g d_j \frac{1}{|v_{slip}|^2} \quad (3.44)$$

onde v_{slip} é a velocidade de deslizamento das bolhas e pode ser estimado a partir da velocidade do fase dispersa e a fração volumétrica média da fase dispersa na região de borbulhamento, ou seja,

$$v_{slip} = \frac{U_s}{\bar{f}_j} \quad (3.45)$$

onde U_s é a velocidade superficial da fase dispersa e \bar{f}_j é a fração volumétrica média da fase dispersa.

A velocidade superficial da fase dispersa pode ser obtida através das expressões abaixo:

$$U_s = \frac{Q_j}{A_B} \quad (3.46)$$

ou,

$$U_s = \frac{F_s}{\sqrt{\rho_j}} \quad (3.47)$$

onde Q_j , F_s e ρ_j representam a vazão volumétrica, o fator de vazão e a massa específica da fase dispersa, respectivamente. A_B é a área de borbulhamento.

Para a o cálculo da fração volumétrica média da fase dispersa \bar{f}_j^B , pode-se recorrer à correlação de [Bennett, Agrawal e Cook \(1983\)](#), que pode ser expressa pela equação abaixo:

$$\bar{f}_j^B = 1 - \bar{f}_k^B \quad (3.48)$$

onde,

$$\bar{f}_k^B = \exp \left[-12,55 \left(U_s \sqrt{\frac{\rho_j}{\rho_k - \rho_j}} \right)^{0,91} \right] \quad (3.49)$$

Similar a correlação proposta por [Bennett, Agrawal e Cook \(1983\)](#), [Colwell \(1981\)](#) propôs uma correlação para se calcular a fração volumétrica média para a fase dispersa, que além de incorporar as propriedades físicas e condições operacionais, leva em conta os efeitos geométricos. Desta maneira a correlação pode ser descrita como:

$$\bar{f}_j^C = 1 - \frac{1}{1 + 12,6 \left[\left(\frac{\rho_j}{\rho_k - \rho_j} \right) \frac{U_s^2}{gh_{cl}} \right]^{0,4} \left(\frac{A_H}{A_B} \right)^{-0,25}} \quad (3.50)$$

onde h_{cl} , A_H e A_B representam a altura de líquido claro, a área total das perfurações e a área de borbulhamento, respectivamente.

Substituindo as Equações 3.44 e 3.45 na Equação 3.42, têm-se:

$$\mathbf{M}_{kj} = f_j g (\rho_k - \rho_j) |\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k| (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k) \left| \frac{\bar{f}_j}{U_s} \right|^2 \quad (3.51)$$

O modo como a Equação 3.51 é apresentada, implica em dificuldades numéricas devido ao fato da possibilidade da fração volumétrica da fase dispersa ou contínua ser zero ou muito próxima de zero em algumas regiões. Entretanto, a partir de manipulações algébricas, é possível eliminar este problema. Krishna et al. (1999a) sugere multiplicar a Equação 3.51 pela fração volumétrica da fase contínua e dividir pela fração volumétrica média da fase contínua. A partir dessas manipulações, obtém-se uma equação mais apropriada para a resolução numérica. Logo, a expressão para transferência de quantidade de movimento entre as fases é disposta,

$$\mathbf{M}_{kj} = \frac{f_k f_j g}{\bar{f}_k} (\rho_k - \rho_j) |\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k| (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k) \left| \frac{\bar{f}_j}{U_s} \right|^2 \quad (3.52)$$

É válido ressaltar, que a correlação de Krishna et al. (1999a) para coeficiente de arraste elimina a dependência do diâmetro de bolha, pois há uma enorme dificuldade de se estimar com precisão um diâmetro representativo da bolha tanto no escoamento em pratos perfurados de coluna de destilação, quanto devido à não esfericidade das bolhas formadas.

3.2.4 Transferência de calor entre as fases

A transferência de calor entre as fases ocorre devido ao não equilíbrio térmico através da interface das fases envolvidas. O calor total por unidade de volume transferido entre as fases, \mathbf{Q}_k , é dado por:

$$\mathbf{Q}_k = \sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{Q}_{kj} \quad (3.53)$$

Pode-se notar que, a transferência de calor entre as fases são iguais e opostas, de modo que a soma das taxas de calor na interface é zero:

$$(\mathbf{Q}_{kj} = -\mathbf{Q}_{jk}) \Rightarrow \sum_k \mathbf{Q}_k = 0 \quad (3.54)$$

A transferência de calor através de uma fronteira é geralmente descrita em termos de um coeficiente de transferência global de calor, h_{kj} , que corresponde à quantia de calor que atravessa uma unidade de superfície por unidade de tempo por unidade de diferença de temperatura entre

as fases. Assim, a taxa de transferência de calor, \mathbf{Q}_{kj} , da fase dispersa para a fase contínua, é dada por:

$$\mathbf{Q}_{kj} = h_{kj} A_{kj} (T_j - T_k) \quad (3.55)$$

onde h_{kj} , A_{kj} e $(T_j - T_k)$ representam o coeficiente global de transferência de calor, a área interfacial por unidade de volume e a diferença de temperatura entre as dispersa, “ j ”, e contínua, “ k ”, respectivamente.

Análoga à transferência de quantidade de movimento, o coeficiente global de transferência de calor e área interfacial por unidade de volume, pode ser expressa através do coeficiente volumétrico de transferência de calor, $c_{kj}^{(h)}$, isto é,

$$\mathbf{Q}_{kj} = c_{kj}^{(h)} (T_j - T_k) \quad (3.56)$$

Pode-se definir o grupo adimensional, número de Nusselt, Nu , como ([INCROPERA et al., 2008](#)):

$$\text{Nu} = \frac{h d}{\lambda} \quad (3.57)$$

Isolando o termo h da Equação 3.57 e aplicando o conceito para um modelo de partícula esférica, têm-se:

$$h_{kj} = \frac{\lambda_k \text{Nu}_{kj}}{d_j} \quad (3.58)$$

onde h_{kj} é o coeficiente global de transferência calor, λ_k é a condutividade térmica da fase contínua, Nu_{kj} é o número adimensional de Nusselt na interface e d_j é o diâmetro médio da fase dispersa, d_j .

Em um escoamento laminar em torno de uma partícula esférica, a análise teórica mostra que o número de Nusselt é igual a 2. Para uma partícula esférica em um fluido Newtoniano incompressível em movimento, o número de Nusselt é uma função do número de Reynolds da partícula, Re_{kj} , e do fluido circundante do número de Prandtl, Pr_{kj} ([BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2004](#)). Na literatura, há algumas correlações para o cálculo do número de Nusselt na interface:

- Regime laminar:

$$\text{Nu}_{kj} = 2 \quad (3.59)$$

- Regime turbulento:

- Correlação de [Ranz e Marshall \(1952\)](#):

$$\text{Nu}_{kj} = 2 + \text{Re}_{kj}^{0.5} \text{Pr}_j^{0.3} \quad (3.60)$$

para $0 \leq \text{Re}_{kj} < 200$ e $0 \leq \text{Pr}_j < 250$

- Correlação de [Hughmark \(1967\)](#):

$$\text{Nu}_{kj} = 2 + \text{Re}_{kj}^{0.5} \text{Pr}_j^{0.33} \quad (3.61)$$

para $0 \leq \text{Re}_{kj} < 776,06$ e $0 \leq \text{Pr}_j < 250$

$$\text{Nu}_{kj} = 2 + \text{Re}_{kj}^{0.62} \text{Pr}_j^{0.33} \quad (3.62)$$

para $776,06 \leq \text{Re}_{kj}$ e $0 \leq \text{Pr}_j < 250$

Com,

$$\text{Re}_{kj} = \frac{\rho_k |\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k| d_j}{\mu_k} \quad (3.63)$$

$$\text{Pr}_{kj} = \frac{Cp_k \mu_k}{\lambda_k} \quad (3.64)$$

onde Cp_k é a capacidade calorífica, μ_k é a viscosidade dinâmica e λ_k é a condutividade térmica da fase contínua.

Para um modelo de partícula esférica, a área interfacial por unidade de volume entre uma fase contínua e uma dispersa, A_{kj} , pode ser expressa por:

$$A_{kj} = \frac{6f_j}{d_j} \quad (3.65)$$

onde f_j e d_j representam a fração volumétrica da fase dispersa e diâmetro média de bolha, respectivamente.

Análoga a transferência de quantidade de movimento na interface, a determinação ou fixação de um diâmetro médio de bolha que possa representar todo o escoamento do prato, torna-se um problema muito grande para esses tipos de escoamento. Deste modo, [Davidson, Mech e Schuler \(1960\)](#) propuseram uma correlação que estima o diâmetro máximo de bolha de uma dada condição operacional e geométrica para pratos perfurados. Essa correlação pode ser descrita abaixo:

$$d_{j,max} = 1,23 \sqrt[5]{\frac{p_t^4}{g} \left(U_s \frac{A_C}{A_B} \right)^2} \quad (3.66)$$

onde $d_{j,max}$ é o diâmetro máximo de bolha, p_t é o *pitch* triangular dos orifícios no prato perfurado (ou arranjo dos orifícios com espaçamento triangular entres eles), \mathbf{g} é o vetor de aceleração da gravidade, U_s é a velocidade superficial da fase dispersa, A_C é a área de secção transversal da coluna de destilação e A_B é a área de borbulhamento do prato.

Com um enfoque muito interessante no escoamento em pratos perfurados de coluna de destilação, Hofhuis e Zuideweg (1979) define o diâmetro médio de Sauter da bolha como a metade do diâmetro máximo de bolha obtido pela Equação 3.66. Assim, a expressão que define o diâmetro médio de Sauter, fica:

$$\bar{d}_j = \frac{d_{j,max}}{2} \quad (3.67)$$

A partir da Equação 3.67, foi utilizado diâmetro de bolha para o cálculo da área interfacial na transferência de calor entre as fases.

3.2.5 Transferência de massa entre as fases

Como visto anteriormente nas Equações 3.1, 3.2, 3.4 e 3.5, o termo que refere-se à taxa líquida de massa por unidade de volume, Γ_{kj} , que se desloca da fase contínua, k , para a fase dispersa, j , para um sistema multifásico, pode ser escrita como:

$$\Gamma_{kj} = \sum_{k \neq j}^{n_f} \Gamma_{kj} \quad (3.68)$$

onde Γ_{kj} é a fonte de massa por unidade de volume para o interior da fase contínua k devido à transferência de massa na interface.

Note que, a transferência de massa entre as fases são iguais e opostas, de modo que a soma das taxas de transferência de massa na interface é zero:

$$(\Gamma_{kj} = -\Gamma_{jk}) \quad \Rightarrow \quad \sum_k \Gamma_k = 0 \quad (3.69)$$

Para reconhecer a direção do fenômeno de transferência de massa é conveniente expressar Γ_{kj} como:

$$\Gamma_{kj} = \Gamma_{kj}^+ - \Gamma_{jk}^+ \quad (3.70)$$

onde os termos Γ_{kj}^+ e Γ_{jk}^+ representam a taxa mássica positiva por unidade de volume da fase contínua k para a fase dispersa j e da fase dispersa j para a fase contínua k , respectivamente. Esses termos também possuem a seguinte propriedade, $\Gamma_{kj}^+ > 0$ e $\Gamma_{jk}^+ > 0$.

Para a transferência de massa através na interface, é conveniente expressar a taxa de escoamento de massa por unidade de volume, em termos de fluxos mássicos, ou seja,

$$\Gamma_{kj} = \dot{m}_{kj} A_{kj} \quad (3.71)$$

onde \dot{m}_{kj} é a taxa de escoamento de massa por unidade de área interfacial da fase dispersa j para a fase contínua k e A_{kj} é a densidade de área superficial entre as fases.

Os termos de fonte de massa que afetam a equação da continuidade, Γ_{kj} são referidos como fontes primárias de massa. No entanto, pode ser observado claramente que, se a 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 de uma fase dispersa j para uma fase contínua k , pode ser expressa pela Equação 3.72, onde o termo $S_{M,k}$ encontrado nas equações descritas anteriormente.

$$S_{M,k} = \sum_{j=1}^{n_f} (\Gamma_{kj}^+ \varphi_j - \Gamma_{jk}^+ \varphi_k) \quad (3.72)$$

onde φ_k e φ_j representam as propriedades conserváveis entre as fases.

Segundo [Noriler \(2007\)](#), no processo de transferência de massa entre as fases em pratos de coluna 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.

Como hipótese simplificadora neste estudo, 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 coluna de destilação.

3.2.6 Transferência de espécies químicas entre as fases

De maneira análoga de como foram tratados os termos de transferência de quantidade de movimento e de calor entre as fases, nas seções 3.2.3 e 3.2.4, respectivamente, o termo de transferência de espécies químicas entre as fases, $\mathbf{Y}_{A,k}$, é tratado nesta seção e pode ser expresso como,

$$\mathbf{Y}_{A,k} = \sum_{k \neq j}^{n_f} \mathbf{Y}_{A,kj} \quad (3.73)$$

Nota-se que, a transferência de espécies químicas entre as fases são iguais e opostas, de modo que a soma das taxas de calor na interface é zero:

$$(\mathbf{Y}_{A,kj} = -\mathbf{Y}_{A,jk}) \Rightarrow \sum_k \mathbf{Y}_{A,k} = 0 \quad (3.74)$$

Análoga aos termos de transferência entre as fases explicado anteriormente, a transferência de espécies químicas na interface, $\mathbf{Y}_{A,kj}$, pode ser definido como:

$$\mathbf{Y}_{A,kj} = k_{kj}^c A_{kj} \rho_k (y_{A,ks} - y_{A,k}) \quad (3.75)$$

onde K_{kj}^c representa o coeficiente de transferência de espécies químicas na fase contínua k , A_{kj} representa a área interfacial, e $y_{A,ks}$ e $y_{A,k}$ representam as frações mássicas do componente A na interface com a fase dispersa j e no seio da fase contínua k , respectivamente.

A força motriz para que um componente A presente em uma fase contínua k e em uma fase dispersa j , 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. Segundo Poling, Prausnitz e O'Connell (2000), 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 3.76 à 3.78, conforme as definições dadas a seguir:

$$\rho_{A,k} = PM_A C_{A,k} \quad (3.76)$$

$$x_{A,k} = \frac{C_{A,k}}{C_k} \quad (3.77)$$

$$X_{A,k} = \frac{\rho_{A,k}}{\rho_k} \quad (3.78)$$

onde PM_A , $\rho_{A,k}$, ρ_k , $C_{A,k}$, C_k , $X_{A,k}$ e $x_{A,k}$ representam o peso molecular do componente A , a concentração mássica do componente A , a concentração mássica total, a concentração molar do componente A , a concentração molar total, a fração mássica do componente A e a fração molar do componente A da fase k , respectivamente.

A transferência do componente A da fase contínua k para a fase dispersa j , 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 esta 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.

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 contínua k com o lado da fase dispersa j (ANSYS, Inc., 2012a).

A seguir, será apresentado o tratamento matemático para descrever o equilíbrio de potenciais e a resistência à transferência de espécies entre as fases.

3.2.6.1 Potenciais químicos

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

$$X_{A,k} = f(X_{A,j}) \quad (3.79)$$

A concentração de um componente A na fase j em função da concentração do componente A na fase k , pode ser calculada de diversas formas. A mais comumente utilizada para a transferência de massa em sistemas líquido-vapor é o procedimento gamma-phi ($\gamma - \phi$). O procedimento é apresentado abaixo (POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2000; SMITH; NESS; ABBOTT, 2007):

$$x_{A,k} \gamma_A P_A^{\text{vap}} \phi_A^{\text{sat}} P_{oA} = x_{A,j} \phi_A P \quad (3.80)$$

onde $x_{A,k}$ e $x_{A,j}$ são as frações molares do componente A na fase k e j , respectivamente. γ_A é o coeficiente de atividade do componente A na fase contínua, P_A^{vap} é a pressão de vapor do componente A na temperatura do sistema. ϕ_A e ϕ_A^{sat} são os coeficientes de fugacidade do componente A na fase dispersa na mistura e na saturação, respectivamente. P_{oA} é o fator de Poynting e P é a pressão do sistema.

Em sistemas à baixa pressão ($P < 5 \text{ atm}$), pode-se fazer as seguintes considerações:

- Fator de Poynting igual à 1;
- Razão $\phi_A / \phi_A^{\text{sat}}$ pode ser calculada, por exemplo, pela equação do virial;

- O coeficiente de atividade, γ_A , pode ser calculado através de modelos e/ou métodos como Margules, Wilson, UNIQUAC, UNIFAC, NRTL, entre outros;
- A pressão de vapor, P_A^{vap} , depende da temperatura e pode ser calculada por equações, como por exemplo, a equação de Antoine.

As equações e modelos citados acima estão amplamente discutidos na literatura (POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2000; KORETSKY, 2007; SMITH; NESS; ABBOTT, 2007). Deste modo, aplicando as considerações citadas acima, chega-se a seguinte expressão:

$$x_{A,k} \gamma_A P_A^{\text{vap}} \phi_A^{\text{sat}} = x_{A,j} \phi_A P \quad (3.81)$$

Com base na Equação 3.81, algumas simplificações podem ser aplicadas, tais como: considerar a fase vapor como sendo uma mistura ideal ($\phi_A = \phi_A^{\text{sat}} = 1$) e se a fase líquida se comportar como uma mistura líquida ideal ($\gamma_A = 1$), pode-se dizer que nesta situação o procedimento $\gamma - \phi$ nos leva à lei de Raoult:

$$x_{A,k} P_A^{\text{vap}} = x_{A,j} P \quad \Rightarrow \quad x_{A,j} = \frac{P_A^{\text{vap}}}{P} x_{A,k} \quad (3.82)$$

Observando a Equação 3.82, após a indicação da seta, nota-se que esta é uma expressão linear de $x_{A,j}$ como função de $x_{A,k}$, pois a pressão de saturação, P_A^{vap} , depende somente da temperatura, e não da concentração do componente A na fase k . Mas, como se sabe, a curva de equilíbrio não é linear. Porém, em situações nas quais um líquido puro de componente A , está em contato com uma fase dispersa (gás ou vapor) que contém o componente A , a Lei de Raoult pode ser aplicada.

Já na situação limite contrária, onde um gás ou vapor puro de componente A está em contato com um líquido contendo o componente A , pode-se combinar a lei de Dalton com a lei de Henry, chegando na seguinte expressão abaixo,

$$x_{A,j} = \frac{\mathcal{H}_{A,k}}{P} x_{A,k} \quad (3.83)$$

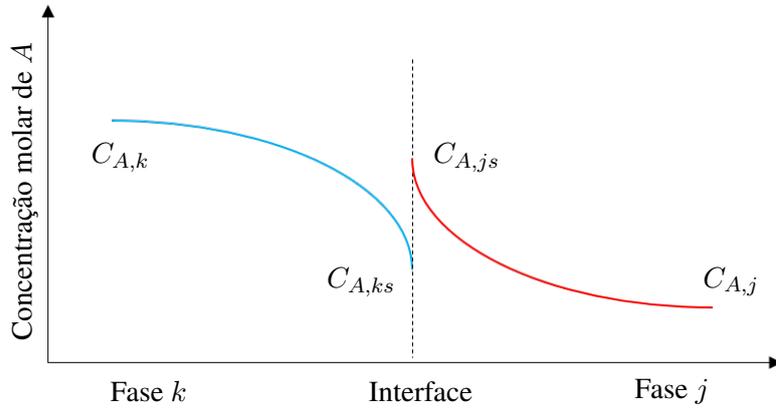
onde $\mathcal{H}_{A,k}$ é a constante de Henry para o componente A na fase contínua k .

3.2.6.2 Modelo de duas resistências

Em virtude da descontinuidade da concentração no equilíbrio de fases, conforme apresentado na Figura 14, não é possível tratar a transferência de massa multicomponente usando os coeficientes globais de transferência de massa, é necessário, então, considerar um modelo de duas resistências.

Assim, neste trabalho, a transferência do componente A da fase k para a fase j , ou vice-versa, é tratada pela análise do modelo de duas resistências. Deste modo, é necessário

Figura 14 – Representação de transferência de massa entre as fases.



Fonte: Elaborado pelo autor.

considerar um modelo de duas resistências. Pode-se tratar a transferência de massa usando os coeficientes de transferência de massa similar ao modelo de duas resistências utilizando em transferência de calor, ou seja (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2004),

$$n_{A,k} = k_k^c (C_{A,ks} - C_{A,k}) \quad (3.84)$$

$$n_{A,j} = k_j^c (C_{A,j,s} - C_{A,j}) \quad (3.85)$$

onde $n_{A,k}$ é o fluxo molar do componente A para o seio da fase k a partir da interface e $n_{A,j}$ é o fluxo molar do componente A para o seio da fase j a partir da interface. Os termos $C_{A,ks}$ e $C_{A,j,s}$ representam as concentrações molares do componente A nas interfaces das fases k e j , respectivamente. Os termos k_k^c e k_j^c são os coeficiente de transferência de massa nas fases k e j , respectivamente. Os termos $C_{A,k}$ e $C_{A,j}$ representam as concentrações molares do componente A no seio das fases k e j , respectivamente.

Multiplicando-se as Equações 3.84 e 3.85 pelo massa molecular do componente A , chega-se às equações em termos dos fluxos de massa:

$$m_{A,k} = k_k^c (\rho_{A,ks} - \rho_{A,k}) \quad (3.86)$$

$$m_{A,j} = k_j^c (\rho_{A,j,s} - \rho_{A,j}) \quad (3.87)$$

onde $m_{A,k}$ e $m_{A,j}$ representam o fluxo mássico do componente A do seio da fase k até a interface e fluxo mássico do componente A do seio da fase j até a interface, respectivamente. O termos $\rho_{A,ks}$ e $\rho_{A,j,s}$ são a concentrações mássicas do componente A na fase k e na fase j na interface, respectivamente.

Para eliminar os valores desconhecidos da interface, as Equações 3.84 à 3.87 devem ser complementadas pelas relações de equilíbrio entre $C_{A,ks}$ e $C_{A,j,s}$, e entre $\rho_{A,ks}$ e $\rho_{A,j}$. É mais

conveniente expressar matematicamente e fisicamente essas relações utilizando uma constante de proporcionalidade que representa a razão de equilíbrio das concentrações molares. Assim, a constante de proporcionalidade pode ser expressa como:

$$C_{A,js} = K^c C_{A,ks} \quad \Rightarrow \quad \rho_{A,js} = K^c \rho_{A,ks} \quad (3.88)$$

onde K^c é a constante de proporcionalidade.

De acordo com a restrição do balanço de massa na interface,

$$m_{A,k} + m_{A,j} = 0 \quad (3.89)$$

têm-se:

$$\frac{\rho_{A,js}}{K^c} = \rho_{A,ks} = \frac{k_k^c \rho_{A,k} + k_j^c \rho_{A,j}}{K^c k_j^c + k_k^c} \quad (3.90)$$

Para eliminar os valores da interface, presentes nas Equações 3.84 à 3.87, pode-se utilizar a Equação 3.90, de forma a expressar as taxas mássicas interfaciais em termos das concentrações mássicas dos seios das fases, conforme apresentado nas equações abaixo:

$$m_{A,k} = -m_{A,j} = K_{kj}^c (K^c \rho_{A,k} - \rho_{A,j}) \quad (3.91)$$

$$\frac{1}{K_{kj}^c} = \frac{1}{k_k^c} + \frac{K^c}{k_j^c} \quad (3.92)$$

Desta maneira, pode-se calcular a taxa de transferência de espécies químicas do componente A que cruza a interface, a partir da equação abaixo,

$$\mathbf{Y}_{A,kj} = -\mathbf{Y}_{A,jk} = K_{kj}^c A_{kj} (K^c \rho_{A,k} - \rho_{A,j}) \quad (3.93)$$

Como explicado anteriormente, o termo K^c , tratado aqui como uma constante de proporcionalidade é uma medida conveniente da tendência de uma espécie química se separar ou dividir preferencialmente entre as fases líquida e vapor. Ela é também conhecida como constante termodinâmica ou “razão de equilíbrio” nos cálculos termodinâmicos de equilíbrio líquido-vapor. Esta constante de equilíbrio, conforme apresentado nas equações acima, pode ser definida também, para uma espécie A , como a razão entre as frações molares do componente A nas fases j e k (SMITH; NESS; ABBOTT, 2007). Este termo pode ser obtido, dentre outras formas, a partir de equações clássicas de equilíbrio, tais como: lei de Raoult, lei de Raoult modificada, lei de Henry, procedimento $\phi - \phi$, procedimento $\gamma - \phi$, entre outros, lembrando que as leis citadas anteriormente possuem restrições às quais podem ser utilizadas.

Como adotado nesse trabalho, a constante termodinâmica foi calculada empregando o procedimento $\gamma - \phi$, isto é (SMITH; NESS; ABBOTT, 2007),

$$K^c = \frac{\gamma_A P_A^{\text{vap}}}{\phi_A P} \quad (3.94)$$

onde γ_A , P_A^{vap} , ϕ_A e P representam o coeficiente de atividade na fase líquida, a pressão de vapor, o coeficiente de fugacidade na fase vapor do componente A e a pressão total, respectivamente.

O coeficientes de atividades são dependentes da composição da fase líquida e eles podem ser calculados por diversos modelos existentes na literatura, dependendo apenas da sua particularidade. Desta forma, o modelo utilizado neste trabalho para o sistema etanol-água foi o modelo de Wilson para o coeficiente de atividade. Segundo Wankat (2012), a equação de Wilson consegue representar matematicamente os fenômenos de não idealidade de álcoois com baixo peso molecular. Portanto, o modelo de Wilson para um mistura binário pode ser expresso como:

$$\ln(\gamma_A) = -\ln(x_A + x_B \Lambda_{AB}) + x_B \left(\frac{\Lambda_{AB}}{x_A + x_B \Lambda_{AB}} - \frac{\Lambda_{BA}}{x_B + x_A \Lambda_{BA}} \right) \quad (3.95)$$

$$\ln(\gamma_B) = -\ln(x_B + x_A \Lambda_{BA}) - x_A \left(\frac{\Lambda_{AB}}{x_A + x_B \Lambda_{AB}} - \frac{\Lambda_{BA}}{x_B + x_A \Lambda_{BA}} \right) \quad (3.96)$$

onde γ_A , γ_B , x_A e x_B representam os coeficientes de atividade da fase líquida e as frações molares dos componentes A e B , respectivamente.

Os termos Λ_{AB} e Λ_{BA} representam os parâmetros de Wilson e podem ser relacionados aos parâmetros moleculares da seguinte maneira (KORETSKY, 2007):

$$\Lambda_{AB} = \frac{v_B}{v_A} \exp\left(-\frac{\lambda_{AB}}{RT}\right) \quad (3.97)$$

$$\Lambda_{BA} = \frac{v_A}{v_B} \exp\left(-\frac{\lambda_{BA}}{RT}\right) \quad (3.98)$$

onde v_A e v_B são os volumes molares dos componentes A e B . λ_{AB} e λ_{BA} são parâmetros experimentais de interação molecular dos componentes A e B , nas quais são relativamente independente da temperatura e podem ser encontrados tabelados na literatura.

A pressão de vapor, P_A^{vap} , pode ser calculada a seguir através do modelo de Antoine (SMITH; NESS; ABBOTT, 2007):

$$\ln(P_A^{\text{vap}}) = A_A - \frac{B_A}{T_k + C_A} \quad (3.99)$$

$$\ln(P_B^{\text{vap}}) = A_B - \frac{B_B}{T_k + C_B} \quad (3.100)$$

onde A , B e C são as constantes do modelo de Antoine para os componentes A e B e eles podem ser encontrados tabelados na literatura. T_k é a temperatura da fase k .

Considerando a fase vapor ideal (à baixas pressões), o coeficiente de fugacidade para os componentes é 1, isto é, $\phi_A = \phi_B = 1$.

Os coeficientes de transferência de massa (k_k^c e k_j^c) podem ser calculados conforme algumas correlações apresentadas na literatura. De acordo com Zanutto (2015), foram testados três modelos de coeficientes de transferência de massa, tais quais, o modelo de Higbie, o modelo SRS (*Surface-Renewal-Stretch*) e o modelo de Zuiderweg. No presente trabalho, foi adotado o modelo de Higbie para representar os coeficientes de transferência de massa. O motivo pela escolha do modelo está explícito pelos seguintes argumentos:

... 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 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 (ZANUTTO, 2015, p. 186).

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 de massa. 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 et al., 2006). Higbie (1935) deduziu que, em uma média temporal, os coeficientes de transferência de massa para k e j , pode ser expressa como,

$$k_k^c = 2\sqrt{\frac{D_{AB,k}}{\pi\theta_k}} \quad (3.101)$$

$$k_j^c = 2\sqrt{\frac{D_{AB,j}}{\pi\theta_j}} \quad (3.102)$$

onde $D_{AB,k}$ e $D_{AB,j}$ são as difusividades dos componentes A e B das fases k e j , π é a constante pi ($\pi \approx 3,1415$), e θ_k e θ_j representam o tempo de contato na região de dispersão (*froth region*) para as fases k e j .

O tempo de contato para ambas as fases podem ser definidas como,

$$\theta_k = \frac{d_j}{v_{slip}} \quad (3.103)$$

$$\theta_j = \frac{d_j}{v_p} \quad (3.104)$$

onde $v_{j,p}$ é a velocidade da fase dispersa j nas perfurações do prato de destilação.

Para fechar a modelagem da equação de transferência de espécies químicas entre as fases, a área interfacial, A_{kj} , da Equação 3.93, pode ser calculada utilizando as Equações 3.65 a 3.67, conforme apresentando anteriormente.

3.3 Síntese da modelagem matemática

De acordo as informações dispostas anteriormente, podem-se descrever as equações de conservação que representam o escoamento líquido-gás ou líquido-vapor² em pratos perfurados de destilação.

Desta forma, descreve-se a seguir a modelagem matemática aplicada no presente trabalho para um sistema isotérmico (seção 3.3.1) e para um sistema não isotérmico com transferência de espécies químicas (seção 3.3.2) para representar o escoamento em um prato perfurado de coluna de destilação. Os subscritos “ α ” e “ β ” representam as fases líquida e gás/vapor, respectivamente.

3.3.1 Modelagem matemática aplicada no sistema líquido-gás (água-ar) em pratos perfurados

Na modelagem matemática aplicada para o escoamento isotérmico, foram assumidas as seguintes hipóteses simplificadoras:

- Modelo multifásico heterogêneo;
- Abordagem Euleriana-Euleriana;
- Escoamento isotérmico e sem transferência de espécies químicas;

² Uma forma de padronizar e diferenciar os escoamentos multifásicos para os sistemas água-ar e etanol-água, foi adotar a nomenclatura líquido-gás para o sistema que não ocorre a mudança de fase (água-ar) e líquido-vapor para o sistema que ocorre mudança de fase (etanol-água).

- Sistema água-ar à 1 atm e 25 °C;
- Fase líquida (componente água, subscripto “ α ”) é a fase contínua e a fase gasosa (componente ar, subscripto “ β ”) é a fase dispersa;
- Viscosidade turbulenta foi modelada apenas para a fase líquida, utilizando o modelo de turbulência SST, pois a turbulência na fase líquida é mais vigorosa do que na fase gasosa, onde os efeitos de turbulência são transferidos para fase gás através da transferência de quantidade de movimento entre as fases;
- Força de arraste é predominante em relação as outras forças interfaciais em pratos perfurados de destilação.

Portanto, a seguir, descreve-se o modelo matemático aplicado no presente trabalho para representação do escoamento isotérmico líquido-gás em um pratos perfurados de coluna de destilação:

- Equações de conservação da massa:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_\alpha \rho_\alpha) + \nabla \cdot (f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = 0 \quad (3.105)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_\beta \rho_\beta) + \nabla \cdot (f_\beta \rho_\beta \mathbf{v}_\beta) = 0 \quad (3.106)$$

- Equações de conservação da quantidade de movimento;

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) + \nabla \cdot \left\{ f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \mathbf{v}_\alpha - f_\alpha \mu_\alpha^{\text{eff}} \left[\nabla \mathbf{v}_\alpha + (\nabla \mathbf{v}_\alpha)^{\text{tp}} \right] \right\} = \\ - f_\alpha \nabla p' + f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} + \mathbf{M}_{\alpha\beta}^D \end{aligned} \quad (3.107)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_\beta \rho_\beta \mathbf{v}_\beta) + \nabla \cdot \left\{ f_\beta \rho_\beta \mathbf{v}_\beta \mathbf{v}_\beta - f_\beta \mu_\beta \left[\nabla \mathbf{v}_\beta + (\nabla \mathbf{v}_\beta)^{\text{tp}} \right] \right\} = \\ - f_\beta \nabla p + f_\beta \rho_\beta \mathbf{g} + \mathbf{M}_{\beta\alpha}^D \end{aligned} \quad (3.108)$$

- Viscosidade efetiva da fase líquida, μ_α^{eff} :

$$\mu_\alpha^{\text{eff}} = \mu_\alpha + \frac{a_1 \rho_\alpha k_\alpha}{\max(\alpha_1 \omega_\alpha, S F_2)} \quad (3.109)$$

- Pressão modificada, p' :

$$p' = p + \frac{2}{3} \rho_\alpha k_\alpha \quad (3.110)$$

- Transferência de quantidade de movimento entre as fases líquida e gasosa devido a força de arraste, \mathbf{M}^D :

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta}^D = -\mathbf{M}_{\beta\alpha}^D = \frac{f_\alpha f_\beta \mathbf{g}}{f_\alpha} (\rho_\alpha - \rho_\beta) |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha) \left| \frac{\bar{f}_\beta}{U_s} \right|^2 \quad (3.111)$$

As Equações 3.105 à 3.111 descrevem o escoamento isotérmico líquido-gás para o sistema água-ar utilizado no presente trabalho. Uma maneira de diferenciar o presente trabalho do que já tem desenvolvido recentemente, foi verificar e quantificar através dos dados experimentais de Solari e Bell (1986), a influência do *downcomer* de entrada na hidrodinâmica do prato perfurado. Assim, validada a modelagem matemática para o escoamento isotérmico, foi modelado e simulado um sistema não isotérmico líquido-vapor com transferência de espécies químicas para o sistema etanol-água.

3.3.2 Modelagem matemática aplicada no sistema líquido-vapor (mistura etanol-água) em pratos perfurados

Análoga ao modelo isotérmico apresentado acima, um outro estudo numérico realizado no presente trabalho foi a modelagem matemática e simulação de um escoamento não isotérmico com transferência de espécies química para um sistema etanol-água, na qual foram assumidas as seguintes hipóteses simplificadoras para o modelo, como descrito abaixo:

- Modelo multifásico heterogêneo;
- Abordagem Euleriana-Euleriana;
- Escoamento não isotérmico e com transferência de espécies químicas;
- Sistema etanol-água à 1 atm;
- Fase líquida (mistura líquida etanol-água, subscripto “ α ”) é a fase contínua e a fase vapor (mistura vapor etanol-água, subscripto “ β ”) é a fase dispersa;
- Viscosidade turbulenta foi modelada apenas para a fase líquida, utilizando o modelo de turbulência SST, pois turbulência na fase líquida é mais vigorosa do que na fase vapor, onde os efeitos de turbulência são transferidos para fase vapor através da transferência de quantidade de movimento entre as fases;
- Força de arraste é predominante em relação as outras forças interfaciais em pratos perfurados de destilação;
- Correlação de Ranz e Marshall (1952) foi adotada para representar a transferência de calor entre as fases;
- Transferência de espécies químicas foi utilizando a teoria de penetração de Higbie (1935) e o procedimento $\gamma - \phi$, tratando a fase vapor como ideal.

Portanto, a seguir, descreve-se o modelo matemático aplicado no presente trabalho para representação do escoamento não isotérmico líquido-vapor com transferência de espécies químicas em um pratos perfurados de coluna de destilação:

- Equações de conservação da massa:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) = 0 \quad (3.112)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_\beta \rho_\beta) + \nabla \cdot (f_\beta \rho_\beta \mathbf{v}_\beta) = 0 \quad (3.113)$$

- Equações de conservação da quantidade de movimento;

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) + \nabla \cdot \left\{ f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \mathbf{v}_\alpha - f_\alpha \mu_\alpha^{\text{eff}} \left[\nabla \mathbf{v}_\alpha + (\nabla \mathbf{v}_\alpha)^{\text{tp}} \right] \right\} = \\ - f_\alpha \nabla p' + f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} + \mathbf{M}_{\alpha\beta}^D \end{aligned} \quad (3.114)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_\beta \rho_\beta \mathbf{v}_\beta) + \nabla \cdot \left\{ f_\beta \rho_\beta \mathbf{v}_\beta \mathbf{v}_\beta - f_\beta \mu_\beta \left[\nabla \mathbf{v}_\beta + (\nabla \mathbf{v}_\beta)^{\text{tp}} \right] \right\} = \\ - f_\beta \nabla p + f_\beta \rho_\beta \mathbf{g} + \mathbf{M}_{\beta\alpha}^D \end{aligned} \quad (3.115)$$

- Viscosidade efetiva da fase líquida, μ_α^{eff} :

$$\mu_\alpha^{\text{eff}} = \mu_\alpha + \frac{a_1 \rho_\alpha k_\alpha}{\max(\alpha_1 \omega_\alpha, S F_2)} \quad (3.116)$$

- Pressão modificada, p' :

$$p' = p + \frac{2}{3} \rho_\alpha k_\alpha \quad (3.117)$$

- Transferência de quantidade de movimento entre as fases líquida e gasosa devido a força de arraste, \mathbf{M}^D :

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta}^D = -\mathbf{M}_{\beta\alpha}^D = \frac{f_\alpha f_\beta \mathbf{g}}{\bar{f}_\alpha} (\rho_\alpha - \rho_\beta) |\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha| (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}_\alpha) \left| \frac{\bar{f}_\beta}{U_s} \right|^2 \quad (3.118)$$

- Equações de conservação de energia;

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_\alpha \rho_\alpha h_\alpha) + \nabla \cdot (f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha h_\alpha - f_\alpha \lambda_\alpha^{\text{eff}} \nabla T_\alpha) = \mathbf{Q}_{\alpha\beta} \quad (3.119)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_\beta \rho_\beta h_\beta) + \nabla \cdot (f_\beta \rho_\beta \mathbf{v}_\beta h_\beta - f_\beta \lambda_\beta \nabla T_\beta) = \mathbf{Q}_{\beta\alpha} \quad (3.120)$$

- Condutividade térmica efetiva da fase líquida, $\lambda_\alpha^{\text{eff}}$:

$$\lambda_\alpha^{\text{eff}} = \lambda_\alpha + \frac{\mu_\alpha^{\text{turb}}}{\text{Pr}_\alpha^{\text{turb}}} \quad (3.121)$$

- Transferência de calor entre as fases líquida e vapor, \mathbf{Q} :

$$\mathbf{Q}_{\alpha\beta} = -\mathbf{Q}_{\beta\alpha} = h_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} (T_\beta - T_\alpha) \quad (3.122)$$

- Equações de conservação de espécies químicas;

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_\alpha \rho_\alpha y_{A,\alpha}) + \nabla \cdot (f_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha y_{A,\alpha} - f_\alpha \rho_\alpha D_{AB,\alpha}^{\text{eff}} \nabla y_{A,\alpha}) = \mathbf{Y}_{A,\alpha\beta} \quad (3.123)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_\beta \rho_\beta y_{A,\beta}) + \nabla \cdot (f_\beta \rho_\beta \mathbf{v}_\beta y_{A,\beta} - f_\beta \rho_\beta D_{AB,\beta} \nabla y_{A,\beta}) = \mathbf{Y}_{A,\beta\alpha} \quad (3.124)$$

- Difusividade efetiva da fase líquida, $D_{AB,\alpha}^{\text{eff}}$:

$$D_{AB,\alpha}^{\text{eff}} = D_{AB,\alpha} + \frac{\mu_{\alpha}^{\text{turb}}}{Sc_{\alpha}^{\text{turb}}} \quad (3.125)$$

- Transferência de espécies químicas do componente A entre as fases líquida e vapor, Y_A :

$$Y_{A,\alpha\beta} = -Y_{A,\beta\alpha} = K_{\alpha\beta}^c A_{\alpha\beta} (K^c \rho_{A,\alpha} - \rho_{A,\beta}) \quad (3.126)$$

$$K^c = \frac{\gamma_A P_A^{\text{vap}}}{\phi_A P} \quad (3.127)$$

As Equações 3.112 à 3.127 descrevem o escoamento não isotérmico líquido-vapor para o sistema etanol-água utilizado no presente trabalho. O estudo proposto neste presente trabalho, utilizando o sistema etanol-água, foi verificar a influência da velocidade de vapor na entrada dos orifícios sobre o escoamento no prato.

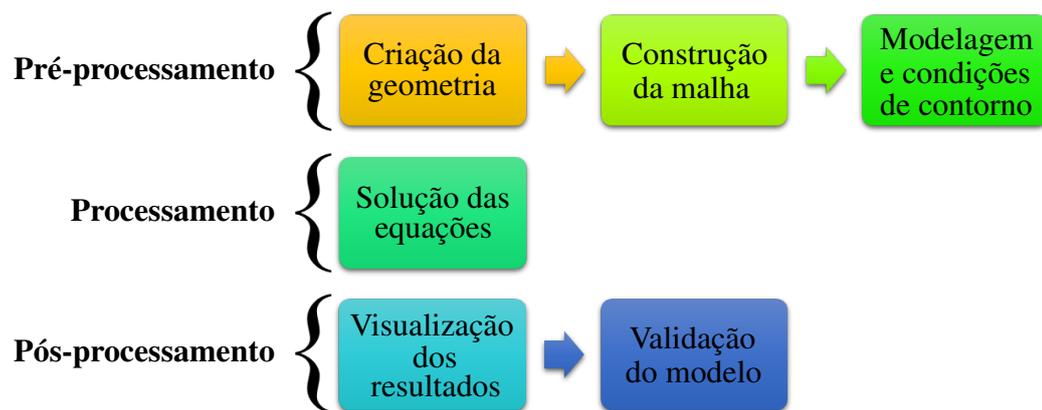
4 METODOLOGIA NUMÉRICA

Neste capítulo são apresentados os recursos utilizados e as etapas envolvidas nas simulações do prato perfurado de destilação através das técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD). Essas etapas podem ser divididas em 3 grupos (TU; YEOH; LIU, 2008):

- Pré-processamento;
- Processamento (ou *solver*);
- Pós-processamento.

Uma maneira de representar as etapas citadas acima, encontra-se na Figura 15, cuja a mesma ilustra os passos para se realizar uma simulação em CFD.

Figura 15 – Etapas comumente percorridas durante a simulação de CFD.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Deste modo, as etapas apresentadas acima para os modelos isotérmico e não isotérmico serão detalhados nas seções seguintes. O pacote comercial da ANSYS, Inc. versão 14.5 foi utilizado na metodologia.

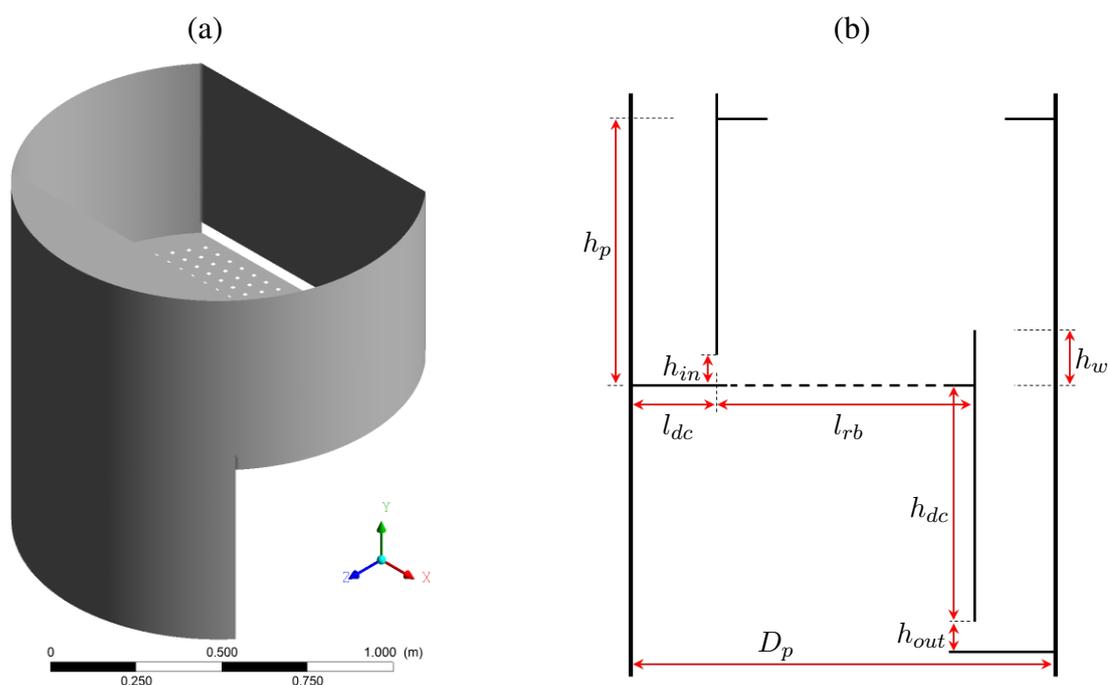
4.1 Pré-processamentos dos modelos

O pré-processamento é a primeira 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 (TU; YEOH; LIU, 2008).

4.1.1 Domínio computacional

O *software* Design Modeler do pacote comercial da ANSYS, Inc. foi utilizado para criar o domínio computacional de interesse. As características geométricas do prato perfurado foram baseadas no trabalho experimental de Solari e Bell (1986). A Figura 16 e a Tabela 4 apresentam as dimensões e as características geométricas do prato perfurado, respectivamente.

Figura 16 – Dimensões do estágio simulado baseado no trabalho de Solari e Bell (1986): (a) domínio computacional e (b) detalhes geométricos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

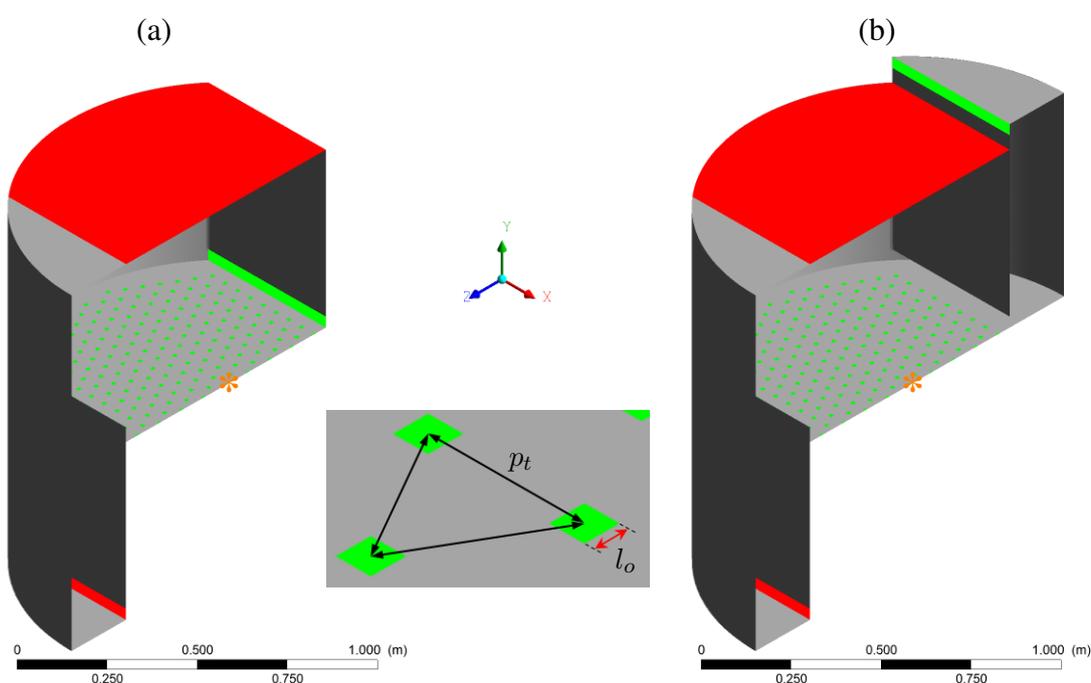
Tabela 4 – Características geométricas do prato perfurado utilizado nas simulações.

Descrição das características geométricas	Símbolo	Valor	Unidades
Diâmetro do prato perfurado	D_p	1,213	m
Espaçamento do prato perfurado	h_p	0,61	m
Comprimento da represa	l_w	0,925	m
Altura da represa	h_w	0,05	m
Altura do <i>downcomer</i>	h_{dc}	0,572	m
Comprimento do <i>downcomer</i>	l_{dc}	0,21415	m
Comprimento dos orifícios	l_o	0,01126	m
Distância entre os orifícios (<i>pitch triangular</i>)	p_t	0,05	m
Altura de entrada e de saída de líquido	h_{in} e h_{out}	0,038	m
Número de orifícios	N_o	347	m
Comprimento da região de borbulhamento	l_{rb}	0,7847	m
Área de borbulhamento (sob a área total do prato)	$\%A_B$	76	–
Área dos orifícios (sob a área de borbulhamento)	$\%A_o$	5	–

Fonte: Elaborado pelo autor.

A fim de se buscar um melhor entendimento nos padrões de fluxo de entrada de líquido no prato, foi proposto no presente trabalho um estudo para o escoamento isotérmico (ar-água) a inclusão do *downcomer* de entrada de líquido no domínio computacional. Esta proposta teve como intuito de observar a influência da entrada de líquido próxima à região de borbulhamento. A Figura 17 apresenta os domínios computacionais utilizados na proposta. Para apresentar mais detalhes das geometrias utilizadas, foi feito um corte simétrico no domínio computacional em $x = 0$ m no plano-YZ. A origem dos domínios (representada pelo símbolo *) está situada nas coordenadas (0; 0; 0), isto é, no centro da base do prato perfurado.

Figura 17 – Domínios computacionais utilizados na simulação para o escoamento isotérmico: (a) sem o *downcomer* de entrada e (b) com o *downcomer* de entrada.



Fonte: Elaborado pelo autor.

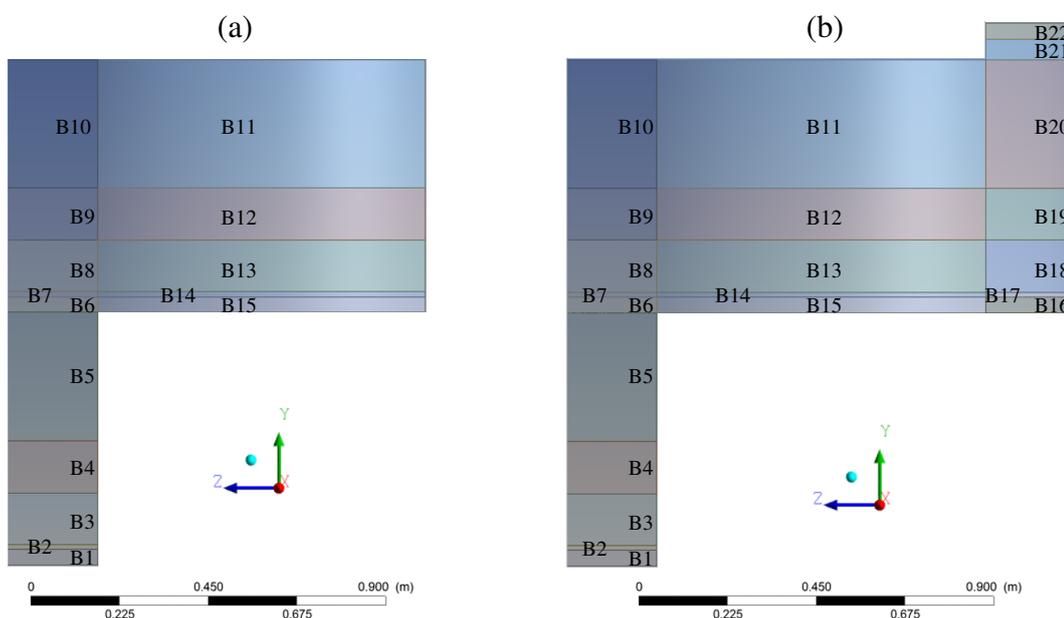
As perfurações do domínio computacional foram consideradas a forma quadrada ao invés da forma circular como utilizado por Solari e Bell (1986). Essa consideração foi feita em busca de se obter uma malha numérica com elementos que atendam a qualidade da mesma. Para garantir a mesma área de cada perfuração, igualou-se a área de um orifício circular com a área de um orifício quadrado obtendo assim, o comprimento da aresta do orifício quadrado (l_o).

É válido ressaltar, que foi considerado o domínio computacional completo na simulação do estágio. O uso da hipótese de simetria deve ser usada com cautela, pois os escoamentos multifásicos e turbulentos são naturalmente transientes e nem sempre se comportam de forma constante e simétrica em um dado domínio.

4.1.2 Malha numérica

Após definido o domínio computacional, partiu-se para a construção das malhas computacionais utilizando o *software* Meshing do pacote comercial da ANSYS, Inc. A etapa de construção da malha numérica é extremamente importante durante um experimento numérico utilizando as técnicas de CFD. A sua importância está no fato de que a qualidade da malha gerada está relacionada à estabilidade e a qualidade dos resultados que serão obtidos. A Figura 18 apresenta a estrutura dos blocos adotada para a construção da malha numérica.

Figura 18 – Estrutura dos blocos do domínio computacional para a criação da malha numérica: (a) sem o *downcomer* de entrada e (b) com o *downcomer* de entrada.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Para facilitar a construção da malha numérica, dividiu-se a geometria em diferentes blocos. Essa estratégia utilizada na divisão do domínio computacional em vários blocos consiste na necessidade de se obter uma malha com maior grau de refinamento em regiões de maior interesse. Na Figura 18, itens a e b, os blocos B1, B6, B15, B16 e B22 possuem altura de 3,8 cm, os blocos B2, B7, B14 e B17 possuem altura de 1,2 cm, os blocos B3, B4, B8, B9, B12, B13, B18 e B19 possuem altura de 12,5 cm, os blocos B10, B11 e B20 possuem altura de 31 cm e o bloco B21 altura de 5 cm. Os blocos mais próximos à base do prato perfurado receberam um maior grau de refinamento por estarem nas regiões de intenso borbulhamento e também de grande interesse de análise.

O teste de sensibilidade de malha foi realizado na geometria que não possui o *downcomer* de entrada. Esta escolha teve como intuito de caracterizar um tamanho médio dos elementos em cada bloco e não a análise do escoamento. Caracterizado assim um tamanho médio, torna-se possível otimizar regiões de interesse do domínio computacional.

Dessa maneira, as exigências de critério de qualidade de uma malha deve-se passar por dois momentos durante um estudo em CFD: na sua qualidade dos elementos da malha e no teste de sensibilidade dos resultados fornecidos pela malha construída. A Figura 19 ilustra as três malhas numéricas utilizadas neste estudo. As malhas construídas são formadas por elementos hexaédricos (sendo a maioria deles) e por elementos prismas triangulares com seus nós concidentes.

Em relação a qualidade dos elementos da malha, os critérios como *aspect ratio*, *element quality* e *skewness* devem ser atendidos no seu intervalo válido. De acordo com ANSYS, Inc. (2012b), os critérios podem ser definidos como: o *aspect ratio* é baseado em uma relação das arestas dos elementos criados, podendo assumir valores aceitáveis entre 1 até 25, onde o valor igual a 1 é considerado como ideal; o *element quality* é baseado na razão do volume para o comprimento da aresta de um dado elemento. Um valor igual a 1 deste critério indica um cubo perfeito e um valor de zero indica que o elemento possui volume igual a zero ou um volume negativo, portanto, quanto mais próximo de 1 estiver este parâmetro, maior será a qualidade do elemento; e por fim, o *skewness* determina o quão perto do ideal (equilátero ou equiângulo) uma face ou uma célula está. O termo *skewness* pode ser traduzido inglês “assimetria” e, deste modo, quanto mais próximo de zero for este valor, melhor a qualidade da face ou uma célula perfeita. A Tabela 5 apresenta as características relacionadas a qualidade das malhas utilizadas na simulação do escoamento isotérmico (água-ar).

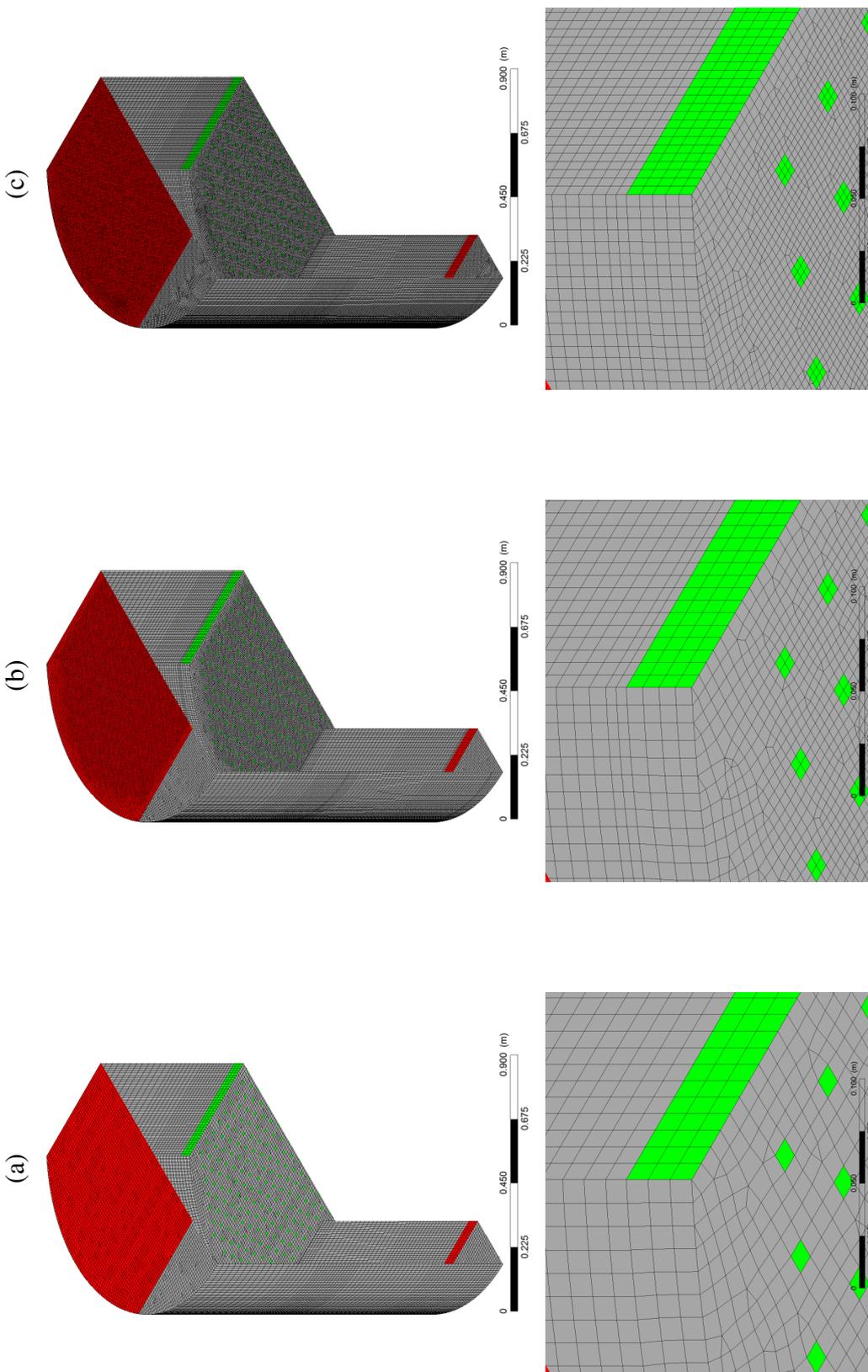
Tabela 5 – Qualidade das malhas utilizadas no teste de sensibilidade dos resultados.

Informações	Malha			
	1	2	3	
Elementos	320.487	1.370.725	3.366.553	
Nós	330.908	1.394.412	3.426.882	
Qualidade dos elementos	Intervalo de validação	Malha		
		1	2	3
<i>Aspect ratio</i>	Mínimo	1,006	1,007	1,010
	Máximo	9,722	12,258	19,050
	Médio	1,879	2,634	2,878
<i>Element quality</i>	Mínimo	0,220	0,184	0,107
	Máximo	0,999	0,999	0,999
	Médio	0,817	0,621	0,547
<i>Skewness</i>	Mínimo	$1,30 \times 10^{-9}$	$7,99 \times 10^{-9}$	$1,30 \times 10^{-10}$
	Máximo	$5,89 \times 10^{-1}$	$5,37 \times 10^{-1}$	$6,45 \times 10^{-1}$
	Médio	$7,61 \times 10^{-2}$	$5,20 \times 10^{-2}$	$3,90 \times 10^{-2}$

Fonte: Elaborado pelo autor.

De acordo com a Tabela 5, fica evidente o aumento de elementos e de nós das malhas. Se compararmos a proporção da quantidade de elementos, da malha 1 para a malha 2 houve um aumento de 4,35 vezes e da malha de 1 para a malha 3 houve um aumento de 10,69 vezes.

Figura 19 – Malhas utilizadas no teste de sensibilidade para o escoamento isotérmico: (a) malha 1, (b) malha 2 e (c) malha 3.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Esse aumento foi devido ao fator de refinamento do método utilizado GCI para determinar a incerteza da malha. Ainda na Tabela 5, foi possível observar um decaimento dos aspectos de qualidade da malha de acordo com aumento do refino das malhas. Como apresentado na Figura 18, os blocos B10, B11 e B20 estão situados em uma região que há somente a fase gasosa e por isso o número de camadas de elementos foi menor, proporcionando elementos mais “finos”.

No que se refere ao teste de sensibilidade dos resultados de uma malha, foi utilizado o método GCI (do inglês *Grid Convergence Index*) proposto por Roache (1994). Este método consiste na análise de duas ou mais malhas, geralmente utilizam-se três malhas, obedecendo um critério para o grau refino dos elementos entre as malhas, quantificando sua incerteza numérica. Uma das maiores vantagens deste método é que ele permite que o usuário possa quantificar a incerteza numérica em um volume, em um plano e/ou em um ponto no domínio computacional, verificando assim, regiões na qual há ou não a necessidade mais refino da malha. Este método pode ser visto com mais detalhes em NASA (2008) e Celik et al. (2008).

A metodologia GCI é baseada na teoria generalizada da extrapolação de Richardson, que envolve a comparação entre a solução discreta em dois espaçamentos diferentes de malha numérica. No Anexo A é apresentado com mais detalhes o procedimento GCI.

De acordo com o procedimento GCI, para determinar a razão de refinamento (r) é preciso definir um tamanho representativo dos elementos (h) em cada malha. Portanto, para se obter essas razões de refinamento recorre-se a equação a seguir:

$$r = \frac{h_{grosseira}}{h_{refinada}} \quad (4.1)$$

Como a simulação do presente trabalho é tridimensional, uma estimativa para calcular um tamanho representativo dos elementos pode é calculado como:

$$h = \left[\frac{1}{N_T} \sum_{i=1}^N (\Delta V_i) \right]^{1/3} \quad (4.2)$$

onde N_T e ΔV_i representam o número total de elementos e a somatória de cada volume i dos elementos da malha, respectivamente.

No presente estudo, foi utilizado um fator de segurança ($F_{sec} = 1,25$). De acordo com NASA (2008), este valor de 1,25 é um valor muito seguro e de grande confiabilidade quando se analisa 3 ou mais malhas. Na Tabela 6 são apresentadas as informações para o cálculo do procedimento GCI para as malhas três malhas construídas.

De acordo com os dados da Tabela 6, as razões refinamento das malhas foram acima de 1,3 conforme sugerido por Celik et al. (2008).

Tabela 6 – Informações das malhas numéricas para o procedimento GCI.

Malhas	Malha 1	Malha 2	Malha 3
h (mm)	13,01	8,01	5,94
r	1,62	1,35	

Fonte: Elaborado pelo autor.

4.1.3 Configurações das simulações

Nesta etapa, o *software* CFX-Pre do pacote comercial da ANSYS, Inc. foi utilizado para detalhar e especificar as condições envolvidas na simulação de interesse, isto é, informar o regime de trabalho (transiente ou estacionário), os fluidos e/ou sólidos envolvidos, as condições de contorno e de inicialização da simulação, modelos matemáticos, esquemas de interpolação, critérios de convergência, entre outras opções. É importante ressaltar, que foram avaliados dois sistemas, um isotérmico (água-ar) e outro não isotérmico (etanol-água). O primeiro foi utilizado para validar a hidrodinâmica do prato perfurado com os dados do trabalho experimental de [Solari e Bell \(1986\)](#) e o segundo para simular e avaliar a transferência de energia e das espécies químicas, calculando-se assim a eficiência de separação do etanol líquido para fase vapor.

4.1.3.1 Sistema isotérmico (água-ar)

No sistema isotérmico (água-ar), as simulações foram separadas em dois conjuntos: no primeiro grupo foram realizadas três simulações, com o intuito de estimar a incerteza numérica das malhas, definindo assim um tamanho representativo dos elementos; e no segundo grupo foram realizadas duas simulações, com o intuito de observar a influência do *downcomer* de entrada de líquido e validar os campos de velocidade de líquido e os parâmetros hidráulicos do prato perfurado com trabalho experimental de [Solari e Bell \(1986\)](#) e outras correlações já difundidas na literatura.

O detalhamento das configurações das simulações do escoamento isotérmico, tais como: as configurações dos modelos; as condições de contorno e de inicialização do domínio, as condições operacionais e as propriedades físicas dos fluidos; e outras configurações adicionais do “*setup*” das simulações, foram divididas em tópicos e serão apresentadas a seguir para uma melhor organização do presente trabalho.

- **Configurações dos modelos:**

As principais características e configurações da modelagem matemática do escoamento isotérmico (água-ar) para os dois conjuntos citado acima, são apresentados na Tabela 7. A dimensão do domínio computacional, a abordagem multifásica, o modelo multifásico e interfacial, a morfologia dos fluidos e os modelos de turbulência foram especificadas as mesmas opções para ambos os conjuntos de simulações. Para o teste de sensibilidade das malhas, as simulações foram conduzidas em estado estacionário e consumindo 7.500 iterações.

Tabela 7 – Características e configurações das simulações utilizadas para o escoamento isotérmico (água-ar).

Modelagem matemática		Teste de sensibilidade da malha	Validação da modelagem matemática
Dimensão do domínio		Tridimensional	
Estado		Estacionário	Estacionário Transiente
Tempo de simulação		7.500 iterações	7.500 iterações 25 s
Passo de tempo (<i>timestep</i>)		–	0.0005 s
Abordagem multifásica		Euleriana-Euleriana	
Modelo multifásico		Heterogêneo	
Modelo interfacial		<i>Particle model</i>	
Morfologia dos fluidos	Fase líquida	Contínua (água)	
	Fase gasosa	Dispersa (ar)	
Modelos de turbulência	Fase líquida	<i>Shear Stress Transport (SST)</i>	
	Fase gasosa	Laminar	

Fonte: Elaborado pelo autor.

Já para a validação do modelo matemático, as simulações ocorreram em duas etapas: na primeira etapa, as simulações (sem e com a inclusão do *downcomer* de entrada) foram conduzidas em estado estacionário, atingindo um estado “quasi-estacionário” consumindo também 7.500 iterações; na segunda etapa, foram utilizados os resultados da primeira etapa como chute inicial para as simulações transientes, na qual o tempo de escoamento das simulações foi de 25 s.

• Condições de contorno e de inicialização do domínio:

As condições de contorno e de inicialização são fundamentais para o fechamento do modelo e permitem a resolução das equações numéricas envolvidas nas simulações. 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 (2D) como entrada (*inlet*), saída (*outlet*) e parede (*wall*). A Figura 20 ilustra as condições de contorno utilizadas nas simulações para o teste de independência da malha e para a validação da modelagem matemática.

Entrada de líquido: na região de entrada de líquido, adotou-se um perfil de velocidade uniforme, ao qual o cálculo de velocidade de líquido nesse contorno é expressa abaixo:

$$v_{\alpha,z} = \frac{Q_{\alpha}}{A_{in}} \quad (4.3)$$

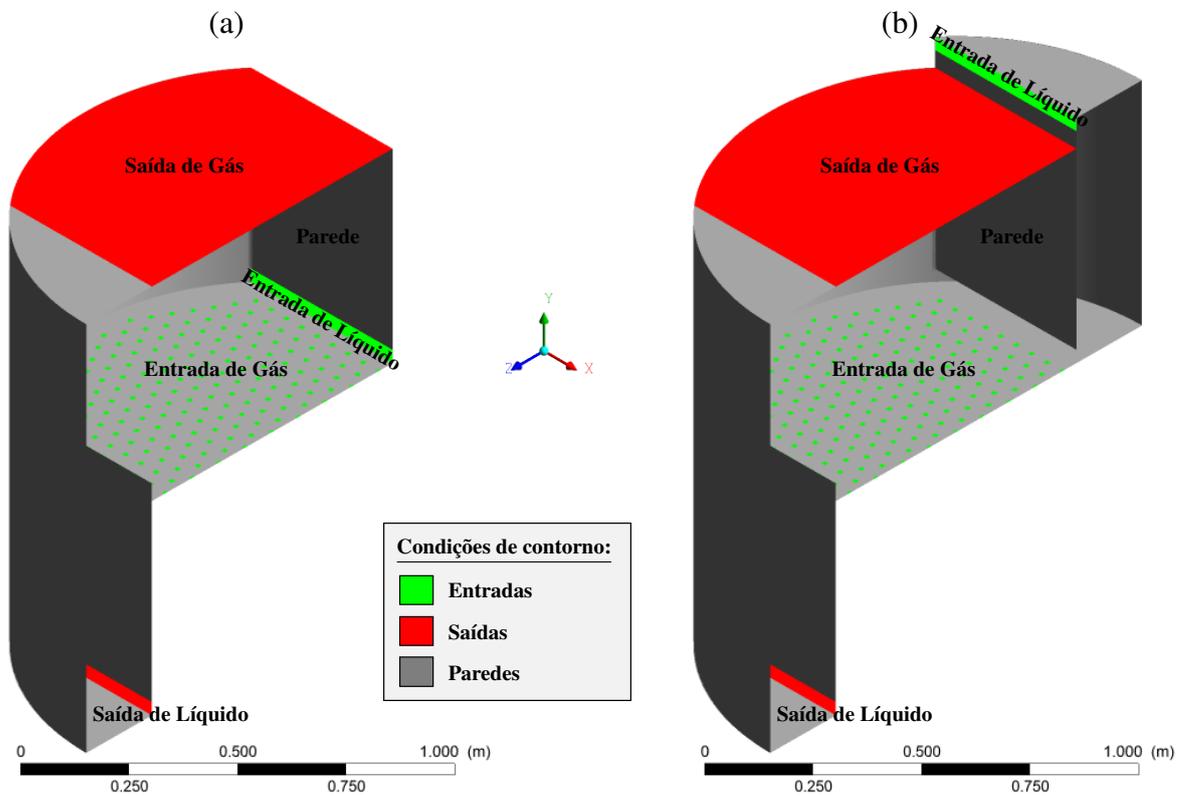
onde $v_{\alpha,z}$ é a velocidade de líquido na direção z do domínio computacional, Q_{α} é a vazão volumétrica de líquido e A_{in} é a área da região de entrada na da fase líquida no prato perfurado. Essa área pode ser calculada como:

$$A_{in} = h_{in}l_w \quad (4.4)$$

onde h_{in} é a altura de entrada região de líquido e l_w é o comprimento da represa do prato perfurado.

Considerou-se que apenas o líquido entra na região de entrada de líquido, isto é, a fração volumétrica de líquido tem valor unitário ($f_{\alpha,in} = 1$), pois a quantidade arrastada da fase gasosa foi considerada desprezível.

Figura 20 – Regiões demarcadas na aplicação das condições de contorno adotadas para a simulação do escoamento isotérmico: (a) sem o *downcomer* de entrada e (b) com o *downcomer* de entrada.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Entrada de gás: nas regiões de entrada de gás consideraram-se que a vazão mássica de gás é a mesma em cada um dos orifícios. Sendo assim, a velocidade de gás na entrada dos orifícios pode ser calculada como:

$$v_{\beta,y} = \frac{U_s A_B}{N_o A_{o,i}} \quad (4.5)$$

onde $v_{\beta,z}$ é a velocidade de gás que atravessa os orifícios na direção y do domínio computacional, U_s é a velocidade superficial do gás, A_B é a área de borbulhamento do prato perfurado, N_o é o

número total de orifícios e $A_{o,i}$ é a área de um orifício. Como o orifício do domínio computacional construído tem a forma geométrica quadrada, a sua área pode ser calculada da seguinte maneira:

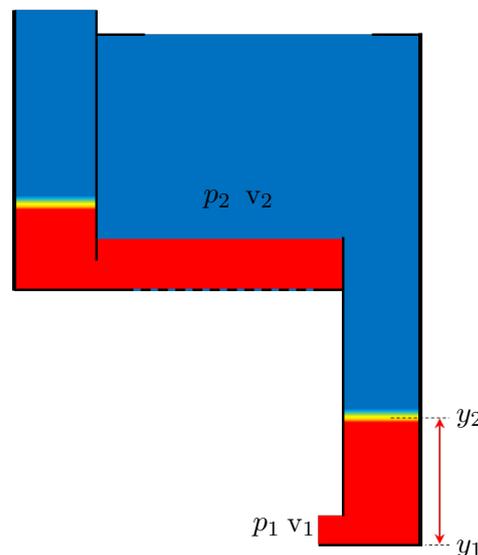
$$A_{o,i} = (l_o)^2 \quad (4.6)$$

onde l_o representa o comprimento da aresta do orifício.

Analogamente à consideração feita na entrada de líquido, apenas o gás entra pelos orifícios, pois a quantidade de líquido arrastado foi desprezada por ser muito baixa, portanto, a fração volumétrica de gás tem-se valor unitário ($f_{\beta,in} = 1$).

Saída de líquido: na região de saída de líquido adotou-se uma condição de pressão. A ideia dessa condição de pressão teve o intuito de simular uma resistência na saída de líquido, que na realidade existe devido ao prato inferior, ao qual não consta no modelo proposto. Dessa maneira, a resistência implica no surgimento de uma coluna de acúmulo de líquido na saída do *downcomer* (as cotas $y_1 - y_2$), sendo que neste estudo adotou-se uma altura de coluna de líquido acumulado de 50% da altura do *downcomer*. A Figura 21 indica as posições de referências (índices “1” e “2”) utilizadas no procedimento do cálculo da pressão.

Figura 21 – Localização dos pontos de referência para o cálculo da condição de contorno na saída de líquido.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Para especificar pressão de saída (p_1), recorreu-se a equação de Bernoulli (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2004),

$$\frac{p_1}{\gamma_\alpha} + \frac{v_1^2}{2g} + y_1 = \frac{p_2}{\gamma_\alpha} + \frac{v_2^2}{2g} + y_2 \quad (4.7)$$

onde p_1 , p_2 , v_1 , v_2 , y_1 e y_2 representam as pressões, as velocidades e as posições (cotas) de referência 1 e 2, respectivamente. O γ_α é o peso específico do líquido e ele pode ser definido como o produto entre a massa específica do fluido na fase líquida e a gravidade, portanto:

$$\gamma_\alpha = \rho_\alpha g \quad (4.8)$$

Realizando-se considerações na Equação 4.7, tais como, a superfície do líquido estagnada ($v_2 = 0$) e $p_2 = p_{\text{ref}}$, e substituindo as considerações feitas e manuseando algebricamente a equação, temos:

$$p_1 = p_{\text{ref}} + \rho_\alpha g \left[\frac{v_2^2}{2g} + (y_2 - y_1) \right] \quad (4.9)$$

É válido ressaltar que p_1 fornecerá o valor da pressão absoluta, e não a pressão relativa.

Saída de gás: na região de saída de gás, também utilizou-se uma condição de pressão, especificando-se uma pressão relativa igual a zero, ou seja, uma pressão absoluta de 1 atm ($p_{\text{ref}} = 0$ atm), devido à condição de operação proposta no presente estudo.

Paredes: nas regiões de parede, utilizou-se a condição de não deslizamento na parede (*no slip wall*) para as duas fases.

Inicialização: a condição de inicialização utilizada nas simulações do prato perfurado consistiu no domínio computacional contendo somente a fase gasosa, ou seja, considerou-se a fração volumétrica de gás igual a 1 e a fração volumétrica de líquido igual a zero, permitindo observar o fenômeno de enchimento de líquido no prato perfurado.

• **Condições operacionais e propriedades físicas dos fluidos:**

Além das condições apresentadas anteriormente, as Tabelas 8 e 9 apresentam condições operacionais e a propriedades físicas das fases líquida (água) e gasosa (ar) utilizadas nas simulações do prato.

Tabela 8 – Condições operacionais utilizadas na simulação do escoamento isotérmico.

Simulação	Condições operacionais	
	Q_α [m ³ .s ⁻¹]	F_s [m.s ⁻¹ (kg.m ⁻³) ^{0,5}]
Caso 1	$6,94 \times 10^{-3}$	1,015

Fonte: Elaborado pelo autor.

As velocidades de entrada de líquido e de gás são normais e constantes nas fronteiras do domínio e impôs-se uma pressão estática de 101.325 Pa (1 atm). As demais propriedades foram calculadas em função da entrada e da saída dos fluidos. As condições operacionais e as

propriedades físicas foram as mesmas tanto para a simulação de teste de independência da malha quanto para a simulação de validação do modelagem proposta.

Tabela 9 – Propriedades físicas da água e do ar utilizadas na simulação do escoamento isotérmico.

Fase	Espécie	Temperatura [°C]	Densidade [kg.m ⁻³]	Viscosidade dinâmica [Pa.s]
Líquida (α)	Água	25	997,00	$8,899 \times 10^{-4}$
Gasosa (β)	Ar		1,185	$1,831 \times 10^{-5}$

Fonte: Elaborado pelo autor.

As propriedades físicas da água e do ar utilizadas nas simulações foram retiradas do banco de dados do *software* CFX-Pre 14.5.

- **Configurações adicionais:**

Configurações adicionais foram incluídas no *software* CFX-Pre, tais como, os esquemas de interpolação, os critérios de convergência e entre outras informações necessárias. Essas informações adicionais são apresentadas abaixo na Tabela 10. Para as equações de conservação de continuidade e de quantidade de movimento e de turbulência, o esquema de interpolação *Upwind* foi empregado para os termos advectivos e para os termos transientes foi utilizado o esquema *First order backward Euler*. É importante lembrar que para as simulações realizadas em estado estacionário, o esquema de interpolação para o termo transiente é desconsiderado.

Tabela 10 – Configurações adicionais utilizadas nas simulações do escoamento isotérmico.

Configurações adicionais	Teste de malha	Validação do modelo
Esquemas de interpolação	Termos advectivos	<i>Upwind</i>
	Turbulência	<i>First order</i>
	Termos transientes	– <i>First order backward Euler</i>
Controle de convergência	Mínimo de iterações	– 1
	Máximo de iterações	– 25
Critério de convergência	RMS (<i>Root Mean Square</i>)	10^{-4}
Número de Courant	Médio	– 0,1
	Máximo	– 1,6

Fonte: Elaborado pelo autor.

Em relação a convergência das simulações, a quantidade máxima de iterações utilizada nas simulações transientes foi 25, ou seja, se os resíduos das propriedades calculadas na primeira iteração em um determinado passo de tempo não for menor que o critério de convergência utilizado neste caso 10^{-4} será seguido para a segunda iteração. Se for atingido o valor máximo de iterações e a simulação não estiver com os resíduos abaixo do critério adotado, passa-se para o próximo passo de tempo. Analisando ainda a Tabela 10, o número de Courant é um número

adimensional que relaciona a distância percorrida por um fluido em um passo de tempo pelo tamanho local dos volumes da malha, deste modo, esse adimensional pode ser expresso como:

$$Co = \frac{|v| \Delta t}{\Delta x} \quad (4.10)$$

onde $|v|$ é o módulo da magnitude de velocidade local, Δt é o passo de tempo e Δx é o tamanho (distância) local dos volumes finitos da malha. Segundo Fortuna (2000), deve-se utilizar um passo de tempo que assegura um número de Courant menor que 1 ($Co < 1$).

Em relação à natureza da solução, o *software* CFX-Pre 14.5 utiliza o método de solução acoplado, sendo todas as equações resolvidas simultaneamente como um sistema único. Por fim, em todas as simulações realizadas foram adotadas a dupla precisão (*double precision*), isto é, garantindo maior precisão numérica nas operações matemáticas realizadas na etapa de processamento (*solver*).

4.1.3.2 Sistema não isotérmico (etanol-água)

No sistema não isotérmico (etanol-água), foram realizadas quatro simulações, variando-se a vazão de entrada de vapor no estágio perfurado. A variação no fluxo de vapor teve como o intuito principal, avaliar influência da velocidade de entrada de vapor em função do grau de separação dos componentes, isto é, o quanto de etanol na fase líquida é transferida para a fase vapor.

O domínio computacional utilizado para os fenômenos de transferência entre as espécies químicas foi baseado no trabalho experimental de Solari e Bell (1986) com a adição do *downcomer* de entrada de líquido no prato perfurado (vide Figura 17b). A malha numérica utilizada no escoamento não isotérmico foi a malha 2, a qual apresentou um melhor desempenho numérico de acordo com resultados obtidos pelo procedimento GCI.

Análogo ao detalhamento das configurações das simulações do escoamento isotérmico, as configurações do escoamento não isotérmico, tais como: as configurações dos modelos; as condições de contorno e de inicialização do domínio, as condições operacionais e as propriedades físicas dos fluidos; e outras configurações adicionais do “*setup*” das simulações, foram divididos em tópicos e serão apresentados a seguir para uma melhor organização do presente trabalho.

- **Configurações dos modelos:**

As principais características e configurações da modelagem matemática do escoamento não isotérmico (etanol-água) para as simulações apresentadas anteriormente, são apresentados na Tabela 11. A dimensão do domínio computacional, a abordagem multifásica, o modelo multifásico e interfacial, a morfologia dos fluidos e outras configurações foram especificadas as mesmas opções para ambas as simulações.

Tabela 11 – Características e configurações das simulações utilizadas para o escoamento não isotérmico (etanol-água).

Modelagem matemática	Estacionário			Transiente
	1 FT	2 FTs	3 FTs	3 FTs
Dimensão do domínio	Tridimensional			
Tempo de simulação	15.000 iterações			10 s
Passo de tempo (timestep)	-	-	-	0,0005 s
Abordagem multifásica	Euleriana-Euleriana			
Modelo multifásico	Heterogêneo			
Modelo interfacial	<i>Particle model</i>			
Transferência entre as fases	QM	Krishna et al. (Eq. 3.44)		
	E	-	Ranz-Marshall (Eq. 3.60)	
	EsQ	-	Teoria de Higbie (Eq. 3.101)	
Morfologia dos fluidos	Fase líquida	Contínua (mistura etanol-água)		
	Fase vapor	Dispersa (mistura etanol-água)		
Modelo de turbulência	Fase líquida	<i>Shear Stress Transport (SST)</i>		
	Fase vapor	Laminar		

Fonte: Elaborado pelo autor.

A fim de se obter uma melhor convergência das simulações envolvendo os três fenômenos de transporte (FT), adotou-se por uma estratégia similar ao trabalho de [Noriler \(2007\)](#), ou seja, iniciar as simulações resolvendo apenas as equações de conservação de quantidade de movimento (QM) e turbulência. Após as propriedades se estabilizarem em um certo passo de tempo, adiciona-se as equações de conservação de energia (E). Por fim, estabilizadas as equações citadas anteriormente, liga-se as equações de conservação de espécies químicas (EsQ). Essa metodologia citada pelo autor foi de grande importância para se obter uma ótima convergência numérica.

A estratégia adotada no escoamento não isotérmico percorreu quatro passos, onde nos três primeiros passos as simulações foram realizadas em estado estacionário, dispondo-se de um total de 15.000 iterações (5.000 por etapa) e no quarto passo, as simulações foram realizadas em estado transiente, simulando 10 s de escoamento. Detalhando o procedimento de simulação realizada, no primeiro passo, as simulações foram realizadas resolvendo apenas as equações de conservação de quantidade de movimento e de turbulência, na qual a variável altura de líquido claro foi utilizada como critério de estabilização do escoamento. No segundo passo, usou-se os resultados da etapa anterior como chute inicial, adicionando as equações de conservação de energia na modelagem. Desta maneira, a fim de observar a estabilização dos campos de temperatura no escoamento, foram monitoradas 3 regiões (plano-ZX em $x = 0,038$ m e as saídas de líquido e de vapor) do domínio computacional. No terceiro passo, análogo ao segundo passo, utilizou-se os resultados obtidos anteriormente e adicionou-se as equações de conservação de espécies químicas, utilizando um valor constante para a constante termodinâmica (K^c). A fim de observar a estabilização do escoamento, foram monitoradas 2 regiões (as saídas de líquido

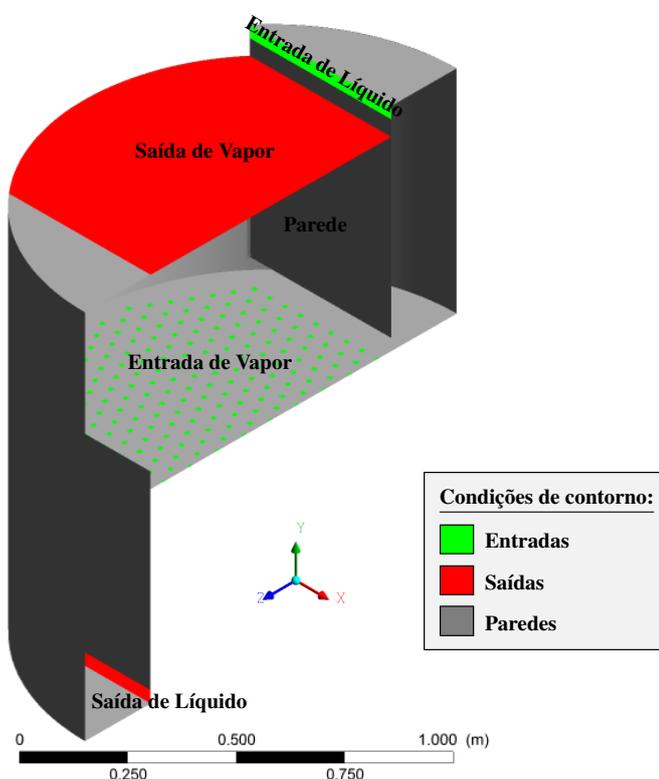
e de vapor). Por fim, o quarto passo da estratégia foi similar ao terceiro passo e consistiu em uma simulação em estado transiente e implementando o procedimento $\gamma - \phi$ para a constante termodinâmica.

Ainda na Tabela 11, os materiais criados para representar as fases líquida e vapor consistem nas substâncias (ou espécies) puras de etanol e água, ou seja, mistura de composição variável. As propriedades físicas dos materiais, em mistura e em substância pura, serão apresentados mais a frente na Tabela 13.

- **Condições de contorno e de inicialização do domínio:**

Análogo às condições de contorno e de inicialização apresentadas na seção 4.1.3.1, será detalhado a seguir apenas as informações adicionais, ou seja, as equações para se determinar as velocidade de líquido e de vapor na entrada e a pressão na saída de líquido no prato perfurado foram as mesmas. É válido ressaltar, que nas simulações realizadas para o escoamento não isotérmico foi utilizado o domínio computacional com o *downcomer* de entrada. Deste modo, a Figura 22 ilustra as condições contorno utilizadas nas simulações.

Figura 22 – Regiões demarcadas na aplicação das condições de contorno adotadas para a simulação do escoamento não isotérmico.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Entrada de líquido: na região de entrada de líquido, adotou-se um perfil de velocidade uniforme. Considerou-se que apenas o líquido entra na região de entrada de líquido, isto é, a fração

volumétrica de líquido tem valor unitário ($f_{\alpha,in} = 1$), pois a quantidade arrastada da fase vapor foi considerada desprezível. Adicionalmente para a mistura líquida etanol-água, especificou-se a fração mássica de etanol na entrada de líquido sendo igual a 0,54023. Neste contorno, a temperatura da fase líquida adotada foi 81,65°C.

Entrada de vapor: nas regiões de entrada de vapor consideraram-se que a vazão mássica de vapor é a mesma em cada um dos orifícios. Analogamente à consideração feita na entrada de líquido, apenas o vapor entra pelos orifícios, pois a quantidade de líquido arrastado foi desprezada por ser muito baixa, portanto, a fração volumétrica de vapor tem-se valor unitário ($f_{\beta,in} = 1$). Adicionalmente para a mistura de vapor etanol-água, especificou-se a fração mássica de etanol na entrada de vapor sendo igual a 0,73305. Neste contorno, a temperatura da fase vapor adotada foi 83,75°C.

Saída de líquido: na região de saída de líquido adotou-se uma condição de pressão. Para o cálculo dessa pressão foi utilizada Equação 4.9, conforme apresentado na seção anterior.

Saída de vapor: na região de saída de gás, também utilizou-se uma condição de pressão, especificando-se uma pressão relativa igual a zero, ou seja, uma pressão absoluta de 1 atm ($p_{ref} = 0$ atm), devido à condição de operação proposta no presente estudo.

Paredes: para as simulações que envolvem transferência de energia, considerou as regiões de paredes como adiabática, isto é, o prato não troca calor em suas vizinhanças.

- **Condições operacionais e propriedades físicas dos fluidos:**

Além das condições apresentadas anteriormente, as Tabelas 12, 13 e 14 apresentam condições operacionais e as propriedades físicas das misturas e das substâncias puras nas fases líquida e vapor, respectivamente, utilizadas nas simulações do prato perfurado.

Tabela 12 – Condições operacionais utilizadas na simulação do escoamento não isotérmico.

Simulações	Condições					
	Q_{α} [m ³ .s ⁻¹]	F_s [m.s ⁻¹ (kg.m ⁻³) ^{0,5}]	Temperatura na entrada, T_{in} [°C]		Fração mássica de etanol, X_A	
			Líquido	Vapor	Líquido	Vapor
Caso 1		0,462				
Caso 2	6,94 × 10 ⁻³	0,801	81,65	83,75	0,73305	0,54023
Caso 3		1,015				
Caso 4		1,464				

Fonte: Elaborado pelo autor.

As velocidades de entrada de líquido e de vapor são normais e constantes nas fronteiras do domínio e impôs-se uma pressão estática de 101.325 Pa (1 atm). As demais propriedades foram calculadas em função da entrada e da saída dos fluidos. As propriedades físicas foram as mesmas para todos os casos apresentados acima, na qual só foram alteradas as vazões de vapor na entrada do prato perfurado.

Tabela 13 – Propriedades físicas de mistura das fases líquida e vapor utilizadas na simulação do escoamento não isotérmico.

Propriedades físicas	Mistura	
	Fase líquida	Fase vapor
Capacidade calorífica, C_p [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]	3.320,902	1.702,546
Condutividade térmica, λ [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	0,293413	0,020773
Difusividade, D_{AB} [m ² .s ⁻¹]	$5,58306 \times 10^{-9}$	$1,57389 \times 10^{-5}$
Massa específica, ρ [kg.m ⁻³]	793,341	1,4609
Tensão superficial, σ [N.m ⁻¹]	0,027599	
Viscosidade dinâmica, μ [Pa.s]	$3,9027 \times 10^{-4}$	$1,0738 \times 10^{-5}$

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 14 – Propriedades físicas das espécies puras para as fases líquida e vapor calculadas à 82,7 °C utilizadas na simulação do escoamento não isotérmico.

Propriedades físicas	Fase líquida		Fase vapor	
	Etanol	Água	Etanol	Água
Capacidade calorífica, C_p [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]	2.998,661	4.212,895	1.620,083	1.889,850
Condutividade térmica, λ [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	0,154048	0,679190	0,020046	0,022425
Massa específica, ρ [kg.m ⁻³]	730,410	967,541	1,9593	0,3290
Viscosidade dinâmica, μ [Pa.s]	$4,0424 \times 10^{-4}$	$3,5160 \times 10^{-4}$	$1,0425 \times 10^{-5}$	$1,1448 \times 10^{-5}$

Fonte: Elaborado pelo autor.

As propriedades físicas de mistura e das espécies químicas puras das fases envolvidas foram calculadas a uma temperatura de 82,7°C e 1 atm de pressão. As equações e as correlações utilizadas para o cálculo das propriedades das substâncias apresentadas anteriormente foram retiradas de [CHERIC \(1995\)](#) e [Poling, Prausnitz e O'connell \(2000\)](#) e podem ser visualizadas nos Anexos [B](#) e [C](#).

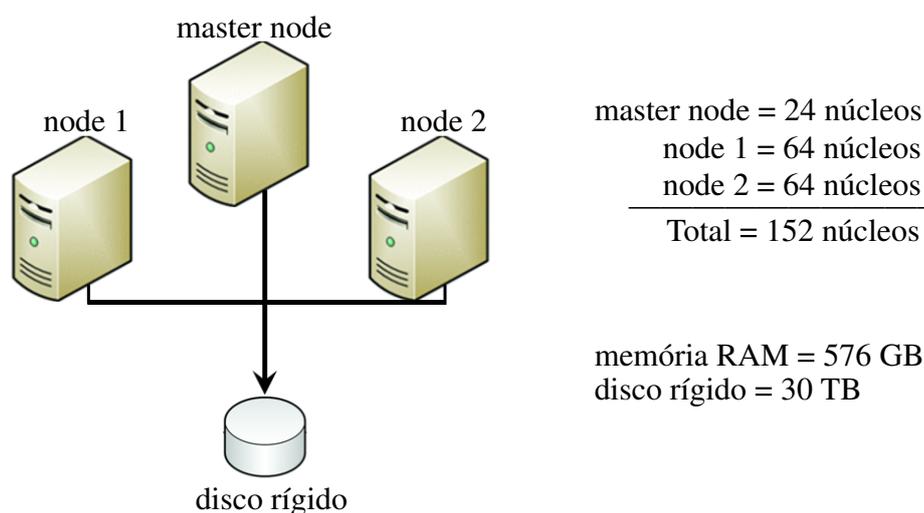
As configurações adicionais aplicadas para o escoamento não isotérmico foram as mesmas adotadas para o isotérmico (ver Tabela [10](#)).

Com o término da etapa de pré-processamento, passou-se para a etapa de processamento das simulações, isto é, etapa de aplicação dos métodos numéricos envolvidos para a resolução das equações de transporte dos fenômenos modelados.

4.2 Processamento dos modelos

Para a realização dos experimentos numéricos, dispôs-se de um cluster computacional (Figura 23) pertencente ao Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos (DEQ/UFSCar).

Figura 23 – Estrutura do cluster computacional do DEQ/UFSCar.



Fonte: Elaborado pelo autor.

O *cluster* utilizado possui o sistema operacional SUSE Linux, constituído de processadores AMD Opteron™ 6234 com frequência 2.261 MHz. O *software* CFX-Solver Manager do pacote comercial da ANSYS, Inc. foi utilizado para a resolução das equações.

O tempo computacional registrado nas simulações para cada caso variou de acordo a modelagem matemática utilizada:

- Teste de independência de malha: de 3 a 9 dias;
- escoamento isotérmico: de 33 a 35;
- escoamento não isotérmico: de 23 a 26 dias.

De acordo com as informações obtidas acima, fica evidente a necessidade de grandes recursos de *hardware* para simular casos que envolvem escoamento multifásico e multicomponente em pratos perfurados de destilação.

4.3 Pós-processamento dos modelos

Após a etapa de processamento das simulações, realizou-se a visualização dos resultados obtidos através do *software* CFX-Post do pacote comercial da ANSYS, Inc. Com o propósito de qualificar e quantificar os resultados obtidos, realizou-se diversas análises, como citado acima. Deste modo, essas análises serão descritas nos tópicos abaixo.

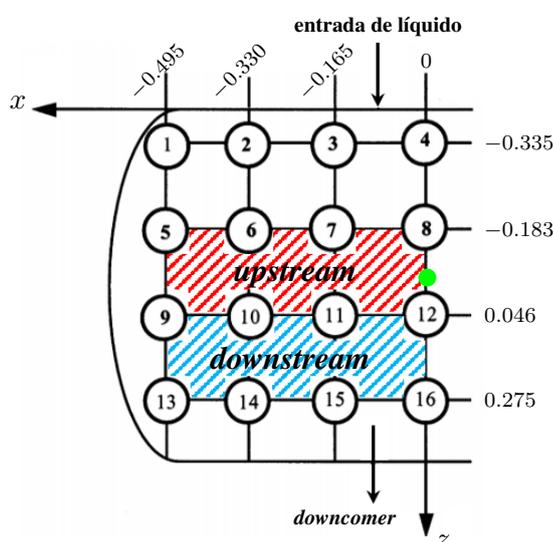
4.3.1 Análise GCI

Como já comentado anteriormente, foi utilizada a metodologia GCI para o teste de malha, onde foram tomadas como referência a altura de líquido claro (h_{cl}). A região de coleta de dados da altura de líquido claro está localizada na região de borbulhamento, isto é, um sensor situado próximo à base do prato, na coordenada (0; 0, 005; 0), e o outro acima da região de espuma do prato perfurado, na coordenada (0; 0, 3; 0). Deste modo, realizou-se uma média dessas propriedades para as últimas 3.500 iterações. Os resultados dessa análise serão apresentados mais adiante na seção 5.1.

4.3.2 Validação da modelagem matemática

Visando verificar e validar a modelagem matemática do escoamento isotérmico (água-ar), buscou-se alcançar a adequação dos perfis de velocidade de líquido obtido das simulações com os dados experimentais de Solari e Bell (1986). Os autores dividiram o prato em duas regiões: *upstream* e *downstream* e instalaram 25 sensores que, a partir de técnicas de fluorimetria, foi possível a obtenção das velocidades de líquido sobre o prato. Esses sensores foram dispostos como mostra a Figura 24, onde estão localizados a uma altura de 0,038 m acima da base do prato perfurado.

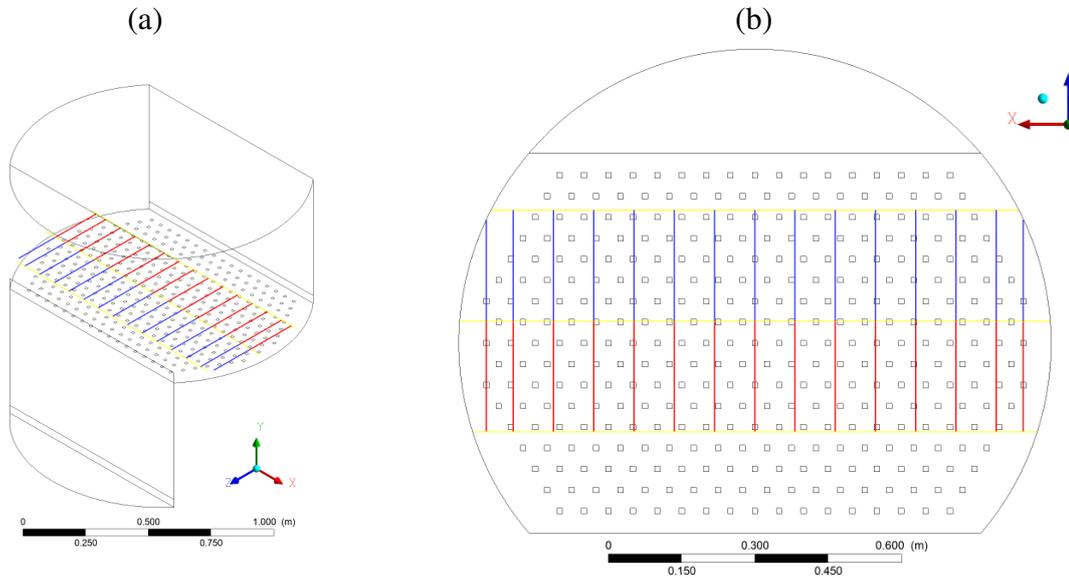
Figura 24 – Layout dos sensores e as regiões *upstream* e *downstream* do trabalho experimental de Solari e Bell (1986).



Fonte: Elaborado pelo autor.

A região *upstream* está situada entre os sensores de 5 a 8 e 9 a 12 e a região *downstream* entre os sensores de 9 a 12 e 13 a 16. Desta maneira, como critério de comparação dos resultados, foram construídas 30 linhas de medição para a análise das velocidades, especificamente, a componente w de velocidade de líquido (velocidade de líquido na direção z do escoamento). A Figura 25 ilustra as linhas de medição de velocidades utilizadas nas simulações.

Figura 25 – Linhas utilizadas na análise da componente w de velocidade de líquido nas regiões *upstream* e *downstream* do prato perfurado.



Fonte: Elaborado pelo autor.

O intervalo de tempo selecionado para determinar o valor médio da propriedade foi de 0 a 25 segundos para cada linha das regiões. Cada linha possui um comprimento de 22,9 cm e foi dividida em 100 pontos, onde cada ponto possui uma distância de 2,29 mm entre eles.

Solari e Bell (1986) determinaram a velocidade de líquido pela relação entre a distância entre os sensores e o tempo gasto no percurso. Deste modo, optou-se por avaliar a componente w de velocidade de líquido no prato em cada linha de cada região demarcada.

Afim de se determinar os erros envolvidos entre as simulações e os dados experimentais, foi adotada a equação abaixo:

$$E(\%) = 100 \times \left| \frac{\phi_{\text{sim}} - \phi_{\text{exp}}}{\phi_{\text{exp}}} \right| \quad (4.11)$$

onde ϕ_{sim} e ϕ_{exp} são as propriedades obtidas da simulação e do experimental, respectivamente.

Complementando a verificação e validação do escoamento isotérmico, avaliou-se também um importante parâmetro hidráulico utilizado em estágios de destilação: a altura de líquido claro (h_{cl}). Dessa maneira, um dos procedimentos de cálculo utilizado neste estudo foi através da Equação 4.12, proposta pelo autor.

$$h_{cl} = \frac{P_1 - P_2 + U_s \rho_\beta (v_{\beta,y} - U_s)}{\rho_\alpha g} \quad (4.12)$$

onde P_1 e P_2 são as tomadas de pressão nos pontos 1 e 2, situados na região de borbulhamento do prato, conforme comentado acima na seção 4.3.1.

Para a verificação e validação do parâmetro hidráulico (h_{cl}), foram utilizadas diversas correlações apresentadas na literatura, com o intuito de comparação. Assim, segue abaixo as correlações:

- Hofhuis e Zuiderweg (1979):

$$h_{cl} = 0,6 \left(\frac{Q_\alpha}{U_s l_w} \sqrt{\frac{\rho_\alpha}{\rho_\beta}} \right)^{1/4} (h_w)^{1/2} (p_t)^{1/4} \quad (4.13)$$

para

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

- Colwell (1981):

$$h_{cl} = \bar{f}_\alpha^C h_w + 7,8 \left[(\bar{f}_\alpha^C)^{1/2} \frac{Q_\alpha}{C_d l_w} \right]^{2/3} \quad (4.14)$$

para

$$C_d = 0,61 + 0,08 \frac{h_{cf}}{h_w}, \quad \text{se } \frac{h_{cf}}{h_w} \leq 8,315$$

$$C_d = 1,06 \left(1 + \frac{h_{cf}}{h_w} \right), \quad \text{se } \frac{h_{cf}}{h_w} > 8,315$$

onde C_d é o coeficiente de represa e h_{cf} é a altura de dispersão acima da represa.

- Bennett, Agrawal e Cook (1983):

$$h_{cl} = \bar{f}_\alpha^B \left[h_w + C \left(\frac{Q_\alpha}{l_w \bar{f}_\alpha^B} \right)^{2/3} \right] \quad (4.15)$$

para

$$C = 0,0327 + 0,0286 \exp(-137,8 h_w) \quad (4.16)$$

onde Q_α está em $[\text{m}^3 \cdot \text{min}^{-1}]$.

- Solari e Bell (1986):

$$h_{cl} = 0,014 + 0,4 h_w + 2,21 Lw - 0,0135 F_s \quad (4.17)$$

para

$$Lw = \frac{2Q_\alpha}{l_w + D_p} \quad (4.18)$$

onde Lw é a razão entre a vazão volumétrica de líquido e o comprimento de represa do prato perfurado.

- [Oliveira \(2014\)](#) e [Zanutto \(2015\)](#):

$$h_{cl} = \sum_{i=1}^n f_{\alpha,i} h_i \quad (4.19)$$

onde $f_{\alpha,i}$ é a fração volumétrica de líquido no bloco i , h_i é a altura do bloco i e n é o número total de blocos utilizados no cálculo da equação.

Mais informações sobre essa análise serão apresentadas no capítulo seguinte (seção 5.2).

4.3.3 Eficiência de separação

Para o escoamento não isotérmico, a avaliação da eficiência de separação das espécies no prato perfurado, utilizou-se o cálculo de eficiência proposto por [Murphree \(1925\)](#). O e

Sugerido por [West, Gilbert e Shimizu \(1952\)](#), a subdivisão do estágio em vários subdomínios (pontos ou áreas), nos quais serão aplicados a eficiência de Murphree pontual em cada subdomínio criado. Segundo [Noriler \(2007\)](#), é a relação de maior fidelidade no estudo e previsão da eficiência.

De acordo com os relatos dos autores acima, como proposta do presente trabalho, dividiu-se o prato em 15 subdomínios na direção z do escoamento da fase líquida, com comprimentos iguais a 5,2313 cm. 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.

Por fim, apresentada a metodologia de análise dos resultados, segue-se para os resultados obtidos nas simulações do prato perfurado.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

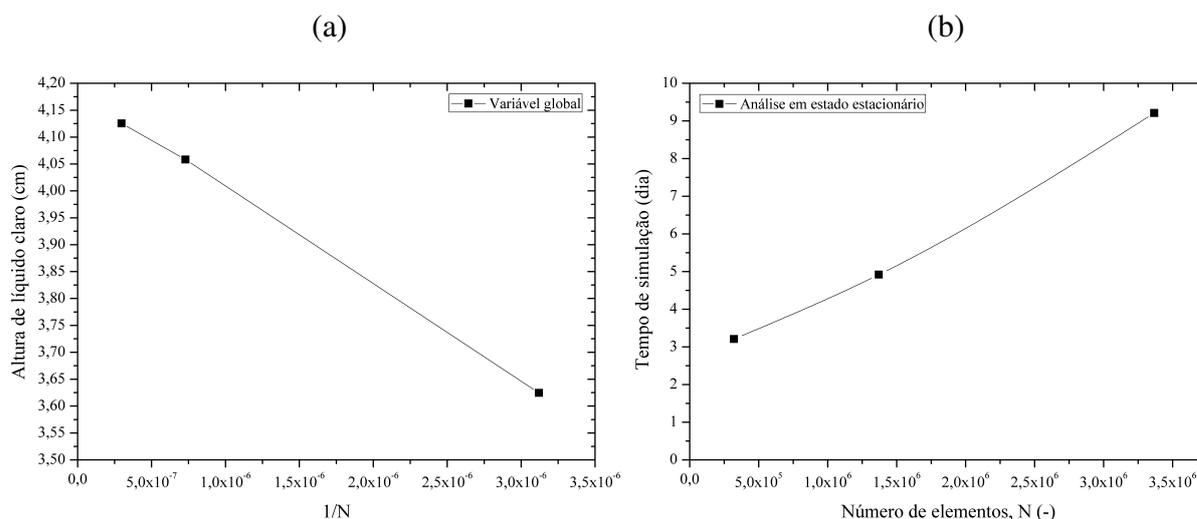
Neste capítulo são apresentados e analisados os resultados obtidos através das simulações numéricas, realizadas ao longo deste trabalho conforme as configurações escolhidas na seção anterior. Estes experimentos numéricos tiveram por objetivos os testes de sensibilidade (ou independência) das malhas, a análise e a validação da hidrodinâmica para o escoamento isotérmico, e da transferência de espécies químicas do escoamento não isotérmico do prato perfurado.

5.1 Teste de sensibilidade das malhas numéricas

Conforme apresentado no início do capítulo, é de extrema importância o teste de sensibilidade das malhas e a sua influência sobre os resultados de acordo com o seu refinamento. Nessa linha de pensamento, a estimativa de incerteza numérica foi realizada em três malhas: malha 1 (grosseira), malha 2 (mediana) e malha 3 (refinada), com a quantidade de elementos de 320.487, 1.370.725 e 3.366.553, respectivamente.

A Figura 26 ilustra o comportamento médio da variável escolhida para o método GCI e o tempo computacional gasto em função das malhas construídas.

Figura 26 – Metodologia GCI em função das malhas no estado estacionário: (a) o valor médio da altura de líquido claro e (b) o tempo de processamento computacional consumido.



Fonte: Elaborado pelo autor.

De acordo com os resultados obtidos na Figura 26a, pode-se notar que os valores da altura de líquido claro (variável global) a partir da malha 2 tendem a assumir um valor “quase” assintótico em aproximadamente 4 cm. Após esse nível de refinamento, a influência destas malhas não apresentou mudanças significativas nos resultados se analisarmos qualitativamente.

Uma análise quantitativa fez-se necessária para estimar essa incerteza numérica entre as malhas. A Tabela 15 apresenta os detalhes dos resultados obtidos com o método GCI das malhas em estudo.

Tabela 15 – Estimativa da incerteza numérica da altura de líquido claro utilizando o método GCI.

Variável	GCI ₁	GCI ₂	GCI ₃
Altura de líquido claro	1,17%	3,26%	16,62%

Fonte: Elaborado pelo autor.

A altura de líquido claro mostrou uma estabilidade numérica a partir da malha 2 com um valor de 4,052 cm. De acordo com os resultados obtidos pelo método GCI, as incertezas numéricas variam entre 1,17% a 16,62%. Em paralelo à análise do método GCI discutido acima, um fator muito importante e que deve ser considerado para otimizar as simulações é o tempo de processamento computacional. É claro que, cada configuração de *clusters* depende da performance dos *hardwares* envolvidos. De acordo com a Figura. 26b, nota-se que o tempo computacional aumentou de maneira não-linear variando de 3 a aproximadamente 10 dias, conforme o aumento de elementos nas malhas simuladas.

A partir dos resultados adquiridos pelo método GCI, definiu-se a malha 2 (1.370.725 elementos) a ser utilizada nas próximas etapas de simulação, mostrando um desempenho satisfatório, com uma incerteza numérica menor que 4% para a variável global e com a metade do tempo de processamento comparado com a malha 3 (refinada).

No Anexo A é apresentado com mais detalhes as informações obtidas do cálculo da incerteza numérica.

5.2 escoamento isotérmico (água-ar)

Nesta seção são apresentados os resultados para a verificação e validação do modelo isotérmico relacionados ao estudo da hidrodinâmica do prato perfurado. Dessa maneira, os resultados obtidos como a distribuição de velocidade de líquido e altura de líquido claro serão comparados com outros estudos apresentados na literatura.

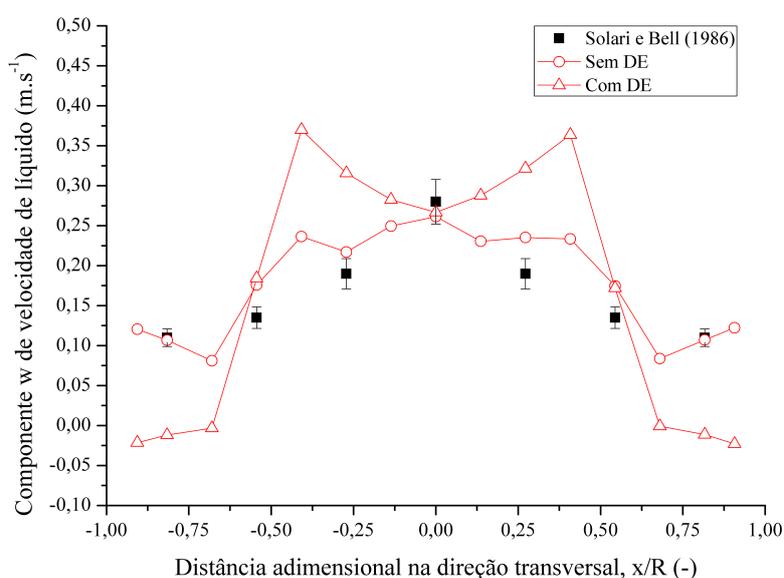
5.2.1 Distribuição dos campos de velocidade de líquido

A distribuição de velocidade de líquido no prato perfurado é o principal campo para verificar e validar o modelo sugerido. Os resultados extraídos das simulações foram comparados com os campos de velocidade do trabalho experimental de Solari e Bell (1986) nas regiões *upstream* e *downstream*.

As Figuras 27 e 28 a seguir, apresentam o comportamento da média da componente w de velocidade de líquido em função da distância adimensional na direção x (x/R) nas regiões

upstream e *downstream* para as geometrias com e sem o *downcomer* de entrada (DE) de líquido, respectivamente. Nos eixos das abscissas, o valor igual a zero representa o centro do prato e os valores de -1 a 1 representam as regiões de paredes do prato perfurado. Os dados experimentais de velocidade de líquido de Solari e Bell (1986) foram incorporados em ambos os gráficos, juntamente com a faixa de erro estimada de 10% associada aos experimentos.

Figura 27 – Perfil da componente w de velocidade de líquido médio em função da distância adimensional na região *upstream* para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$.



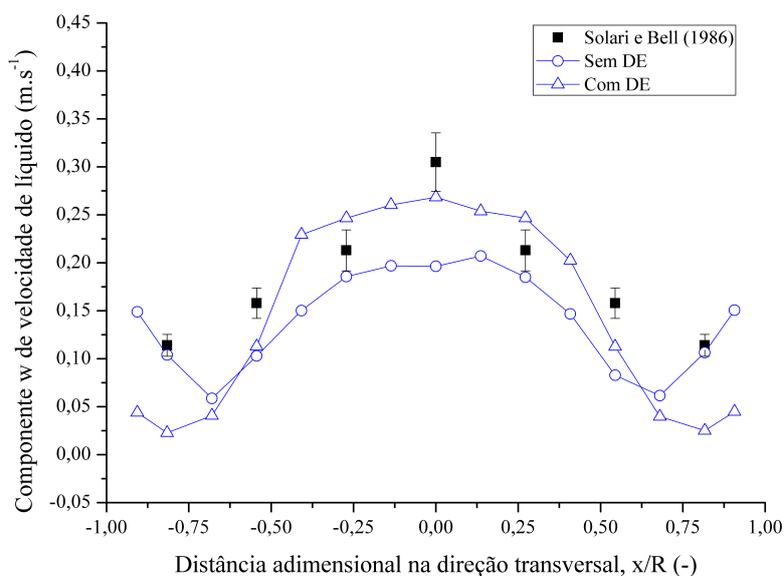
Fonte: Elaborado pelo autor.

A partir da Figura 27, observa-se que para a geometria sem o DE, a componente w de velocidade de líquido apresentou valores maiores no centro do prato perfurado e ao se afastar da região central em direção às paredes, as velocidades sofreram uma variação desacelerando lentamente, apresentando um perfil similar ao de Solari e Bell (1986). Já para geometria com o DE, o perfil da componente w de velocidade de líquido apresentou um comportamento distinto em relação a geometria sem o DE. Partindo do centro do prato até uma distância adimensional ($-0,4 < x/R < 0,4$), notou-se um aumento de velocidade de líquido, atingindo valores próximos à $0,37 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, e a partir dessa região, a componente w de velocidade sofreu uma súbita desaceleração, indicando valores menores que zero $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ em regiões mais próximas da parede. De acordo com a orientação das coordenadas do domínio computacional, esses valores próximos e menores que zero caracterizam regiões de estagnação e de início de recirculação de líquido no prato. Dessa maneira, se analisarmos qualitativamente os dois modelos de geometria propostos, o domínio computacional sem o DE apresentou resultados mais próximo dos dados de campos de velocidade do trabalho experimental de Solari e Bell (1986).

Como observado por Gesit, Nandakumar e Chuang (2003), a falta de detalhes sobre

o perfil de velocidade de entrada de líquido no trabalho experimental de Solari e Bell (1986) prejudica o entendimento mais profundo desses perfis de velocidade. Ainda, Kister (1992) afirma que o perfil de velocidade de líquido na entrada possui uma forte influência sobre o perfil do escoamento do líquido ao longo do prato.

Figura 28 – Perfil da componente w de velocidade de líquido médio em função da distância adimensional na região *downstream* para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

De acordo com a Figura 28, os perfis da componente w de velocidade de líquido de ambas as geometrias na região *downstream* apresentaram um comportamento mais próximo dos dados experimentais, principalmente na região central do prato perfurado. Análogo aos perfis de velocidade da região *upstream* comentado anteriormente, as velocidades de líquido para ambas as geometrias apresentaram valores mais altos na região central do prato, sofrendo pequenas oscilações em seus gradientes de velocidade. Ao se afastar da região central e caminhar em direção à parede ($x/R > \pm 0,5$), nota-se também, uma desaceleração de velocidade de líquido e em seguida, um ganho de velocidade. Como observado, a região *downstream* é uma região que engloba maior número de regiões “críticas” do prato, isto é, propicia à formação de regiões de recirculação e de estagnação de líquido, além do efeito gerado pela represa no escoamento. A dificuldade de se medir em diferentes instantes de tempo um valor médio e representativo dos campos de velocidade de líquido sobre o prato é muito complexo. Este fato é devido a natureza transiente e turbulenta dos escoamentos multifásicos.

Um fato interessante comentado por Zanutto (2015), é que as regiões próximas à represa tendem a formar turbilhões, os quais conduzem à formação de zonas de recirculação, de estagnação e até fluxos retrógrados de líquido. Isto se deve ao fato de o líquido que colide com a

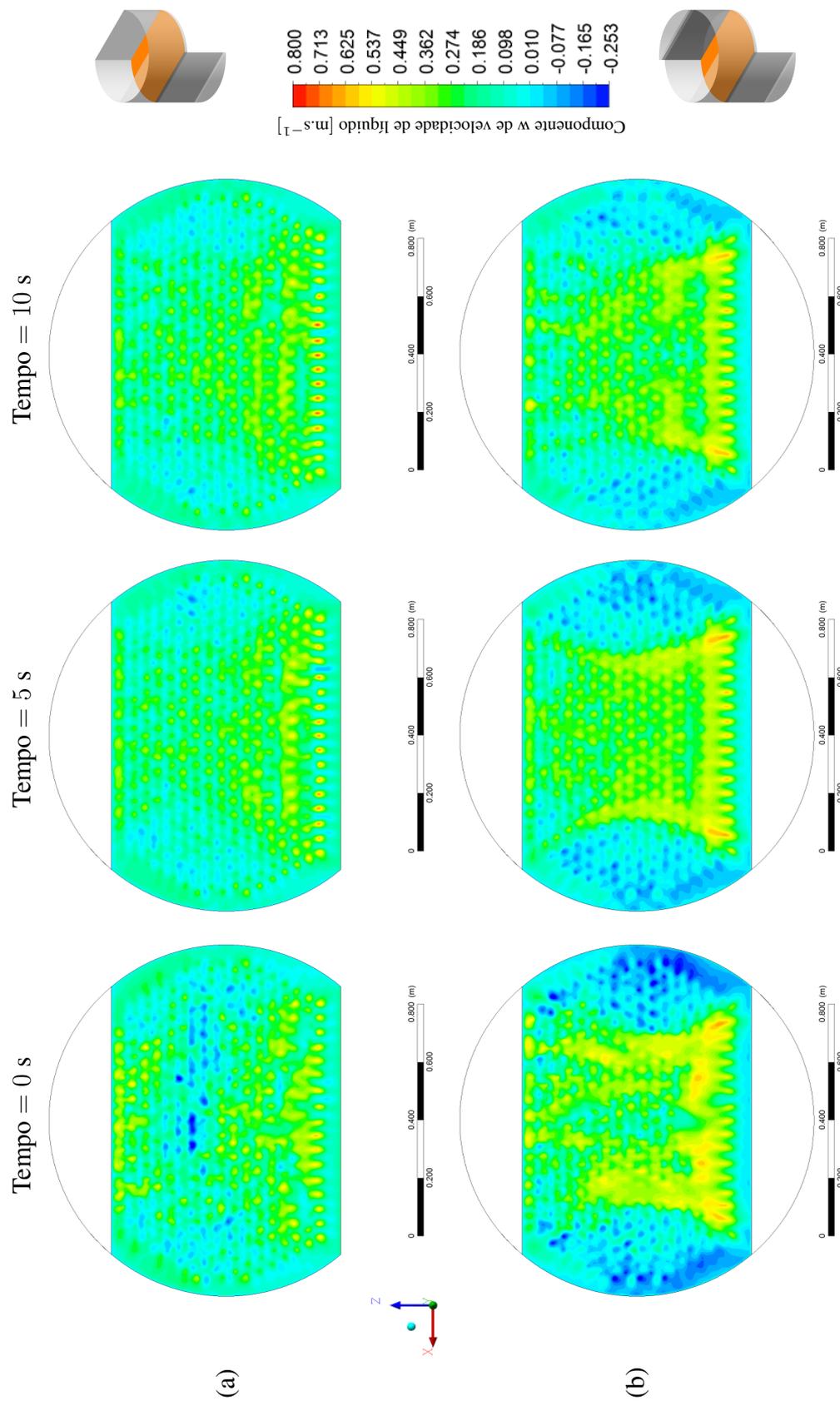
represa possuir uma tendência a recuar sobre o prato e assim influenciar o escoamento do líquido que está indo de encontro à represa, surgindo as regiões “críticas”. Esses fatores podem gerar maiores dificuldades de se obter resultados numéricos e experimentais.

A fim de se entender melhor essas regiões “críticas” no prato perfurado, as Figuras 29 e 30 ilustram a seguir, a componente w de velocidade de líquido em função do tempo para as geometrias com e sem DE, aos quais estão situados no plano-ZX à 3,8 cm da base do prato. Nessa perspectiva, torna-se evidente os perfis da componente w de velocidade de líquido apresentado para as regiões *upstream* e *downstream*. Os padrões de velocidade de líquido da geometria sem DE (Figs. 29a e 30a), para os instantes de tempo, apresentaram ser mais homogêneos ao longo do plano analisado, com pequenas áreas formadas de possíveis zonas de recirculação e de estagnação de líquido. Já para a geometria com DE (Figs. 29b e 30b), os padrões de velocidade de líquido apresentaram uma não heterogeneidade nas regiões próximas às paredes, deixando perceptível a formação de regiões “críticas” (representada pela cor azul).

À vista disso, mesmo que os perfis médios da componente w de velocidade de líquido (Figs. 27 e 28) para a domínio com DE não terem apresentado uma similaridade com os dados de velocidade de Solari e Bell (1986), há evidência da formação de uma mistura não homogênea no prato perfurado, tornando-se imprescindível a inclusão do DE.

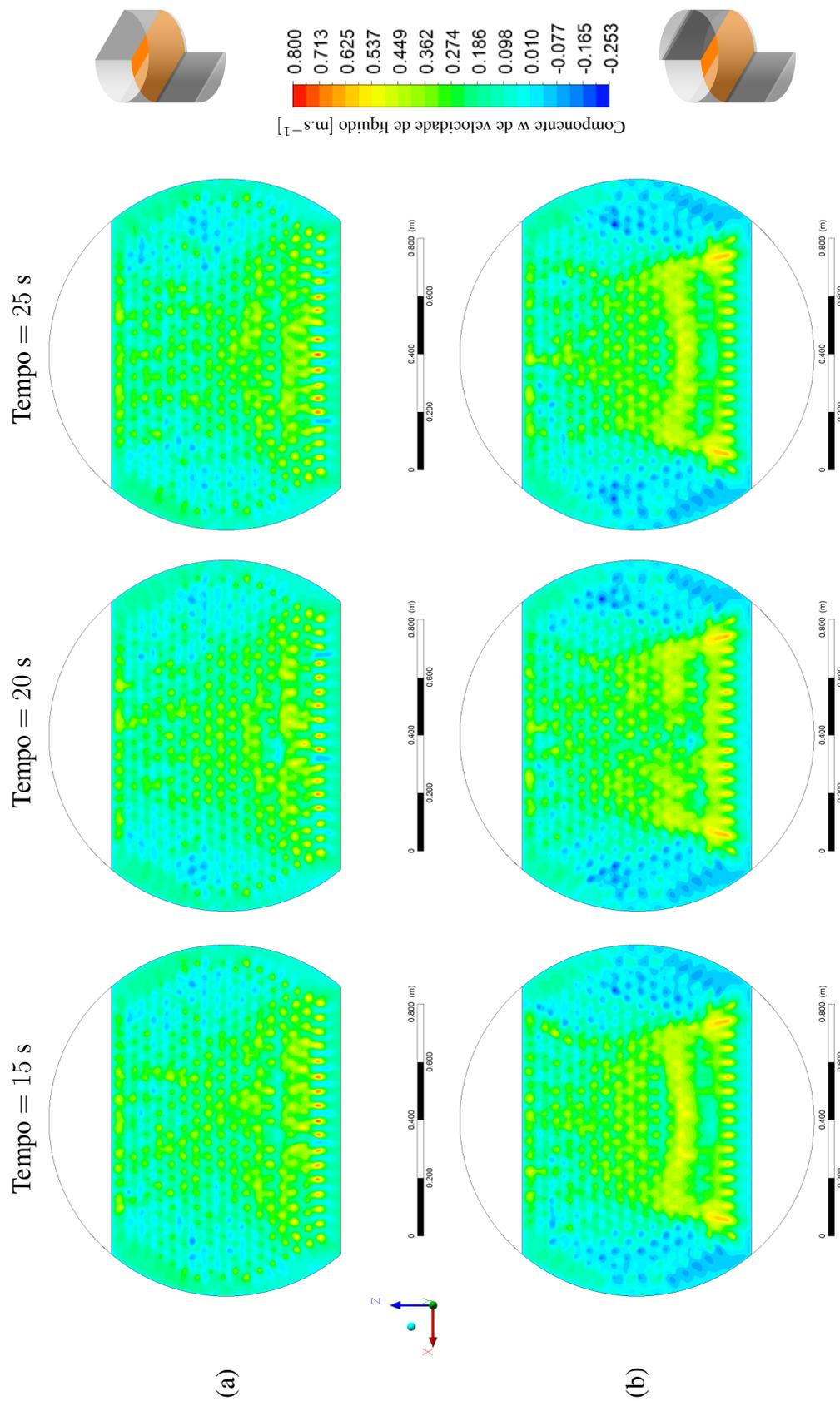
Uma outra forma de se entender a diferença entre os perfis de velocidade de líquido obtidos nas Figuras 27 e 28, pode ser justificado através da Figura 31. A figura ilustra os perfis de velocidade de líquido na entrada, sejam eles, pelas geometrias sem DE e com DE (item a) e os contornos de velocidade de líquido nas regiões monitoradas para as geometrias sem DE (item b) e com DE (item c). É evidente a influência do perfil de velocidade na entrada ao longo do escoamento no prato, como pode ser visto na Figura 31a. Ao instituir um perfil uniforme na entrada de líquido (geometria sem DE), possibilita-se uma mistura mais homogênea ao longo da região de borbulhamento do prato, enquanto a formação natural do perfil de velocidade na entrada de líquido (geometria com DE), proporciona uma mistura não homogênea, situação encontrada comumente em pratos perfurados, como citado por Kister (1992). Os picos de velocidade de líquido encontrado na Figura 31a para o geometria com DE, ficam mais evidentes no item c.

Figura 29 – Mapas de contorno da componente w de velocidade de líquido para os instantes de tempo igual a 0, 5 e 10 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ no plano ZX (em $y = 0,038 \text{ m}$): (a) sem DE e (b) com DE.



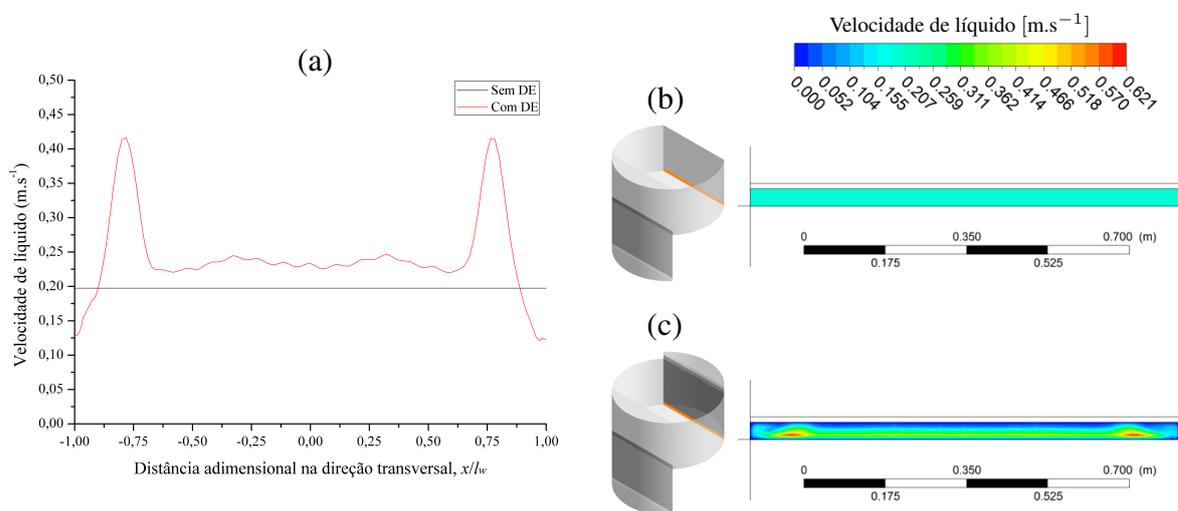
Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 30 – Mapas de contorno da componente w de velocidade de líquido para os instantes de tempo igual a 15, 20 e 25 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ no plano ZX (em $y = 0,038 \text{ m}$): (a) sem DE e (b) com DE.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 31 – Comparação dos perfis de velocidade de líquido na região de entrada do prato perfurado em função da distância adimensional para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$: (a) os perfis de velocidade de líquido médio para ambas as geometrias e os contornos de velocidade de líquido para as geometrias (b) sem DE e (c) com DE.



Fonte: Elaborado pelo autor.

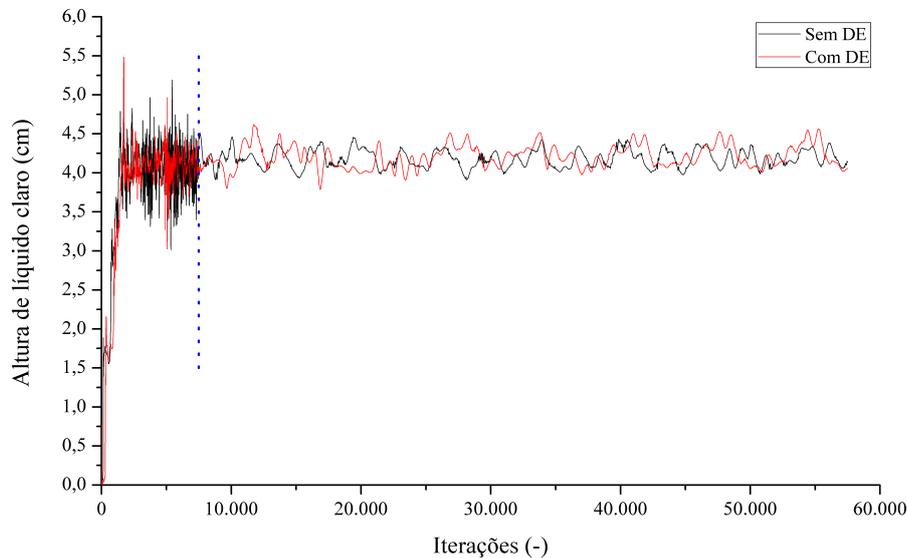
5.2.2 Altura de líquido claro

Além da verificação dos campos de velocidade de líquido com os dados experimentais de Solari e Bell (1986), o parâmetro altura de líquido claro (h_{cl}) foi utilizado para validar a simulação, comparando-o com os dados obtidos a partir das correlações da literatura e de simulações realizadas em outros estudos utilizando as mesmas características geométricas. O parâmetro é de grande importância no estudo da hidrodinâmica em pratos de destilação.

A Figura 32 apresenta a variação da altura de líquido claro em função das iterações para as geometrias sem DE e com DE.

De acordo com a figura acima, nota-se um rápido crescimento da altura de líquido claro nas primeiras 2.000 iterações. Isso se deu pelo motivo da condição de inicialização do domínio computacional para ambas as geometrias, ser ausente da fase líquida sobre o prato. Após esse crescimento, atingiu-se um estado oscilatório dos valores da altura de líquido claro. A linha pontilhada (na vertical) separou os dois momentos das simulações, um em estado estacionário e o outro em estado transiente. No estado estacionário, as oscilações da altura de líquido foram maiores, variando entre 3 a 5 cm, enquanto no estado transiente essas oscilações foram mais brandas, variando entre 3,5 a 4,5 cm. Nota-se, ainda, que o comportamento hidrodinâmico do prato perfurado é oscilatório. Dessa maneira, pode-se designar um estado “*quasi-estacionário*”, isto é, um estado onde os valores da altura de líquido claro flutuam em torno de uma média bem definida.

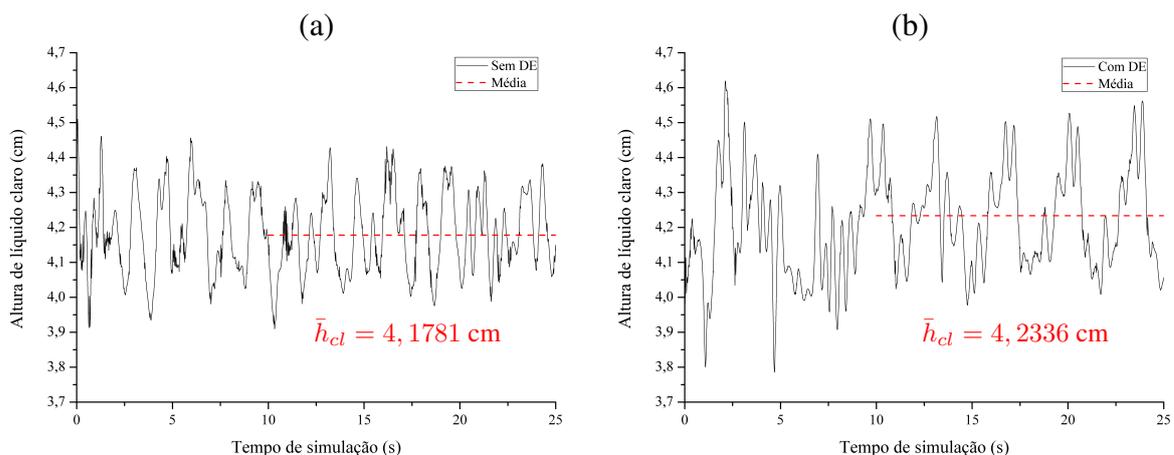
Figura 32 – Monitoramento da altura de líquido claro em função das iterações para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m}.\text{s}^{-1}(\text{kg}.\text{m}^{-3})^{0,5}$ para as geometrias sem DE e com DE.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Figura 33 são apresentadas as flutuações e as médias da altura de líquido claro em função do tempo de simulação para as geometrias sem DE e com DE.

Figura 33 – Flutuações da variável altura de líquido claro em função do tempo computacional (estado transiente) e valor médio para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m}.\text{s}^{-1}(\text{kg}.\text{m}^{-3})^{0,5}$ para as geometrias: (a) sem DE e (b) com DE.



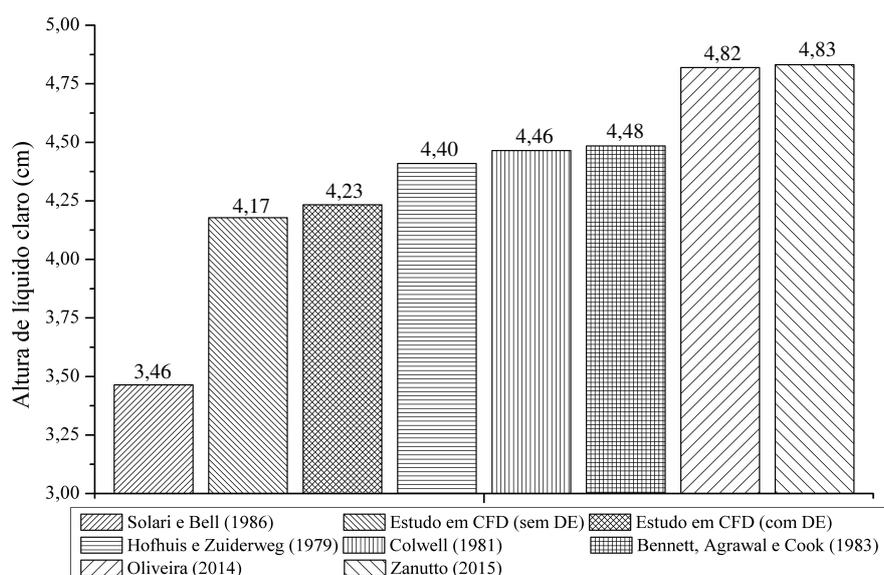
Fonte: Elaborado pelo autor.

Nota-se, que houve uma quantidade maior de oscilações (frequência) e uma menor amplitude da altura de líquido claro na geometria sem DE. Em contrapartida, a geometria com DE apresentou um comportamento inverso. Como citado na metodologia, foram obtidos

os valores médios entre os instante de tempo de 10 s a 25 s. As médias temporais obtidas apresentaram valores correlatos: aproximadamente 4,17 cm para o domínio sem DE e 4,23 cm para o domínio com DE. Essa diferença de altura de quase 6 mm entre as geometrias é insignificante devido à característica extremamente turbulenta do escoamento, fazendo que essa altura de líquido claro se modifique de acordo com o fluxo sobre o prato perfurado. Outra característica interessante do escoamento é que na geometria sem DE o perfil da altura de líquido claro apresentou um comportamento aleatório, enquanto a geometria com DE apresentou um perfil periódico.

Com o propósito de comparação dos valores médios de altura de líquido claro obtidos nas simulações para ambas as geometrias, a Figura 34 ilustra e compara as correlações da literatura (Eqs. 4.13, 4.14, 4.15 e 4.17) com as simulações obtidas no trabalho de Oliveira (2014) e Zanutto (2015).

Figura 34 – Comparação da altura de líquido claro obtida nas simulações sem DE e com DE com os resultados da literatura para a condição operacional $Q_{\alpha} = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ para as geometrias sem DE e com DE.



Fonte: Elaborado pelo autor.

De acordo com a Figura 34, nota-se que os valores de altura de líquido claro variaram entre 3,46 à 4,83 cm. Os resultados obtidos no presente estudo para ambas as geometrias mostraram melhor concordância com as correlações empíricas de Hofhuis e Zuiderweg (1979), Colwell (1981) e Bennett, Agrawal e Cook (1983). Já para a correlação de Solaris e Bell (1986) e os resultados simulados de Oliveira (2014) e Zanutto (2015) apresentaram maior diferença.

Para representar esses desvios, a Tabela 16 apresenta o erro relativo (em %), calculado pela Equação 4.11, entre o presente estudo e as correlações empíricas e os trabalhos simulados, conforme apresentados na Figura 34. A geometria sem DE e com DE apresentaram os erros

relativos com menores valores para as correlações empíricas de Hofhuis e Zuiderweg (1979), Colwell (1981) e Bennett, Agrawal e Cook (1983). Dentre as geometrias, destaca-se a geometria com DE com erros de 3,99%, 5,18% e 5,61%, respectivamente. Assim, os desvios apresentados estão dentro do intervalo de erro envolvidos nas correlações.

Tabela 16 – Erro relativo da altura de líquido claro para o sistema isotérmico (ar-água) entre as geometrias propostas e as correlações da literatura.

Geometria	Erro relativo (%)					
	Hofhuis e Zuiderweg (1979)	Colwell (1981)	Bennett, Agrawal e Cook (1983)	Solari e Bell (1986)	Oliveira (2014)	Zanutto (2015)
Sem DE	5,25	6,42	6,85	20,60	13,32	13,51
Com DE	3,99	5,18	5,61	22,20	12,17	12,37

Fonte: Elaborado pelo autor.

Ainda na Tabela 16, a correlação proposta por Solari e Bell (1986) apresentou erro relativo considerável para ambas as geometrias, próximo à 22%. Como comentado por Van Baten e Krishna (2000) e Gesit, Nandakumar e Chuang (2003), as simulações em CFD e a correlação empírica de Bennett, Agrawal e Cook (1983) possuem a tendência de superestimar os valores de altura de líquido claro que os valores experimentais. Os autores, justificam ainda, que a presença de impurezas contidas na fase líquida poderiam suprimir os fenômenos de quebra e coalescência das bolhas no prato perfurado, aumentando assim a retenção gasosa (ou fração volumétrica média da fase gasosa - \bar{f}_β^B) resultando em um valor menor da altura de líquido claro no prato. É válido destacar, que a correlação de Bennett, Agrawal e Cook (1983) não incorpora na sua correlação, os fenômenos de quebra e coalescência das bolhas e impurezas, como também a modelagem matemática em CFD proposta para ambas as geometrias.

Os resultados obtidos por Oliveira (2014) e Zanutto (2015) apresentaram diferenças relativas de aproximadamente 13% para ambas geometrias, sem DE e com DE. Acredita-se, que esses valores obtidos pelos autores, podem ter sido influenciado pelo modo de como foi construída a malha numérica (densidade de elementos na região de borbulhamento), pois o cálculo desse parâmetro hidráulico é feito através da somatória das frações volumétricas de líquido dos elementos de cada bloco, utilizado na criação do domínio computacional, conforme apresentado na Equação 4.19.

Outro fator considerável relacionado ao maior desvio em relação ao trabalho de Solari e Bell (1986), observado por Zanutto (2015), está no fato de os autores terem distribuído vários sensores ao longo da região de borbulhamento no prato, cujo os mesmos podem se apresentar como impurezas ou interferências (obstáculos), e assim acarretar em uma diminuição da altura de líquido claro e até mesmo nos campos de velocidade de líquido sobre o prato.

5.2.3 Campos de fração volumétrica

As Figuras 35 e 36 ilustram uma análise de característica qualitativa dos campos de fração volumétrica de líquido das diferentes geometrias para os instantes de tempos definidos entre 15 à 25 segundos. Como mencionado na metodologia sobre a estratégia de simulação (seção 4.1.3.1), não foi possível obter passo a passo o fenômeno de preenchimento de líquido no prato ao longo do estado estacionário, apenas em estado transiente.

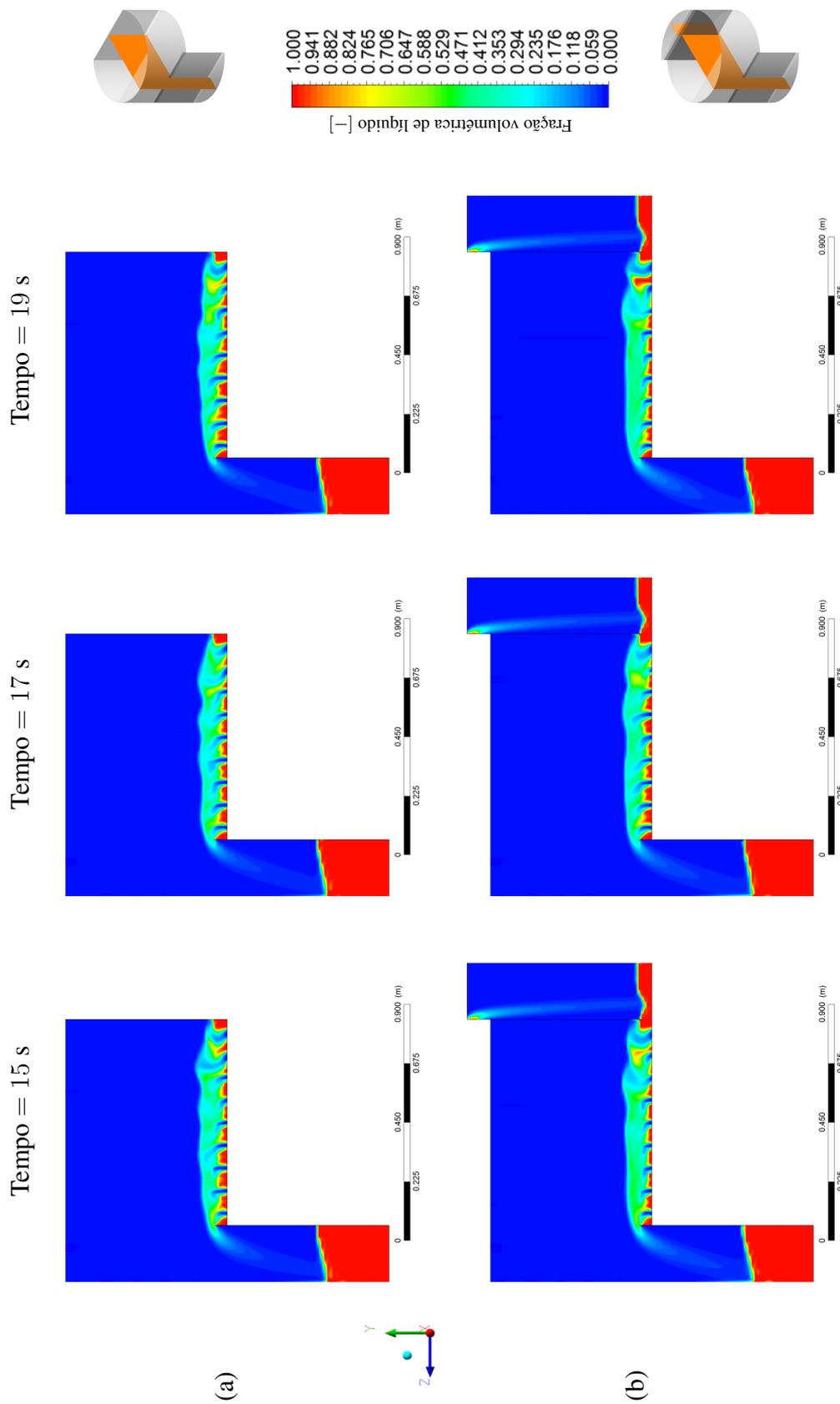
Como observado por Oliveira (2014) e Zanutto (2015), o período de preenchimento de líquido é de 7 à 10 segundos do tempo real de escoamento para as condições operacionais utilizadas no presente estudo, pois as vazões de entrada de líquido e de gás interferem diretamente no tempo de preenchimento. Após esse período, os autores constataram também, o processo de sobreposição de líquido sobre o vertedor do prato e por fim chegando até a região do *downcomer* de saída, o qual foi represado até uma certa altura estabelecida pela condição “saída de líquido”. O represamento de líquido se estabeleceu entre 12 à 15 segundos de escoamento, atingindo assim um estado “quasi-estacionário” tanto na região de borbulhamento quanto no *downcomer* de saída do prato perfurado.

As Figuras 35 e 36 apresentam uma hidrodinâmica já estabelecida, com pequenas variações nos campos de fração volumétrica de líquido. Nota-se alta concentração de fração de líquido na entrada do prato e, ao cruzar a área perfurada (região de borbulhamento) há uma redução dessa concentração de líquido em virtude deste chocar-se com a fase gasosa, misturando-se, formando assim uma dispersão (conhecida também por espuma), acarretando o arraste de porções do líquido pelo gás. Sob as regiões dos orifícios, as frações de líquido permanecem baixas e voltam a aumentar fora das regiões perfuradas quando o escoamento atinge a região próxima do vertedor (represa). A região do *downcomer* de saída desempenha uma função muito importante na separação das fases, a qual tem a incumbência de garantir que toda a fase gasosa arrastada pela fase líquida seja recuperada, desprendendo-se da fase líquida e por gravidade, seguindo em direção ao prato superior.

É importante ressaltar, que o escoamento é completamente caótico, evidenciando o arraste de pequenas parcelas de líquido pelo vapor, que por conseguinte, caem sobre a dispersão quando seu peso se torna maior que a força de arraste. Este fenômeno ocorre continuamente, e em diferentes regiões do prato perfurado.

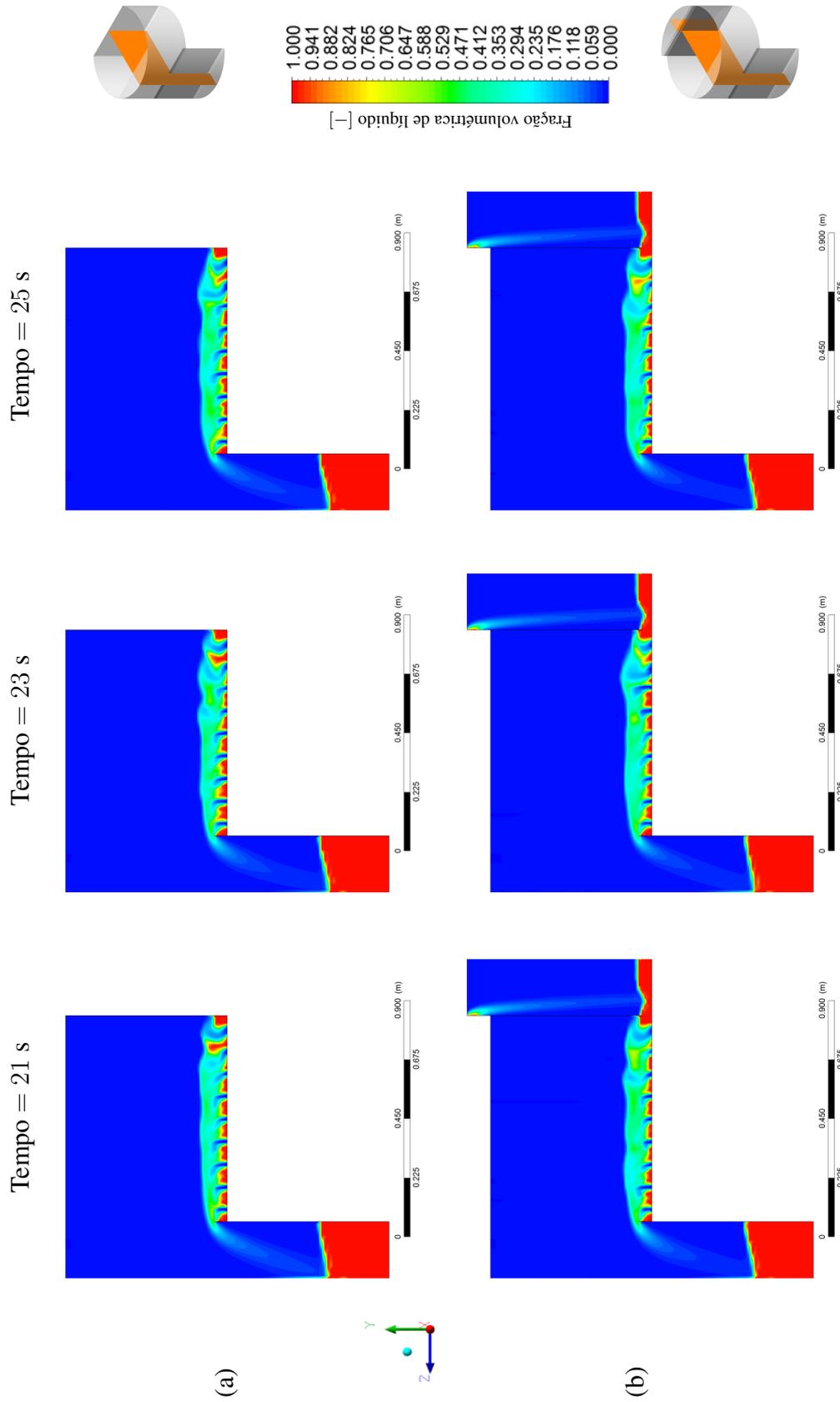
A região de borbulhamento desempenha uma importante função de mistura do escoamento, deixando em contato íntimo as fases líquida e gasosa/vapor para que haja uma troca máxima de quantidade de movimento, de energia e de massa. Dessa forma, a investigação da intensidade de mistura entre as fases, faz-se um parâmetro importante e as Figuras 37 e 38 ilustram essa investigação.

Figura 35 – Mapas de contorno da fração volumétrica de líquido para os instantes de tempo igual a 15, 17 e 19 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ situado no plano YZ (em $x = 0 \text{ m}$): (a) sem DE e (b) com DE.



Fonte: Elaborado pelo autor.

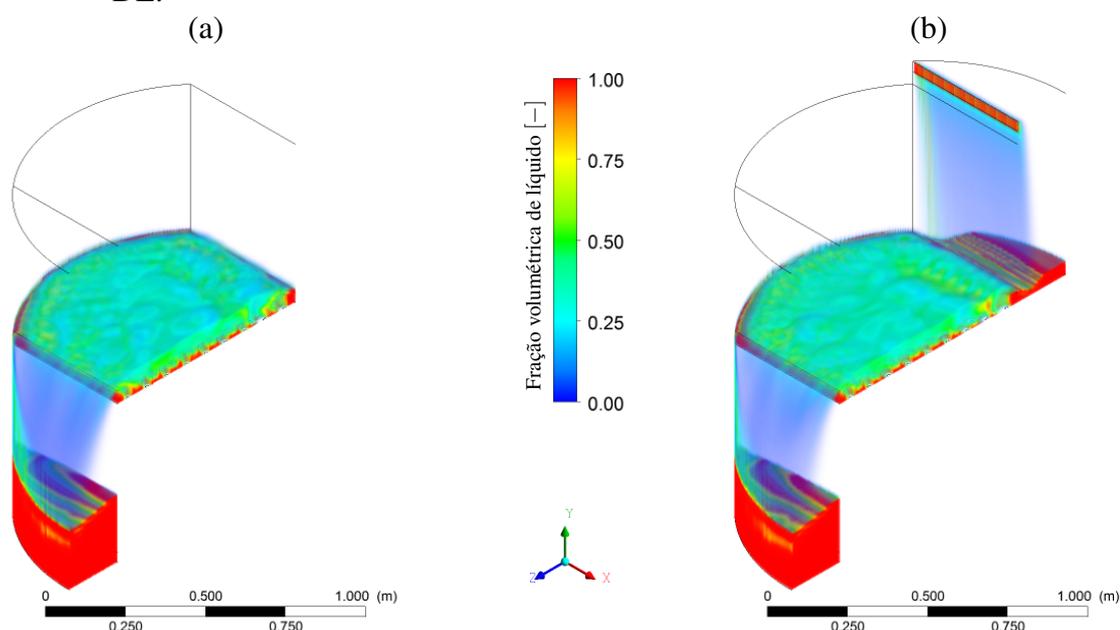
Figura 36 – Mapas de contorno da fração volumétrica de líquido para os instantes de tempo igual a 21, 23 e 25 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$ situado no plano YZ (em $x = 0 \text{ m}$): (a) sem DE e (b) com DE.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 37 foi gerada com o intuito de complementar as análises qualitativas realizadas. Assim, utilizou-se a técnica de renderização de volume (*volume rendering*), realizando um corte simétrico no plano-YZ, para a variável de fração volumétrica de líquido no instante de 25 segundos de escoamento. O corte simétrico teve a finalidade de ilustrar a região de espuma (mistura entre as fases envolvidas) sobre o prato através de uma vista tridimensional do escoamento inteiramente caótico e turbulento.

Figura 37 – Distribuição da fração volumétrica de líquido através da utilização da ferramenta de renderização de volumes no instante de 25 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$: (a) sem DE e (b) com DE.

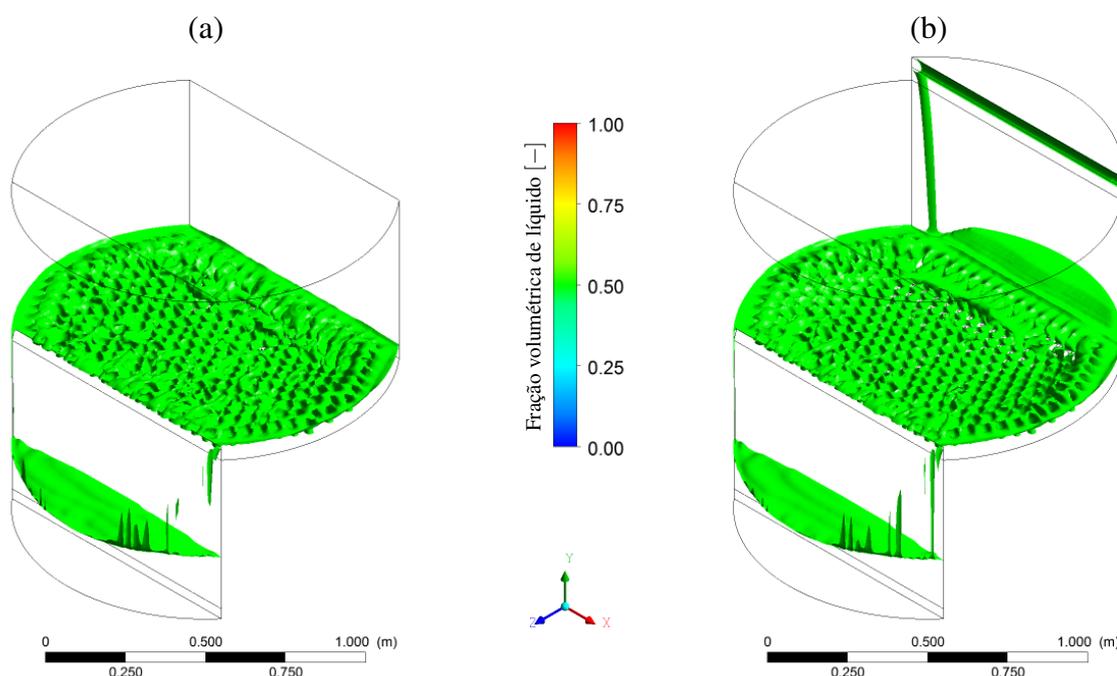


Fonte: Elaborado pelo autor.

Conforme apresentado nas Figuras 35, 36 e 37, não houve a formação da coluna de líquido no *downcomer* de entrada do prato. Isso ocorreu devido a influência da condição de contorno imposta no domínio com DE, criando assim um perfil de velocidade de líquido na entrada do prato geralmente não comum.

A Figura 38 ilustra o grau de mistura das fases líquida e gasosa para as geometrias sem DE e com DE. As isosuperfícies geradas possuem uma fração volumétrica de líquido de valor igual à 0,5. Esse valor tem como propósito situar e destacar a região de mistura. Nota-se que as isosuperfícies são bastantes irregulares, onde na região de borbulhamento (região de orifícios) apresenta uma região de maior intensidade de mistura, enquanto que nas regiões próximas às paredes, é constatado um perfil mais brando e contínuo devido a ausência dos orifícios, surgindo assim, possivelmente, caminhos preferenciais e de baixo grau de mistura. De acordo com Noriler (2007), essas regiões de baixo grau de mistura colaboram para o fraco desempenho de transferência de calor e das espécies químicas.

Figura 38 – Isosuperfície para uma fração volumétrica de líquido constante igual a 0,5 no instante de tempo de 25 segundos para a condição operacional $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e $F_s = 1,015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$: (a) sem DE e (b) com DE.



Fonte: Elaborado pelo autor.

5.3 Escoamento não isotérmico (etanol-água)

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos do modelo não isotérmico, onde é feita uma análise qualitativa simultânea dos três fenômenos de transporte (quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas) e da eficiência de separação do componente etanol no prato perfurado com a inclusão do *downcomer* de entrada (DE). Para a eficiência de separação dos componente, os resultados obtidos foram comparados com outros estudos apresentados na literatura.

5.3.1 Análise dos fenômenos de transporte em função do fator F_s no prato perfurado

Como comentado acima, nesta subseção serão apresentados, separadamente, uma análise dos fenômenos de transporte envolvidos em função do fator F_s (ou carga de vapor) do escoamento não isotérmico.

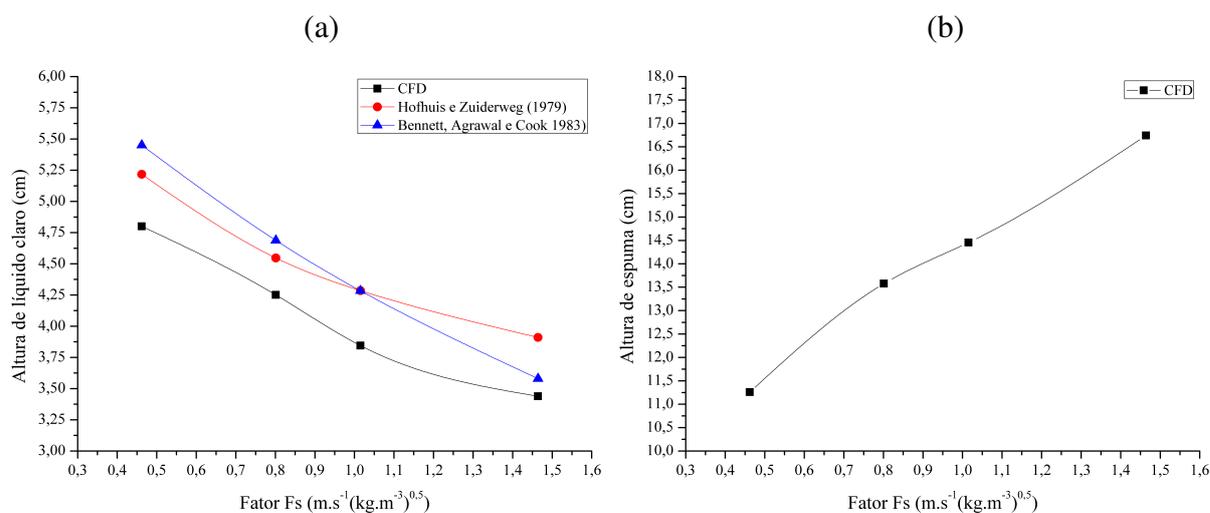
5.3.1.1 Transferência de quantidade de movimento

Foram escolhidos para representar a transferência de quantidade de movimento, os parâmetros hidráulicos e os campos de fração volumétrica de líquido.

• **Parâmetros hidráulicos:**

A análise dos parâmetros hidráulicos é essencial para se entender o comportamento quando se aplica uma perturbação no escoamento, como por exemplo, neste caso, a variação da carga de vapor (ou fator F_s) na condição de contorno de entrada de vapor. Desta maneira, os parâmetros hidráulicos (altura de líquido claro, altura de espuma e fração volumétrica média de líquido na espuma) serão apresentados a seguir pelas Figuras 39 e 40, respectivamente.

Figura 39 – Perfil médio dos parâmetros hidráulicos do prato em função do fator F_s para a condição operacional de $Q_{\alpha} = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$: (a) altura de líquido claro e (b) altura de espuma.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os itens (a) e (b) da Figura 39 apresentam os perfis médios de altura de líquido claro e de espuma em função do fator F_s , respectivamente. Nota-se, que os parâmetros apresentaram comportamento inverso. Os valores de altura de líquido claro obtidos via CFD (Figura 39a) decresceram com o aumento do fator F_s . Isso ocorreu devido ao aumento de fração volumétrica de vapor na região de borbulhamento. Já a altura de espuma (Figura 39b), apresentou um perfil crescente com aumento do fator F_s . Isso se deu, pelo fato de que a altura de espuma tem influência direta com a velocidade de vapor que atravessa as perfurações do prato, aumentando a altura da dispersão no prato.

Ainda na Figura 39a, altura de líquido claro obtida via CFD apresentou valores abaixo, porém manteve-se uma similaridade qualitativa no perfil, daqueles obtidos a partir de correlações. Os desvios entre resultados obtidos via CFD e as correlações empíricas podem ser visualizados na Tabela 17.

De acordo com os dados da Tabela 17, nota-se, de maneira geral, que a altura de líquido claro apresentou um erro igual e superior à 6,50% para os quatro casos simulados. Acredita-se, que a discrepância desses desvios se deu pelo fato que as correlações de Hofhuis e Zuiderweg (1979) e Bennett, Agrawal e Cook (1983) foram validadas para sistema ar-água. É válido

Tabela 17 – Erro relativo da altura de líquido claro para o sistema não isotérmico (etanol-água) entre o modelo de CFD e as correlações da literatura.

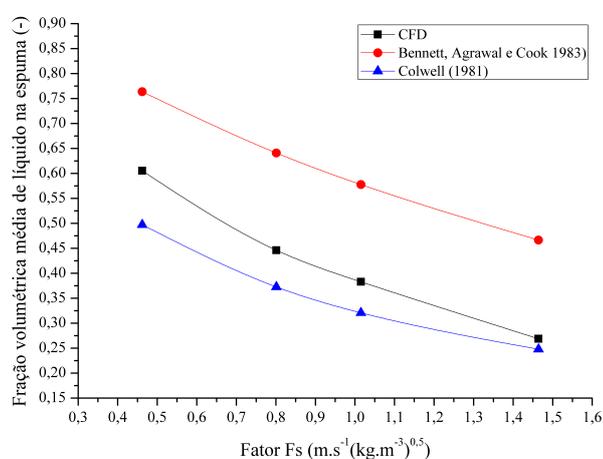
Correlações	Erro relativo da altura de líquido claro (%)			
	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Hofhuis e Zuiderweg (1979)	7,99	6,50	10,28	12,05
Bennett, Agrawal e Cook (1983)	11,93	9,32	10,25	3,93

Fonte: Elaborado pelo autor.

relembrar, que no presente estudo foi usado uma mistura líquida etanol-água, apresentando uma massa específica de mistura diferente que da água pura (vide as Tabelas 9 e 13).

Por conseguinte, a Figura 40 ilustra o comportamento da fração volumétrica média de líquido na dispersão (também conhecida de fração volumétrica *holdup* de líquido) em função do fator F_s , comparando com as correlações de Colwell (1981) e Bennett, Agrawal e Cook (1983).

Figura 40 – Perfil de fração volumétrica média (*holdup*) de líquido na espuma em função do fator F_s para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

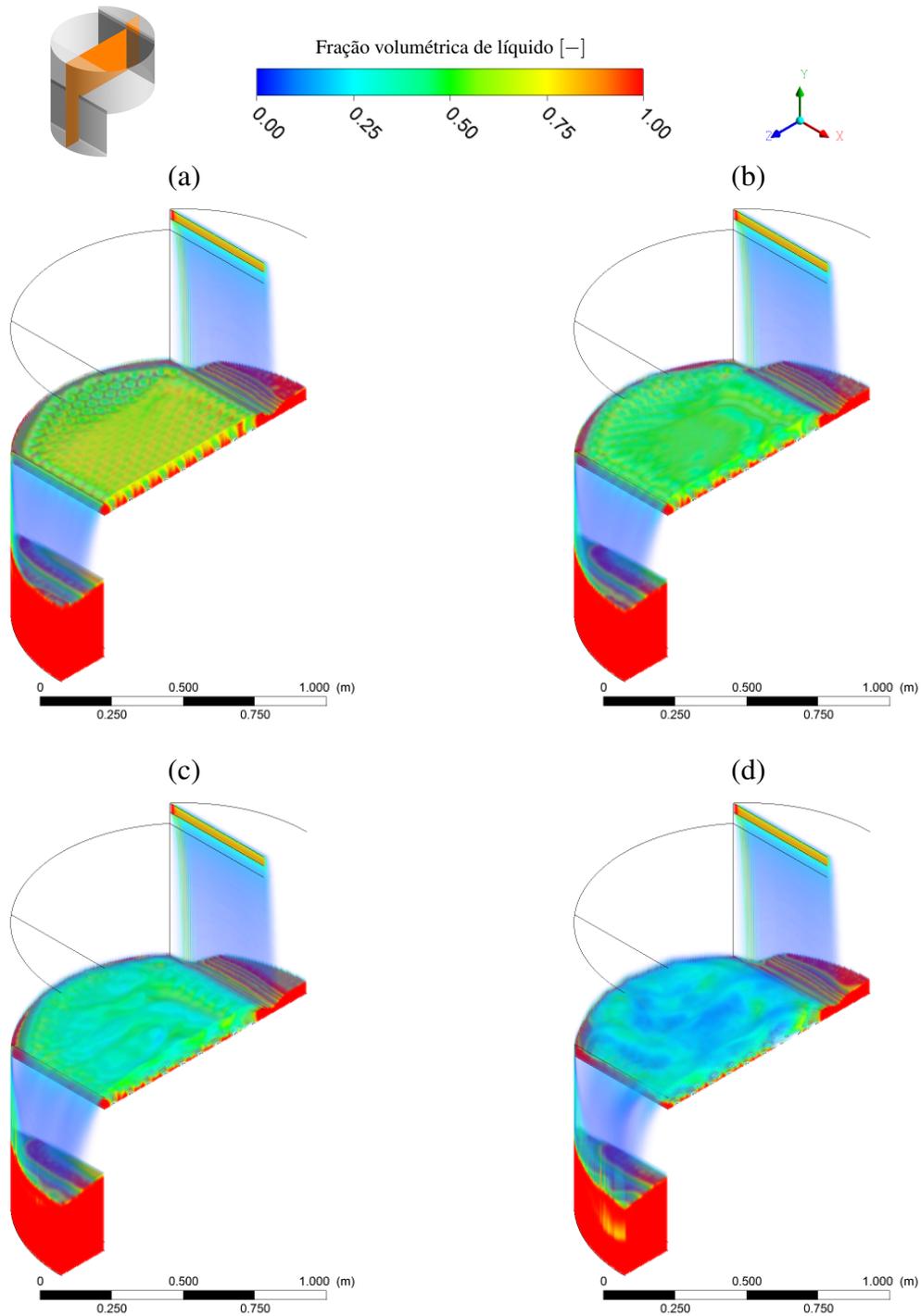
Os resultados da fração volumétrica média de líquido na espuma apresentaram valores que estão entre as correlações empíricas. Pode-se observar, que a fração volumétrica média de líquido na espuma diminui com o aumento da carga de vapor, apresentando os mesmos comportamentos obtidos através das correlações. Dessa maneira, a dificuldade de se encontrar correlações utilizando outros sistemas, como por exemplo, etanol e água, ainda é muito vago e assim, há a dificuldade de se obter resultados comparativos.

• Campos de fração volumétrica de líquido:

Com o intuito de ilustrar e detalhar o comportamento dos resultados obtidos dos parâmetros hidráulicos anteriormente para o escoamento não isotérmico, a Figura 41 apresenta os

campos de fração volumétrica de líquido através de renderização de volume para os quatro casos simulados.

Figura 41 – Distribuição de fração volumétrica de líquido no instante de 10 segundos através da renderização de volume para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e de F_s igual à: (a) 0,462, (b) 0,801, (c) 1,015 e (d) $1,464 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

É evidente o aumento da fração volumétrica (*holdup*) de vapor e da espuma sobre a região de borbulhamento no prato com o aumento da carga de vapor. Em sequência, partindo do

item (a) até o item (d) da Figura 41, o aumento da velocidade de vapor na entrada dos orifícios promove um comportamento mais desordenado aumentando a turbulência na fase líquida. É válido ressaltar, que o modelo de geometria proposto via CFD, não capta os fenômenos de gotejamento de líquido para o prato inferior (conhecido como *weeping*) e o arraste de líquido pela fase vapor para o prato superior, por não incluir regiões antes dos orifícios de entrada e depois dos orifícios de saída.

Como reportado na análise do escoamento isotérmico (água-ar), não foi possível formar a coluna de líquido no *downcomer* de entrada, independente da mudança das condições de vazão de vapor no prato.

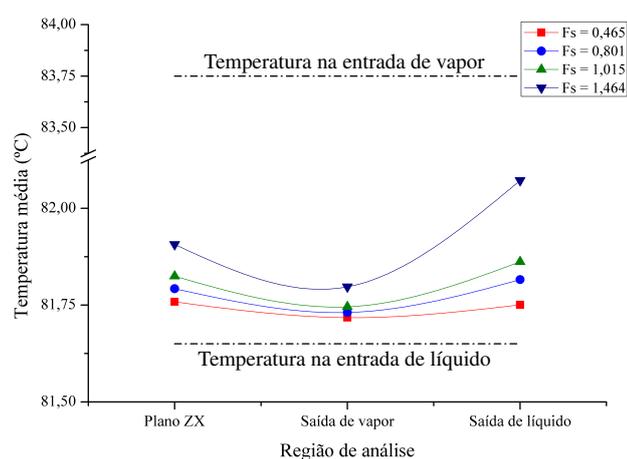
5.3.1.2 Transferência de energia

Escolheu-se a temperatura das fases para representar os resultados obtidos via CFD, na transferência de energia entre o líquido e o vapor sobre o prato perfurado. A seguir são apresentados os perfis de temperatura médio e os campos de temperatura de líquido, ambos em função do fator F_s .

- **Perfis de temperatura médio:**

Na Figura 42 é apresentado os perfis de temperatura média, monitorados em três regiões do domínio computacional para os quatro casos simulados.

Figura 42 – Perfil de temperatura média das fases líquida e vapor em função do fator F_s .



Fonte: Elaborado pelo autor.

As regiões analisadas da Figura 42 estão situadas em um plano ZX à 3,8 cm da base do prato e nas condições de contorno “saída de vapor” e “saída de líquido”. Para cada região, plano ZX e “saída de líquido”, calculou-se a temperatura média da fase líquida, e para “saída de vapor” a temperatura média da fase vapor entre os instantes de 5 à 10 segundos. As linhas paralelas e das extremidades (tracejada e pontilhada) representam os limites de temperatura do estágio, sendo

as temperaturas de entrada de líquido, 81,65 °C e de vapor, 83,75 °C. Nota-se, que os perfis de temperatura se apresentaram dentro desses limites, respeitando assim, a física do modelo. O prato perfurado, de modo geral apresentou uma baixa transferência de calor entre as fases para os casos simulados, principalmente para os valores de F_s entre 0,462 à 1,015. Já para o caso 4 ($F_s = 1,464$), observou-se uma troca de calor maior entre as fases, atingindo temperaturas mais elevadas que nos outros casos. Acredita-se, que isso se deu, pelo fato, que com o aumento de fluxo de vapor nos orifícios do prato, aumentou o tempo de contato entre as fases. Como as características geométricas simuladas foram baseadas no trabalho experimental de [Solari e Bell \(1986\)](#), a altura de represa do prato perfurado pode ter influenciado diretamente na transferência de calor entre as fases.

- **Campos de distribuição de temperatura de líquido:**

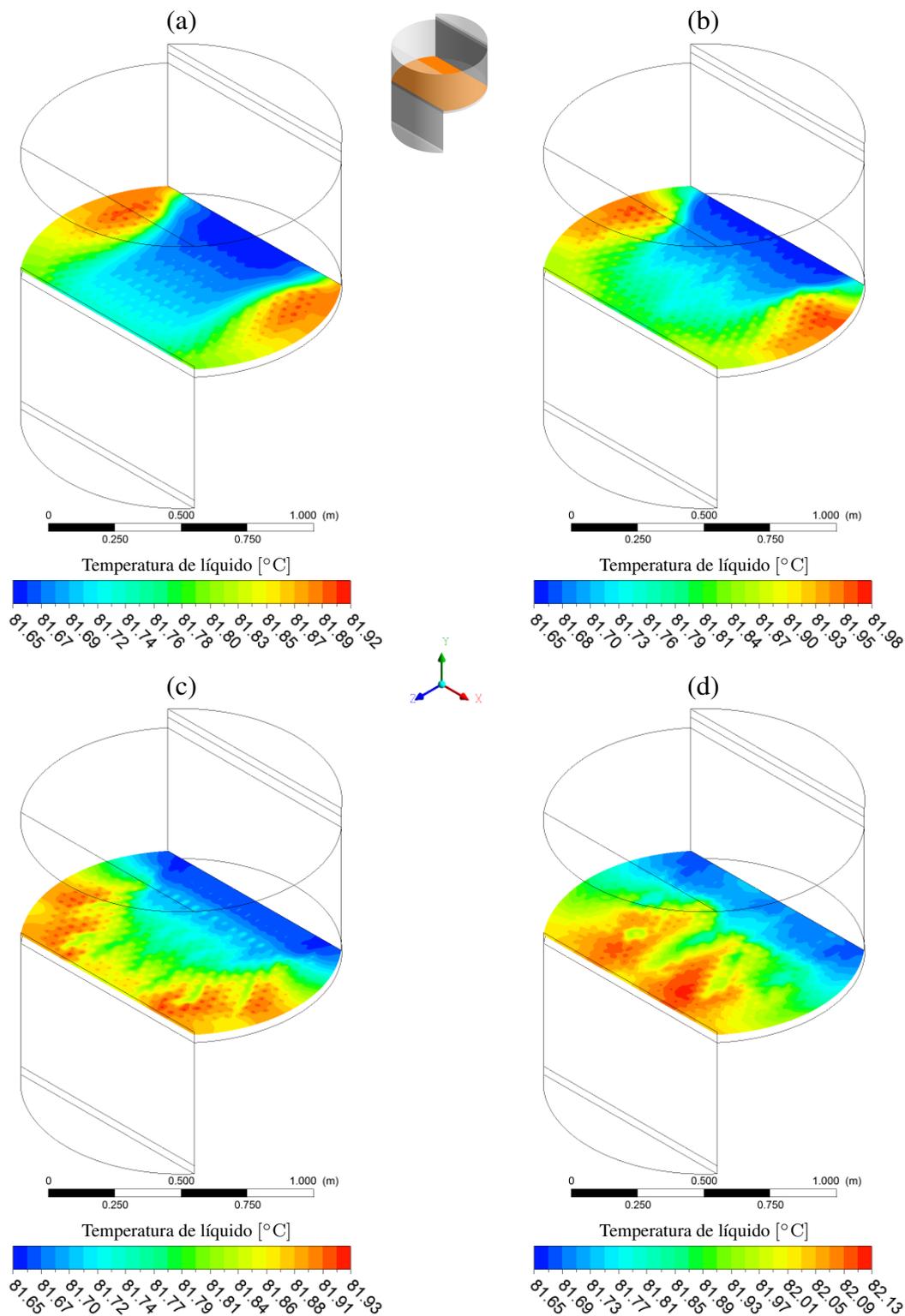
Outra maneira de contribuir para uma análise da temperatura de líquido sobre a região de borbulhamento, é apresentado na Figura 43.

De modo geral, é notório a influência da carga de vapor na transferência de calor entre as fases no prato perfurado. Sequencialmente, conforme exibido os itens da Figura 43, percebe-se uma variabilidade da distribuição de temperatura de líquido em função do aumento do fator F_s . Os campos de temperatura de líquido obtidos estão situados no plano ZX à 3,8 cm da base do prato para um instante de tempo de 10 segundos. Para ambos os casos simulados, foi possível observar a troca de calor entre as fases líquida e vapor no plano ZX. Nota-se, que para o item (a) da Figura 43, os campos de temperatura de líquido apresentaram um comportamento simétrico e contínuo ao longo em sentido ao vertedor do prato, com regiões mais quentes próximas às paredes e da entrada de líquido. No item (b), os campos de temperatura de líquido exibiram um comportamento semelhante ao do item (a), mas com o deslocamento da região mais quentes para a posição central próxima às paredes. O itens (c) e (d), apresentaram regiões mais quentes e de maior proporção ao longo do prato, seguindo em direção a vertedor.

As regiões mais quentes formadas, conforme ilustradas para os quatros casos em estudo, são devido a presença de má distribuição de fluxos no prato, como por exemplo, as zonas de recirculação e estagnação de líquido no prato. Como explicado exhaustivamente na literatura e detectado na análise do escoamento isotérmico do presente trabalho, os fenômenos de má distribuição além de afetar a transferência de calor entre as fases, interfere negativamente, na transferência de massa, limitando a separação dos componentes.

De maneira geral, a baixa variação da temperatura ao longo do prato perfurado pode ter sido limitado devida a temperatura das fases estarem próximas ao ponto de azeotropia.

Figura 43 – Mapas de contorno de distribuição de temperatura de líquido situado no plano-ZX a 3,8 cm da base do prato perfurado no instante de 10 segundos para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e de F_s igual à: (a) 0,462, (b) 0,801, (c) 1,015 e (d) 1,464 $\text{m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$.



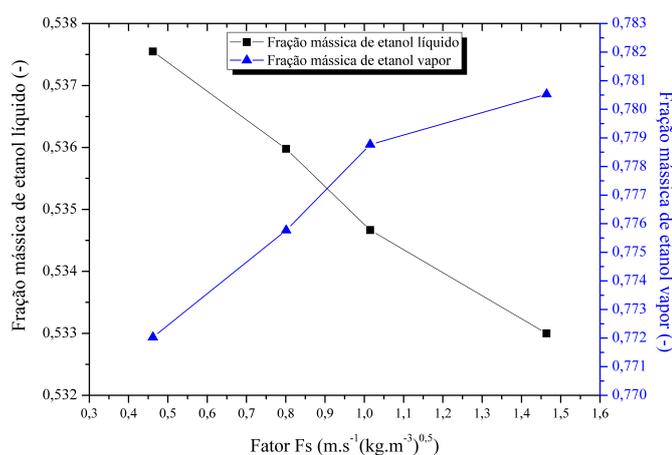
Fonte: Elaborado pelo autor.

5.3.1.3 Transferência de espécies químicas

• Distribuição de fração mássica do etanol:

A fim de se obter uma análise completa do escoamento dos fenômenos de transporte simultaneamente, apresentam-se na Figura 44, os perfis de fração mássica média de etanol nas fases líquida e vapor aplicado nas regiões de contorno de saída de líquido e da vapor.

Figura 44 – Perfil de fração mássica média de etanol na fase líquida e na vapor em função do fator F_s .



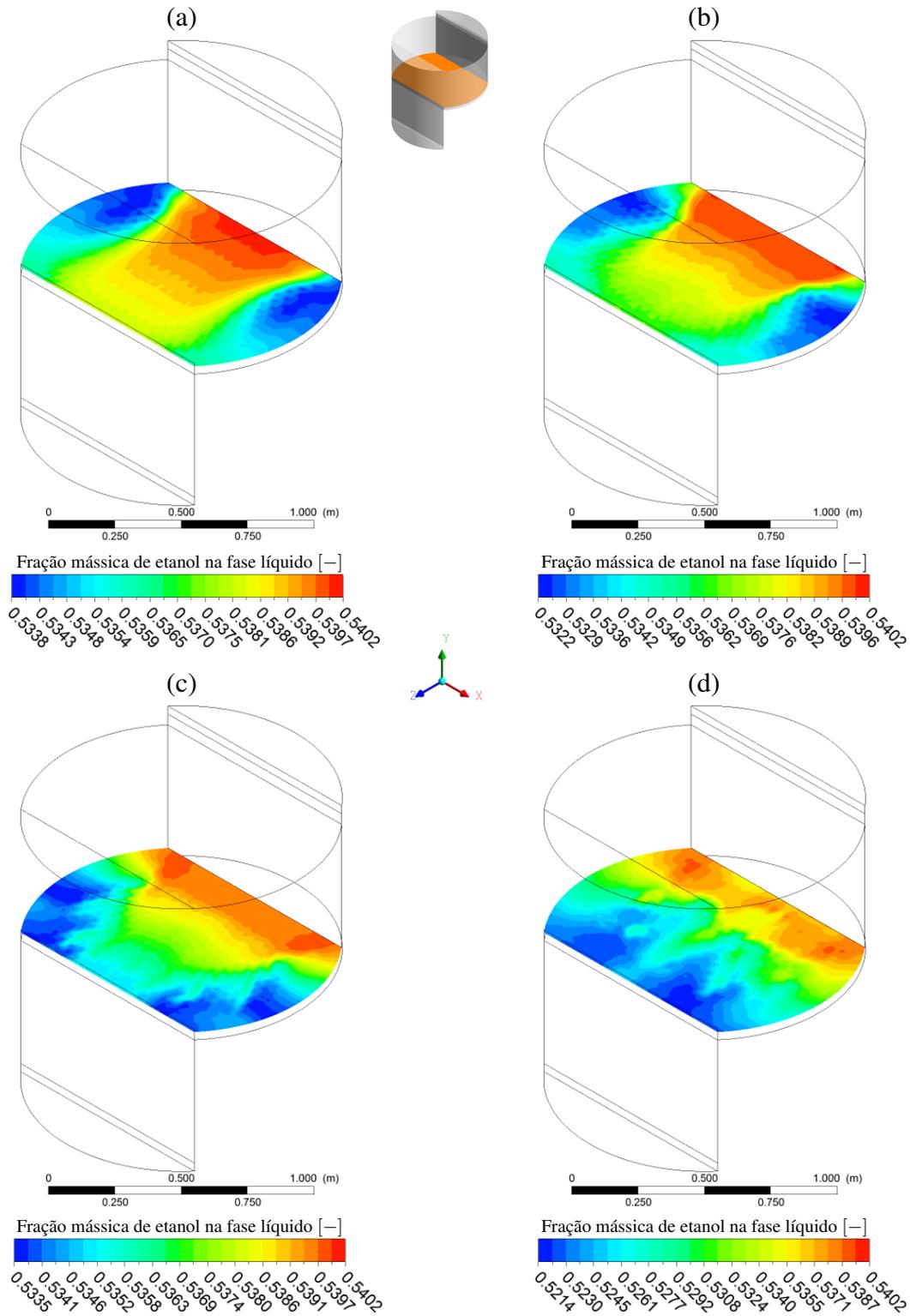
Fonte: Elaborado pelo autor.

Os valores médios das frações de etanol foram obtidos entre os instantes de 5 à 10 segundos do escoamento. No intuito de se obter as frações mássicas médias de etanol nos contornos, foram calculadas as médias (baseadas na área de cada região) para ambas as fases e em cada instante de tempo. Dessa maneira, pode-se calcular a média temporal das frações em suas respectivas regiões. Nota-se, que as frações mássicas de etanol apresentaram valores médios crescentes para a fase vapor e decrescentes para a líquida. Esse comportamento, de maneira geral, era esperado devido a transferência da espécie química (etanol) da fase líquida para a fase vapor com a influência da transferência de quantidade de movimento (velocidade e turbulência do escoamento) e de calor (diferença de temperatura entre as fases).

Como os valores médios das frações mássicas de etanol caracterizam um valor representativo para cada região analisada em função da carga de vapor, a Figura 45 ilustra os campos de distribuição de fração mássica de etanol na fase líquida no instante de 10 segundo do escoamento real.

A partir de um estado “quasi-estacionário” atingido no escoamento, nota-se que o líquido entra no prato com uma maior fração de etanol e a medida que a mistura líquida (etanol-água) transcorre sobre a região de borbulhamento em direção a represa, há uma redução na concentração de etanol na fase líquida, na qual este é o componente mais volátil. Em contrapartida, ocorre um aumento na concentração de água na fase líquida, sendo o componente menos volátil, nesse caso

Figura 45 – Campos de fração mássica do etanol no líquido situado no plano-ZX a 3,8 cm da base do prato perfurado no instante de 10 segundos para a condição operacional de $Q_{\alpha} = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e de F_s igual à: (a) 0,462, (b) 0,801, (c) 1,015 e (d) $1,464 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

a água. Essa variação das concentrações dos componentes na fase líquida é devida à transferência das espécies químicas com a fase vapor.

Observando os itens da Figura 45, nota-se que os gradientes de concentração apresentaram comportamentos bem distintos uns dos outros. Esse foi devido à influência da velocidade de vapor na entrada dos orifícios. De modo geral, as distribuições da fração mássica de etanol na fase líquida apresentaram perfis similares com o apresentado na transferência de energia (vide a Figura 43), por efeito dos padrões de fluxo provocado pela transferência de quantidade de movimento. Nos itens (a) e (b) da Figura 45, os maiores gradientes de concentração estão nas regiões próximas às paredes, na direção perpendicular do fluxo de líquido no prato. Já para os itens (c) e (d) da mesma Figura, as regiões de maiores gradientes de concentração estão localizadas próximas à represa do prato, indo em direção ao *downcomer* de saída do prato.

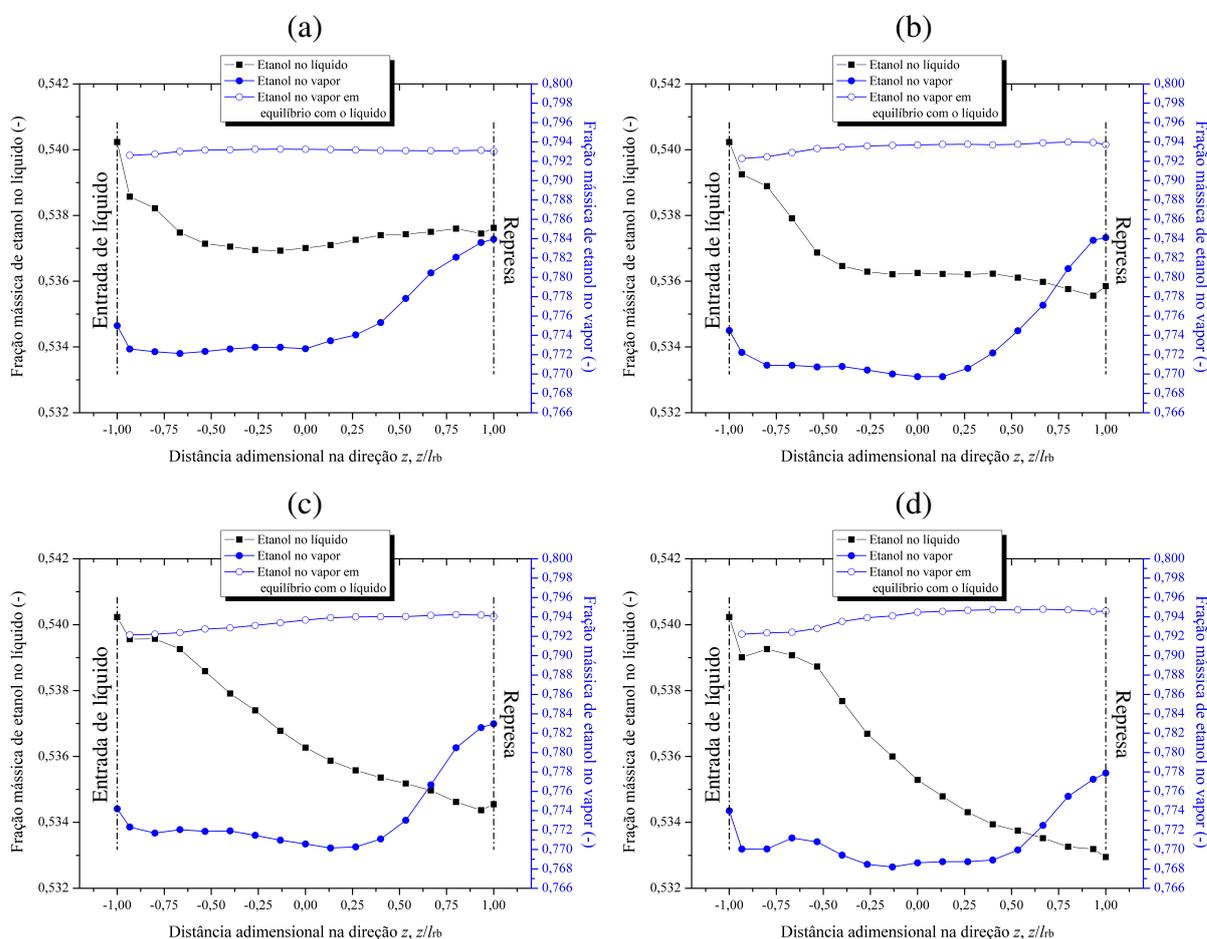
Pelo fato da mistura líquida apresentar variações de concentração ao longo do seu domínio, constata-se a formação de uma mistura não homogênea da fase líquida, ou seja, a fase líquida não possui um valor constante de fração mássica ao longo do estágio, consideração que é utilizada em alguns modelos macroscópicos. Assim, em busca de otimizar e analisar o escoamento com mais acurácia, os modelos macroscópicos não conseguem capturar ponto a ponto as propriedades importantes, havendo a necessidade de se realizar um estudo em CFD.

A fim de complementar a análise das frações mássicas de etanol obtidas anteriormente, a avaliação da fração mássica de etanol no vapor e no líquido em função da posição (ponto) é ilustrado pela Figura 46.

Como explicado na seção 4, os valores pontuais de fração mássica para ambas as fases foram obtidos ao dividir o domínio computacional em 15 subdomínios. Para cada condição operacional de F_s são apresentados os perfis das frações mássicas médias de etanol nas fases líquida e no vapor e também a fração mássica de etanol na fase vapor que estaria em equilíbrio com a fase líquida como função da posição ocupada no prato. Observando os itens de (a) a (d) da Figura 46, nota-se que a fração mássica de etanol na fase líquida sofre um decaimento da direção da entrada de líquido até a represa (delimitadas pelas pontilhadas e tracejadas na vertical). Já para a fração mássica de etanol na fase vapor, apresentou-se um valor aproximadamente constante ao longo de quase todo o comprimento da região de borbulhamento (l_{rb}) e aumentou na região próxima a represa do prato perfurado.

Ainda na Figura 46, os perfis de fração mássica de etanol na fase vapor que estaria em equilíbrio com a fase líquida que deixa o prato apresentaram-se com maior valor do que a fração de etanol no vapor que sai do domínio simulado. Desse modo, essa diferença de concentração indica que a transferência das espécies químicas (ou de massa) do estágio está longe da transferência de massa que aconteceria em um prato perfurado ideal.

Figura 46 – Variação pontual da fração mássica média de etanol no líquido, no vapor e no vapor que estaria em equilíbrio com o líquido em função da distância adimensional z (comprimento da região de borbulhamento, l_{rb}) para a condição operacional de $Q_{\alpha} = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e de F_s igual à: (a) 0,462, (b) 0,801, (c) 1,015 e (d) $1,464 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$.

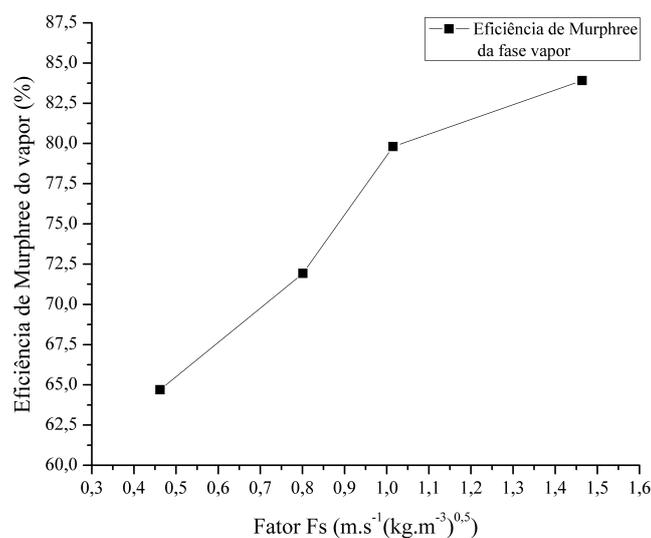


Fonte: Elaborado pelo autor.

5.3.2 Eficiência de separação dos componentes

A partir dos valores médios e pontuais das frações mássicas das fases apresentados anteriormente, pode-se calcular a eficiência de separação do componente etanol entre as fases para o prato perfurado. Assim, são apresentadas, a seguir, as eficiências média e pontual de separação obtidas através da eficiência de Murphree.

As frações mássicas de etanol para as fases serviram de base para se calcular a eficiência média de Murphree para o prato perfurado. Na Figura 47 são apresentados os valores médios de eficiência em função do fator F_s .

Figura 47 – Perfis de eficiência de Murphree da fase vapor em função do fator F_s .

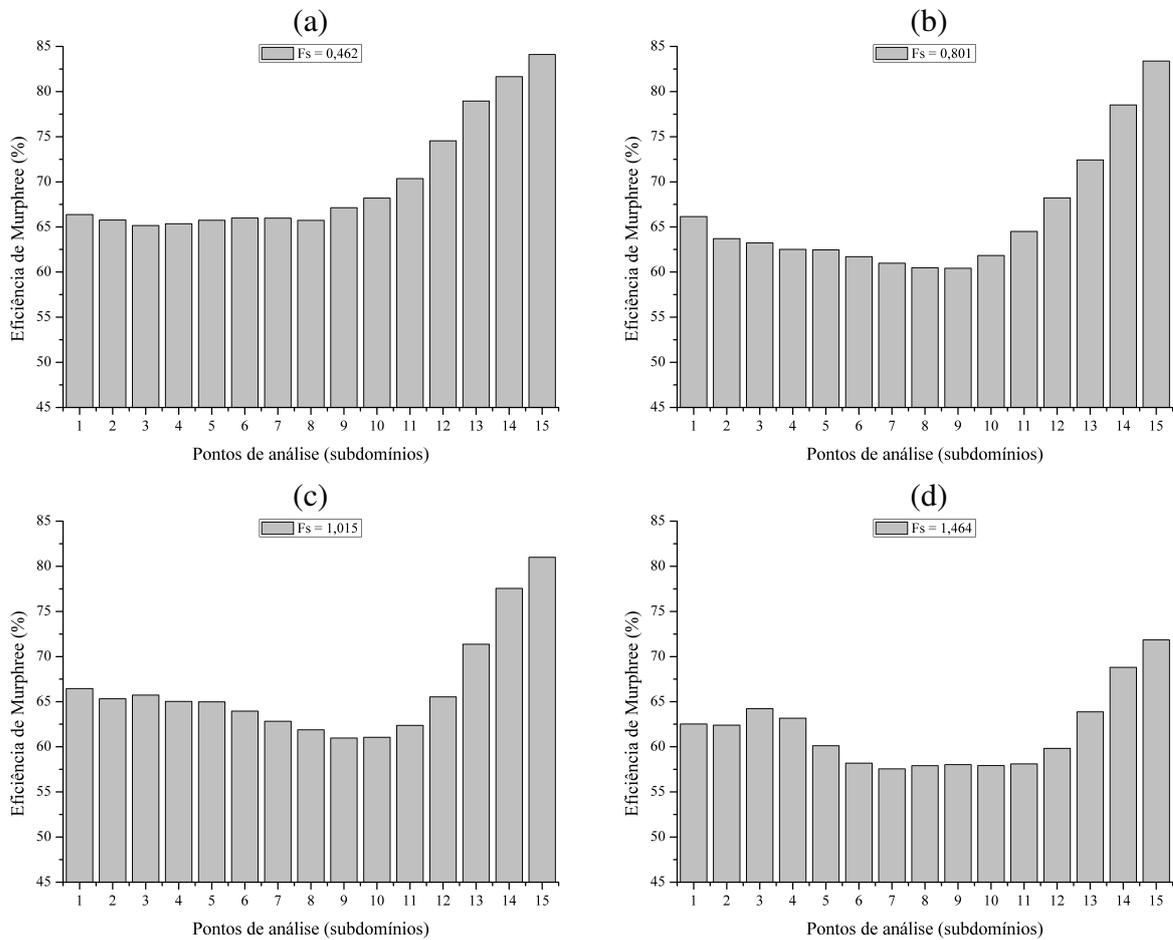
Fonte: Elaborado pelo autor.

Para determinar a eficiência de Murphree do estágio, conforme explicado na seção 4.3.3, relacionou-se o valor médio de fração mássica de etanol no vapor que entra e sai do estágio, com a média de fração de etanol que sairia do prato se estivesse em equilíbrio com o líquido que sai do estágio. É válido ressaltar, que as frações mássicas médias obtidas foram para um intervalo de 5 a 10 segundos de escoamento. Nota-se que a eficiência de Murphree apresentou um comportamento crescente devido a influência do fator F_s .

Outra forma de verificar com mais detalhes a eficiência de Murphree sobre o prato perfurado, a Figura 48 ilustra a eficiência Murphree local para os casos simulados.

É evidente a variação de eficiência em função do fator F_s quando se caminha da entrada de líquido (subdomínio 1) até a represa (subdomínio 15). De maneira geral, a eficiência aumenta na direção da represa. Uma interpretação para esse aumento, ao longo da trajetória para a represa, é baseado no conceito de tempo de residência de líquido no prato. Desse modo, o líquido próximo à entrada do prato possui um menor tempo de residência no estágio que o líquido próximo à represa. Sendo a transferência de massa fortemente influenciada pelo tempo de contato entre as fases líquida e vapor, este comportamento é observado.

Figura 48 – Variação pontual da eficiência de Murphree do vapor em função dos subdomínios para a condição operacional de $Q_\alpha = 6,94 \times 10^{-3} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ e de F_s igual à: (a) 0,462, (b) 0,801, (c) 1,015 e (d) 1,464 $\text{m} \cdot \text{s}^{-1} (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^{0,5}$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Por fim, pode-se observar, que o líquido próximo à represa terá efetuado uma maior transferência de espécies químicas. Quando o escoamento se aproxima da represa, ela passa a funcionar como um bloqueio para o escoamento da fase líquida, proporcionando um efeito de retorno do líquido, produzindo uma região de maior tempo de contato entre as fases líquida e vapor, aumentando assim, a temperatura do líquido e consequentemente a eficiência nessa região.

6 CONCLUSÕES

De acordo com os estudos numéricos apresentados para o prato perfurado de coluna de destilação, pode-se destacar as seguintes conclusões obtidas através da análise de CFD:

- Foi possível determinar incerteza numérica através do procedimento GCI, na qual essa análise foi muito importante para calcular o erro de discretização. A malha 2 apresentou uma incerteza numérica de 3,26% para a variável altura de líquido claro, um valor considerado baixo em termo de erro de discretização, considerando uma malha numérica confiável para ser utilizada nas simulações dos casos isotérmico e não isotérmico;
- No escoamento isotérmico foi possível comparar os campos de velocidade de líquido obtidos via CFD com os dados de [Solari e Bell \(1986\)](#). As geometrias sem DE e com DE apresentaram em conformidade com os dados de [Solari e Bell \(1986\)](#), na qual ficou bem destacado a influência do *downcomer* de entrada no escoamento. Conclui-se que, o domínio computacional com DE influenciou diretamente no escoamento do prato perfurado devida não formação da coluna de líquido na região do *downcomer* de entrada. Essa não formação da coluna de líquido pode ter ocorrido pela escolha da condição de contorno e/ou pela condição operacional utilizada;
- Para o estudo não isotérmico (etanol-água), a influência da carga de vapor (F_s) influenciou diretamente nos parâmetros hidráulicos do prato perfurado, podendo observar a redução da altura de líquido claro e o aumento da altura de espuma conforme se aumentava o fator F_s . Em relação a transferência de energia entre as fases líquida e vapor, foi possível observar os gradientes de temperatura de líquido formados ao longo da região de borbulhamento do prato e a influência da velocidade de vapor de entrada do prato na troca térmica entre as fases. Foi possível verificar e constatar a transferência de espécies químicas entre as fases, ao qual apresentou variações das frações mássicas médias de etanol em função da carga de vapor. O uso da constante de equilíbrio termodinâmico (K^e) foi calculado nó a nó do domínio computacional, evitando assim, uso de um valor constante, ao qual restringiria a transferência de massa no estágio;
- Para a separação do etanol, foi possível quantificar a eficiência através da equação de Murphree. As eficiências de Murphree do estágio e pontuais apresentaram valores acima do que encontrados na literatura. Assim, observou-se a não homogeneidade da mistura nas fases líquida e vapor, evidenciando a importância da análise da eficiência em diferentes regiões do estágio;
- Por fim, as técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD) mostraram-se ser uma ferramenta muito importante para a análise de escoamento em pratos perfurados de

destilação e seu uso deve ser usado de maneira cautelosa, na busca de otimizar projetos e estabelecer estratégias de condições operacionais em estágios de destilação.

7 SUGESTÕES PARA TRABALHO FUTUROS

As seguintes sugestões são indicadas para o avanço no conhecimento nos processos de destilação:

- Estudar e elaborar a otimização de geometrias objetivando minimizar os fenômenos que influenciam na transferência de massa e energia;
- Testar e propor modelos de coeficiente de arraste, verificando assim sua influência no escoamento;
- Estudar e implementar outros modelos de transferência de massa entre as fases, verificando assim sua influência no escoamento;
- Testar outros modelos de turbulência, além do $k-\epsilon$ e do *shear stress transport*;
- Testar esquemas de alta ordem (*high resolution*), pois na maioria dos trabalhos é utilizado o esquema *upwind* devido a facilidade da convergência da solução;
- Testar outras condições para tentar simular o acúmulo de líquido no *downcomer* de entrada e, conseqüentemente, ter uma melhor representação do perfil de entrada de líquido no prato.

Referências

- ALHO, A. T. P.; ILHA, A. Simulação numérica de escoamentos complexos. In: *Anais da V Escola de Primavera em Transição e Turbulência*. [S.l.: s.n.], 2006.
- ANSYS, Inc. *ANSYS CFX-Solver Modeling Guide*. Canonsburg, PA, 2012.
- ANSYS, Inc. *ANSYS Meshing User's Guide*. Canonsburg, PA, 2012.
- 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*. 268 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) — Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas–UNICAMP, Campinas-SP, 1997.
- BELL, R. L.; SOLARI, R. B. Effect of nonuniform velocity fields and retrograde flow on distillation tray efficiency. *AIChE Journal*, v. 20, n. 4, p. 688–695, 1974.
- BENNETT, D. L.; AGRAWAL, R.; COOK, P. J. New pressure drop correlation for sieve tray distillation columns. *AIChE Journal*, v. 29, n. 3, p. 434–442, 1983.
- BIDDULPH, M. W. Tray efficiency is not constant. *Hydrocarbon Processing*, v. 56, n. 10, p. 145–148, 1977.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Fenômenos de transporte*. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004. 838 p.
- BLAZEK, J. *Computational fluid dynamics: principles and applications*. 2. ed. Amsterdam: Elsevier, 2005. 470 p.
- CALDAS, J. N. *Internos de torres: pratos e recheios*. 1. ed. Rio de Janeiro: EdUERJ, 2003. 466 p.
- CD-adapco. *Computational Dynamics Analysis & Design Application Company Ltd (CD-adapco)*. 2016. Acessado: janeiro de 2016. Disponível em: <<http://en.wikipedia.org/wiki/CD-adapco/>>.
- CELIK, I. B. et al. Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications. *Journal of fluids Engineering-Transactions of the ASME*, v. 130, n. 7, p. 1–4, 2008.
- CHERIC. *Chemical Engineering and Materials Research Information Center*. 1995. Acessado: agosto de 2015. Disponível em: <<http://www.cheric.org/research/kdb/>>.
- CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. *Bubbles, Drops and Particles*. 1. ed. New York: Academic Press, 1978. 380 p.
- COLWELL, C. J. Clear liquid height and froth density on sieve trays. *Industrial Engineering Chemistry Process Design Development*, v. 20, n. 2, p. 298–307, 1981.
- DAVIDSON, J. F.; MECH, A. M. I.; SCHULER, B. O. G. Bubble formation at an orifice in a viscous liquid. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, v. 38, p. 105–115, 1960.

- FAIR, J. R.; TRUTNA, W. R.; SEIBERT, A. F. A new, ultracapacity tray for distillation columns. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 77, n. 7, p. 619–626, 1999.
- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. *Computational methods for fluid dynamics*. 3. ed. Berlin: Springer, 2002. 423 p.
- FISCHER, C. H.; QUARINI, G. L. Three-dimensional heterogeneous modeling of distillation tray hydraulics. In: *AIChE Annual Meeting*. [S.l.: s.n.], 1998.
- FORTUNA, A. d. O. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. 1. ed. São Paulo: EdUSP, 2000. 426 p.
- FOUST, A. S. et al. *Princípios das operações unitárias*. 2. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1982. 670 p.
- GESIT, G.; NANDAKUMAR, K.; CHUANG, K. T. CFD modeling of flow patterns and hydraulics of commercial-scale sieve trays. *AIChE Journal*, v. 49, n. 4, p. 910–924, 2003.
- HIGBIE, R. The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure. *Transactions of American Institute of Chemical Engineers*, v. 31, n. 0, p. 365–389, 1935.
- HIMMELBLAU, D. M. *Process analysis by statistical methods*. 1. ed. New York: John Wiley, 1970. 463 p.
- HIRSCHBERG, S.; WIJN, E. F.; WEHRLI, M. Simulating the two phase flow on column trays. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 83, n. 12, p. 1410–1424, 2005.
- HOFHUIS, P. A. M.; ZUIDERWEG, F. J. Sieve plates: dispersion density and flow regimes. In: *Inst. Chem. Eng. Symp. Ser.* [S.l.: s.n.], 1979. v. 56.
- HUGHMARK, G. A. Mass and heat transfer from rigid spheres. *AIChE Journal*, v. 13, n. 6, p. 1219–1221, 1967.
- INCROPERA, F. P. et al. *Fundamentos de transferência de calor e de massa*. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008. 643 p.
- ISHII, M.; ZUBER, N. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. *AIChE Journal*, v. 25, n. 5, p. 843–855, 1979.
- JUSTI, G. H. *Aplicação da fluidodinâmica computacional na avaliação da hidrodinâmica de estágio em colunas de destilação*. 118 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) — Departamento de Engenharia Química (DEQ), Universidade Federal de São Carlos—UFSCar, São Carlos-SP, 2012.
- KAESER, M.; PRITCHARD, C. L. The impact of heat transfer on murphree tray efficiency. *Energy*, v. 31, n. 15, p. 3108–3116, 2006.
- KISTER, H. Z. *Distillation operation*. 1. ed. Boston: McGraw-Hill, 1989. 729 p.
- KISTER, H. Z. *Distillation design*. 1. ed. Boston: McGraw-Hill, 1992. 710 p.
- KLER, S. C.; LAVIN, J. T. Simulation of flow on distillation trays. *Gas Separation & Purification*, v. 2, n. 1, p. 34–40, 1988.

- KORETSKY, M. D. *Termodinâmica para engenharia química*. 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007. 502 p.
- KRISHNA, R. et al. Rise velocity of a swarm of large gas bubbles in liquids. *Chemical Engineering Science*, v. 54, n. 2, p. 171–183, 1999.
- KRISHNA, R. et al. Cfd simulations of sieve tray hydrodynamics. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 77, n. 7, p. 639–646, 1999.
- LAUNDER, B.; SPALDING, D. B. *Lectures in mathematical models of turbulence*. 1. ed. London: Academic Press Inc, 1972. 176 p.
- LAVIN, J. T.; URUA, I. J. Distillation trays with non-circular holes: expanded metal trays. *Gas Separation & Purification*, v. 6, n. 1, p. 3–8, 1992.
- LEWIS, W. K. The efficiency and design of rectifying columns for binary mixtures. *The Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, v. 14, n. 6, p. 492–496, 1922.
- LIU, C. J. et al. A fluid-dynamic model for flow pattern on a distillation tray. *Chemical Engineering Science*, v. 55, n. 12, p. 2287–2294, 2000.
- LOCKETT, M. J. *Distillation tray fundamentals*. 1. ed. New York: Cambridge University Press, 1986. 226 p.
- LOPEZ, F.; CASTELLS, F. Influence of tray geometry on scaling up distillation efficiency from laboratory data. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 38, n. 7, p. 2747–2753, 1999.
- MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. 2. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004. 453 p.
- MALVIN, A.; CHAN, A.; LAU, P. L. Large eddy simulation of distillation sieve tray hydrodynamics using volume-of-fluid (VOF) multiphase model. In: *Proceedings of the World Congress on Engineering and Computer Science*. [S.l.: s.n.], 2010. v. 2.
- MARANGONI, C. *Implementação de uma estratégia de controle com ação distribuída em uma coluna de destilação*. 151 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) — Universidade Federal de Santa Catarina–UFSC, Florianópolis-SC, 2005.
- MCCABE, W. L.; THIELE, E. W. Graphical design of fractionating columns. *Industrial and 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. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 76, n. 7, p. 843–848, 1998.
- MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*, v. 32, n. 8, p. 1598–1605, 1994.
- MURPHREE, E. V. Rectifying column calculations. *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 17, n. 7, p. 747–750, 1925.
- NASA. *Examining Spatial (Grid) Convergence*. 2008. Acessado: janeiro de 2016. Disponível em: <<http://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/tutorial/spatconv.html>>.
- NETO, A. S. *Turbulência nos Fluidos Aplicada*. Universidade Federal de Uberlândia, Faculdade de Engenharia Mecânica, 2004.

- NORILER, D. *Modelagem matemática multifásica e simulação tridimensional e transiente para sistemas gás-líquido: o caso do escoamento líquido-vapor em colunas de destilação*. 185 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) — Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas–UNICAMP, Campinas-SP, 2007.
- NORILER, D. et al. Simultaneous momentum, mass, and energy transfer analysis of a distillation sieve tray using CFD techniques: prediction of efficiencies. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 49, n. 14, p. 6599–6611, 2010.
- NORILER, D. et al. Thermal fluid dynamics analysis of gas-liquid flow on a distillation sieve tray. *Chemical Engineering Journal*, v. 136, n. 2–3, p. 133–143, 2008.
- OLIVEIRA, G. C. de. *Aplicação de técnicas de CFD na melhoria da eficiência de estágio em colunas de destilação para produção de etanol*. 152 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) — Departamento de Engenharia Química (DEQ), Universidade Federal de São Carlos–UFSCar, São Carlos-SP, 2014.
- PATANKAR, S. V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. 1. ed. New York: Routledge, 1980. 197 p.
- PERRY, R. H.; GREEN, D. W. *Perry's chemical engineers' handbook*. 8. ed. New York: McGraw-Hill, 2008. 2704 p.
- PESCARINI, M. H. *Desenvolvimento de um algoritmo para simulação de coluna de destilação multicomponentes em estado estacionário utilizando a modelagem de estágio de não equilíbrio*. 341 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) — Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas–UNICAMP, Campinas-SP, 1996.
- PINTO, J. C.; LAGE, P. L. d. C. *Métodos numéricos em problemas de engenharia química*. 1. ed. Rio de Janeiro: E-Papers Serviços Editoriais, 2001. 316 p.
- POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. *The properties of gases and liquids*. 5. ed. New York: McGraw-Hill, 2000. 707 p.
- PONCHON, M. Application of graphs to the study of commercial fractional distillation. *Technique Moderne*, v. 13, p. 20–55, 1921.
- RAHIMI, M. R.; KARIMI, H. CFD simulation of hydraulics of sieve trays with gas mal-distribution. *Chemical Product and Process Modeling*, v. 5, n. 1, p. 1–21, 2010.
- RAHIMI, M. R. et al. Prediction of temperature and concentration distributions of distillation sieve trays by CFD. *Tamkang Journal of Science and Engineering*, v. 9, n. 3, p. 265–278, 2006.
- RAHIMI, R.; AMERI, A.; SETOODEH, N. Effect of inlet downcomer on the hydrodynamic parameters of sieve trays using CFD analysis. *Journal of Chemical and Petroleum Engineering*, v. 45, n. 1, p. 27–38, 2011.
- RAHIMI, R. et al. Efficiencies of sieve tray distillation columns by CFD simulation. *Chemical Engineering & Technology*, v. 29, n. 3, p. 326–335, 2006.
- RAHIMI, R.; SOTOODEH, M. M.; BAHRAMIFAR, E. The effect of tray geometry on the sieve tray efficiency. *Chemical Engineering Science*, v. 76, p. 90–98, 2012.

- RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R. Evaporation from drops. *Chemical Engineering Progress*, v. 48, p. 141–146, 1952.
- ROACHE, P. J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. *Journal of Fluids Engineering*, v. 116, p. 405–413, 1994.
- SAKATA, M. et al. The effect of hole size on sieve tray performance. In: *2007 Spring Meeting & 3rd Global Congress on Process Safety*. [S.l.: s.n.], 2007.
- SMITH, J. M.; NESS, H. C. V.; ABBOTT, M. M. *Introdução a termodinâmica da engenharia química*. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007. 626 p.
- SOARES, C. *Desenvolvimento de uma metodologia para avaliação numérica e experimental do escoamento líquido/vapor em colunas de destilação*. 212 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) — Faculdade de Engenharia Química, 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, n. 4, p. 640–649, 1986.
- SOREL, E. *Distillation et rectification industrielle*. 1899. Acessado: junho de 2015. Disponível em: <<http://archive.org/stream/distillationetr00soregoog#page/n5/mode/2up>>.
- STANDART, G. Studies on distillation-V: generalized definition of a theoretical plate or stage of contacting equipment. *Chemical Engineering Science*, v. 20, n. 6, p. 611–622, 1965.
- STAUDT, P. B. *Modelagem e simulação dinâmica de colunas de destilação*. 124 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul–UFRGS, Porto Alegre-RS, 2007.
- SULZER. *Separation technology: conventional trays*. 2015. Acessado: julho de 2015. Disponível em: <<http://www.sulzer.com/en/Products-and-Services/Separation-Technology/Conventional-Trays>>.
- SUN, Z. et al. Prediction of distillation column performance by computational mass transfer method. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, v. 19, n. 5, p. 833–844, 2011.
- TELEKEN, J. G. et al. CFD simulation of multiphase flow in a sieve tray of a distillation column. *Brazilian Journal of Petroleum and Gas*, v. 3, n. 3, p. 93–102, 2009.
- TU, J.; YEOH, G. H.; LIU, C. *Computational fluid dynamics: a practical approach*. 1. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2008. 456 p.
- UNICA. *Consumo de combustíveis no Brasil: Etanol hidratado*. 2016. Acessado: janeiro de 2016. Disponível em: <<http://www.unicadata.com.br/historico-de-consumo-de-combustiveis.php?idMn=11&tipoHistorico=10&acao=visualizar&idTabela=1708&produto=Etanol%20Bhidratado%20Bcombust%2526iacute%253Bvel&nivelAgregacao=1>>.
- VAN BATEN, J. M.; KRISHNA, R. Modelling sieve tray hydraulics using computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Journal*, v. 77, n. 3, p. 143–151, 2000.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. 2. ed. Harlow: Pearson Education, 2007. 503 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, n. 10, p. 2556–2567, 2004.
- WANKAT, P. C. *Separation process engineering: includes mass transfer analysis*. 3. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2012. 954 p.
- WEST, F. B.; GILBERT, W. D.; SHIMIZU, T. Mechanism of mass transfer on bubble plates. *Industrial & Engineering Chemistry*, v. 44, n. 10, p. 2470–2478, 1952.
- WIJN, E. F. The effect of downcomer layout pattern on tray efficiency. *The Chemical Engineering Journal and the Biochemical Engineering Journal*, v. 63, n. 3, p. 167–180, 1996.
- WILCOX, D. C. Multiscale model for turbulent flows. *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*, v. 26, n. 11, p. 1311–1320, 1988.
- WILCOX, D. C. *Turbulence modeling for CFD*. 2. ed. California: DCW Industries, 2004. 540 p.
- YANAGI, T.; SAKATA, M. Performance of a commercial scale 14% hole area sieve tray. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, v. 21, n. 4, p. 712–717, 1982.
- YU, K. T. et al. Computational fluid-dynamics and experimental verification of two-phase two-dimensional flow on a sieve column tray. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 77, n. 6, p. 554–560, 1999.
- ZANUTTO, C. P. *Aplicação de técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) na avaliação da hidrodinâmica e da transferência de massa em estágio de coluna de destilação*. 197 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) — Departamento de Engenharia Química (DEQ), Universidade Federal de São Carlos–UFSCar, São Carlos-SP, 2015.
- ZAREI, A.; HOSSEINI, S. H.; RAHIMI, R. CFD and experimental studies of liquid weeping in the circular sieve tray columns. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 91, n. 12, p. 2333–2345, 2013.
- ZAREI, A.; HOSSEINI, S. H.; RAHIMI, R. Cfd study of weeping rate in the rectangular sieve trays. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, v. 44, n. 1, p. 27–33, 2013.
- ZAREI, T.; RAHIMI, R.; ZIVDAR, M. Computational fluid dynamic simulation of MVG tray hydraulics. *Korean Journal of Chemical Engineering*, v. 26, n. 5, p. 1213–1219, 2009.
- ZHANG, M. et al. Downcomer mixing and its effect on distillation tray efficiency. *Transactions of Tianjin University*, v. 4, n. 1, p. 17–23, 1998.

Anexos

Na seção **A** é apresentado com mais detalhes os resultados adicionais da incerteza numérica e as equações utilizadas para o cálculo do procedimento GCI.

Nas seções **C** e **B** serão apresentados as propriedades e as equações para o cálculo das propriedades físicas das substâncias, respectivamente. Para diferenciar a nomenclatura das substâncias e das fases serão adotados os subscritos *A* para o componente etanol, *B* para o componente água, α para fase líquida e β para a fase vapor.

ANEXO A – Procedimento GCI

Para se determinar a incerteza numérica do procedimento GCI seguiu-se as seguintes etapas:

- **Etapa 1:** A partir das malhas numéricas construídas, deve-se calcular um tamanho representativo dos elementos (h) de cada malha e ordenar o tamanho dos elementos em ordem crescente, isto é, $h_1 < h_2 < h_3$.

$$h = \left[\frac{1}{N_{T,n}} \sum_{i=1}^N (\Delta V_i) \right]^{1/3} \quad (\text{A.1})$$

onde $N_{T,i}$ é o número total de elementos da malha i e $\sum(\Delta V_i)$ é a somatória de cada volume i dos elementos da malha.

- **Etapa 2:** Com os valores dos tamanhos representativos obtidos na etapa anterior, deve-se calcular a razão de refinamento (r) para cada par de malha.

$$r_{ji} = \frac{h_j}{h_i} \quad (\text{A.2})$$

- **Etapa 3:** Após definida a propriedade (ϕ) de análise (por exemplo: a velocidade, a pressão, a fração volumétrica, entre outras de interesse), deve-se calcular a diferença entre os valores da propriedade (ϵ) de cada malha:

$$\epsilon_{ji} = \phi_j - \phi_i \quad (\text{A.3})$$

- **Etapa 4:** Calcular a ordem aparente (p), através das equações abaixo:

$$p = \frac{1}{\ln(r_{ji})} \left| \ln \left| \frac{\epsilon_{kj}}{\epsilon_{ji}} \right| + q(p) \right| \quad (\text{A.4})$$

$$q(p) = \ln \left(\frac{r_{ji}^p - s}{r_{kj}^p - s} \right) \quad (\text{A.5})$$

$$s = 1 \operatorname{sinal} \left(\frac{\epsilon_{kj}}{\epsilon_{ji}} \right) \quad (\text{A.6})$$

onde $\operatorname{sinal}()$ é a função sinal. Para o cálculo da ordem aparente recorre-se a métodos iterativo, pois a Equação A.4 depende de $q(p)$ e a Equação A.5 depende de p .

- **Etapa 5:** Após determinado a ordem aparente na etapa calcular, calcula-se o valor da propriedade extrapolada ϕ_{ext} .

$$\phi_{ext}^{ji} = \frac{(r_{ji}^p \phi_i - \phi_j)}{r_{ji}^p - 1} \quad (\text{A.7})$$

- **Etapa 6:** Encontrar os erros relativos aproximado (e_a^{ji}) e extrapolado (e_{ext}^{ji}):

$$e_a^{ji} = \left| \frac{\phi_i - \phi_j}{\phi_i} \right| \quad (\text{A.8})$$

$$e_{ext}^{ji} = \left| \frac{\phi_{ext}^{ji} - \phi_i}{\phi_{ext}^{ji}} \right| \quad (\text{A.9})$$

- **Etapa 7:** Calcular as incertezas numéricas para as malhas refinada ($GCI_i^{refinada}$) e grosseira ($GCI_j^{grosseira}$):

$$GCI_i^{refinada} (\%) = 100 \times \frac{F_{sec} e_a^{ji}}{r_{ji}^p - 1} \quad (\text{A.10})$$

$$GCI_j^{grosseira} (\%) = 100 \times \frac{r_{ji}^p F_{sec} e_a^{ji}}{r_{ji}^p - 1} \quad (\text{A.11})$$

onde F_{sec} é o fator de segurança e adota-se um valor igual 1,25.

ANEXO B – Cálculo das propriedades físicas

- Capacidade calorífica (à pressão constante), C_p :

$$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4 \quad (\text{B.1})$$

onde: C_p capacidade calorífica, [kJ kmol⁻¹ K⁻¹]
 T temperatura, [K]

Tabela 18 – Valores dos coeficientes da equação da capacidade calorífica.

Coeficientes	Fases			
	Líquida (α)		Vapor (β)	
	Etanol (A)	Água (B)	Etanol (A)	Água (B)
A	-67,444	50,811	19,959	33,763
B	1,843	0,213	0,143	$-5,946 \times 10^{-3}$
C	$-7,298 \times 10^{-3}$	$-6,310 \times 10^{-4}$	$7,763 \times 10^{-5}$	$2,236 \times 10^{-5}$
D	$1,052 \times 10^{-5}$	$6,483 \times 10^{-7}$	$-1,513 \times 10^{-7}$	$-9,962 \times 10^{-9}$
E	0	0	$5,366 \times 10^{-11}$	$1,097 \times 10^{-12}$

Fonte: [CHERIC \(1995\)](#).

- Coeficiente de atividade, γ :

$$\ln(\gamma_A) = -\ln(x_A + \Lambda_{AB}x_B) + x_B \left(\frac{\Lambda_{AB}}{x_A + \Lambda_{AB}x_B} - \frac{\Lambda_{BA}}{x_B + \Lambda_{BA}x_A} \right) \quad (\text{B.2})$$

$$\ln(\gamma_B) = -\ln(x_B + \Lambda_{BA}x_A) - x_A \left(\frac{\Lambda_{AB}}{x_A + \Lambda_{AB}x_B} - \frac{\Lambda_{BA}}{x_B + \Lambda_{BA}x_A} \right) \quad (\text{B.3})$$

$$\Lambda_{ij} = \frac{v_j}{v_i} \exp\left(-\frac{a_{ij}}{RT}\right) \quad (\text{B.4})$$

onde: γ coeficiente de atividade, [-]
 a_{ij} parâmetro de interação binária, [cal mol⁻¹]
 R constante dos gases ideais, [cal mol⁻¹ K⁻¹]
 T temperatura, [K]
 v volume molar, [cm³ mol⁻¹]
 x fração molar, [-]
 Λ parâmetro de interação binária, [-]

- Condutividade térmica, λ :

$$\lambda_{\beta} = A + B T + C T^2 + D T^3 \quad (\text{B.5})$$

onde: λ condutividade térmica, [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]
 T temperatura, [K]

Tabela 19 – Valores dos coeficientes da equação da condutividade térmica.

Coeficientes	Fases			
	Líquida (α)		Vapor (β)	
	Etanol (A)	Água (B)	Etanol (A)	Água (B)
A	0,263	-0,3838	$-7,797 \times 10^{-3}$	$7,341 \times 10^{-3}$
B	$-3,847 \times 10^{-4}$	$5,254 \times 10^{-3}$	$4,167 \times 10^{-5}$	$-1,013 \times 10^{-5}$
C	$2,211 \times 10^{-7}$	$-6,369 \times 10^{-6}$	$1,214 \times 10^{-7}$	$1,801 \times 10^{-7}$
D	0	0	$-5,184 \times 10^{-11}$	$-9,100 \times 10^{-11}$

Fonte: [CHERIC \(1995\)](#).

- Difusividade, D_{AB} :

Fase líquida:

$$\begin{aligned} \ln(D_{AB,\alpha}) = & x_B \ln(D_{AB}^{\circ}) + x_A \ln(D_{BA}^{\circ}) + 2 \left[x_A \ln\left(\frac{x_A}{\phi_A}\right) + x_B \ln\left(\frac{x_B}{\phi_B}\right) \right] + \\ & 2x_A x_B \left[\frac{\phi_A}{x_A} \left(1 - \frac{\lambda_A}{\lambda_B}\right) + \frac{\phi_B}{x_B} \left(1 - \frac{\lambda_B}{\lambda_A}\right) \right] + \\ & x_B q_A \left[(1 - \theta_{BA}^2) \ln(\tau_{BA}) + (1 - \theta_{BB}^2) \tau_{AB} \ln(\tau_{AB}) \right] + \\ & x_A q_B \left[(1 - \theta_{AB}^2) \ln(\tau_{AB}) + (1 - \theta_{AA}^2) \tau_{BA} \ln(\tau_{BA}) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

$$D_{AB}^{\circ} = \frac{7,4 \times 10^{-8} (\phi_{Assoc,B} MM_B)^{\frac{1}{2}} T}{\mu_{A,\alpha} V_{b,A}} \quad (\text{B.7})$$

$$D_{BA}^{\circ} = \frac{7,4 \times 10^{-8} (\phi_{Assoc,A} MM_A)^{\frac{1}{2}} T}{\mu_{B,\alpha} V_{b,B}} \quad (\text{B.8})$$

$$\theta_{ij} = \frac{\theta_i \tau_{ij}}{\sum_l \theta_l \tau_{lj}} \quad (\text{B.9})$$

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_l x_l q_l} \quad (\text{B.10})$$

$$\tau_{ij} = \exp\left(-\frac{a_{ij}}{T}\right) \quad (\text{B.11})$$

$$\phi_i = \frac{x_i \lambda_i}{\sum_l x_l \lambda_l} \quad (\text{B.12})$$

$$\lambda_i = \sqrt[3]{r_i} \quad (\text{B.13})$$

onde:

$D_{AB,\alpha}$	difusividade da fase líquida, [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]
a_{ij}	parâmetros binários ajustáveis de interação molecular, [-]
D_{AB}^o	difusividade em diluição infinita do soluto A no solvente B , [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]
D_{BA}^o	difusividade em diluição infinita do soluto B no solvente A , [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]
MM	massa molecular, [g mol^{-1}]
Q_k	parâmetro UNIQUAC, [-]
q_i	parâmetro de volume UNIFAC, [-]
R_k	parâmetro UNIQUAC, [-]
r_i	parâmetro de superfície UNIFAC, [-]
T	temperatura, [K]
V_b	volume molar do soluto na temperatura de ebulição, [$\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$]
x	fração molar, [-]
μ	viscosidade dinâmica, [cP]
ϕ_{Assoc}	fator de associação do solvente, [-]

$$r_i = \sum_k v_k^{(i)} R_k \quad (\text{B.14})$$

$$q_i = \sum_k v_k^{(i)} Q_k \quad (\text{B.15})$$

Fase vapor:

$$D_{AB,\beta} = \frac{2,66 \times 10^{-3} T^{\frac{3}{2}}}{P (MM_{AB})^{\frac{1}{2}} (\sigma_{AB})^2 \Omega_D} \quad (\text{B.16})$$

$$MM_{AB} = 2 \left(\frac{1}{MM_A} + \frac{1}{MM_B} \right)^{-1} \quad (\text{B.17})$$

$$\sigma_{AB} = (\sigma_A \sigma_B)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.18})$$

$$\sigma = \left(\frac{1,585 V_b}{1 + 1,3 \delta^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{B.19})$$

$$\delta = \frac{1,94 \times 10^3 \mu_p^2}{V_b T_b} \quad (\text{B.20})$$

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(D T^*)} + \frac{E}{\exp(F T^*)} + \frac{G}{\exp(H T^*)} + \frac{0,19 \delta_{AB}^2}{T^*} \quad (\text{B.21})$$

$$T^* = \frac{T}{\epsilon_{AB}/k} \quad (\text{B.22})$$

$$\frac{\epsilon_{AB}}{k} = \left(\frac{\epsilon_A \epsilon_B}{k \ k} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.23})$$

$$\frac{\epsilon}{k} = 1,18 \left(1 + 1,3 \delta^2 \right) \quad (\text{B.24})$$

$$\delta_{AB} = (\delta_A \delta_B)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.25})$$

onde:

$D_{AB,\beta}$	difusividade da fase vapor, [cm ² s ⁻¹]
k	constante de Boltzmann, [-]
P	pressão, [bar]
T	temperatura, [K]
T_b	temperatura no ponto de ebulição, [K]
δ	parâmetro polar, [-]
ϵ	energia característica de Lennard-Jones, [-]
μ_p	momento dipolar, [debye]
σ	comprimento característico de Lennard-Jones, [-]
Ω_D	integral de colisão, [-]

Tabela 20 – Valores das constante da integral de colisão (Equação B.21).

Constantes	A	B	C	D	E	F	G	H
Valores	1,06036	0,1561	0,193	0,47635	1,03587	1,52996	1,76474	3,89411

Fonte: Poling, Prausnitz e O'connell (2000).

- Massa específica, ρ :

Fase líquida:

$$\rho_{A,\alpha} = \frac{A}{B \left[1 + \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^D \right]} \quad (\text{B.26})$$

$$\rho_{B,\alpha} = A + B \tau^{0,35} + C \tau^{\frac{2}{3}} + D \tau + E \tau^{\frac{4}{3}} \quad (\text{B.27})$$

$$\tau = 1 - \frac{T}{647,096} \quad (\text{B.28})$$

Fase vapor:

$$\ln \left(\frac{\rho_{A,\beta}}{\rho_c} \right) = A \theta^{\frac{2}{3}} + B \theta^{\frac{5}{3}} + C \theta^{\frac{10}{3}} + D \theta^{\frac{16}{3}} \quad (\text{B.29})$$

$$\theta = 1 - \frac{T}{T_c} \quad (\text{B.30})$$

onde:

ρ	massa específica, [mol dm ⁻³]
T	temperatura, [K]
ρ_c	massa específica crítica, [mol dm ⁻³]
T_c	temperatura crítica, [K]

Tabela 21 – Valores dos coeficientes das equações da massa específica.

Coeficiente	Fase		
	Líquida (α)		Vapor (β)
	Etanol (A)	Água (B)	Etanol (A)
A	1,6288	17,863	-8,35647816638
B	0,27469	58,606	-2,38721859682
C	514	-95,396	-39,6946441837
D	0,2318	213,89	-9,99133502692
E	–	-141,26	–

Fonte: [CHERIC \(1995\)](#), [Perry e Green \(2008\)](#).

- Pressão de vapor, P^{vap} :

$$\ln(P^{\text{vap}}) = A - \frac{B}{T + C} \quad (\text{B.31})$$

onde: P^{vap} difusividade da fase vapor, [bar]
 T temperatura, [K]

Tabela 22 – Valores dos coeficientes da equação de pressão de vapor.

	A	B	C
Etanol	12,2917	3803,98	-41,68
Água	11,6834	3816,44	-46,13

Fonte: [Koretsky \(2007\)](#).

- Tensão superficial, σ :

Fase líquida:

$$\sigma_{\text{mis},\alpha} = X_A \sigma_A + X_B \sigma_B \quad (\text{B.32})$$

$$\sigma = K (P_c)^x (T_b)^y (T_c)^z \left(\frac{1 - T_r}{1 - T_{b,r}} \right)^m \quad (\text{B.33})$$

onde: σ tensão superficial, [dina cm⁻¹]
 P_c pressão crítica, [K]
 T_b temperatura no ponto de ebulição, [K]
 $T_{b,r}$ temperatura no ponto de ebulição reduzida, [-]
 T_c temperatura crítica, [K]
 T_r temperatura reduzida, [-]
 X fração mássica, [-]

Tabela 23 – Valores das constante do modelo de tensão superficial.

	K	x	y	z	m
Álcoois	2,28	0,25	0,175	0	0,8
Ácidos	0,125	0,50	-1,5	1,85	11/9
Todos outros	0,158	0,50	-1,5	1,85	11/9

Fonte: Poling, Prausnitz e O'connell (2000).

- Viscosidade dinâmica, μ :

Fase líquida:

$$\ln(\mu_\alpha) = A + \frac{B}{T} + C T^2 + D T^2 \quad (\text{B.34})$$

Fase vapor:

$$\mu_\beta = A + B T + C T^2 \quad (\text{B.35})$$

onde: μ viscosidade dinâmica, [cP]
 T temperatura, [K]

Tabela 24 – Valores dos coeficientes da equação da viscosidade dinâmica.

Coeficientes	Fases			
	Líquida (α)		Vapor (β)	
	Etanol (A)	Água (B)	Etanol (A)	Água (B)
A	-6,21	-24,71	$1,396 \times 10^{-4}$	$-3,189 \times 10^{-3}$
B	1.614	4.209	$2,848 \times 10^{-5}$	$4,145 \times 10^{-5}$
C	$6,18 \times 10^{-3}$	$4,527 \times 10^{-2}$	$1,241 \times 10^{-9}$	$-8,272 \times 10^{-10}$
D	$-1,132 \times 10^{-5}$	$-3,376 \times 10^{-5}$	–	–

Fonte: [CHERIC \(1995\)](#).

ANEXO C – Propriedades físicas

Tabela 25 – Propriedades das substâncias puras e em mistura.

Propriedades	Substâncias		Unidades
	Etanol	Água	
Massa específica crítica, ρ_c	5,991	17,874	[mol dm ⁻³]
Massa molecular, MM	46,0688	18,0152	[kg kmol ⁻¹]
Momento dipolar, μ_p	1,7	1,8	[debyes]
Pressão crítica, P_c	61,48	220,64	[bar]
Temperatura crítica, T_c	513,92	647,14	[K]
Temperatura no ponto de ebulição, T_b	351,52	373,15	[K]
Volume molar no ponto de ebulição, V_b	59,20	18,90	[cm ³ mol ⁻¹]
Constante dos gases ideais, R	1,987		[cal mol ⁻¹ K ⁻¹]

Fonte: Perry e Green (2008), Poling, Prausnitz e O'connell (2000).

Tabela 26 – Parâmetros UNIQUAC.

Parâmetros	Grupos			
	CH ₃	CH ₂	OH	H ₂ O
Q_k	0,848	0,54	1,2	1,4
R_k	0,9011	0,6744	1,0	0,92
$v_k^{(i)}$	1	1	1	1

Fonte: Poling, Prausnitz e O'connell (2000).