

Universidade Federal de Santa Catarina

Centro Tecnológico – CTC

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Joel Gustavo Teleken

ANÁLISE DA FLUIDODINÂMICA DO PRATO
PERFURADO DE UMA UNIDADE PILOTO DE
DESTILAÇÃO

Florianópolis, Fevereiro/2009

Joel Gustavo Teleken

ANÁLISE DA FLUIDODINÂMICA DO PRATO
PERFURADO DE UMA UNIDADE PILOTO DE
DESTILAÇÃO

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina como parte integrante dos requisitos exigidos para obtenção do título de mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Prof. Dr. Ricardo A. F. Machado

Prof. Dr. Marinho Bastos Quadri

Florianópolis, Fevereiro/2009

ANÁLISE DA FLUIDODINÂMICA DO PRATO PERFURADO DE UMA UNIDADE PILOTO DE DESTILAÇÃO

Por

Joel Gustavo Teleken

Dissertação julgada para obtenção do título de **Mestre em Engenharia Química**, área de concentração **Desenvolvimento de Processos Químicos e Biotecnológicos** e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina.

Prof. Dr. Ricardo Antonio Francisco Machado
orientador

Prof. Dr. Marinho Bastos Quadri
co-orientador

Prof. Dr. Leonel Teixeira Pinto
Coordenador do CPGENQ

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Antonio Francisco Machado

Prof. Dr. Marinho Bastos Quadri

Dr. Ana Paula Meneguelo

Prof. Dr. João Inácio Soletti

Prof. Dr. Ariovaldo Bolzan

Este trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Controle de Processos do Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos, Centro Tecnológico, Universidade Federal de Santa Catarina.

Contou com o apoio financeiro do programa: **PRH-ANP/MCT N^o 34**: Formação de Engenheiros nas Áreas de Automação, Controle e Instrumentação para a Indústria do Petróleo e Gás.



Em especial à Minha Família,
pelo apoio incondicional
durante este processo de
aprendizagem.

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Dr. Ricardo Antonio Francisco Machado pela orientação, oportunidade, confiança, pelos conhecimentos transmitidos, pelo acompanhamento competente, pela amizade e principalmente pela paciência.

Ao Co-orientador, Professor Dr. Marinho Bastos Quadri pelo apoio, idéias e orientação que contribuíram para o desenvolvimento do trabalho.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina, em especial ao Laboratório de Controle de Processos, que ofereceu totais condições através de seu suporte logístico, para a realização do trabalho.

Agradeço ao CLAUMANN e ao PIAIÁ pela valiosa e abnegada ajuda na utilização do CFX.

À Agência Nacional do Petróleo – ANP, pelo apoio financeiro prestado por intermédio de seu Programa de Recursos Humanos para Formação de Engenheiros no Setor de Petróleo e Gás – PRH34.

Aos professores, João Inácio Soletti, Ana Paula Meneguelo, Marinho Bastos Quadri, Ariovaldo Bolzan e Ricardo Antônio Francisco Machado, participantes da banca de defesa desta dissertação por terem aceito avaliar este trabalho.

À todos os colegas de laboratório, meus colegas de turma, professores e funcionários que me acolheram, conviveram e contribuíram a tornar meus projetos realidade. Aos amigos Iaçanã, Diogo, Leandro e demais colegas do laboratório pela amizade e companheirismo durante esta jornada.

À minha família, que sempre estiveram incondicionalmente ao meu lado e me ensinaram a seguir em frente durante esta caminhada minha eterna gratidão.

RESUMO

O processo de destilação é amplamente utilizado em refinarias de petróleo porém, a maioria dos estudos que envolvem colunas de destilação estão fundamentados por modelos macroscópicos de conservação de massa e de energia, como por exemplo, os modelos de estágios de equilíbrio e não equilíbrio, nos quais os aspectos fluidodinâmicos do escoamento são restritos e orientados a medição de parâmetros macroscópicos. Neste trabalho é estudada a habilidade da fluidodinâmica computacional em modelar a complexa hidrodinâmica de pratos perfurados em colunas de destilação, afim de analisar o processo com uma abordagem microscópica. Para tanto objetiva-se a proposição de um modelo microscópico de conservação de quantidade de movimento, em condições de escoamento turbulento sob a influência da fase vapor, para representar a fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor em prato perfurado de uma unidade piloto de destilação, com validação através da correlação experimental de Bennett et. al., (1983), e então analisar qual a influência, que as resistências utilizadas para controle com aquecimento distribuído da unidade piloto de destilação que estão sobre as superfícies dos pratos, tem sobre a fluidodinâmica do escoamento, além de um estudo sobre os fenômenos de transferência de calor e massa para uma mistura binária de etanol e água. A metodologia numérica consistiu em iniciar com o estudo de escoamento monofásico, passado para o multifásico em um prato perfurado, utilizando-se um modelo homogêneo e tridimensional. Após a validação deste modelo a partir da correlação experimental de Bennett et. al., (1983), estudou-se a influência que as resistências tem na sua hidrodinâmica, além de estudar os fenômenos de transferência de calor e massa para a mistura binária. Na análise dos resultados obtidos concluiu-se primeiramente que o modelo homogêneo, tridimensional, multifásico apresenta uma boa concordância com a correlação experimental de Bennett et. al., (1983), além de observar-se a ocorrência de diferentes padrões de escoamento na superfície do prato no interior de uma coluna de destilação de acordo com a vazão de vapor e a presença das resistências sobre a superfície dos pratos, sendo o escoamento não uniforme. Além disto, o fluxo de líquido próximo a parede tem uma tendência de retroceder, o que resulta no fenômeno de circulação que ocorre devido ao componente radial de velocidade sofrer um maior impacto do campo de pressão em comparação ao componente axial. Os efeitos de borbulhamento provocados pela fase vapor aumentam a energia cinética turbulenta do líquido fluindo horizontalmente. Também observou-se que a presença das resistências sobre a superfície do prato influenciam nos padrões de fluxo sobre o mesmo.

ABSTRACT

The distillation process is widely used in oil refineries but greater part of researches involving distillation columns are based on macroscopic models of mass and energy conservation, as an example there are the equilibrium and non-equilibrium stage models. In these cases the fluid dynamics characteristics are restricted in measuring macroscopic parameters. For this reason, it is studied the ability of computational fluid dynamics (CFD) to model the complex two-phase hydrodynamics of sieve trays from the distillation columns in order to analyze the process with a microscopic approach. It is proposed the development, implementation and application of a microscopic model for momentum conservation subjected to turbulent flow of the vapour phase, to represent fluid dynamics of vapor-liquid flow in a perforated plate distillation pilot plant, with validation through correlation of experimental Bennett et. al. (1983), and then examine the influence that the resistance used to control heating of distributed distillation pilot plant that are on the surfaces of dishes, exerts on the fluid dynamic flow, besides a study on the phenomena of heat transfer and mass for a binary mixture of ethanol and water. The numerical methodology consisted to make a deep study of flow with single phase, past the multiphase in the sieve tray, using a homogeneous, three dimensions, multiphase model. After the validation of this model from the experimental correlation of Bennett et. al., (1983), it was studied the influence that the resistances have on its hydrodynamic, in addition to studying the phenomena of heat transfer and mass for the binary mixture. It was concluded that there is the occurrence first that the homogeneous model, three-dimensional, multiphase shows a good agreement with the experimental correlation of Bennett et. al., (1983), it is also observed different flow patterns inside the distillation column according to the gas flow and plate geometry and the flow is not uniform in the plate surface. Besides, there is a liquid flow tendency to go back near the wall, resulting in a circulating zone, probably due to the radial flow velocity component suffering greater impact of a pressure field in comparison to the axial flow velocity component. The effects of the bubbling increase the turbulent kinetic energy and are very important in the study of the liquid-vapor flow in sieve trays of a distillation column. It also notes that the vapor phase, when in contact with the liquid flowing horizontally. It was also observed that the presence of resistance on the surface of the plate influences flow patterns on it.

LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 3.1 Esquema de uma coluna de destilação simples com uma alimentação, condensador total e refeedor parcial.</i>	12
<i>Figura 4.1 Localização dos pontos da função de Interpolação.</i>	25
<i>Figura 4.2 Soluções com presença de (a) oscilação numérica, (b) difusão numérica.</i>	28
<i>Figura 5.1 Situação física a ser modelada.</i>	31
<i>Figura 5.2 Esquema de uma coluna de destilação.</i>	33
<i>Figura 5.3 Domínio físico 3-DMult.</i>	41
<i>Figura 5.4 Malha Numérica Gerada para o escoamento 3-D Multifásico Homogêneo.</i>	42
<i>Figura 5.5 Domínio físico 3-D multifásico homogêneo I.</i>	43
<i>Figura 5.6 Malha do modelo 3-D multifásico homogêneo I.</i>	44
<i>Figura 5.7 Domínio físico 3-D multifásico homogêneo II.</i>	45
<i>Figura 5.8 Malha do modelo 3-D multifásico homogêneo II.</i>	46
<i>Figura 6.1 Sistema de Estudo Multifásico.</i>	58
<i>Figura 6.2 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso A 3-D Mult.</i>	60
<i>Figura 6.3 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso B 3-D Mult.</i>	62
<i>Figura 6.4 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso C 3-D Mult.</i>	63
<i>Figura 6.5 Sistema de Estudo Multifásico.</i>	64
<i>Figura 6.6 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso A 3-D MultI.</i>	67
<i>Figura 6.7 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso B 3-D MultI.</i>	69
<i>Figura 6.8 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso C 3-D MultI.</i>	70
<i>Figura 6.9 Comparação entre o Modelo 3-DHom com a correlação de Bennett et. al. (1983) para altura de líquido claro para uma velocidade de alimentação de água de 0,0067 (m/s).</i>	71
<i>Figura 6.10 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso D 3-D MultI.</i>	73

<i>Figura 6.11 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso E 3-D Multi.</i>	74
<i>Figura 6.12 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso F 3-D Multi.</i>	76
<i>Figura 6.13 Comparação entre o Modelo 3-DHom com a correlação de Bennett et. al. (1983) para altura de líquido claro para uma velocidade de alimentação de água de 0,06 (m/s).</i>	77
<i>Figura 6.14 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso G 3-D Multi.</i>	78
<i>Figura 6.15 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso H 3-D Multi.</i>	80
<i>Figura 6.16 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso I 3-D Multi.</i>	82
<i>Figura 6.17 Comparação entre o Modelo 3-DHom com a correlação de Bennett et. al. (1983) para altura de líquido claro para uma velocidade de alimentação de água de 0,1 (m/s).</i>	83
<i>Figura 6.18 Disposição da Resistência sobre a superfície do prato na Unidade Piloto de Destilação.</i>	84
<i>Figura 6.19 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso A 3-D MultiII.</i>	85
<i>Figura 6.20 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso B 3-D MultiII.</i>	87
<i>Figura 6.21 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso C 3-D MultiII.</i>	89
<i>Figura 6.22 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso A 3-D MultiIII.</i>	91
<i>Figura 6.23 Distribuição da Fração Molar de Etanol na Mistura Líquida (A) e Vapor (B) para o Caso A 3-D MultiIII.</i>	92
<i>Figura 6.24 Distribuição da Fração Molar de Água na Mistura Líquida (A) e Vapor (B) para o Caso A 3-D MultiIII.</i>	92
<i>Figura 6.25 Distribuição da Fração volumétrica da mistura de etanol e água na fase líquida e vapor e os vetores velocidade para o Caso A 3-D MultiIV.</i>	94
<i>Figura 6.26 Distribuições das frações molares de etanol e água nas misturas líquida e vapor par ao Caso A 3-D MultiIV.</i>	95
<i>Figura 6.27 Distribuição da Fração volumétrica da mistura de etanol e água na fase líquida e vapor e os vetores velocidade para o Caso B 3-D MultiIV.</i>	97

Figura 6.28 Distribuições das frações molares de etanol e água nas misturas líquida e vapor par ao Caso B 3-D MultIV. _____ 98

LISTA DE TABELAS

<i>Tabela 5.1 Constantes do Modelo k-ε padrão.</i>	37
<i>Tabela 5.2 Parâmetros geométricos para estudo de Caso Mult.</i>	41
<i>Tabela 5.3 Parâmetros geométricos para estudo de Caso Multi I.</i>	44
<i>Tabela 5.4 Parâmetros geométricos para estudo de Caso Mult II.</i>	46
<i>Tabela 5.5 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo.</i>	47
<i>Tabela 5.6 Parâmetros utilizados no modelo de equilíbrio.</i>	51
<i>Tabela 5.7 Dados para calculo da pressão de vapor via Equação de Antoine.</i>	51
<i>Tabela 5.8 Resumo das condições de contorno para solução dos modelos multifásicos propostos.</i>	54
<i>Tabela 6.1 Variação das Velocidades nas Simulações dos Modelos Propostos.</i>	57
<i>Tabela 6.2 Propriedades Físicas do Líquido e do Ar.</i>	58
<i>Tabela 6.3 Condições Operacionais utilizadas para solução do Modelo Multifásico Homogêneo</i>	59
<i>Tabela 6.4 Velocidades dos Estudos de Caso para o Modelo Multifásico Homogêneo.</i>	59
<i>Tabela 6.5 Propriedades Físicas dos Fluidos Para Escoamento 3-D Multi.</i>	65
<i>Tabela 6.6 Condições Operacionais para o Modelo 3-D Multi.</i>	65
<i>Tabela 6.7 Velocidades dos Estudos de Caso para o Modelo Multifásico Homogêneo I.</i>	66
<i>Tabela 6.8 Velocidades dos Estudos de Caso para o Modelo Multifásico Homogêneo II</i>	84
<i>Tabela 6.9 Condições de Operação para o Modelo Multifásico Homogêneo III e IV.</i>	90
<i>Tabela 6.10 Velocidades dos Estudos de Caso para o Modelo Multifásico Homogêneo III.</i>	90
<i>Tabela 6.11 Velocidades dos Estudos de Caso para o Modelo Multifásico Homogêneo II.</i>	93

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Latinas

A	Área	[m ²]
A _B	Área de borbulhamento no prato	[m ²]
A _H	Área total dos furos ativos no prato	[m ²]
A _g	Área interfacial por unidade de volume	[m ²]
A _i	Constante da Equação de Antoine	
B _i	Constante da Equação de Antoine	
C _i	Constante da Equação de Antoine	
a, b	Coefficientes	
C	Parâmetro utilizado na correlação de Bennett <i>et. al.</i> (1983)	
C _μ	Constante do modelo de turbulência	
C _{ε1}	Constante do modelo de turbulência	
C _{ε2}	Constante do modelo de turbulência	
C _D	Coefficiente de arraste	
D	Diâmetro da coluna	[m]
d	Diâmetro dos furos	[m]
d _g	Diâmetro médio das bolhas	[m]
f	Fração volumétrica	
F	Parcela difusiva, força resistiva	
\dot{F}	Vazão mássica de Alimentação	[kg/s]
F _R	Força de arraste	
F _s	Força gerada pela tensão superficial	
G _T	Geração de turbulência	

g	Vetor aceleração da gravidade	$[m/s^2]$
h	Altura de líquido no prato	$[m]$
H	Entalpia	
h_{cl}	Altura de líquido claro no prato	$[m]$
$h_{g,l}$	Coefficiente global de transferência de calor	$[J/s\ m^2\ K]$
h_w	Altura da represa	$[m]$
$h_{g,l}$	Coefficiente global de transferência de calor	
K	Energia cinética turbulenta	$[m^2/s^2]$
L	Taxa de vazão de líquido	$[m^3/s\ m]$
\dot{L}	Vazão mássica de líquido	$[kg/s]$
L_s	Escala de comprimento	$[m]$
\dot{M}	Vazão mássica	$[kg/s]$
$M_{g,l}$	Transferência de momento	
Nu	Número de Nusselt	
\mathbf{n}	Vetor normal	
P	Pressão	$[Pa]$
P^{sat}	Pressão de Saturação	$[Pa]$
Pe	Número de Peclet	
Pr	Número de Prandt	
Q	Fluxo difusivo	
Q_L	Vazão volumétrica de líquido	$[m^3/s]$
$Q_{g,l}$	Taxa de transferência de energia	
r	Raio	$[m]$
Re	Número de Reynolds	
S	Termo fonte	
T	Temperatura	$[K]$

t	Tempo	[s]
u	Componente de velocidade na direção x	[m/s]
u_s	Velocidade do vapor no furo	[m/s]
v	Componente de velocidade na direção y	[m/s]
\mathbf{v}	Vetor velocidade	[m/s]
V	Volume	[m ³]
\dot{V}	Vazão mássica de vapor	[kg/s]
w	Componente de velocidade na direção z	[m/s]
W	Comprimento da represa	[m]
x	coordenada	[m]
y	coordenada	[m]
z	coordenada	[m]

Letras Gregas

α, β	Parâmetros dos esquemas de interpolação	
ε	Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta	[m ² /s ³]
ϕ	Propriedades fluidodinâmicas (u, v, w k e ε)	
Γ	Coefficiente de difusão	
κ	Raio de curvatura	
Λ	Fator de relaxação	
μ	Viscosidade	[kg/m s]
ρ	Massa específica	[kg/m ³]
Γ	Coefficiente de atividade da Lei de Rault Modificado	
σ	Tensão Superficial	[N/m]
$\sigma_\varepsilon, \sigma_\kappa$	Constantes do modelo de turbulência	
ζ	Direção ortogonal a parede	
λ_g	Condutividade Térmica	
γ	Coefficiente de atividade	

Sobrescrito

ε	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
k	Geração de energia cinética turbulenta
t	Turbulento
b	Da correlação de Bennett <i>et. al.</i> (1983)

Subscrito

0	Valor inicial
b	Face base
b	Ponto base
e	Face leste
g	Fase gasosa
α	Referente a fase
l	Fase líquida
P	Ponto
ref	Referência
v	Fase vapor
w	Ponto oeste
x	Coordenada x
y	Coordenada y
z	Coordenada z
ϕ	Propriedades fluidodinâmicas (u, v, w k e ε)
i	Fase genérica

Operadores Matemáticos

-	Média temporal
∂	Derivada parcial
∇	Operador nabra

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS	v
RESUMO.....	vi
ABSTRACT.....	vii
LISTA DE FIGURAS.....	viii
LISTA DE TABELAS.....	xi
LISTA DE SÍMBOLOS.....	xii
SUMÁRIO	xvi
CAPÍTULO I	1
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1 Motivação pelo estudo	1
1.2 Objetivos	2
1.2.1 Objetivos Específicos	3
1.3 Inovação	3
1.4 Temática do Trabalho	3
CAPÍTULO II.....	5
2 REVISÃO BILIOGRÁFICA.....	5
CAPÍTULO III.....	11
3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	11
3.1 Introdução	11
3.2 Colunas de Destilação	12
3.2.1 Restrições.....	13
3.3 Estágios de Equilíbrio	14
3.4 Fluidodinâmica Computacional	15
3.4.1 Gerador de Geometria.....	18
3.4.2 Gerador de Malha	18
3.4.3 Pré-Processamento.....	19

3.4.4	Solvers	19
3.4.5	Pós-Processamento	20
3.4.6	O Método Multigrid.....	20
3.5	Método de Volumes Finitos	21
CAPÍTULO IV		23
4	MÉTODOS NUMÉRICOS	23
4.1	O Método dos Volumes Finitos	23
4.2	Esquemas de interpolação	25
4.3	Difusão Numérica	27
4.4	Acoplamento Pressão Velocidade.....	28
4.5	Altura de Líquido Claro sobre o Prato	30
CAPÍTULO V		31
5	MODELAGEM MATEMÁTICA	31
5.1	Pressão de Saturação	34
5.2	Multicomponente	34
5.3	Multifásico	35
5.4	Termo Fonte	35
5.5	Modelo de Turbulência	36
5.5.1	Modelo $k - \epsilon$	36
5.6	Equação Geral da Conservação.....	38
5.7	Modelo 3-D Multifásico Homogêneo (3-DMult)	38
5.7.1	Geometria do Modelo 3-D Mult	40
5.7.2	Malha Numérica 3-D Mult.....	41
5.8	Modelo 3-D Multifásico Homogêneo I (3-DMultI).....	42
5.8.1	Geometria do Modelo 3-D MultI.....	42
5.8.2	Malha Numérica do Modelo 3-D MultI.....	43
5.9	Modelo 3-D Multifásico Homogêneo II (3-DMultII)	44

5.9.1	Geometria do Modelo 3-D MultII.....	45
5.9.2	Malha Numérica do Modelo 3-D MultII	45
5.10	Modelo 3-D Multifásico Homogêneo Compacto	46
5.11	Modelo 3-D Multifásico Homogêneo III (3-DMultIII).....	48
5.12	Modelo 3-D Multifásico Homogêneo IV (3-DMultIV)	53
5.13	Representação matemática das condições de contorno utilizadas para solução dos modelos matemáticos propostos	53
5.14	Método Numérico utilizado para solução dos modelos propostos	54
CAPÍTULO VI		56
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	56
6.1	Modelo 3-D Homogêneo Multifásico – (3-DMult)	57
6.1.1	Caso A 3-D Mult.....	59
6.1.1.1	Resultados da Simulação Caso A 3-D Mult	60
6.1.2	Caso B 3-D Mult.....	61
6.1.2.1	Resultados da Simulação Caso B 3-D Mult	61
6.1.3	Caso C 3-D Mult.....	62
6.1.3.1	Resultados da Simulação Caso C 3-D Mult	63
6.2	Modelo 3-D Multifásico Homogêneo I (3-D MultI).....	64
6.2.1	Caso A 3-D MultI	66
6.2.1.1	Resultados da Simulação Caso A 3-D MultI.....	66
6.2.2	Caso B 3-D MultI	68
6.2.2.1	Resultados da Simulação Caso B 3-D MultI.....	68
6.2.3	Caso C 3-D MultI	69
6.2.3.1	Resultados da Simulação Caso C 3-D MultI.....	69
6.2.3.2	Altura de Líquido Claro sobre o prato para uma velocidade de líquido de 0,0067 (m/s).....	71
6.2.4	Caso D 3-D MultI	72
6.2.4.1	Resultados da Simulação Caso D 3-D MultI.....	72

6.2.5	Caso E 3-D Multi.....	73
6.2.5.1	Resultados da Simulação Caso E 3-D Multi	73
6.2.6	Caso F 3-D Multi.....	75
6.2.6.1	Resultados da Simulação Caso F 3-D Multi	75
6.2.6.2	Altura de Líquido Claro sobre o prato para uma velocidade de líquido de (0,06 m/s) 76	
6.2.7	Caso G 3-D Multi	77
6.2.7.1	Resultados da Simulação Caso G 3-D Multi.....	78
6.2.8	Estudo de Caso H 3-D Multi	79
6.2.8.1	Resultados da Simulação Caso H 3-D Multi.....	79
6.2.9	Estudo de Caso I 3-D Multi.....	81
6.2.9.1	Resultados da Simulação Caso I 3-D Multi	81
6.2.9.2	Altura de Líquido Claro sobre o prato para uma velocidade de líquido de (0,1 m/s) 82	
6.3	Modelo 3-D Multifásico Homogêneo II (3-D MultiII)	83
6.3.1	Caso A 3-D MultiII.....	84
6.3.1.1	Resultados da Simulação Caso A 3-D MultiII	85
6.3.2	Caso B 3-D MultiII	86
6.3.2.1	Resultados da Simulação Caso B 3-D MultiII.....	86
6.3.3	Caso C 3-D MultiII	88
6.3.3.1	Resultados da Simulação Caso C 3-D MultiII.....	88
6.4	Modelo 3-D Multifásico Homogêneo III (3-D MultiIII)	89
6.4.1	Estudo de Caso A 3-D MultiIII.....	90
6.4.1.1	Resultados da Simulação Caso A 3-D MultiIII	90
6.5	Modelo 3-D Multifásico Homogêneo IV (3-DMultiIV)	93
6.5.1	Estudo de Caso A 3-D MultiIV	93
6.5.1.1	Resultados da Simulação Caso A 3-D MultiIV	94
6.5.2	Estudo de Caso B 3-D MultiIV.....	96

6.5.2.1	Resultados da Simulação Caso B 3-D MultIV	96
CAPITULO VII		99
7	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	99
CAPITULO VIII.....		102
8.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	102

CAPÍTULO I

1. INTRODUÇÃO

O presente projeto propõe um estudo fenomenológico rigoroso dos fenômenos que ocorrem no interior de uma unidade piloto de destilação com o intuito de verificar microscopicamente os fenômenos de transferência de calor, massa e quantidade de movimento objetivando otimizar o sistema.

De maneira similar ao que ocorre na natureza, onde o processo de seleção natural responsabiliza-se pela eliminação das espécies menos adaptadas e capacitadas, em um mercado competitivo, apenas os mais eficientes sobrevivem, por isso a necessidade de estar sempre otimizando e controlando os processos.

Encontram-se descritos neste capítulo a motivação do trabalho, e os objetivos a serem alcançados.

1.1 Motivação pelo estudo

Inseridos neste contexto socioeconômico globalizado e competitivo, está o desenvolvimento de projetos e processos químicos cada vez mais aperfeiçoados, incorporando modelos matemáticos que possibilitam maior aproximação do seu comportamento real. O processo de separação por destilação tem incorporado diversos conceitos de modelagens visando o aprimoramento da representação fenomenológica. Um maior entendimento, em nível microscópico, dos mecanismos que ocorrem em processos de destilação é muito relevante, principalmente quanto à sofisticação dos equipamentos e processos e seus sistemas de controle.

Coluna de destilação é um dos equipamentos de separação mais utilizados na indústria petroquímica, representando cerca de 80% do custo operacional energético em indústrias petroquímicas, por isso o perfeito funcionamento e otimização destas unidades são fatores cruciais economicamente. Uma das formas de solucionar este problema passa pelo

aperfeiçoamento do sistema de controle, com uma estrutura par de variável controlada/manipulada bem definido. Mesmo assim seu uso justifica-se pelo considerável aumento do valor agregado dos produtos, além de possibilitar o cumprimento das exigências de mercado, fomentando assim, busca por tecnologias mais eficientes e flexíveis.

Este projeto procura vincular o Desenvolvimento e Controle de Processos de Destilação e Fluidodinâmica Computacional, para associar este estudo aos estudos tradicionais de transferência de calor, massa e quantidade de movimento. A fluidodinâmica computacional envolve a solução numérica de conservação da massa, momento e energia. A aplicação de tal ferramenta na modelagem de colunas de destilação pode melhorar a descrição do escoamento o qual, à luz engenharia de processos de separação é tratado empregando-se uma combinação de modelos altamente idealizados e/ou empíricos.

O modelo matemático desenvolvido foi, baseado na conservação da massa, calor e quantidade de movimento, sob condições de turbulência para predição dos perfis de velocidade do líquido em um prato perfurado de uma coluna de destilação com vertedor, permitindo desta maneira a identificação dos padrões de escoamento líquido/vapor e as regiões de maior transferência de calor e massa úteis para otimização e controle de colunas de destilação.

Até o momento foram desenvolvidos alguns estudos na área de fluidodinâmica computacional, porém muitos destes estudos utilizaram uma geometria e condições de contorno simplificadas. Também observou-se que existem poucos estudos completos envolvendo transferência de calor, massa e quantidade de movimento. Com estas oportunidades optou-se pela realização de um estudo fluidodinâmico de uma unidade piloto de destilação, levando-se em conta as características geométricas reais do prato.

1.2 Objetivos

Este trabalho tem como objetivo geral a realização da simulação fluidodinâmica do prato de uma unidade piloto de destilação.

1.2.1 Objetivos Específicos

Os objetivos específicos que se pretendem alcançar com este projeto são:

1. Desenvolvimento de um modelo para descrever a fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor, em prato de uma coluna de destilação;
2. Aplicação e implementação do modelo matemático em código comercial de fluidodinâmica computacional (CFX), para realização de um estudo de experimentação numérica de modelos e métodos;
3. Avaliação da influência na hidrodinâmica do prato da coluna de destilação pela presença de resistências sobre a superfície mesmo;
4. Avaliação da eficiência de separação nos pratos.

1.3 Inovação

O estudo, desenvolvimento de projetos, sistemas de controle e métodos de otimização de colunas de destilação são feitos na sua maioria com base em modelos e métodos que consideram apenas os fenômenos macroscópicos ocorridos neste processo de separação.

Melhorar o desenvolvimento destes projetos, otimizar os sistemas de controle e readaptar os métodos de otimização levando em consideração os fenômenos de transferência de calor, massa e quantidade de movimento, os quais podem ser identificados e estudados a partir de um estudo de simulação fluidodinâmica computacional. É a principal inovação deste trabalho visto que existem poucos estudos concentrados nesta área, porém com um grande potencial para a melhoria da eficiência deste processo de separação.

1.4 Temática do Trabalho

Este trabalho está estruturado em oito capítulos para facilitar a apresentação e entendimento do mesmo, começando pela Introdução, referente, a colunas de destilação, à necessidade de novos estudos envolvendo aspectos fluidodinâmicos do escoamento líquido-

vapor, a motivação para o desenvolvimento do projeto e os principais objetivos a serem alcançados no término deste trabalho.

No Capítulo 2 é apresentada uma breve revisão bibliográfica relativa as principais técnicas de CFD e suas aplicações na simulação fluidodinâmica de colunas de destilação, objetivando perceber quais as principais oportunidades e carências nesta área.

Afim de aprofundar os conhecimentos sobre colunas de destilação e técnicas de CFD aplicadas ao seu estudo formulou-se o Capítulo 3.

Tratando-se de um estudo com principal foco na experimentação numérica, o Capítulo 4, trata do principal método numérico utilizado para realização das simulações de fluidodinâmica computacional. No Capítulo 5 está descrito, de forma sistemática, a metodologia e o desenvolvimento dos estudos em fluidodinâmica computacional envolvendo escoamento líquido-vapor e que culminaram na proposição de um modelo matemático capaz de prever o escoamento na superfície de um prato perfurado de uma coluna de destilação e os fenômenos de transferência envolvidos.

O Capítulo 6 apresenta os principais resultados obtidos das simulações realizadas utilizando o software comercial ANSYS CFX 11, junto com as discussões e conclusões de cada uma destas. As conclusões gerais do projeto e as sugestões para trabalhos futuros aparecem descritas no Capítulo 7.

Por fim, no Capítulo 8, são apresentadas as principais referências bibliográficas consultadas para realização deste trabalho.

CAPÍTULO II

2 REVISÃO BILIOGRÁFICA

O principal objetivo deste capítulo é apresentar, de maneira clara e objetiva, o material bibliográfico básico produzido sobre a aplicação de técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) para simulação de colunas de destilação. A partir das principais características, discussões e conclusões dos autores encontrados e consultados, serão definidos alguns pontos básicos que fornecerão as características da metodologia seguida neste projeto.

O material a ser discutido a seguir não abrange todos os trabalhos publicados na área de colunas de destilação, mas sim uma amostra significativa dos estudos de simulações em colunas de destilação incluindo técnicas fluidodinâmicas.

No que se refere às técnicas de fluidodinâmica computacional, aplicadas ao escoamento líquido/vapor em colunas de destilação, poucos foram publicados na literatura científica. A resenha dos trabalhos publicados e consultados foram alocados em cada capítulo pertinente, apresentando aqui somente a resenha dos trabalhos mais relevantes encontrados na literatura e cujas características inspiraram o trabalho desenvolvido nesta dissertação.

A literatura apresenta uma grande quantidade de material bibliográfico sobre colunas de destilação. Mas como o objetivo desta pesquisa restringiu-se à modelagem e aplicação de técnicas de fluidodinâmica computacional para simulação de colunas de destilação, focalizaram-se as atenções nesta área.

Para delinear o “Estado de arte” da simulação de colunas de destilação, a partir da utilização de técnicas de fluidodinâmica computacional é importante começar com uma discussão sobre o método de volumes finitos.

Quando trata-se do método de volumes finitos uma grande quantidade de material é encontrada. Desta maneira, vale a pena ressaltar os precursores do método, Patankar e Spalding (1971) e dois principais livros utilizados para realização deste projeto, Versteeg e Malalasekera (1995) e Maliska (2004), os quais apresentam informações detalhadas sobre método de volumes finitos.

Os primeiros trabalhos aplicando técnicas de fluidodinâmica computacional foram feitos em colunas de bolhas. Delnoij *et al.* (1997), construíram uma modelagem com enfoque

Euleriano-Lagrangeano afim de descrever o comportamento fluidodinâmico de uma coluna de bolhas. O modelo bidimensional e bifásico foi construído com as equações da continuidade e do movimento com modelos constitutivos para as forças de arraste, de ascensão, de massa virtual e de interações bolha-bolha. Como principal resultado, observaram a presença de vórtices na fase líquida acima de determinada taxa de gás e estes vórtices também foram observados nos estudos experimentais, validando assim o modelo apresentado.

Já Pflieger e Becker (2001), utilizaram uma modelagem bifásica com uma abordagem Euleriana-Euleriana para descrever o escoamento numa coluna de bolhas. O modelo de turbulência utilizado foi o $k-\varepsilon$ padrão, negligenciando-se os termos de coalescência e quebra de bolhas. A experimentação numérica visava avaliar a influência da turbulência adicional gerada pela presença da fase dispersa, além da validação do modelo teórico com dados experimentais. Foi observado que a adição de turbulência gerada pela vazão do gás cruzando o líquido por modelo, traz um impacto positivo na correta simulação dos perfis axial e radial de velocidade e na predição das frações locais de gás e líquido.

Reis *et. al.* (1996) afirmaram que, embora as formulações matemáticas necessárias para simular a dinâmica do processo de destilação sejam conhecidas desde os anos sessenta, ainda existem algumas dificuldades para obtenção de uma solução mais realística para este sistema de equações. O objetivo principal deste trabalho foi comparar três métodos diferentes para solução dos modelos matemáticos que descrevem o comportamento dinâmico de colunas de destilação, formado por equações diferenciais ordinárias e equações algébricas não lineares (DAE). Os três métodos são:

- i) Método 1: Solução subsequente, com solução explícita das equações algébricas.
- ii) Método 2: Solução subsequente, com solução implícita das equações algébricas, utilizando o método de Newton Raphson.
- iii) Método 3: Solução simultânea do sistema de equações algébricas e diferenciais.

Os resultados obtidos não apresentaram grandes diferenças entre os valores calculados pelos três métodos. Porém o tempo computacional é consideravelmente diferente.

As principais conclusões sobre os métodos estudados foram as seguintes:

- i) A solução simultânea é mais robusta e o tempo computacional é menor quando comparado com a solução subsequente resolvendo as equações algébricas implicitamente.
- ii) Quando a matriz Jacobiana não é calculada pela seqüência de dados DDASSL, a solução é obtida mais rapidamente, e sem qualquer perda nos resultados.
- iii) O passo de integração igual a 60 segundos foi o mais satisfatório.

iv) A utilização do estado de equilíbrio de energia no modelo algébrico ou no diferencial conduz a alterações nos perfis dinâmicos calculados.

Pescarini *et. al.* (1996), está relacionado aos aspectos computacionais de processos de separação multicomponente em contra-corrente utilizando um modelo da fase de não-equilíbrio. O programa desenvolvido resolve as equações de equilíbrio na interface além das equações de transferência de massa e energia simultaneamente.

Boisson e Malin (1996), aplicaram técnicas de fluidodinâmica computacional, utilizando um modelo bidimensional baseado nas equações de Navier Stokes, para uma mistura bifásica, gás-líquido assumindo escoamento heterogêneo. Afim de deixar o modelo mais completo e robusto, a força interfacial de arraste, as forças interfaciais de pressão, as forças interfaciais de ascensão, as forças de aceleração de massa aparente na fronteira da fase contínua e nas imediações da fase dispersa, foram acrescentadas ao modelo através de suas equações constitutivas. O código comercial de fluidodinâmica computacional utilizado foi o PHOENICS, que emprega o método de volumes finitos, além de ser utilizado o modelo de turbulência padrão k- ϵ . A principal conclusão do autor foi que as forças adicionais permitem a corroboração do modelo por comparação com os dados experimentais de maneira satisfatória.

Sokolichin e Eigenberger (1999), tiveram como principal objetivo a comparação entre os modelos laminar bidimensional, turbulento bidimensional e tridimensional, com o modelo k- ϵ padrão usado como modelo de turbulência. Para resolução das equações utilizou-se o método de volumes finitos com um esquema de interpolação de alta ordem, afim de evitar a difusão numérica. Segundo os autores, o modelo tridimensional junto com o modelo de turbulência k- ϵ padrão tiveram boa representação qualitativa e uma aceitável representação quantitativa frente aos dados experimentais.

Especificamente sobre a aplicação de técnicas de fluidodinâmica computacional em colunas de destilação a pratos, poucos são os trabalhos nesta área, tendo como precursores Liu *et. al.* (2000), Van Baten e Krishna (2000) e Soares *et. al.* (2001).

Liu *et. al.* (2000), elaboraram um modelo com enfoque Euleriano, bidimensional e monofásico, para representar o escoamento turbulento do líquido em um prato de destilação, considerando a força resistiva gerada pelo borbulhamento do gás no líquido através de uma correlação empírica. Mais correlações empíricas foram utilizadas para prever a altura do líquido sobre o prato, a perda de carga, entre outras. O modelo de turbulência utilizado foi o k- ϵ padrão incrementado por um termo de geração de turbulência proveniente do borbulhamento. A geração da energia cinética turbulenta proveniente do efeito do borbulhamento do gás no líquido, aparece na modelagem representada por uma constante

chamada de coeficiente de transferência. O método numérico utilizado foi volumes finitos com algoritmo SIMPLE para o acoplamento pressão-velocidade. A técnica de anemometria do fio quente foi utilizada para obtenção de dados experimentais usados para corroboração do modelo. Os resultados mostram uma comparação entre os dados experimentais e numéricos, além de mapas do vetor velocidade. Concluiu-se com os resultados do modelo monofásico e bidimensional acrescido das forças resistivas e o termo adicional nas equações de turbulência que quando comparados com os dados experimentais, foram muito representativos para o escoamento do líquido em um prato de destilação, especialmente em casos onde há zonas de recirculação. Entretanto, esta modelagem é muito dependente de equações e parâmetros empíricos que limitam sua utilização.

Krishna *et. al.*, (1999) e Van Baten e Krishna (2000), propuseram uma modelagem tridimensional e multifásica para representar a fluidodinâmica de um prato perfurado de destilação. A modelagem em ambos os casos é idêntica, tendo como diferença as características geométricas da coluna. O primeiro trabalha com uma coluna de seção transversal quadrada, enquanto o segundo, aprimora a geometria para uma coluna de seção circular. O enfoque utilizado foi o Euleriano-Euleriano e as equações de Navier Stokes multifásicas serviram como base para a modelagem. A transferência de momento entre as fases segue o modelo de coeficiente de arraste. A resolução das equações baseia-se no método dos volumes finitos, acoplados no código comercial CFX da AEA "technology". O acoplamento pressão-velocidade é obtido com algoritmo SIMPLER e o esquema de interpolação utilizado foi o híbrido para todas as equações. O domínio numérico consiste de um estágio da coluna com 180 furos de seções quadrada e cilíndrica. Segundo os autores, a suposição de furos de seção quadrada não traz impacto nos resultados, pois o enfoque foi Euleriano para ambas as fases. Os resultados apresentados mostram campos de velocidade e fração volumétrica. O modelo foi corroborado com os dados de altura de líquido no prato em vários casos. É importante ressaltar que os autores trabalharam com o modelo heterogêneo que implica em equações do momento para ambas as fases e, por conseguinte, um alto tempo computacional. A principal conclusão dos autores faz referência à alta confiabilidade do modelo na predição da fluidodinâmica de um prato de destilação.

Na simulação do processo de destilação, Yu (1992) e Zhang e Yu (1994) apresentaram um modelo bidimensional para fluxo da fase líquida em um prato da coluna, onde foram utilizadas as equações do modelo $k-\epsilon$ para o fechamento do sistema e uma força foi incluída para a fase vapor no termo fonte da equação de momento para considerar o efeito de interação das fases líquidas e vapor. Também, Fischer & Quarini (1998) propuseram um modelo

tridimensional heterogêneo para simulação hidrodinâmica dos pratos. Nesta linha Liu *et. al.* (2000), desenvolveram um modelo descrevendo o fluxo da fase líquida num prato perfurado, considerando a resistência e o efeito de borbulhamento gerado pela inserção de vapor na fase líquida. Mehta *et. al.* (1998) e Gesit *et. al.*(2003) previram a distribuição da velocidade da fase líquida, altura de líquido claro, altura da espuma, e fração volumétrica de líquido nos pratos usando técnicas de CFD. Depois, Wang *et. al.* (2004), desenvolveram um modelo tridimensional considerando o efeito do vapor por força de arraste, aumento de força, força virtual de massa e corpo no modelo e simularam uma coluna com 1,2 m de diâmetro com dez pratos perfurados e refluxo total.

A idéia de usar CFD para incorporar a predição da eficiência dos pratos é confiada no fato de que a hidrodinâmica é um fator influente e essencial para transferência de massa nas interfaces e difusões no domínio, e que poderiam ser compreendidas pelo efeito da distribuição de velocidade no perfil de concentração. Isto é um fator que abre um assunto na predição computacional da transferência de massa baseada em fluidodinâmica computacional.

O principal problema para esta aproximação é o fechamento para a equação diferencial de transferência de massa, com duas variáveis desconhecidas, concentração e difusão turbulenta da transferência de massa. A difusão turbulenta de transferência de massa, não depende somente das propriedades fluidodinâmicas (por exemplo, viscosidade turbulenta do fluido) mas também da flutuação da concentração no fluxo turbulento. Liu (2003) propôs um modelo com duas equações, equação para variação da concentração c^2 e sua taxa de dissipação ε para o fechamento da equação diferencial de transferência de massa. O modelo para transferência de massa computacional de Liu, foi aplicado com sucesso para prever o difusão turbulenta da transferência de massa e a eficiência para uma coluna de destilação em escala comercial por Sun (2005).

Segundo Sun *et. al.* (2007), o protótipo do modelo de Liu, em sua forma inicial é bastante complicado e de implementação computacional tediosa. Neste artigo o modelo c^2 - ε_c é simplificado e as constantes do modelo são averiguadas. Ao mesmo tempo, a equação de CFD é modificada para descrever a interação entre as fases líquidas e vapor modelando a melhor velocidade que é influenciada pela eficiência computacional do prato. O teste para validar a simplificação e melhoria do modelo, foi feito comparando os resultados do modelo com os experimentais encontrados na literatura. O acordo entre eles demonstra que o método modificado CMT (Computational Mass Transfer) pode ser usado na análise do desempenho de uma coluna de destilação existente como também avaliar a eficiência do prato antes da

construção. O modelo original $\bar{c}^{-2} - \varepsilon_c$ (Liu, 2007) usado para fechar a equação diferencial de transferência de massa é simplificado e as constantes do modelo são verificadas. Uma equação melhorada de CFD é empregada para prever o campo de velocidade. O modelo simplificado CMT mostrou-se uma boa ferramenta para prever a difusividade turbulenta de transferência de massa, o perfil de concentração em um prato como também a eficiência do prato de uma coluna de destilação.

Breach e Ansari (2007), desenvolveram um modelo matemático para conectar-se por meio de interface via usuários de rotina com as equações de transporte de um modelo de CFD multifásico multicomponente não homogêneo no código comercial ANSYS-CFX. O fluxo multifásico multicomponente não homogêneo refere-se a uma aproximação numérica onde, os componentes presentes em cada fase são modelados tendo seus campos de fluxos separados. Os componentes não estão misturados em uma escala microscópica, mas o bastante, em uma escala macroscópica com uma interface discernível entre os componentes em cada fase. O modelo matemático foi implementado com sucesso com foco Euleriano-Euleriano, equações de transporte multifásicos multicomponentes como também enfoque Lagrangeano. Neste caso as equações de transporte para o CFD consideram três componentes, ar, peróxido de hidrogênio e água, e também consideraram dois componentes presentes na fase líquida, peróxido de hidrogênio e água. Neste modelo matemático, controla-se a transferência de massa entre as fases, o líquido e o vapor/gás, pelas equações do software CFD. Em resumo, as equações constitutivas de CFD consideram um sistema multicomponente, líquido/vapor e o modelo matemático considera um sistema binário. O método aproximado foi incorporado com equações constitutivas, multifásicas e multicomponentes para uma análise em CFD ANSYS-CFX usando (ANSYS CFX-Solver, 2005) com termos fontes que impuseram a interface na transferência de massa e energia corrigindo-as. As equações de equilíbrio líquido-vapor de Schumb *et. al.* (1955) estabeleceram o limite das fases de equilíbrio para as relações governantes.

Noriler *et. al.* (2007), aplicaram um modelo de CFD com enfoque Euleriano-Euleriano para os fluxos gás-líquido com capacidade para prever os fenômenos térmicos e de momento dos fluxos multifásicos. Um modelo tridimensional e transiente para conservação da energia e da quantidade de movimento foi aplicado para prever os campos de frações volumétricas, velocidades, pressões e temperatura dos fluxos bifásicos no prato da coluna de destilação.

CAPÍTULO III

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A proposta deste capítulo é apresentar as características do processo de destilação que interferem nos fenômenos de transferência de calor, massa e quantidade de movimento. Também apresentar a modelagem de estados de equilíbrio. E abordam-se as principais características da técnica de fluidodinâmica computacional (CFD).

3.1 Introdução

O processo de separação de uma fase sólida, líquida ou gasosa em seus componentes mais utilizado nas indústrias químicas e petroquímicas é a destilação, que é baseada na diferença das temperaturas de ebulição de seus componentes individuais (HENLEY e SEADER, 1981). O equipamento mais comum para realizar a destilação é a coluna com pratos, que consiste de uma seqüência vertical de estágios onde ocorre o contato entre o vapor e o líquido. Além de possuir flexibilidade de operação em relação às pressões, temperaturas e volumes dos processados.

Apesar de largamente utilizado, o processo de destilação possui um custo elevado, existindo uma preocupação quanto à otimização energética, visando sua redução e melhor aproveitamento. Por isso é de fundamental importância o conhecimento e caracterização do que acontece microscopicamente no interior da coluna, para que assim seja possível maximizar os processos de transferência de calor e massa, aumentando a eficiência do processo.

Em virtude de sua grande importância, muitos métodos e modelos matemáticos foram propostos e usados para estimar parâmetros e cálculos de projetos. Sendo que os primeiros cálculos foram descritos por SOREL em meados de 1890, posteriormente surgiram métodos gráficos propostos por Ponchon (1921) e McCABE e Thiele (1925), porém nestes últimos anos com a grande evolução dos computadores a solução numérica vem se tornando uma grande aliada na solução das equações dos modelos matemáticos propostos pelos novos métodos.

3.2 Colunas de Destilação

A coluna de destilação é um dos equipamentos de separação mais empregados na indústria química e petroquímica. A palavra "destilação" é originária do latim *distillare*, o que significa gotejar, ou seja, o gotejamento de um líquido de um condensador para um recipiente (FERREIRA e NETO, 2007).

O equipamento mais comum utilizado para realizar a separação de componentes de um mistura, é uma coluna de destilação com pratos, onde ocorre o contato entre o líquido e o vapor. (SOARES, 2000). Uma unidade de destilação pode ser representada de maneira esquemática pela Figura 3.1.

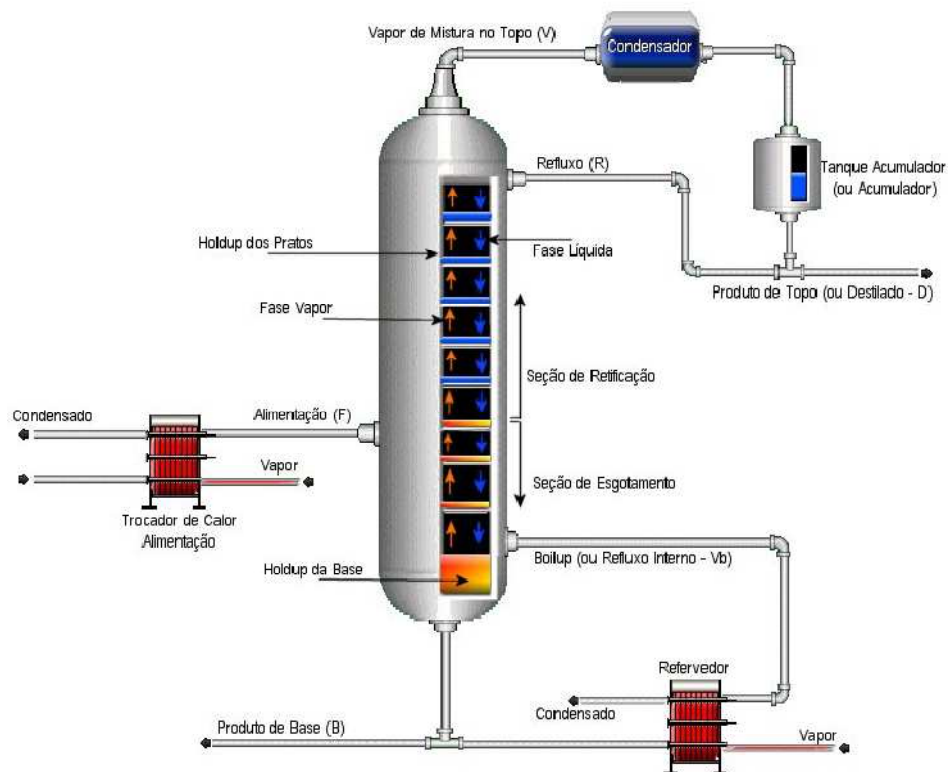


Figura 3.1 Esquema de uma coluna de destilação simples com uma alimentação, condensador total e retervedor parcial.

(Fonte: Marangoni, 2005)

A hidrodinâmica da coluna consiste na descida de líquido através de canais em direção a base, enquanto o vapor ascende borbulhando através do líquido, movido pelo gradiente de

pressão existente no interior da coluna, entre a base e o topo. O escoamento das fases no prato é cruzado quando estes contêm vertedores de descida de líquido, pois o vapor passa através das perfurações existentes nos pratos e entra em contato com líquido fluindo sobre o mesmo (MARANGONI, 2005).

Uma coluna de destilação possui também um refulvedor, localizado na base da coluna o qual tem como principal função produzir o vapor que ascende pela coluna, e um condensador localizado no topo da coluna com a função de condensar os vapores que chegam ao topo. Uma parte deste condensado vai para um acumulador e parte retorna para a coluna como refluxo o qual é responsável pela corrente de líquido acima do prato de alimentação, visto que esta ocorre em níveis intermediários da coluna.

A principal função dos pratos existentes no interior da coluna de destilação é aumentar a área efetiva de contato entre as fases líquida e vapor. O prato mais simples e utilizado é o prato perfurado (SOARES, 2000). Segundo Barros *et al.*, (1994), um prato perfurado pode operar com um fluxo cruzado a uma pequena taxa de escoamento de vapor até o ponto em que o líquido comece a drenar através dos orifícios e a dispersão do gás fica inadequada para se ter uma boa eficiência.

O processo de separação por destilação envolve uma grande quantidade de energia e este é baseado na diferença de volatilidade, tratando-se de uma transferência de calor e massa (MOURA, 2003). A transferência de massa em colunas de destilação é um processo muito complexo. Para que ocorra uma transferência efetiva de massa entre as fases, o contato líquido/vapor deve ocorrer sob regime turbulento, uma vez que a turbulência aumenta a taxa de transferência de massa por unidade de área pois, ajuda a dispersar um fluido em outro e aumenta a área de interfacial (SOARES, 2000).

Segundo Walter *et al.*, (1941), o contato entre as fases ocorre por meio do fluxo cruzado no qual o líquido escoá paralelamente ao prato, no percurso entre os vertedouros de entrada e saída, enquanto o vapor atravessa, sendo distribuído no prato através de perfurações.

O transporte de massa entre as fases, no caso de um prato perfurado ocorre pela interação entre as bolhas do vapor formadas nos furos e o líquido circunvizinho entre o líquido e o vapor misturados na massa aerada e entre o líquido borrifado no espaço entre pratos (PERRY *et al.* 1973).

3.2.1 Restrições

A hidrodinâmica de uma coluna de destilação é um sistema muito complexo. Na base da coluna. 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 do topo em direção ao fundo escoam o líquido, na mesma direção do gradiente positivo de pressão, devido a diferença de densidade (FOUST, *et al.*, 1982).

Vazões muito altas ou baixas, de vapor ou líquido, podem provocar arraste de líquido, formação de cones de vapor, pulsação, gotejamento, inundação ou formação excessiva de espuma entre outros problemas (KALID, 2005).

Para vazões de vapor muito baixas, o líquido começa a escoar pelas aberturas nos pratos e não pelo vertedoro, diminuindo a eficiência de separação. Se a vazão interna de líquido na coluna é pequena, o líquido é distribuído de maneira irregular, proporcionando a formação de pontos quentes, existindo assim, máximos e mínimos para as condições de operação (KALID, 2005).

Segundo Gomide (1988), a mudança de pressão na coluna deve ser suave, pois a súbita diminuição da pressão provoca uma brusca vaporização do líquido nos pratos (flashing) e o aumento da vazão de vapor com possível formação excessiva de espuma. Já o aumento repentino da pressão provoca condensação do vapor e a diminuição da vazão deste podendo causar gotejamento.

A restrição quanto a separação é limitada pela quantidade de refluxo disponível e pelo número de pratos na coluna. A temperatura e a pressão não podem se aproximar das condições críticas, pois o fluxo hidráulico depende da diferença entre a massa específica da fase líquida e gasosa. (KALID, 2005).

3.3 Estágios de Equilíbrio

O desenvolvimento do projeto de uma coluna de destilação possui diversas etapas, porém a etapa que apresenta o maior grau de incerteza intrínseca é a obtenção do número de pratos reais a partir do número de pratos teóricos com o conhecimento da eficiência. (CHAN e FAIR, 1984; DRIBIKA e BIDDULPH, 1986).

Os modelos de estágios de equilíbrio já foram descritos por vários autores, como: HOLLAND (1981), HENLEY e SEADER (1988) e TAYLOR e LUCIA (1994).

Nas colunas de destilação de pratos, a forte interação entre as fases líquida e vapor ocorrem em cada prato, enriquecendo o vapor nos compostos mais voláteis e esgotando estes no líquido. O fluxo de líquido descendente é devido à ação da gravidade enquanto a ascensão do vapor devido o delta de pressão existente em cada estágio ao longo da coluna de destilação (KING, 1980).

O modelo de estágios de equilíbrio considera que as correntes de líquido e vapor que deixam o estágio estão em equilíbrio entre si. As equações do modelo de equilíbrio são: equações do balanço de massa, do equilíbrio de fases, do somatório das frações de líquido, vapor e alimentação e do balanço de energia (SOARES, 2000).

Quando se utiliza modelos de estágios de equilíbrio, intrinsecamente assume-se o equilíbrio termodinâmico, pois na maioria das vezes o líquido e o vapor saem em equilíbrio térmico de cada prato, já o equilíbrio químico não é uma suposição válida. Relacionando o número de estágios de equilíbrio com a eficiência da coluna, teremos o número de estágios reais necessários para o processo, lembrando que a eficiência dos pratos varia de 40 a 80%, visto que os melhores percentuais de eficiência são alcançados em colunas de menor diâmetro devido à homogeneidade da mistura (SOARES, 2000).

O modelo de estágios de equilíbrio pode ter sua eficiência sensivelmente diminuída por dois principais fatores:

1. Arraste de gotas de líquido pelo vapor devido às altas vazões de vapor;
2. Obstrução da passagem de vapor pelo líquido nos furos, devido às baixas vazões de vapor.

As restrições apresentadas pelo método de estágios de equilíbrio, principalmente para misturas multicomponentes não ideais, forçaram ao desenvolvimento de modelos de estágios de não equilíbrio. KRISHNAMURTHY e TAYLOR (1985, a, b, c) foram os pioneiros para o desenvolvimento de um modelo mais realístico.

3.4 Fluidodinâmica Computacional

A fluidodinâmica computacional é uma área de grande interesse para solução de muitos problemas práticos. As análises nesta área de pesquisa podem ser desenvolvidas com base em experimentos bem como em métodos teóricos, onde se destacam os métodos computacionais, utilizados para simulação numérica de dinâmica dos fluidos.

Para escoamento dos fluidos, o modelo matemático é descrito com base nas equações de conservação da massa, energia e quantidade de movimento, que submetidas as condições de contorno e condições iniciais apropriadas representam matematicamente um problema particular (HJERTAGER e MORUND, 1995)

O aumento da complexidade na modelagem matemática, avança a medida que os efeitos fenomenológicos mais complexos vão sendo incorporados ao modelo, podendo ser classificados da seguinte maneira (HIMMELBLAU e BISCHOFF, 1968):

1. modelagem macroscópica;
2. modelagem de máximos gradientes;
3. modelagem dos múltiplos gradientes;
4. modelagem microscópica;
5. modelagem molecular.

A modelagem macroscópica assume que as variáveis não variam no espaço somente no tempo é uma variável independente dos balanços gerais, obtendo-se equações simplificadas de fácil e rápida solução, mas que perdem muitas características do sistema. A modelagem microscópica é baseada no balanço diferencial das equações de conservação de movimento, massa e energia, abrangendo quase todos os efeitos fenomenológicos, porém a solução destas equações torna-se complicada. Já a modelagem em nível molecular avalia todas as interações moleculares envolvidas em cada fenômeno (STREETER, 1997).

A solução numérica destas equações de conservação de movimento, acopladas com as equações de conservação de massa e energia em um referencial microscópico, são definidos como estudo de fluidodinâmica computacional (CFD). Sendo CFD definida como, fluidodinâmica computacional (CFD) é o termo dado ao grupo de técnicas matemáticas, numéricas e computacionais, usadas para obter, visualizar e interpretar soluções computacionais para as equações de conservação de grandezas físicas de interesse de um dado escoamento (MALISKA, 2004).

A técnica de CFD permite a construção de modelos computacionais que representem o sistema em estudo, gerando-se representação da dinâmica do fluido a partir da aplicação da física ao modelo gerado. Esta técnica é capaz de predizer o escoamento do fluido, a transferência de calor, massa, mudança de fase, reação química, movimento mecânico, tensão ou deformação de estruturas sólidas relacionadas (MALISKA, 2004).

Seu uso a nível de pesquisa começou nos anos 80, já em aplicações industriais começou a ser aplicada nos anos 90, principalmente na indústria petroquímica, em situações

denominadas gargalos de processo. (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995; HAMILL, 1996).

Os códigos de fluidodinâmica computacional disponíveis no mercado são muito poderosos, resolvendo as equações que governam o escoamento do fluido, a transferência de calor e massa, a radiação e a reação química, baseados no método de volumes finitos. Porém vale ressaltar que sua operação requer um alto nível de conhecimento para obtenção de resultados satisfatórios para situações complexas.

A origem dessas equações de conservação é a teoria de fenômenos de transporte. Portanto pode-se dizer que CFD é o conjunto das técnicas de simulação computacional usadas para prever os fenômenos físicos ou físico-químicos que ocorrem em escoamentos que podem ser relacionados com a ação e a interação de fatores como dissipação, difusão, convecção, ondas de choque, superfícies escorregadias, condições de contorno e turbulência. No campo da aerodinâmica todos esses fenômenos são governados pelas equações de Navier-Stokes. A maioria dos aspectos importantes dessas relações é não-linear e, como consequência, não possuem soluções analíticas (MALISKA, 2004).

É importante ressaltar que simulações em CFD possuem limitações. Na maioria dos casos é necessário o desenvolvimento de modelos mais acurados como, por exemplo, nas áreas de turbulência, radiação, combustão, escoamentos multifásicos, etc. A aplicação de condições de contorno necessita do desenvolvimento de ferramentas cada vez melhores para descrever em detalhe a geometria do domínio de cálculo. Existe a necessidade constante do aperfeiçoamento das técnicas numéricas para ampliar a capacidade de resolução dos problemas mais complexos (MALISKA, 2004).

O primeiro passo na resolução de problemas envolvendo a fluidodinâmica computacional é a especificação do problema, incluindo geometria, condições de fluxo, e as necessidades da simulação. A geometria pode resultar de medidas de uma configuração existente ou pode ser associada com o estudo do desenho. Um conjunto de objetivos e limitações deve ser especificado. As condições de fluxo devem ser incluídas, como por exemplo, o número de Reynolds, e o número de Mach para o fluxo na camada de ar. As necessidades das simulações envolvem questões como nível de precisão desejada, o tempo requerido e a solução dos parâmetros de interesse (MALISKA, 2004).

Uma vez que o problema foi especificado, apropriadas equações e condições de contorno devem ser escolhidas. Geralmente se aceita que no campo da fluidodinâmica os fenômenos são governados pela conservação da massa, do momento e da energia. As

equações diferenciais parciais resultantes dessas leis de conservação referem-se às equações de Navier-Stokes (MALISKA, 2004).

Estas equações são resolvidas em volumes de controle, que são escolhidos arbitrariamente, desde que estes contenham o fenômeno de interesse de modo a fornecer um meio mais fácil de resolver e analisar problemas de escoamentos de fluidos.

A grande maioria de programas computacionais de CFD é subdividida em cinco elementos principais: um gerador de geometria, um gerador de malha, um pré-processador, um processador que obtém a solução e um pós-processador (cfd-online.com).

3.4.1 Gerador de Geometria

De acordo com o site cfd-online, a primeira informação a ser introduzida no ambiente computacional para resolver um problema de CFD é o domínio onde se buscará a solução do problema. Esse domínio normalmente é introduzido através dos programas de CAD (Computer Aided Design) que permitem modelar qualquer objeto no espaço tridimensional.

3.4.2 Gerador de Malha

Depois de criado o domínio é necessário dividi-lo em pequenos subdomínios não sobrepostos, chamados elementos, pois a solução das equações de transporte pelos métodos numéricos envolve cálculos em subdomínios. Este processo é chamado de geração de malha (grid ou mesh). Existem basicamente dois tipos de malhas: as estruturadas e as não-estruturadas. As malhas estruturadas são geradas pela subdivisão dos eixos coordenados em pequenos elementos unidimensionais, cujo produto cartesiano gera elementos bidimensionais e tridimensionais que são, geralmente, quadriláteros e hexaédricos, respectivamente. Nessas malhas, cada elemento tem sempre o mesmo número de elementos vizinhos, a não ser quando o mesmo pertence ao contorno. As malhas não estruturadas são formadas por elementos que podem ter diversas formas. Em problemas bidimensionais, os elementos são polígonos: triângulos, quadriláteros, pentágonos etc., sendo mais comum o uso de triângulos. No caso tridimensional, os elementos são poliedros: tetraedros, pirâmides, prismas, hexágonos etc.,

sendo os tetraedros os mais usados. Essas malhas conseguem representar mais facilmente as geometrias mais complexas, devido à maior flexibilidade de forma que seus elementos podem assumir. A precisão da solução em um problema de CFD depende do número de elementos e como estes estão distribuídos na malha. Em geral, a precisão da solução melhora com o aumento do número de elementos da malha. Contudo, é necessário balancear a precisão da solução através do refinamento da malha com o custo computacional de se obter a solução no "hardware" disponível (CFD-online.com).

3.4.3 Pré-Processamento

Consiste na modelagem física de um problema de escoamento com a estruturação destas informações de forma que o solver possa usá-las. A modelagem física envolve as seguintes informações:

- i) Seleção dos fenômenos físicos e/ou químicos que serão modelados e simulados;
- ii) Definição das propriedades dos fluidos, como viscosidade, densidade, condutividade térmica, etc.;
- iii) Especificação das condições de contorno apropriadas nos elementos da malha associados ao contorno do domínio.

Os pré-processadores mais recentes fornecem um banco de dados com as propriedades físicas dos fluidos mais comuns e permitem ao usuário evocar diversos modelos físicos e químicos como: modelos de turbulência, transferência de calor radiante, transferência de massa, reações químicas etc., já implementados no código ou ainda permitir a implementação de novos modelos. (CFD-online.com)

3.4.4 Solvers

É a parte principal de um pacote de CFD pois ele implementa as técnicas numéricas de solução e seus parâmetros para resolver os problemas físicos de modo apropriado. Resumidamente, os métodos numéricos que formam a base do solver passam pelos seguintes passos:

- i) Aproximação das variáveis incógnitas do escoamento através de funções simples;
- ii) Discretização, pela substituição das aproximações mencionadas acima nas equações de transporte que governam o escoamento, com manipulações matemáticas subseqüentes;
- iii) Linearização do sistema de equações algébricas resultantes;
- iv) Definição da estratégia de solução do sistema de equações algébricas lineares;
- v) Solução dos sistemas de equações algébricas lineares.

Existem várias técnicas numéricas de solução e suas diferenças estão associadas à forma com que as variáveis incógnitas são aproximadas e ao procedimento de discretização. Todas essas metodologias numéricas levam a sistemas de equações lineares (com matrizes cheias ou esparsas) com um grande número de equações e, portanto, uma abordagem numérica para a solução de tal sistema se torna necessária (CFD-online.com).

3.4.5 Pós-Processamento

Assim como no pré-processamento, um grande esforço de desenvolvimento na área do pós-processamento foi realizado nos últimos anos. Devido aos avanços tecnológicos em software e hardware gráficos, os principais pacotes CFD estão equipados com ferramentas versáteis para visualização de campos escalares e vetoriais, incluindo:

- i) Visualização da geometria e da malha;
- ii) Gráficos de vetores;
- iii) Gráficos de contorno;
- iv) Gráficos sobre superfícies no espaço tridimensional;
- v) Visualizações de linhas de fluxo e de trajetórias das partículas.

A maioria dessas ferramentas também inclui a possibilidade de criar animações para facilitar a análise do resultado. Em adição às diferentes formas de visualização, todos os códigos oferecem arquivos contendo os resultados em diferentes padrões, que podem ser exportados para outro software de visualização (CFD-online.com).

O código comercial de fluidodinâmica computacional CFX 11 da ANSYS Inc. foi empregado para o desenvolvimento deste estudo de caso envolvendo a experimentação numérica dos modelos e métodos para uma unidade piloto de destilação.

3.4.6 O Método Multigrid

Os métodos iterativos ponto a ponto não possuem boas taxas de convergência, quando malhas refinadas são utilizadas, porque os erros de baixa frequência não conseguem ser eliminados pelo algoritmo com boa taxa de convergência (MALISKA, 2004).

A anisotropia dos coeficientes é uma das razões que indica a necessidade de algum tipo de aceleração nos métodos iterativos tipo Gauss-Seidel, pois este método é eficiente apenas na redução dos erros de alta frequência, ou seja, aqueles com comprimento de onda da ordem do tamanho da malha (MALISKA, 2004).

Existem duas classes de métodos multigrid: os geométricos cuja aglomeração dos volumes é feita com base na malha, e os algébricos, cuja aglomeração é feita considerando a anisotropia dos coeficientes, que engloba os dois efeitos, pois a relação de dimensões e as propriedades físicas aparecem nos coeficientes (MALISKA, 2004).

A idéia básica de aceleração da convergência por métodos multigrid é reconhecer que os métodos iterativos ponto a ponto conseguem eliminar os erros com comprimento de onda da ordem do tamanho da malha. Assim, usando malhas desde bem refinadas até bem grosseiras, com poucos volumes no domínio, os erros estariam sendo eliminados em todas as frequências, acelerando o processo de convergência (MALISKA, 2004).

O procedimento é conceitualmente simples, bastando identificar na malha fina a direção na qual os coeficientes são dominantes e, nesta direção, criar uma malha mais. O procedimento para se obter uma malha mais grosseira a partir de uma malha mais fina pode ser visto em Maliska (2004).

3.5 Método de Volumes Finitos

Em paralelo ao grande desenvolvimento dos microcomputadores de alto desempenho numérico ocorreu o avanço dos métodos numéricos para solução de problemas complexos. Como exemplo tem-se o método de volumes finitos que foi originalmente desenvolvido de uma formulação especial do método das diferenças finitas. (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). O algoritmo numérico do método dos volumes finitos segue a seguinte cronologia:

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

Uma grande vantagem do método de volumes finitos (MVF) é sua capacidade de manter o caráter físico de cada termo nas equações discretas possibilitando maior robustez ao método (MALISKA, 2004).

A utilização do método de volumes finitos para solução de problemas contendo EDA's está em grande ascensão, encontrando-se uma grande quantidade de material relacionado ao método de volumes finitos, destacando-se como principais autores: Patankar (1980 e 1981), Maliska (1995 e 2004) e Méier *et al.* (1999).

CAPÍTULO IV

4 MÉTODOS NUMÉRICOS

Este capítulo apresenta os métodos numéricos que foram utilizados para solução das equações que descrevem o modelo que estão apresentadas no Capítulo V. Apresenta-se de forma sucinta as principais particularidades dos métodos que foram utilizados para o pleno desenvolvimento deste trabalho, concentrando-se na obtenção das equações de discretização, nos esquemas de interpolação, nas estratégias aplicadas para se garantir a estabilidade e a convergência das soluções numéricas, ao acoplamento pressão-velocidade e à malha numérica utilizada para a solução dos modelos.

A utilização de técnicas numéricas para solucionar problemas complexos na engenharia, é uma realidade na atualidade, devido ao desenvolvimento de computadores de alta velocidade e de grande capacidade de armazenamento. Em função desta disponibilidade computacional, o desenvolvimento de algoritmos para solução dos mais diversos problemas, tem recebido especial atenção dos analistas numéricos (MALISKA, 2004).

Tanto os métodos analíticos como os métodos numéricos formam uma classe dos métodos teóricos pois, ambos tem por objetivo resolver equações diferenciais. A experimentação numérica praticamente não apresenta restrições, podendo resolver problemas com complicadas condições de contorno, definidos em geometrias arbitrárias e apresentado resultados com bastante rapidez. Esta ferramenta numérica é adequada e confiável quando se está de posse de um método numérico que resolva corretamente as equações diferenciais, e de um modelo matemático que sabidamente, represente com fidelidade o fenômeno físico (MALISKA, 2004).

4.1 O Método dos Volumes Finitos

Até a década de 70, existiam dois principais métodos numéricos, o método das diferenças finitas (MDF) com boa experiência na área de fluidos, mas com poucas habilidades

para tratar de geometrias complexas; e o métodos dos elementos finitos (MEF), hábil no tratamento da geometria, mas sem ferramentas para tratar os termos convectivos presentes nas equações de movimento (MALISKA, 2004). Motivados por estes problemas é que surgiu o método dos volumes finitos (MVF), no qual as equações aproximadas são obtidas através de balanços de conservação da propriedade envolvida (massa, quantidade de movimento, energia) no volume de controle.

Para MALISKA (2004), a preferência pelo MVF para problemas de escoamento de fluidos é justificada pelo fato deste método ao criar as equações aproximadas, estar realizando um balanço da propriedade em nível de volumes elementares. Uma vez que no MVF os balanços de conservação devem ser satisfeitos em nível de volumes elementares, para qualquer tamanho de malha, todos os princípios de conservação podem ser checados em uma malha bastante grosseira.

Neste método, o domínio de cálculo é subdividido em volumes de controle que contêm os pontos da malha numérica (denominados de nós). Estes volumes não são sobrepostos, ou seja, cada volume de controle representa apenas um e somente um nó. Todas as variáveis são definidas no centro dos volumes de controle (à exceção de fronteiras), os quais preenchem os domínios físicos a serem considerados. Cada equação é integrada sobre cada volume de controle para obter uma equação discreta, a qual conecta as variáveis no centro do volume de controle com sua vizinhança. Dessa maneira, o princípio de conservação é satisfeito na sua forma integral para cada volume (SOARES, 2000).

As equações a serem resolvidas têm a mesma forma geral:

$$\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \Phi) - \nabla \cdot (\Gamma \nabla \Phi) = S \quad (4.1)$$

Onde:

- a) ρ : massa específica; ϕ : propriedade; Γ : termo difusivo e S : termo fonte;
- b) O termo temporal tem a finalidade de avançar a solução do problema no espaço de tempo.
- c) O segundo termo representa a parte convectiva da variável ϕ e são os termos mais difíceis de tratar, em virtude de sua natureza não-linear.
- d) O terceiro representa o balanço dos fluxos difusivos.
- e) O termo do lado direito desta equação é o termo fonte. É responsável por acomodar todos os termos que não se encaixam na forma apresentada pela Equação (4.1).

Integrando-se a Equação (5.1) sobre os volumes de controle, obtém-se:

$$\int \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} dV + \int \rho \phi \vec{U} \cdot \vec{n} dA - \int \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} dA = \int S dV \quad (4.2)$$

Termo Transiente
Termo Convectivo
Termo Difusivo
Termo Fonte

Cada termo proveniente da integração da Equação (4.1) é discretizado no espaço usando-se uma diferenciação central de segunda ordem e os coeficientes convectivos obtidos usando a fórmula de interpolação “Rhie-Chow”.

O método de volumes finitos aplicado em CFD resulta em duas vantagens: primeiro, a discretização é conservativa, sendo massa, momento e energia conservados no elemento de volume; e, segundo, porque o método não requer uma transformação de coordenadas para ser aplicado em malhas irregulares ou desestruturadas (MEIER, 1998).

4.2 Esquemas de interpolação

A função de interpolação tem o papel de conectar os pontos nodais, local de armazenamento da variável Φ . A tentativa é sempre utilizar uma função de interpolação com o menor erro de truncamento possível, e que não envolva muitos pontos nodais. A Figura (4.1) mostra a localização dos pontos no volume elementar.

Segundo Maliska (2004), as funções de interpolação podem ser associadas aos coeficientes α e β , dependentes do número de Peclet permitindo a ponderação entre a advecção e a difusão. Tomando a face leste como exemplo, os valores de ϕ na interface podem ser escritos como:

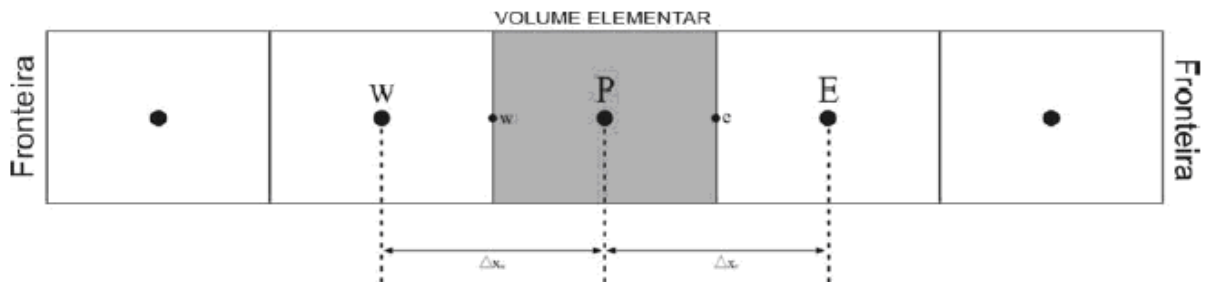


Figura 4.1 Localização dos pontos da função de Interpolação.

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \alpha_e\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right)\phi_E \quad (4.3)$$

$$\Gamma_e^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} = \beta_e \Gamma_e^\phi \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_e}\right) \quad (4.4)$$

- *Esquema das diferenças Centrais (CDS)*

Este esquema usa uma interpolação linear, podendo gerar coeficientes de discretização negativos, o que não é desejável. É um esquema de segunda ordem, não robusto, portanto raramente utilizado. O valor da função na interface é obtido fazendo-se:

$$\alpha = 0 \text{ e } \beta = 1 \quad (4.5)$$

A utilização deste esquema de interpolação na aproximação dos termos advectivos cria, quase sempre, coeficientes negativos, pois é impossível, em problemas reais, refinar a malha até forçar sua positividade, ou seja, manter $Pe \leq 2$ para todos os volumes elementares.

- *Esquema Upwind*

O uso dessa função de interpolação evita coeficientes negativos. É um esquema de interpolação de primeira ordem, onde o valor da função na interface é o mesmo no volume à montante, logo:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2} \text{ se } v \geq 0 \\ \alpha &= -\frac{1}{2} \text{ se } v \leq 0 \\ \beta &= 1 \end{aligned} \quad (4.6)$$

- *Esquema WUDS (Weighted Upstream Differencing Scheme)*

Para este esquema, de acordo com Maliska (2004), têm-se os seguintes valores para os coeficientes de α e β :

$$\alpha = \frac{Pe^2}{10 + 2Pe^2}$$

$$\beta = \frac{1 + 0,005Pe^2}{1 + 0,05Pe^2}$$
(4.7)

Onde Pe é o número de Peclet, sendo este baseado em Δx .

Esquemas desse tipo, onde α e β variam no domínio de cálculo procurando pesar as influências da difusão e da convecção, são chamados de esquemas híbrido (MALISKA, 2004).

4.3 Difusão Numérica

Se a função de interpolação adotada for a de diferenças centrais para os termos advectivos, existem dois riscos: o primeiro é a divergência da solução provocada pelo uso de métodos de solução de sistemas lineares não-aptos ao tratamento de coeficientes negativos, e o segundo é a obtenção de soluções não-realísticas, apresentando oscilações numéricas (Figura 4.2a), visto que o esquema de interpolação de diferenças centrais não dissipa as perturbações inerentes ao processo de solução. O tratamento para as oscilações, para solução com segunda ordem de precisão, é o refino da malha (KRISHNA, 1999).

Se a interpolação usada for upwind, o esquema resultante é bastante estável, obtendo-se sempre uma solução realística, mas com alta dissipação embutida (Figura 4.2b). Essa dissipação ocorre nas regiões de grandes gradientes, podendo levar a uma solução falsa. O operador upwind tem a propriedade de suavizar os grandes gradientes. Esse mecanismo de suavização dos gradientes é equivalente ao processo de difusão física de uma propriedade, sendo por isso chamado de difusão numérica ou falsa difusão (MALISKA, 2004).

Segundo Maliska (2004), o uso de funções de interpolação não-exatas gera erros de truncamento que podem estar associados a esquemas dissipativos ou não. Erros de truncamento associados às funções de interpolação do tipo diferenças centrais são erros não-dissipativos, que produzem as oscilações numéricas, enquanto que os associados a funções de interpolações do tipo upwind são dissipativos e suavizam os gradientes existentes no domínio, produzindo a difusão numérica.

Portanto a difusão numérica resulta dos erros de truncamento de natureza dissipativa, associados aos termos advectivos, originados do fato de a função de interpolação não ser exata. A difusão diminui com o refino da malha, o que também ocorre com os erros de truncamento.

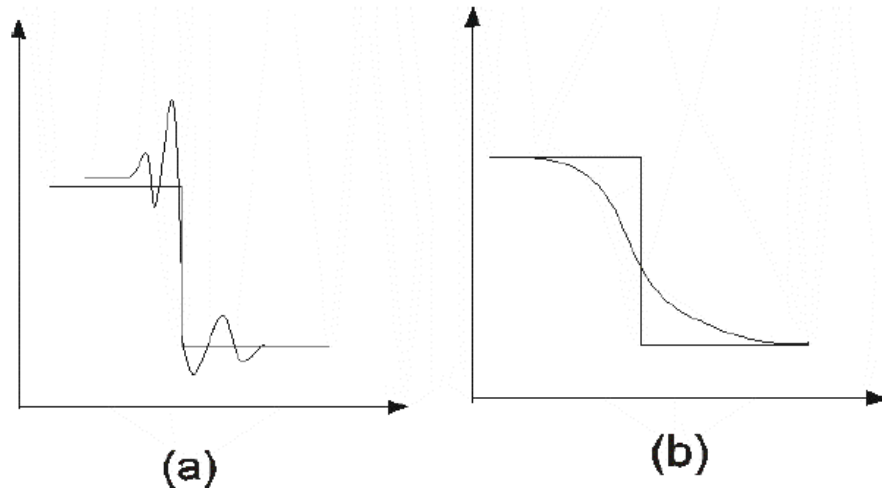


Figura 4.2 Soluções com presença de (a) oscilação numérica, (b) difusão numérica.

4.4 Acoplamento Pressão Velocidade

A natureza segregada do processo de solução requer que cada variável tenha uma equação evolutiva para ser avançada. As componentes da velocidade u , v e w podem ser avançadas por meio da equação de movimento nas três direções. No caso da pressão, para que esta tenha sua própria equação, o escoamento deve ser compressível, ou seja, ρ deve variar fortemente com a pressão. Portanto, é necessário determinar um campo de pressões que, quando inserido nas equações do movimento, origine um campo de velocidades que satisfaça a equação da conservação da massa (MALISKA, 2004).

Se ρ tem variação considerável com P , então a equação de estado, relacionando ρ com a temperatura e a pressão, é a relação empregada para o fechamento do problema. A equação de estado é então a equação evolutiva para a pressão, enquanto a equação da continuidade é para a massa específica. A formulação onde todas as variáveis dependentes possuem a sua equação de evolução é chamada de formulação compressível (MALISKA, 2004).

Segundo Maliska (2004), os problemas compressíveis podem ser resolvidos de acordo com os seguintes passos:

- a) Calcular ρ no instante $t + \Delta t$, usando a equação da conservação da massa, depois a temperatura a partir da equação da energia;
- b) A pressão é obtida através da equação de estado e as velocidades pelas equações de movimento para cada direção;
- c) Reiniciar o cálculo de ρ , e avançar a solução para um novo intervalo de tempo até atingir o regime permanente (transiente real) ou até atingir a convergência (transiente distorcido).

Se a massa específica não varia significativamente com a pressão, mas tem variação considerável com a temperatura, o problema ainda pode ser definido como compressível. Entretanto, a equação de estado $P = P(\rho, T)$ não pode ser usada, pois erros cometidos no cálculo de ρ , através da equação de conservação da massa, poderão produzir grandes erros em P em virtude da grande dependência da massa específica com a temperatura (KRISHNA *et. al.* 1999).

A equação de estado passa a ser uma equação para ρ , e a pressão passa a não possuir uma equação evolutiva, aparecendo sua influência apenas através do seu gradiente nas equações de movimento. A equação da conservação da massa não serve de equação evolutiva para nenhuma variável e passa a ser, apenas, uma restrição que deve ser obedecida pelo campo de velocidades. Portanto é necessário determinar um campo de pressões que, quando inserido nas equações do movimento, origine um campo de velocidades que satisfaça a equação da conservação da massa. O fato de ρ não variar com P introduz uma dificuldade para tratar o acoplamento entre a pressão e a velocidade. Esta formulação é chamada de incompressível (KRISHNA *et. al.* 1999).

De acordo com Maliska (2004), o procedimento de avanço da solução do instante t para o instante $t + \Delta t$ é dado por:

- i) fornecem-se os valores iniciais das variáveis dependentes;
- ii) faz-se o cálculo de T , ρ , e P , através da equação da energia, $\rho = \rho(T)$ e de um algoritmo respectivamente;
- iii) calcula-se as componentes do vetor velocidade, usando as equações do movimento, verifica-se as velocidades satisfazem à equação da conservação da massa;
- iv) caso não satisfaçam, voltar e recalcular a pressão, a temperatura depende das velocidades, portanto deve-se recomeçar o processo;
- v) após a convergência, avançar novo intervalo de tempo, até que o regime permanente seja alcançado ou até atingir-se o tempo de simulação desejado.

Existem vários métodos para o cálculo da pressão. O método SIMPLE é um dos mais usados e discutidos na literatura, tendo sido desenvolvido por Pantankar e Spalding, 1972. Consiste em fazer uma correção para a pressão, obedecendo à equação da continuidade, seguida de uma correção da velocidade. Nos métodos para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade, a seqüência de cálculo envolve dois passos distintos: no primeiro, as velocidades são corrigidas de maneira a satisfazer a equação da conservação da massa; no segundo, as pressões são avançadas para completar o ciclo iterativo. No método SIMPLE, as equações para a correção das velocidades são obtidas a partir das equações do movimento. Uma das vantagens desse método é o fato de não ser necessária a solução de um sistema linear para determinar a pressão. Entretanto, a velocidade de convergência é baixa.

O método SIMPLE possui algumas variações como o SIMPLER ou SIMPLE Revisado, o SIMPLEC ou SIMPLE Consistente (MALISKA, 2004).

4.5 Altura de Líquido Claro sobre o Prato

A altura de líquido claro é definida como a altura de líquido acumulado, a partir da superfície do prato, quando da ausência de injeção de gás. A altura de líquido claro pode ser definida pela correlação experimental de Bennett et. al. (1983):

$$h_{cl} = f_l^B \left[h_w + C \left(\frac{Q_L}{W \times f_l^B} \right)^{0,67} \right] \quad (4.8)$$

Onde:

$$C = 0,50 + 0,438 \exp(-137,8h_w) \quad (4.9)$$

$$f_l^B = \exp \left[-12,55 \left(u_s \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l - \rho_g}} \right) \right] \quad (4.10)$$

CAPÍTULO V

5 MODELAGEM MATEMÁTICA

Neste capítulo é apresentada a modelagem matemática aplicada para a realização dos experimentos numéricos. Nele abordam-se as equações que governam o fenômeno do escoamento na superfície do prato da coluna de destilação. A Figura 5.1 apresenta a situação física de interesse a ser modelada, representando um estágio da destilação (prato do tipo perfurado) onde o líquido entra no prato através do vertedor, percorre toda a superfície do mesmo, principalmente a área de borbulhamento a qual é perfurada e sai do estágio através da saída do vertedor. Já o vapor, entra no prato através das perfurações e mantém contato com o líquido a fim de trocar calor e massa.

É apresentada uma modelagem homogênea, tridimensional e bifásica, além do modelo de turbulência, as equações constitutivas e as condições de contorno para o fechamento do modelo proposto.

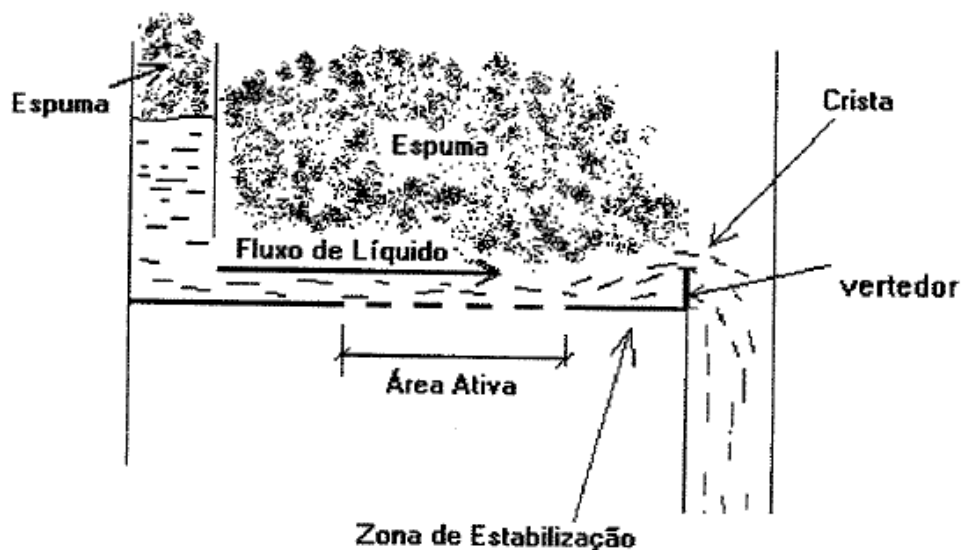


Figura 5.1 Situação física a ser modelada.

É encontrado na literatura que as duas principais hipóteses simplificadoras adotadas para os modelos fluidodinâmicos multifásicos são: a hipótese do contínuo e da interpenetrabilidade das fases.

De acordo com Méier (1998), no domínio do contínuo todas as fases envolvidas são consideradas como matéria contínua, negligenciando-se todas as características moleculares da matéria. Já a hipótese da interpenetrabilidade das fases complementa a hipótese do contínuo, analisando as fases numa escala espacial um pouco acima da microscópica (mas longe da macroscópica) de maneira que as fases possam ocupar o mesmo volume no espaço ao mesmo tempo através de sua interpenetração. Com isto, as propriedades de transporte para todas as fases podem ser calculadas num mesmo ponto do espaço ao mesmo tempo através de uma média volumétrica.

Uma observação pertinente quanto ao enfoque euleriano é de que os princípios de conservação da massa, energia e quantidade de movimento para todas as fases são aplicados considerando-se que as variações numa porção do fluido sejam observadas por um observador fixo no espaço, já no enfoque lagrangeano, o observador move-se com a mesma velocidade de uma porção contínua do fluido (MEIER, 1998).

Segundo Taylor e Krishna (2000) existe uma variedade de modelos disponíveis na literatura para análise e otimização de colunas de destilação. Cada modelo possui seu lugar no procedimento de desenvolvimento, onde os modelos de equilíbrio aparecem como um início para este processo. O trabalho de Baratti *et al.* (1995) mostra que os resultados de um modelo de equilíbrio quando comparados com dados experimentais representaram de forma consistente os resultados reais. Outros trabalhos também afirmam a qualidade dos resultados dos modelos de equilíbrio, como em Wozny e Li (2004) onde esta modelagem foi utilizada em um procedimento de partida e os resultados do modelo foram confrontados com dados experimentais gerando perfis coerentes e qualitativamente semelhantes. Sabe-se também que a dinâmica do equilíbrio é muito mais rápida que a dinâmica hidráulica, sendo portanto, uma consideração razoável. Desta forma, apesar da natureza do transiente ser de não-equilíbrio termodinâmico nos pratos, foi utilizado um modelo simplificado, ou seja, modelo de equilíbrio.

Um esquema da coluna proposta é apresentado na Figura 5.2. A numeração é considerada decrescente da base para o topo.

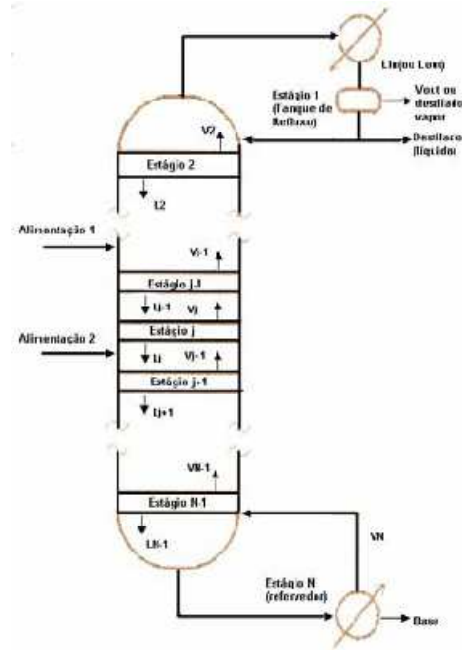


Figura 5.2 Esquema de uma coluna de destilação.

Os balanços molares globais, por componente e os balanços de entalpia podem ser escritos da seguinte forma:

Balanço Molar Global

$$\frac{dM}{dt} = \dot{V}_{j+1} + \dot{L}_{j-1} + \dot{F}_j - \dot{V}_j - \dot{L}_j \quad (5.1)$$

Balanço Molar por Componente

$$\frac{dM_j x_{i,j}}{dt} = \dot{V}_{j+1} y_{i,j+1} + \dot{L}_{j-1} x_{i,j-1} + \dot{F}_j z_{i,j} - \dot{V}_j y_{i,j} - \dot{L}_j x_{i,j} \quad (5.2)$$

Balanço de Energia

$$\frac{dM_j H_j^L}{dt} = \dot{V}_{j+1} H_{j+1}^V + \dot{L}_{j-1} H_{j-1}^L + \dot{F}_j H_j^F - \dot{V}_j H_j^V - \dot{L}_j H_j^L - Q_j \quad (5.3)$$

Relação de Equilíbrio

$$y_{i,j} = \gamma_{i,j} \phi_{i,j} P_{i,j}^{\text{sat}} x_{i,j} / P_j \quad (5.4)$$

Restrições

$$\sum_j x_{i,j} = 1 \quad \forall i \quad (5.5)$$

$$\sum_j y_{i,j} = 1 \quad \forall i \quad (5.6)$$

$$\sum_j \text{Componentes da Alimentação} = 1 \quad (5.6 a)$$

5.1 Pressão de Saturação

A pressão de saturação foi obtida pela correlação de Antoine:

$$\ln\left(\frac{P^{\text{sat}}}{P}\right) = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad (5.7)$$

onde P^{sat} representa a pressão de saturação do componente, P representa a pressão do sistema, T representa a temperatura e A , B e C são os coeficientes tabelados de Antoine (SMITH e VANNES, 2000).

5.2 Multicomponente

Num escoamento multicomponente, assumimos que os diversos componentes de um fluido estão misturados em nível molecular, de forma que, eles compartilham o mesmo campo

de velocidade, temperatura e pressão e a transferência de massa se dá por convecção e difusão (KRISHNA e STANDART, 1976).

5.3 Multifásico

Escoamento multifásico refere-se a uma situação onde mais de um fluido está presente. Cada fluido pode possuir seu próprio campo de velocidade, ou todos os fluidos podem compartilhar um campo comum de velocidade. Ao contrário de escoamento multicomponente, os fluidos não são misturados microscopicamente, e neste caso as correntes de mistura, reação ou separação são abordadas como Euleriano – Euleriano nos processos de transporte e contato (PFLEGER e BECKER, 2001).

5.4 Termo Fonte

São termos opcionais que podem ser associados a muitas equações, assim como para modelos adicionais ou processos físicos específicos. Eles podem ser dimensionados tanto como pontos ou dentro de um volume definido por um subdomínio. “Sources” de energia, momento, resistência, massa, componentes, e de outras variáveis podem ser criadas (CFD-online.com).

Dentro dos subdomínios as mesmas equações de escoamentos dos fluidos dos domínios são resolvidas para os subdomínios. Mais especificamente, “sources” de massa podem ser descritos em termos de massa por unidade de volume, com componentes adicionais a uma temperatura associada (CFD-online.com).

Sources em sistemas multifásicos são muito semelhantes aos monofásicos, exceto que eles são implementados com base em uma fase. É importante notar que sources em fases não são automaticamente considerados com o termo da fração volumétrica. Se a intenção é obter o comportamento do termo fonte, onde há variação da fração volumétrica, então é necessário multiplicá-lo pela fração volumétrica (CFD-online.com).

5.5 Modelo de Turbulência

Turbulência é um processo complexo, principalmente por ocorrer em três dimensões e alterar significativamente as características de um escoamento com pequenas flutuações e às vezes tornando-os instáveis e caóticos. Turbulência ocorre quando as forças de inércia nos fluidos tornam-se significativas em relação às forças viscosas, caracterizadas por altos números de Reynolds (NALLASAMY, 1987).

Em princípio, as equações de Navier Stokes descrevem os escoamentos laminar e turbulento sem informações adicionais. Entretanto, os fenômenos de turbulência ocorrem em distancias e tempos bem menores que os dimensionados para os elementos de volumes utilizados na análise numérica, exigindo enorme capacidade computacional para cálculos acurados (NALLASAMY, 1987).

5.5.1 Modelo k - ε

Segundo Noriler (2007), o modelo k – ε é baseado no conceito de viscosidade turbulenta, composta de duas equações e aplicado como modelo padrão nas industrias, k é a turbulência da energia cinética definida como a variação da velocidade devido a flutuações e tem a dimensão (L²T²), e ε é a dissipação dos turbilhões e tem a dimensão de k pelo tempo (L²T³).

O modelo k – ε é baseado na viscosidade efetiva de turbilhões, e assim:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (5.8)$$

Onde, μ_t é a viscosidade turbulenta. O modelo k-ε assume que a viscosidade turbulenta é ligada à energia cinética e dissipação turbulenta pela relação:

$$\mu_t = C_\mu \rho_\alpha \left(\frac{k_\alpha^2}{\varepsilon_\alpha} \right) \quad (5.9)$$

e,

$$G_k = \mu_t \left[\begin{aligned} &2 \times \left(\frac{\partial v_{x,k}}{\partial x} \right)^2 + 2 \times \left(\frac{\partial v_{y,k}}{\partial y} \right)^2 + 2 \times \left(\frac{\partial v_{z,k}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{x,k}}{\partial y} + \frac{\partial v_{y,k}}{\partial x} \right)^2 \\ &+ \left(\frac{\partial v_{y,k}}{\partial z} + \frac{\partial v_{z,k}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{z,k}}{\partial x} + \frac{\partial v_{x,k}}{\partial z} \right)^2 \end{aligned} \right] \quad (5.10)$$

Onde C_μ é uma constante e G_k é o termo de geração da energia cinética turbulenta.

Os valores de k e ε vem diretamente das equações diferenciais de transporte para a energia cinética turbulenta e taxa de dissipação turbulenta. Sendo assim, para o sistema multifásico temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \rho_\alpha k_\alpha) + \nabla \cdot \left(r_\alpha \left(\rho_\alpha U_\alpha k_\alpha - \left(\mu + \frac{\mu_{ta}}{\sigma_k} \right) \nabla k_\alpha \right) \right) = r_\alpha (P_\alpha - \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + T_{\alpha\beta}^{(k)} \quad (5.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + \nabla \cdot \left(r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha \varepsilon_\alpha - \left(\mu + \frac{\mu_{ta}}{\sigma_k} \right) \nabla \varepsilon_\alpha \right) = r_\alpha \frac{\varepsilon_\alpha}{k_\alpha} (C_{\varepsilon 1} P_\alpha - C_{\varepsilon 2} \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + T_{\alpha\beta}^{(\varepsilon)} \quad (5.12)$$

Onde os termos adicionais $T_{\alpha\beta}^{(k)}$ e $T_{\alpha\beta}^{(\varepsilon)}$ representam os coeficientes de transferência entre fases k e ε , respectivamente.

Onde $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, C_μ , σ_k e σ_ε são constantes do modelo. A Tabela 5.1 apresenta os valores das constantes empíricas do modelo k - ε padrão.

Tabela 5.1 Constantes do Modelo k - ε padrão.

Constante	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_μ	σ_k	σ_ε
Valor	0,09	1,44	1,92	1,00	1,30

5.6 Equação Geral da Conservação

Segundo Meier *et al.*, (1999), um modelo tridimensional, multifásico, transiente e turbulento expresso em coordenadas cartesianas para qualquer propriedade, ϕ_k , na fase k, pode ser generalizado pela seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_k f_k \phi_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k f_k u \phi_k) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_k f_k v \phi_k) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_k f_k w \phi_k) = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[f_k \Gamma_k \frac{\partial(\rho_k \phi_k)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[f_k \Gamma_k \frac{\partial(\rho_k \phi_k)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[f_k \Gamma_k \frac{\partial(\rho_k \phi_k)}{\partial z} \right] + S_\phi \end{aligned} \quad (5.13)$$

onde ϕ_k , são as chamadas propriedades fluidodinâmicas como u, v, w, k e ε na respectiva fase k; Γ é o coeficiente de difusão para cada propriedade ϕ_k ; S é o termo fonte para cada propriedade ϕ_k ; ρ_k é a massa específica da fase k e f_k é a fração volumétrica da fase k.

Os termos da Equação 5.13, representam da esquerda para direita, respectivamente, acúmulo, termos convectivos, taxas difusivas e o termo de transformação da propriedade ϕ_k . Partindo-se desta equação generalizada pode-se escrever o Modelo 3-D bifásico homogêneo proposto neste trabalho.

Particularizações do modelo a partir da equação geral da conservação, por definição da fase k, da propriedade conservável ϕ_k , do coeficiente de difusão Γ e o termo fonte S, são apresentados nos seguintes itens.

5.7 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo (3-DMult)

Quando utiliza-se o modelo multifásico homogêneo faz uma simplificação do modelo multi-fluído, no qual é assumido que as propriedades de transporte são as mesmas para todas as fases presentes, ou seja:

$$\phi_k = \phi \quad 1 \leq k \leq N_k \quad (5.14)$$

Porém as frações volumétricas são distintas. Então a continuidade individual da fase deve ser resolvida para determinar as frações volumétricas, com a restrição de que:

$$\sum_{k=1}^{N_p} f_k = 1 \quad (5.15)$$

A conservação da continuidade de movimento é imposta como da mistura e contrabalançada pelas frações volumétricas de cada fase presente no sistema multifásico.

Na interface entre os dois fluidos, existe uma força de tensão superficial que pode exercer um efeito considerável. Os modelos de forças e de tensão superficial são baseados nos gradientes de fração volumétrica.

Brackbill *et al.* (1992), sugeriu um modelo onde a força de tensão superficial é dada por:

$$F_s = \sigma \kappa \nabla f_k \quad (5.16)$$

onde σ é a tensão superficial e κ o raio de curvatura definido como:

$$\kappa = \frac{1}{|n|} \left(\left(\left(\frac{n}{|n|} \cdot \nabla \right) |n| - \nabla \cdot n \right) \right) \quad (5.17)$$

para um vetor normal a superfície dado por:

$$n = \nabla f \quad (5.18)$$

A turbulência é tratada pelo modelo k- ϵ padrão, descrito no item anterior com uma equação para energia cinética turbulenta da mistura e uma equação para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta da mistura.

Na modelagem matemática, o modelo homogêneo multifásico foi utilizado com o objetivo de analisar a capacidade de prever o escoamento do líquido sobre a superfície do prato desconsiderando o fluxo cruzado com a fase vapor na superfície dos pratos.

No modelo 3-DMult foram assumidas algumas hipóteses simplificadoras:

- o fluxo de líquido é o de interesse, de tal forma que é assumido como mais importante que o fluxo do gás;

- os efeitos térmicos não influenciam no desenvolvimento da fluidodinâmica, de modo que utiliza-se um modelo isotérmico.

- a turbulência é avaliada pelo modelo k- ϵ padrão que assume a hipótese de que os tensores de Reynolds podem ser linearmente relacionados com o gradiente de velocidade média.

A Tabela 5.5 apresenta uma forma compacta do Modelo 3-D Multifásico, onde são definidos os termos fontes para cada variável ϕ_k , e as expressões para o coeficiente de difusão Γ de acordo com Equação 5.13.

5.7.1 Geometria do Modelo 3-D Mult

A Figura 5.3 apresenta a geometria que foi construída com o auxílio do código comercial CFX 11 "BUILD", e utilizada nas simulações do modelo 3-D Multifásico Homogêneo, exibindo as condições de contorno utilizadas na solução. Na condição de entrada de líquido, a velocidade é considerada constante e normal à fronteira. A pressão de 101,325 kPa foi adotada nas duas condições de pressão considerando um escoamento completamente desenvolvido. Estas condições de pressão são aplicadas, pois estas regiões estão abertas, ou seja, estão expostas à entrada e saída de massa. Para baixas velocidades, a condição de pressão ambiente constante pode ser assumida. As condições de contorno utilizadas para solução deste problema são representadas matematicamente na Tabela 5.8.

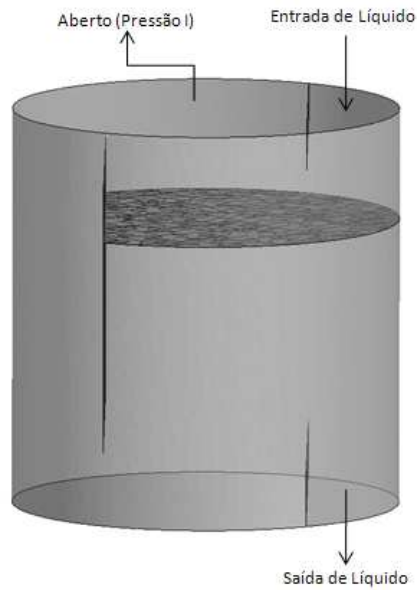


Figura 5.3 Domínio físico 3-DMult.

5.7.2 Malha Numérica 3-D Mult

A Tabela 5.2 apresenta os parâmetros geométricos utilizados para construção da malha que foi utilizada nos estudos de CFD. O sistema escolhido para este caso foi o escoamento de água sem o escoamento cruzado da fase vapor, pois a ênfase está concentrada na capacidade do programa CFX em representar o escoamento do líquido sobre a superfície do prato na ausência do escoamento cruzado com a fase vapor.

Tabela 5.2 Parâmetros geométricos para estudo de Caso Mult.

Parâmetros		Caso A
Geométricos	Altura do Estágio [m]	0,15
	Diâmetro da coluna [m]	0,21
	Altura do represa [m]	0,03
Malha Numérica	N_{nodes} (número de nós)	24.575
	N_{Elementos}(número elementos)	125.604

Utilizando os parâmetros geométricos descritos na Tabela 5.2, construiu-se um domínio 3-D no ANSYS ICEM CFX, onde as características da malha estruturada construída podem ser visualizadas na Figura 5.4.

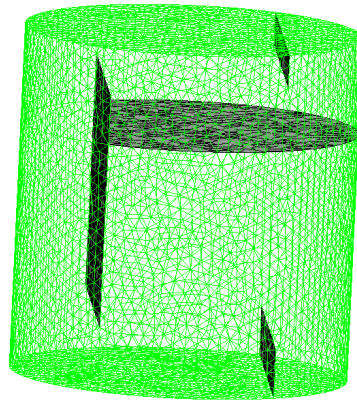


Figura 5.4 Malha Numérica Gerada para o escoamento 3-D Multifásico Homogêneo.

5.8 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo I (3-DMulti)

Na modelagem matemática, o modelo homogêneo multifásico foi utilizado com o objetivo de analisar a capacidade deste prever o escoamento cruzado do líquido com o vapor sobre a superfície do prato, além das iterações que ocorrem entre as duas fases quando submetidas a um escoamento cruzado e turbulento. Este modelo pode ser visto na sua forma compacta na Tabela 5.5.

5.8.1 Geometria do Modelo 3-D Multi

A Figura 5.5 representa domínio físico que foi construído com o auxílio do código comercial CFX 11 "BUILD" e utilizado nas simulações CFD, além de conter as condições de contorno utilizadas para resolver o modelo 3-DMulti. Nas condições de entrada de líquido e gás, as velocidades são consideradas constantes e normais à fronteira. A pressão de 101,325 kPa foi adotada nas duas condições de pressão. As condições de contorno estão representadas matematicamente na Tabela 5.8.

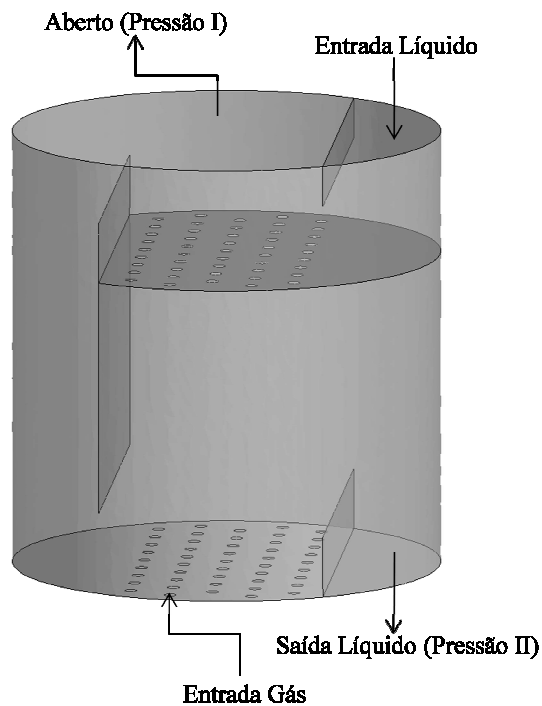


Figura 5.5 Domínio físico 3-D multifásico homogêneo I.

5.8.2 Malha Numérica do Modelo 3-D Multi

A Tabela 5.3 apresenta os parâmetros geométricos utilizados para construção do domínio físico utilizado nos estudos de CFD. O sistema escolhido para este caso também foi ar-água porém, diferentemente do caso anterior, pois é feita a injeção de ar pelos furos do prato como sendo uma condição de contorno, para avaliar sua influência no escoamento líquido no prato.

Tabela 5.3 Parâmetros geométricos para estudo de Caso Multi I.

Parâmetros		Caso A
Geométricos	Altura do Estágio [m]	0,15
	Diâmetro da coluna [m]	0,21
	Diâmetro do furo [m]	0,006
	Número de Furos	47
	Altura do represa [m]	0,03
Malha Numérica	N_{nodes} (número de nós)	80.788
	N_{Elements} (número elementos)	415.164

Utilizando os parâmetros geométricos descritos na Tabela 5.3, construiu-se um domínio 3-D utilizando-se o ANSYS ICEM CFX, onde as características da malha construída podem ser visualizadas na Figura 5.6.

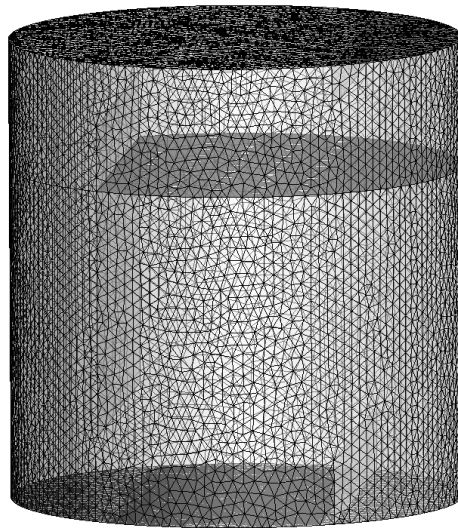


Figura 5.6 Malha do modelo 3-D multifásico homogêneo I.

5.9 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo II (3-DMultII)

Na realização deste estudo foi utilizado um novo domínio 3-D, que levou em consideração as mesmas dimensões utilizadas no caso anterior, porém com uma resistência elétrica disposta sobre a superfície do prato. Este domínio físico foi construído pois a unidade piloto de destilação, que está sendo estudada, contém estas resistências sobre a superfície dos

pratos. Esta geometria construída com o auxílio do código comercial CFX 11 "BUILD" foi estudada para verificar a influência desta no escoamento líquido-vapor no prato destilação.

Uma representação do modelo 3-D Multifásico Homogêneo II pode ser visualizada de forma compacta na Tabela 5.5.

5.9.1 Geometria do Modelo 3-D MultII

A Figura 5.7 demonstra o domínio físico contendo a resistência sobre a superfície do prato além de exibir as condições de contorno do domínio 3-DMultII onde estas são representadas matematicamente na Tabela 5.8.

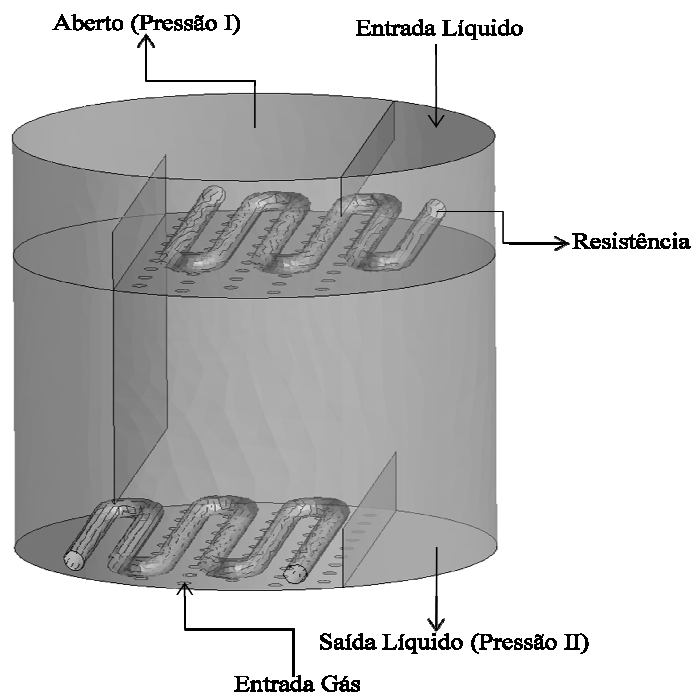


Figura 5.7 Domínio físico 3-D multifásico homogêneo II.

5.9.2 Malha Numérica do Modelo 3-D MultII

A Tabela 5.4 apresenta os parâmetros geométricos utilizados para construção da malha que foi utilizada nos estudos de CFD.

Tabela 5.4 Parâmetros geométricos para estudo de Caso Mult II.

Parâmetros		Caso A
Geométricos	Altura do Estágio [m]	0,15
	Diâmetro da coluna [m]	0,21
	Diâmetro do furo [m]	0,006
	Número de Furos	47
	Diâmetro da Resistência [m]	0.01
	Altura do represa [m]	0,03
Malha Numérica	N_{nodes} (número de nós)	222778
	$N_{\text{Elementos}}$ (número elementos)	1129497

As características da malha construída podem ser visualizadas na Figura 5.8.

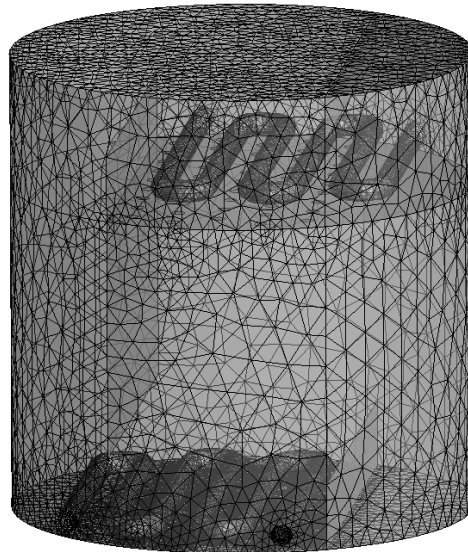


Figura 5.8 Malha do modelo 3-D multifásico homogêneo II.

5.10 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo Compacto

Uma representação do modelo 3-D Multifásico Homogêneo utilizado nas simulações dos estudos de caso anteriormente citados pode ser visualizada de forma compacta na Tabela 5.5.

Tabela 5.5 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo.

Conservação	f_k	ϕ_k	Γ_k	S_ϕ
Massa Fase Líquida	f_l	1	0	0
Massa Fase Vapor	f_g	1	0	0
Momentum na direção x	1	v_x	$\frac{\mu_{mistura} + \mu^t}{\rho_{mistura}}$	$-\frac{\partial p}{\partial x} + \rho_{mistura} g_x + FS_x$
Momentum na direção y	1	v_y	$\frac{\mu_{mistura} + \mu^t}{\rho_{mistura}}$	$-\frac{\partial p}{\partial y} + \rho_{mistura} g_y + FS_y$
Momentum na direção z	1	v_z	$\frac{\mu_{mistura} + \mu^t}{\rho_{mistura}}$	$-\frac{\partial p}{\partial z} + \rho_{mistura} g_z + FS_z$
Energia cinética Turbulenta	1	k	$\frac{\mu_{mistura} + \frac{\mu^t}{\sigma^k}}{\rho_{mistura}}$	$G_k - \rho_{mistura} \varepsilon$
Taxa de Dissipação da energia cinética turbulenta	1	ε	$\frac{\mu_{mistura} + \frac{\mu^t}{\sigma^\varepsilon}}{\rho_{mistura}}$	$\frac{\varepsilon}{k} (C_1 G_k - C_2 \rho_{mistura} \varepsilon)$

Equações Constitutivas

$$\mu_t = C_\mu \rho_\alpha \left(\frac{k_\alpha^2}{\varepsilon_\alpha} \right)$$

$$G_k = \mu_t \left[2 \times \left(\frac{\partial v_{x,k}}{\partial x} \right)^2 + 2 \times \left(\frac{\partial v_{y,k}}{\partial y} \right)^2 + 2 \times \left(\frac{\partial v_{z,k}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{x,k}}{\partial y} + \frac{\partial v_{y,k}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{y,k}}{\partial z} + \frac{\partial v_{z,k}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{z,k}}{\partial x} + \frac{\partial v_{x,k}}{\partial z} \right)^2 \right]$$

$$\mu_{mistura} = f_g \mu_g + f_l \mu_l \quad \rho_{mistura} = f_g \rho_g + f_l \rho_l$$

$$F_{s_x} = \sigma \kappa \frac{\partial f_l}{\partial x} \quad F_{s_y} = \sigma \kappa \frac{\partial f_l}{\partial y} \quad F_{s_z} = \sigma \kappa \frac{\partial f_l}{\partial z}$$

5.11 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo III (3-DMultIII)

Neste estudo foi utilizado a mesma geometria e a mesma malha numérica do Modelo 3-D Multifásico Homogêneo I e o método numérico utilizado para resolução também foi o mesmo, porém utilizou-se uma mistura de etanol e água na alimentação de mistura líquida e mistura vapor.

A partir deste momento estudou-se a conservação da massa, quantidade de movimento e de energia do sistema. A predição dos campos de velocidade, concentração, temperatura e propriedades turbulentas em fluidodinâmica computacional foi efetuada em modelos baseados nos princípios de conservação de massa, da energia e da quantidade de movimento, no domínio do espaço e do tempo. Quando aplicada a fluidos contínuos, estas leis de conservação dizem respeito à taxa de mudança da propriedade de um desejado fluido por forças externas e pode ser definida como:

a) Lei da Conservação da Massa (Continuidade): os fluxos de massa inseridos num volume de controle devem ser exatamente iguais a aqueles que saem.

b) Conservação da Quantidade de Movimento (Segunda Lei de Newton): a força resultante no elemento de fluido é igual à sua massa multiplicada pela aceleração do elemento.

c) Conservação de Energia (Primeira Lei da Termodinâmica): a taxa de variação de energia da partícula de um fluido é igual ao fluxo de calor para dentro do elemento mais trabalho realizado pelas forças de campo e superfície sobre a partícula.

Aplicando estas leis da conservação sobre um elemento infinitesimal fixo no espaço, foi possível determinar um sistema de equações que levaram em consideração as mudanças de massa, quantidade de movimento e energia com o fluido se movendo através das fronteiras dos volumes de controle. As equações resultantes podem ser escritas na forma diferencial em coordenadas cartesianas da seguinte maneira:

i) Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial y_i}(\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial z_i}(\rho w_i) = 0 \quad (5.19)$$

ii) Equação da Conservação de Momento

Direção x:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho uvw) + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \rho g_x \quad (5.20)$$

Direção y:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho uvw) + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \rho g_y \quad (5.21)$$

Direção z:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho uvw) + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \rho g_z \quad (5.22)$$

iii) Equação da Conservação de Energia:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho C_p T) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u C_p T) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v C_p T) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w C_p T) = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S \end{aligned} \quad (5.23)$$

Onde: ρ é a densidade em (kg/m³); u componente de velocidade na direção x (m/s); v componente de velocidade na direção y (m/s); w componente de velocidade na direção z (m/s); x , y e z são coordenadas cartesianas (m); P é a pressão (Pa); μ é a viscosidade (kg/ms); k condutividade térmica (W/mK); C_p calor específico (W/kgK); T temperatura (K); S termo de geração (W/m³) e g é a aceleração da gravidade (m/s²).

Foram apresentadas as equações gerais da conservação em coordenadas cartesianas pois é desta maneira que o código comercial ANSYS-CFX 11, resolveu as mesmas, apesar de estarmos tratando de um domínio com forma cilíndrica, estas equações são resolvidas para cada volume de controle em coordenadas cartesianas.

Para resolver as equações anteriores foram adicionadas equações relacionadas a transferência de massa na interface, transferência de momento na interfase $M_{v,1}$ e transferência de energia, chamadas equações de fechamento.

Para transferência de massa na interface considerou-se a relação de equilíbrio de Rault Modificada onde tem-se:

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (5.24)$$

Partindo da Equação 24 para uma mistura binária as equações que foram utilizadas para o cálculo dos coeficientes de atividade foram:

$$\gamma_1(x_1, x_2, T) = \exp \left[-\ln(x_1 + x_2 \times \Lambda_{12}(T)) + x_2 \times \left(\frac{\Lambda_{12}(T)}{x_1 + x_2 \Lambda_{12}(T)} - \frac{\Lambda_{21}(T)}{x_2 + x_1 \Lambda_{21}(T)} \right) \right] \quad (5.25)$$

e

$$\gamma_2(x_1, x_2, T) = \exp \left[-\ln(x_2 + x_1 \times \Lambda_{21}(T)) - x_1 \times \left(\frac{\Lambda_{12}(T)}{x_1 + x_2 \Lambda_{12}(T)} - \frac{\Lambda_{21}(T)}{x_2 + x_1 \Lambda_{21}(T)} \right) \right] \quad (5.26)$$

onde:

$$\Lambda_{12}(T) = \frac{V_2}{V_1} \exp \left(\frac{-a_{12}}{R \cdot T} \right) \quad (5.27)$$

e

$$\Lambda_{21}(T) = \frac{V_1}{V_2} \exp \left(\frac{-a_{21}}{R \cdot T} \right) \quad (5.28)$$

onde:

- x_1 : fração molar de água na mistura líquida;
- x_2 : fração molar de etanol na mistura líquida.
- T: temperatura do sistema.

- V_1 : volume molar da água.
- V_2 : volume molar do etanol.
- R : constante dos gases ideais.
- a_{12} : coeficiente de interação da água no etanol.
- a_{21} : coeficiente de interação do etanol na água.

A Tabela 5.6 apresenta os valores das constantes que foram utilizadas para calcular os coeficientes de atividade.

Tabela 5.6 Parâmetros utilizados no modelo de equilíbrio.

Parâmetro	Valor
V_1 (cm ³ mol ⁻¹)	18,07
a_{12} (cal mol ⁻¹)	76,92
V_2 (cm ³ mol ⁻¹)	437,98
a_{21} (cal mol ⁻¹)	1238

Fonte: software comercial Hysys.Process®.

A pressão de saturação foi calculada pela Equação de Antoine, definida como:

$$P^{sat} = \exp\left(A_i - \frac{B_i}{T - C_i}\right) \quad (5.29)$$

Onde os parâmetros para calcular a pressão de saturação da água (P^{sat1}) e do etanol (P^{sat2}) estão representados na Tabela 5.7.

Tabela 5.7 Dados para calculo da pressão de vapor via Equação de Antoine.

	A	B (K)	C (K)
Água	16,2887	3816,44	46,16
Etanol	18,9119	3803,98	41,68

Fonte: SMITH, J. M., VAN NESS, H. C.(Hendrick C.), ABBOTT, M. M. (2000).

Desta maneira o modelo de equilíbrio interfacial utilizado foi:

$$\frac{y_i}{x_i} = \frac{\gamma_i P_i^{sat}}{P} \quad (5.30)$$

Considerou-se que a transferência de momento é somente devido a força de arraste por unidade de volume como:

$$M_{g,l} = \frac{3 f_g \rho_l}{4 d_g} C_D |v_g - v_l| (v_g - v_l) \quad (5.31)$$

onde d_g é o diâmetro da bolha e C_D é o coeficiente de arraste.

Com relação a transferência de energia podemos afirmar que a taxa de energia que cruza a interface entre as fases líquidas e vapor pode ser descrita por:

$$Q_{g,l} = h_{g,l} A_v (T_g - T_l) \quad (5.32)$$

onde $h_{g,l}$ é o coeficiente global de transferência de calor, e A_v é a área interfacial por unidade de volume e pode ser calculada por :

$$A_v = \frac{6 f_g}{d_g} \quad (5.33)$$

O coeficiente de transferência de calor é definido como (Bird et al., 1982):

$$h_{g,l} = \frac{\lambda_g \text{Nu}_{g,l}}{d_g} \quad (5.34)$$

onde λ_g é a condutividade térmica e $\text{Nu}_{g,l}$ é o número de Nusselt. O número de Nusselt para bolhas esféricas em regime turbulento foi calculada pela equação Ranz & Marshall:

$$\text{Nu}_{g,l} = 2,0 + 0,6 \text{Re}_g^{0,5} \text{Pr}_g^{0,3} \quad (5.35)$$

isto para:

$$\begin{aligned} 0 \leq Re_g &\leq 200 \\ 0 \leq Pr_g &\leq 250 \end{aligned} \quad (5.36)$$

com os número de Reynolds e Prandtl definidos como:

$$Re_g = \frac{\rho_l v_g d_g}{\mu_l} \quad (5.37)$$

$$Pr_g = \frac{\mu_g Cp_g}{\lambda_g} \quad (5.38)$$

5.12 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo IV (3-DMultIV)

Neste caso foi utilizado a mesma geometria e a mesma malha numérica do Modelo 3-D Multifásico Homogêneo II, o método numérico utilizado para resolução também foi o mesmo. Já a modelagem matemática utilizada e as condições de contorno foram do caso 3-DMultIII com o diferencial pela presença das resistências.

5.13 Representação matemática das condições de contorno utilizadas para solução dos modelos matemáticos propostos

As condições de contorno utilizadas nas simulações para solucionar os modelos matemáticos propostos acima são apresentadas matematicamente na Tabela 5.8. Nas condições de entrada de líquido e gás, as velocidades são consideradas constantes e normais a fronteira. A pressão de 101,325 kPa foi adotada nas duas condições de pressão constante considerando o escoamento completamente desenvolvido, e foi adotado condição de deslizamento nas paredes.

Tabela 5.8 Resumo das condições de contorno para solução dos modelos multifásicos propostos.

Condições de Contorno	Propriedades	Fase Líquida	Fase Vapor
Entrada de Líquido	$v_x _{\text{entrada}} = 0$ $v_y _{\text{entrada}} = v$ $v_x _{\text{entrada}} = 0$ $k _{\text{entrada}} = 1,5(i \times v_y)^2$ $\varepsilon _{\text{entrada}} = \frac{(k _{Y=0})^{1,5}}{0,3Ls}$	$f_{l,\text{ent}} = f_{l0}$ $T_{l,\text{ent}} = T_{l0}$	$f_{v,\text{ent}} = 1 - f_{l,\text{ent}}$ $T_{g,\text{ent}} = T_{g0}$
Entrada de Vapor	$v_x _{\text{entrada}} = 0$ $v_y _{\text{entrada}} = u_s$ $v_z _{\text{entrada}} = 0$ $k _{\text{entrada}} = 1,5(i \times v_y)^2$	$f_{l,\text{ent}} = f_{l0}$ $T_{l,\text{ent}} = T_{l0}$	$f_{v,\text{ent}} = 1 - f_{l,\text{ent}}$ $T_{g,\text{ent}} = T_{g0}$
Saída (PressãoI)	$\frac{\partial v_x}{\partial z} _{\text{SaídaI}} = \frac{\partial v_y}{\partial z} _{\text{SaídaI}} = \frac{\partial k}{\partial z} _{\text{SaídaI}} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} _{\text{SaídaI}} = p_{\text{ref}}$	$\frac{\partial f_l}{\partial z} _{\text{SaídaI}} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial z} _{\text{SaídaI}} = 0$
Saída (PressãoII)	$\frac{\partial v_x}{\partial z} _{\text{SaídaII}} = \frac{\partial v_y}{\partial z} _{\text{SaídaII}} = \frac{\partial k}{\partial z} _{\text{SaídaII}} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} _{\text{SaídaII}} = p_{\text{ref}}$	$-\frac{\partial f_l}{\partial z} _{\text{SaídaII}} = 0$	$-\frac{\partial f_g}{\partial z} _{\text{SaídaII}} = 0$
Parede	$v_x _{\text{parede}} = v_y _{\text{parede}} = k _{\text{parede}} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} _{\text{parede}} = 0$	$\frac{\partial f_l}{\partial \xi} _{\text{Parede}} = 0$ $q_l = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial \xi} _{\text{Parede}} = 0$ $q_v = 0$

5.14 Método Numérico utilizado para solução dos modelos propostos

Todas as equações dos modelos foram resolvidas empregando-se o código comercial CFX 11 o qual é baseado no método de volumes finitos. As simulações do escoamento turbulento líquido-gás foram realizadas usando diferentes estratégias numéricas para garantir estabilidade e convergência na solução numérica. A melhor forma de minimizar erros numéricos, como difusão numérica e retardo na solução numérica, típicos de cálculos com CFD, é resolver as equações do modelo de acordo com a seguinte metodologia:

- não empregar fatores de relaxação;

- utilizar um método de integração no tempo, composto por um esquema de aproximação quadrática e "difference backward";

- tratar o problema da difusão numérica com um esquema de interpolação de alta ordem ("HIGHER UPWIND") ao invés de um esquema de primeira ordem.

A aplicação de um esquema de interpolação " HIGHER UPWIND" evita problemas de "check-boarding" ou oscilação na solução numérica e o acoplamento de pressão-velocidade foi do tipo "SIMPLEC". O algoritmo de interpolação "RHIE-CHOW" com o procedimento de solução AMG foi usado para melhorar a solução e evitar erros numéricos devido a não ortogonalidade das células geradas durante a construção da malha estruturada.

Inicialmente, o prato foi considerado como preenchido de água. As hipóteses de água isenta de ar e ar isento de água nas condições de entrada também foram adotadas.

CAPÍTULO VI

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo, são apresentados os resultados e discussões dos estudos de fluidodinâmica computacional realizados durante o desenvolvimento deste trabalho. Com o intuito de aprimorar a experiência no escoamento multifásico, formulou-se uma metodologia de estudos com acréscimo seqüencial de complexidade. Na Tabela 6.1 observam-se a variação das velocidades de alimentação de líquido e vapor que foram feitas para o estudo do comportamento hidrodinâmico do escoamento cruzado líquido-vapor na superfície de um prato perfurado.

Tabela 6.1 Variação das Velocidades nas Simulações dos Modelos Propostos.

	u_s [m/s]	v_y [m/s]	Casos
Modelo Homogêneo Multifásico (Mult)	0	0,00671	A
	0	0,06	B
	0	0,1	C
Modelo Homogêneo Multifásico I (MultI)	u_s [m/s]	v_y [m/s]	Casos
	0,3	0,00671	A
	0,5	0,00671	B
	0,7	0,00671	C
	0,3	0,06	D
	0,5	0,06	E
	0,7	0,06	F
	0,3	0,1	G
	0,4	0,1	H
0,5	0,1	I	
Modelo Homogêneo Multifásico II (MultII)	u_s [m/s]	v_y [m/s]	Casos
	0,5	0,7	A
	0,5	1,0	B
	0,3	0,5	C
Modelo Homogêneo Multifásico III (MultIII)	u_s [m/s]	v_y [m/s]	Casos
	0,3	0,7	A
Modelo Homogêneo Multifásico IV (MultIV)	u_s [m/s]	v_y [m/s]	Casos
	0,5	0,7	A
	0,5	1,0	B
	0,3	0,5	C

6.1 Modelo 3-D Homogêneo Multifásico – (3-DMult)

Neste caso utilizou-se o domínio físico apresentado na Figura 6.1, com escoamento multifásico, para um estudo preliminar do comportamento fluidodinâmico destas fases, sem a ocorrência do escoamento cruzado líquido vapor na superfície do prato. Estas simulações foram feitas para estudar o comportamento da fase contínua (fase líquida), a distribuição da fração de líquido no estágio como também verificar os vetores de velocidade desta fase.

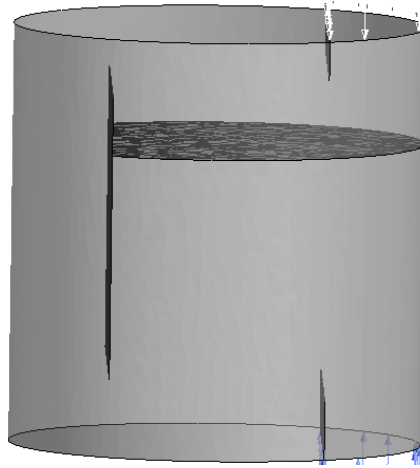


Figura 6.1 Sistema de Estudo Multifásico.

Nas condições de contorno assumidas consideraram-se que a velocidade de entrada de líquido é uniforme e normal na direção "y", o sistema foi considerado isotérmico e nas condições de saída os fluxos são considerados completamente desenvolvidos.

As propriedades físicas assumidas para o líquido e o ar nestas simulações estão apresentadas na Tabela 6.2.

Tabela 6.2 Propriedades Físicas do Líquido e do Ar.

	Viscosidade (kg/ms)	Densidade (kg/m³)
Líquido	$1,0319 \times 10^{-3}$	998
Vapor	$1,0108 \times 10^{-5}$	1,125

Para realização das simulações para o Modelo Multifásico Homogêneo, foram utilizadas as seguintes condições operacionais, descritas e apresentadas na Tabela 6.3.

Tabela 6.3 Condições Operacionais utilizadas para solução do Modelo Multifásico Homogêneo.

	Entrada Líquido		Saída Líquido		Paredes	
	Vap	Liq	Vap	Liq	Vap	Liq
Fração Volumétrica	0	1	-	$\frac{\partial f_1}{\partial \xi} = 0$	Impermeável	
Velocidade Normal (m/s)	u_s	v_y	-	$\frac{\partial v_1}{\partial \xi} = 0$	-	-
Energia Cinética Turbulenta	-	$1,5(i-v_j)^2$	-	$\frac{\partial k_1}{\partial \xi} = 0$	-	0
Dissipação na Taxa de Energia Cinética	-	$\frac{(k_{x=0})^{1,5}}{0,3Ls} = 0$	-	$\frac{\partial \epsilon_1}{\partial \xi} = 0$	-	$\frac{\partial \epsilon_v}{\partial \xi} = 0$
Temperatura (°C)	-	25	-	25	-	25

Para realização do estudo de CFD do Modelo Homogêneo Multifásico foram feitas três simulações com variação da velocidade de alimentação de líquido em cada uma das três simulações para efeito de comparação da influência desta variável no escoamento e para comparação com futuros resultados.

Na Tabela 6.4 observam-se as velocidades com a denominação dos respectivos estudos de casos realizados para o estudo do Modelo Multifásico Homogêneo.

Tabela 6.4 Velocidades dos Estudos de Caso para o Modelo Multifásico Homogêneo.

	u_s [m/s]	v_y [m/s]	Casos
Modelo Homogêneo Multifásico (Mult)	0	0,00671	A
	0	0,06	B
	0	0,1	C

6.1.1 Caso A 3-D Mult

Para realização desta simulação foram utilizadas as condições operacionais, apresentadas e descritas na Tabela 6.3, usando uma velocidade de alimentação de líquido $v_y=0,00671$ (m/s).

6.1.1.1 Resultados da Simulação Caso A 3-D Mult

Na Figura 6.2 podem-se observar os resultados obtidos da simulação, quanto a distribuição da fração volumétrica de água e ar, também como se comportam os vetores velocidade da fase líquida na superfície do prato inferior a uma altura de 1,5 cm na superfície deste para o escoamento multifásico.

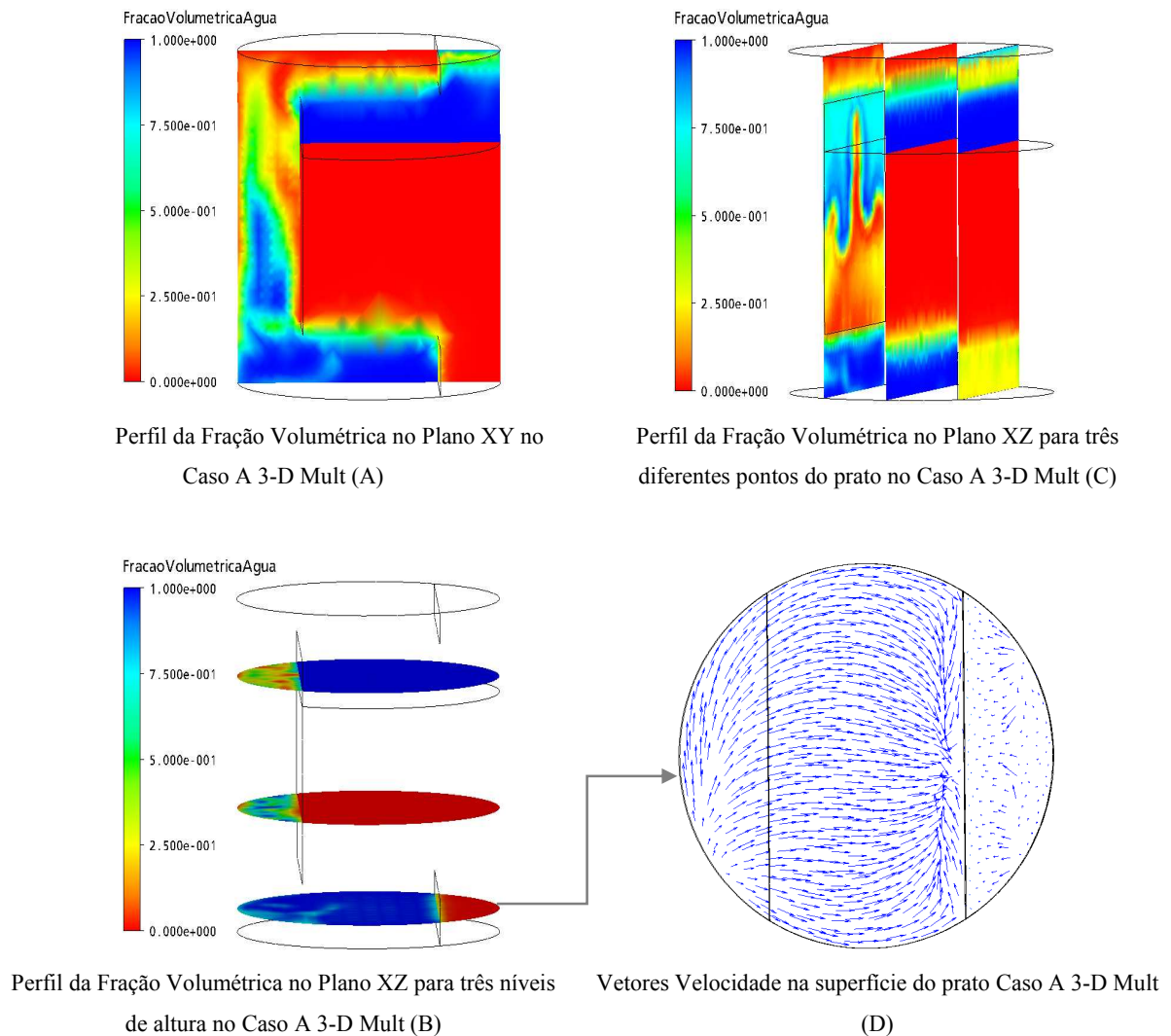


Figura 6.2 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso A 3-D Mult.

Observando a distribuição da fase líquida na figura anterior, (isso após um tempo suficientemente grande para garantir quasi-estado estacionário, vinte segundos), percebe-se que existe uma região bem definida de líquido (represada pela barreira do prato) e uma bem definida de gás, visto que após o estado estacionário ser atingido o que entra de líquido na

parte superior do domínio computacional é igual ao que sai na parte inferior deste mesmo domínio. Os vetores de velocidade são observados a uma altura de 1,5 cm da base do prato inferior (altura da barreira 3 cm). Quanto aos vetores de velocidade, observam-se que estão totalmente direcionados para região de fluxo, ocorrendo poucas zonas de recirculação próximas às paredes, ou seja, o fluxo de líquido está bem orientado e com pouca turbulência.

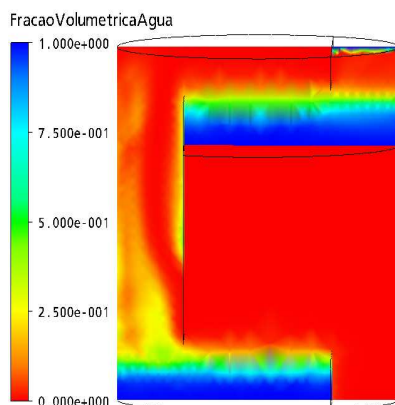
6.1.2 Caso B 3-D Mult

Neste segundo caso de escoamento multifásico, utilizou-se uma velocidade de alimentação de líquido maior ($v_y=0,06$ m/s) que no Caso A 3-D Mult para estudar sua influência no escoamento e qual seu comportamento.

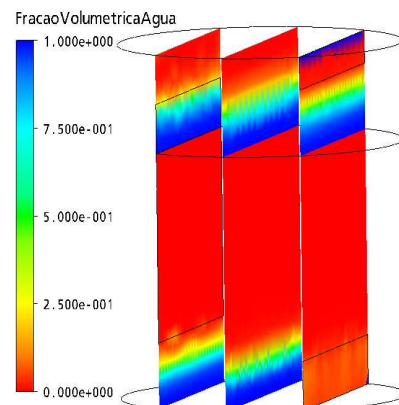
Utilizou-se o mesmo domínio computacional do Caso A 3-D Mult, e as condições operacionais utilizadas na realização desta experimentação numérica estão apresentadas na Tabela 6.3, com uma velocidade de alimentação de líquido $v_y=0,06$ (m/s).

6.1.2.1 Resultados da Simulação Caso B 3-D Mult

Na Figura 6.3 se observam os resultados obtidos a partir do experimento numérico utilizando uma velocidade de alimentação de líquido maior em relação ao Caso A 3-D Mult.



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso B 3-D Mult (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso B 3-D Mult (C)

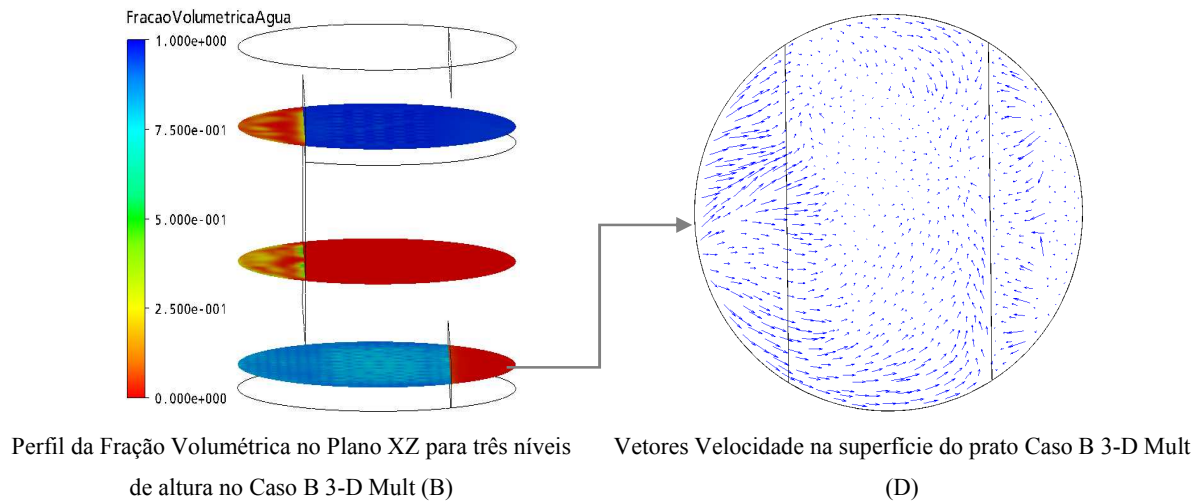


Figura 6.3 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso B 3-D Mult.

Observando-se a Figura 6.3 (B) com relação à distribuição da fração volumétrica de líquido a 1,5 cm da superfície do prato e comparando-se esta com o caso anterior percebe-se uma sutil diferença na concentração da fração volumétrica de líquido na superfície do prato superior estando menor que no Caso A, pois tem uma velocidade de alimentação um pouco maior, o que causa maior turbulência da fase líquida ao chocar-se com a superfície do prato ocorrendo uma mistura com o gás que encontram-se disperso no interior do domínio computacional. Análise que pode ser estendida para a superfície do prato inferior.

Já com relação aos vetores de velocidade, tem-se uma distribuição diferente do caso anterior, existindo regiões de recirculação próximas as paredes. Porém, a direção de fluxo não é totalmente afetada, de maneira que o fluxo de líquido mantém-se na direção da saída do prato. Estas regiões de recirculação aparecem devido aos choques mais intensos da fase líquida com a parede.

6.1.3 Caso C 3-D Mult

Realizou-se um terceiro experimento numérico utilizando uma velocidade de alimentação da fase líquida maior em relação aos dois casos anteriores. As condições operacionais utilizadas para experimentação numérica do Caso C estão apresentadas na Tabela 6.3, com uma velocidade de alimentação de líquido $v_y = 0,1$ (m/s).

6.1.3.1 Resultados da Simulação Caso C 3-D Mult

Nas Figura 6.4 podem-se observar os resultados obtidos a partir da simulação realizada, com respeito a distribuição da fração volumétrica de água e o comportamento dos vetores velocidade na superfície do prato para um escoamento multifásico, com uma velocidade de alimentação de líquido superior aos Casos (A) e (B) 3-D Mult.

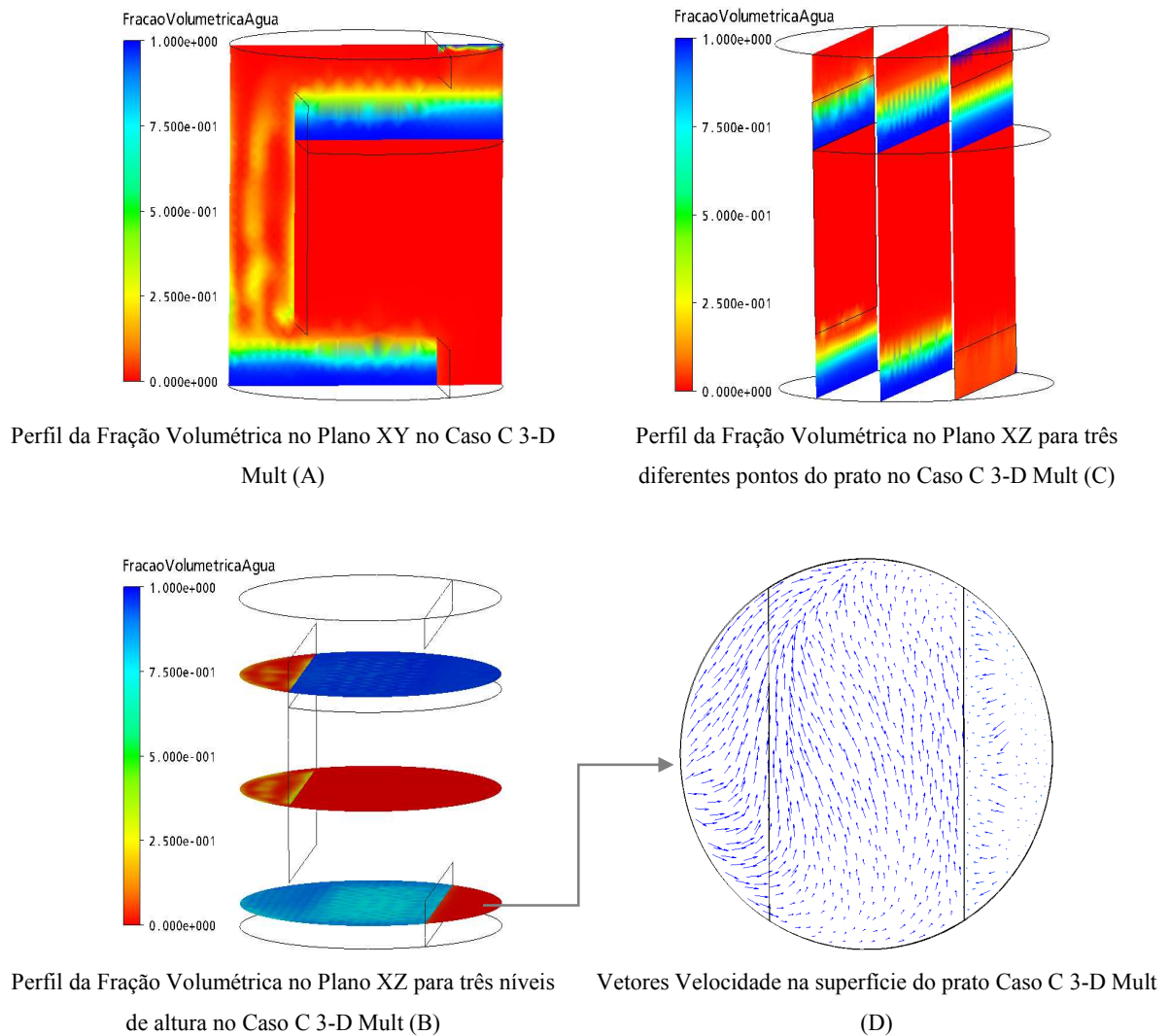


Figura 6.4 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso C 3-D Mult.

A distribuição da fração volumétrica da fase líquida a 1,5 cm da superfície do prato observado na Figura 6.4 (B) apresenta maior quantidade de ar disperso devido a maior velocidade de alimentação de líquido o que ocasiona maior turbulência e assim uma dispersão maior de ar. Observando-se os vetores de velocidade na Figura 6.4 (D), percebe-se que

também ocorreram diferenças, principalmente pelo fato de a velocidade de entrada de líquido ser bastante alta, o que ocasiona choques mais intensos da fase líquida com as paredes curvas do sistema formando regiões de recirculação.

6.2 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo I (3-D Multi)

Para realização das simulações do Modelo 3-D Multifásico Homogêneo I utilizou-se o sistema apresentado na Figura 6.5, alimentando-se água na parte superior do prato e ar pelos furos, na parte inferior do prato. Este trabalho foi feito com o objetivo de estudar o comportamento da distribuição da fração volumétrica de líquido no estágio, verificar os vetores de velocidade desta fase e a influência que estes sofrem devido ao fluxo cruzado com a vazão de vapor.

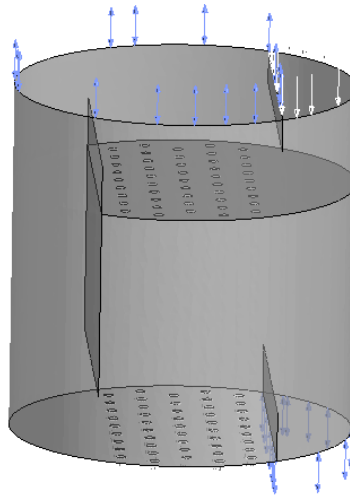


Figura 6.5 Sistema de Estudo Multifásico.

Foi escolhido o sistema água-ar pois neste momento, a ênfase do estudo estava concentrada na fluidodinâmica do prato da coluna de destilação. A condição de ar isento de água e água isento de ar nas entradas, foi utilizada para facilitar a análise das regiões de maior concentração de cada fase.

Nas condições de contorno assumidas consideraram-se que a velocidade de entrada de líquido e vapor são uniformes na direção "y", no limite de borda assumiu-se condição de deslizamento nas paredes, o sistema foi considerado isotérmico (25°C) e nas condições de saída foram assumidos que os fluxos são completamente desenvolvidos.

As propriedades físicas assumidas para o líquido e para o vapor estão apresentadas na Tabela 6.5.

Tabela 6.5 Propriedades Físicas dos Fluidos Para Escoamento 3-D Multi.

	Viscosidade (kg/ms)	Densidade (kg/m³)
Líquido	$1,0319 \times 10^{-3}$	998
Vapor	$1,0108 \times 10^{-5}$	1,125

As condições operacionais assumidas para o estudo do escoamento multifásico turbulento cruzado estão apresentadas na Tabela 6.6. Para realização das experimentações numéricas foram sempre utilizadas estas condições operacionais variando-se as velocidades de alimentação de líquido e do ar de acordo com cada estudo de caso.

Tabela 6.6 Condições Operacionais para o Modelo 3-D Multi.

	Entrada Vapor		Entrada Líquido		Saída		Parede	
	Vap	Liq	Vap	Liq	Vap	Liq	Vap	Liq
Fração Volumétrica	1	0	0	1	$\frac{df_v}{d\xi} = 0$	$\frac{df_l}{d\xi} = 0$	Impermeável	
Velocidade Normal (m/s)	u_s	0	0	v_y	$\frac{dv_v}{d\xi} = 0$	$\frac{dv_l}{d\xi} = 0$	-	-
Energia Cinética Turbulenta	-	-	-	$1,5(i-v_j)^2$	$\frac{dk_v}{d\xi} = 0$	$\frac{dk_l}{d\xi} = 0$	0	0
Dissipação na Taxa de Energia Cinética	-	-	-	$\frac{(k_{x=0})^{1,5}}{0,3Ls}$	$\frac{d\varepsilon_v}{d\xi} = 0$	$\frac{d\varepsilon_l}{d\xi} = 0$	$\frac{d\varepsilon_g}{d\xi} = 0$	$\frac{d\varepsilon_g}{d\xi} = 0$
Temperatura (°C)	25	-	-	25	25	25	-	-

Na Tabela 6.7 observam-se os valores das velocidades utilizadas com as respectivas denominações dos estudos de casos realizados nas experimentações numéricas no ANSYS CFX.

Tabela 6.7 Velocidades dos Estudos de Caso para o Modelo Multifásico Homogêneo I.

	u_s [m/s]	v_y [m/s]	Casos
Modelo Homogêneo Multifásico I (Multi)	0,3	0,00671	A
	0,5	0,00671	B
	0,7	0,00671	C
	0,3	0,06	D
	0,5	0,06	E
	0,7	0,06	F
	0,3	0,1	G
	0,4	0,1	H
	0,5	0,1	I

6.2.1 Caso A 3-D Multi

Neste experimento numérico, utilizou-se uma velocidade de entrada de ar ($u_s=0,3$ m/s) e líquido ($v_y=0,00671$ m/s). As demais condições operacionais assumidas para o escoamento multifásico estão apresentadas na Tabela 6.6.

6.2.1.1 Resultados da Simulação Caso A 3-D Multi

Na Figura 6.6 podem-se observar os resultados obtidos da simulação, quanto a distribuição da fração volumétrica de líquido e o comportamento dos vetores velocidade da fase líquida sob a influência do escoamento cruzado de ar na superfície do prato.

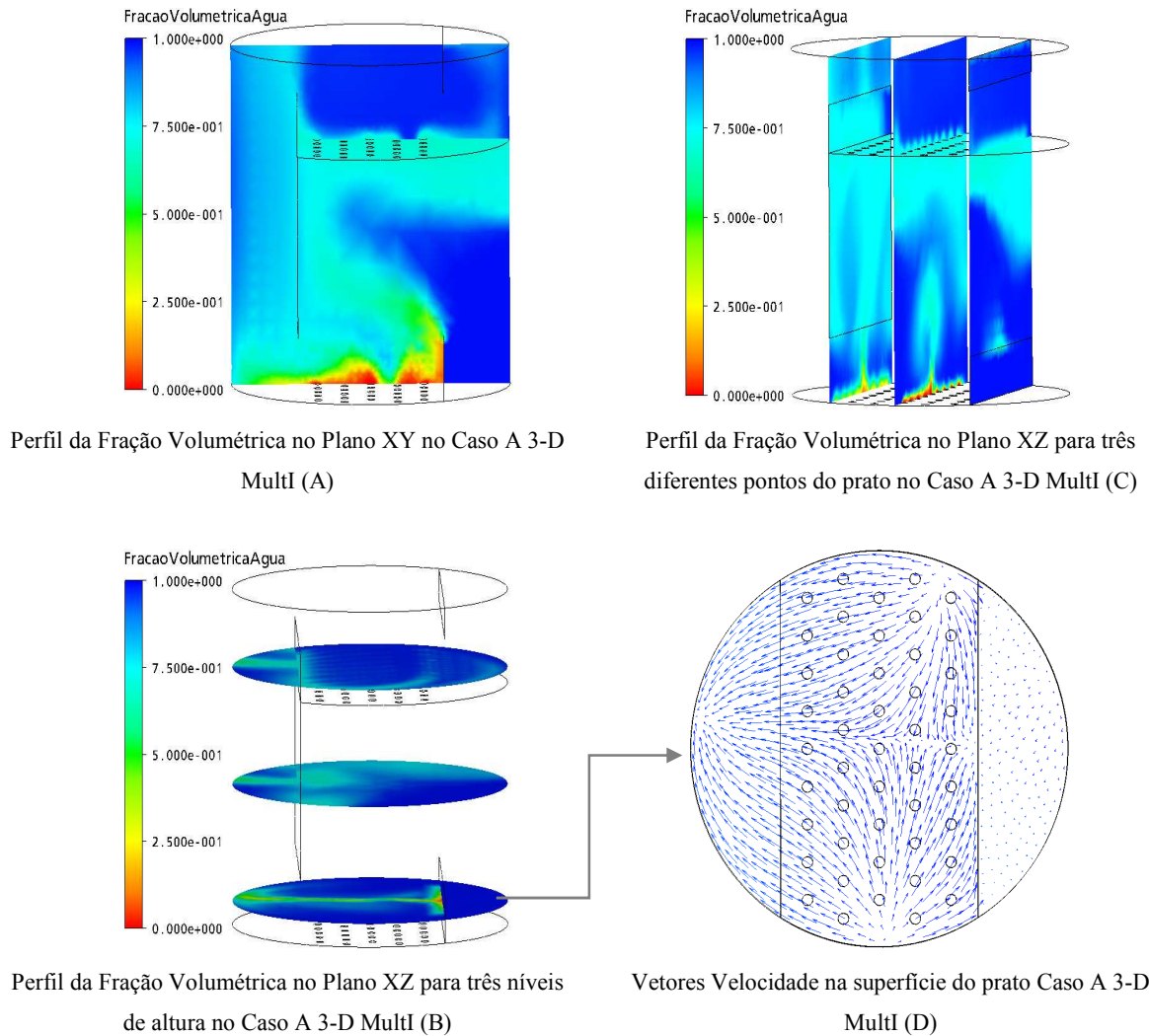


Figura 6.6 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso A 3-D Multi.

Com o intuito de estudar os fenômenos hidrodinâmicos que ocorrem no interior de uma coluna de destilação, mais precisamente na superfície de um prato perfurado é que foi realizada esta simulação. Na Figura 6.6 apresentam-se os resultados obtidos da simulação com uma vazão de líquido baixa quando comparada com a vazão de ar, e isso provoca como principal efeito uma formação excessiva de espuma com o elevação de grande parte do líquido que fica retida sobre a superfície do prato (houldup). Isso é muito indesejável, pois é justamente nesta região que deve ocorrer o melhor e maior contato entre as fases e assim maximizar o processo de transferência de massa obtendo-se a maior eficiência de separação. Observando-se os vetores de velocidade, percebe-se que estes sofrem uma grande influência pela presença do fluxo cruzado do vapor, criando uma desordem com relação a orientação do fluxo da fase líquida o que é desejado do ponto de vista de transferência de massa, pois

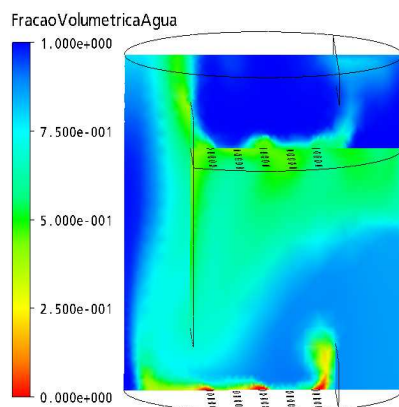
quanto maior a turbulência melhor e maior é a taxa de transferência de massa entre as fases que estão em contato.

6.2.2 Caso B 3-D Multi

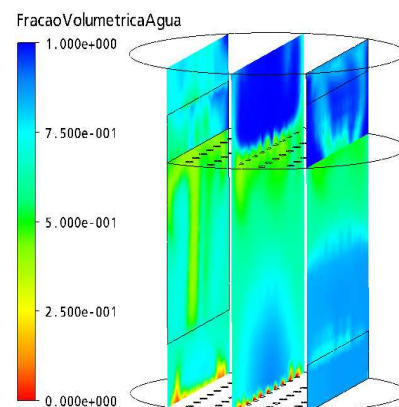
Objetivando verificar, a influência da fase vapor sobre o escoamento da fase líquida e determinar uma condição limite de velocidade de vapor para o funcionamento hidrodinâmico do prato de uma coluna de destilação. Utilizou-se uma velocidade de entrada de ar um pouco maior ($u_s=0,5\text{m/s}$) em comparação ao Caso A 3-D Multi e para o líquido manteve-se a velocidade de alimentação ($v_y=0,00671\text{ m/s}$) na realização da simulação com as demais condições operacionais apresentadas na Tabela 6.6.

6.2.2.1 Resultados da Simulação Caso B 3-D Multi

Na Figura 6.7 observam-se os resultados obtidos da simulação, quanto a distribuição da fração volumétrica de líquido e o comportamento dos vetores velocidade na superfície do prato para um escoamento multifásico, aumentando a velocidade de alimentação de vapor.



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso B 3-D Multi (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso B 3-D Multi (C)

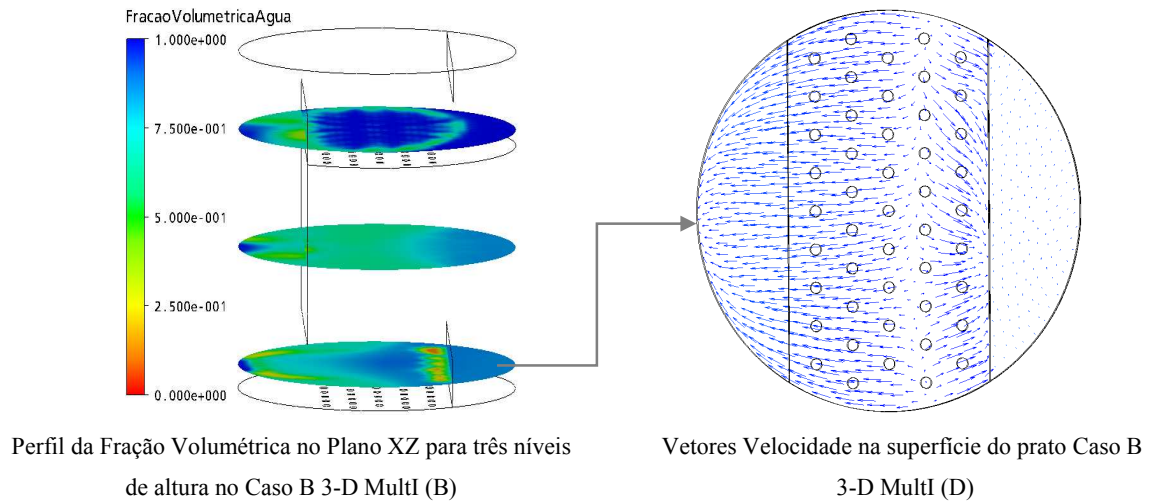


Figura 6.7 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso B 3-D Multi.

A velocidade de alimentação de vapor é maior que no primeiro caso e o efeito que esta causou sobre a hidrodinâmica do prato foi o esperado pois uma grande quantidade de água foi elevada pela alta velocidade do vapor com uma grande formação de espuma, quase secando a região de borbulhamento e os vetores de velocidade da fase líquida ficaram quase totalmente direcionados com o fluxo de vapor ou seja, na direção positiva de “y”.

6.2.3 Caso C 3-D Multi

Neste estudo de caso, utilizou-se uma velocidade de entrada de ar maior, se comparada com os dois casos anteriores ($u_s=0,7$ m/s) mantendo-se a velocidade de líquido constante ($v_y=0,00671$ m/s) para realização da simulação. A Tabela 6.6, contém as condições operacionais que foram assumidas e resolvidas nesta simulação.

6.2.3.1 Resultados da Simulação Caso C 3-D Multi

Os resultados obtidos da simulação podem ser observados na Figura 6.8, quanto a distribuição da fração volumétrica de líquido e também como se comportam os vetores velocidade na superfície do prato para um escoamento multifásico.

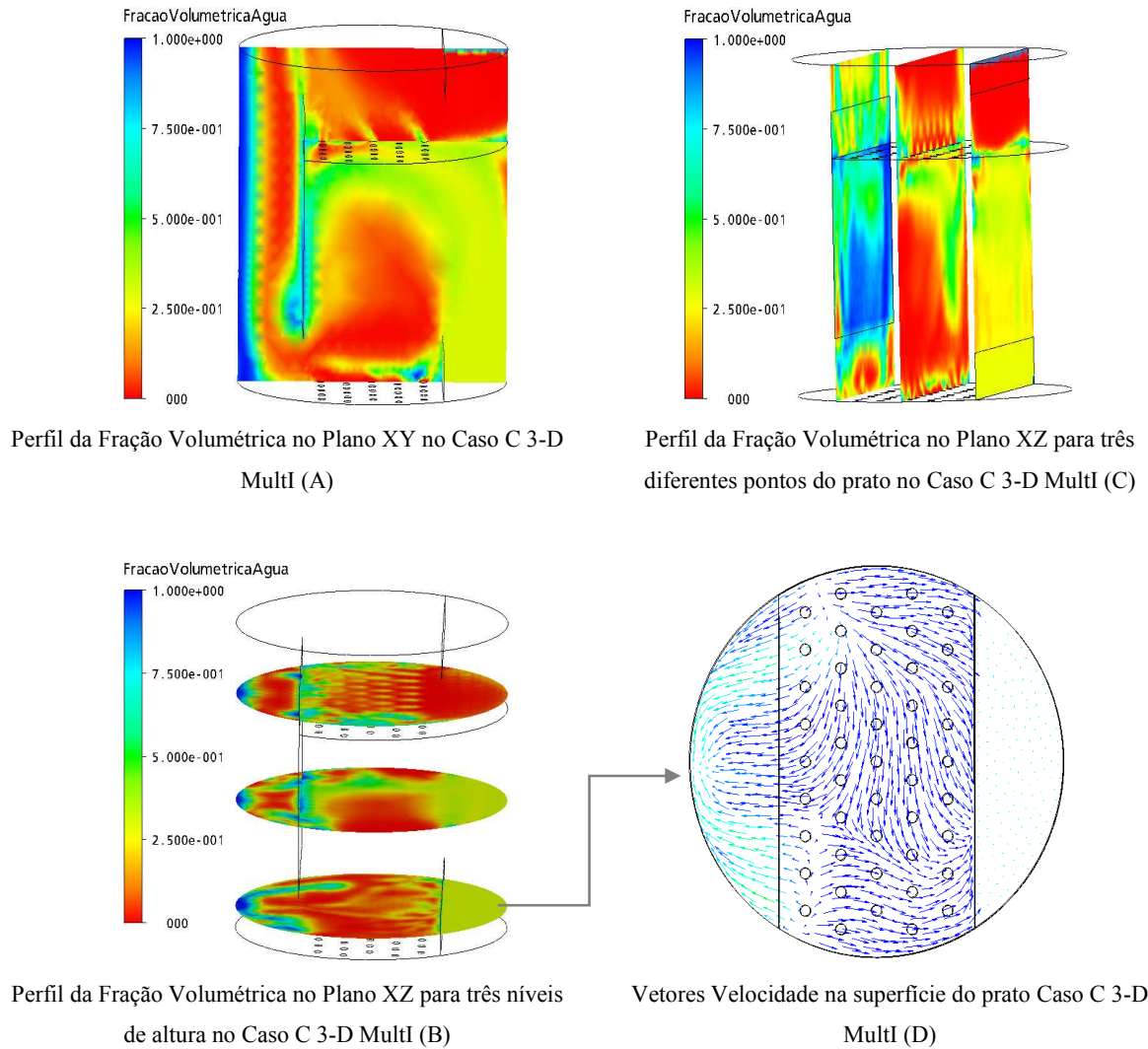


Figura 6.8 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso C 3-D Multi.

Neste caso foi utilizada uma velocidade de ar extremamente alta para este tipo de aplicação, apenas para verificar e comprovar seu efeito sobre a fase líquida no prato e também sobre os vetores velocidade desta. Ficou evidente e claro que esta alta velocidade eleva a maior parte da massa de líquido que está retida na superfície do prato comprometendo todo o funcionamento do processo. Também com relação aos vetores velocidade estes ficam mais direcionados para cima (direção do fluxo de ar) do que para direção do fluxo de líquido para saída do prato, de maneira que esta é uma condição completamente imprópria para o processo, porém, algumas vezes pode ocorrer devido à falhas ou perturbações no processo e assim o processo ficar completamente comprometido.

6.2.3.2 Altura de Líquido Claro sobre o prato para uma velocidade de líquido de 0,0067 (m/s)

Os valores da altura de líquido claro foram obtidos em um intervalo de tempo necessário para garantir a condição de quasi-estado-estacionário, determinados pela fração volumétrica média de líquido vezes a altura do domínio computacional. Estes valores estão demonstrados na Figura 6.9, em comparação com os valores obtidos pela correlação experimental de Bennett *et. al.* (1983), Equação 4.8.

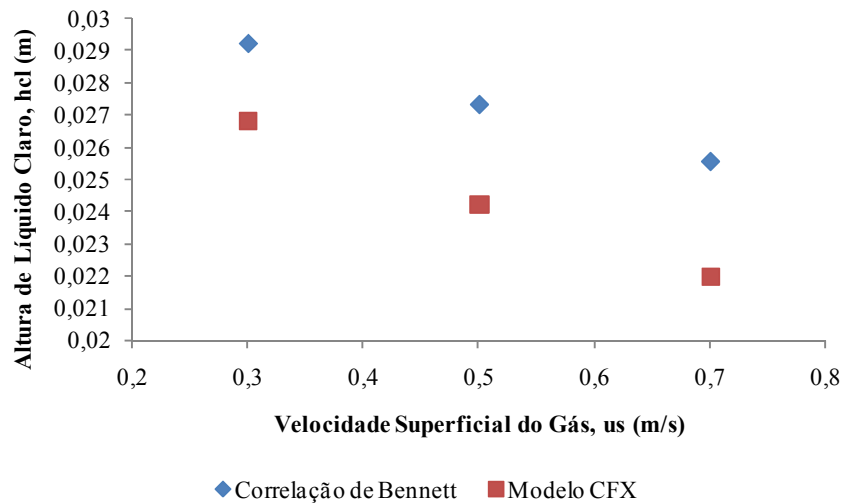


Figura 6.9 Comparação entre o Modelo 3-DHom com a correlação de Bennett *et. al.* (1983) para altura de líquido claro para uma velocidade de alimentação de água de 0,0067 (m/s).

Pode-se observar na Figura 6.9 que existe uma pequena diferença entre os valores simulados e os obtidos pela correlação experimental de Bennett *et. al.* (1983). O modelo 3-D Homogêneo Multifásico I mostrou uma tendência bem similar a correlação experimental de Bennett, de maneira que os resultados obtidos pelo modelo homogêneo predizem de forma aceitável a altura de líquido claro em um prato perfurado de destilação, contendo um erro médio de 11,25%, validando o modelo.

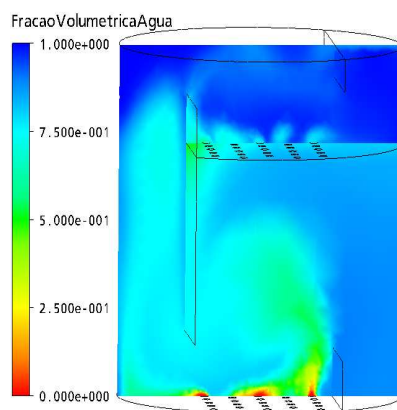
6.2.4 Caso D 3-D Multi

Para experimentação numérica do Caso D até o Caso F utilizou-se uma velocidade de líquido maior em comparação com os três casos anteriores e manteve-se a mesma variação na velocidade de entrada de vapor.

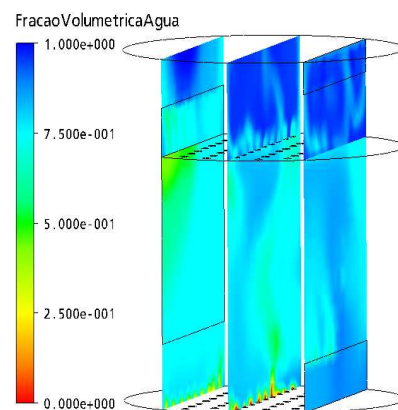
No presente caso, utilizou-se uma velocidade de entrada de ar ($u_s=0,3$ m/s) e líquido ($v_y=0,06$ m/s). A Tabela 6.6 apresenta as condições operacionais utilizadas na realização da simulação.

6.2.4.1 Resultados da Simulação Caso D 3-D Multi

Na Figura 6.10 observam-se os resultados obtidos da experimentação numérica, quanto a distribuição da fração volumétrica de líquido e também como se comportam os vetores velocidade da fase líquida na superfície do prato para um escoamento multifásico, alterando as velocidades de alimentação de líquido e vapor com relação aos três estudos de casos apresentados anteriormente.



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso D 3-D Multi (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso D 3-D Multi (C)

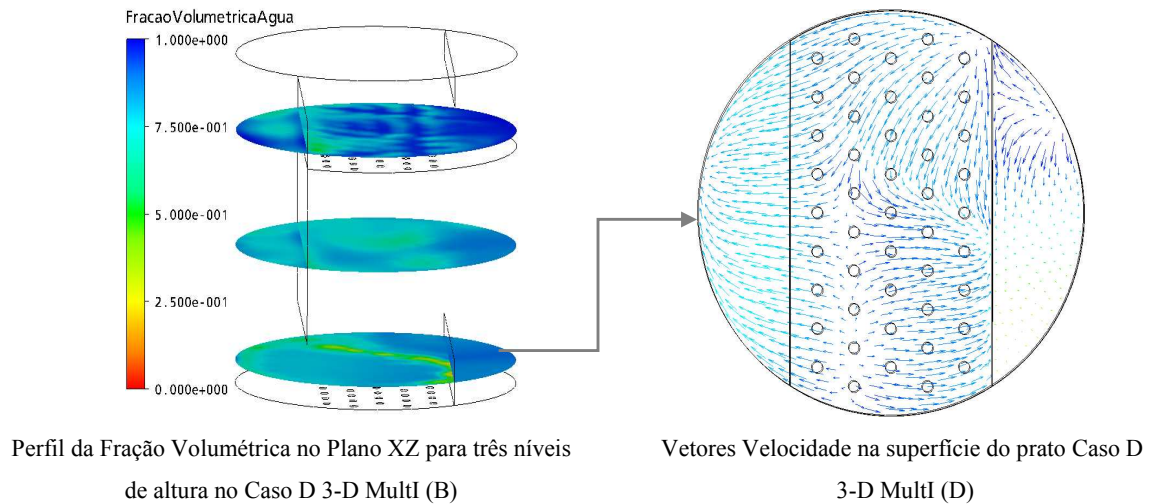


Figura 6.10 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso D 3-D Multi.

Ao observa-se o perfil de distribuição da fração volumétrica de água na Figura 6.10 (A), percebe-se que ocorre uma grande formação de espuma na área de borbulhamento chegando ao ponto de o prato inferior ficar com muito pouco líquido em virtude da alta vazão de fase gasosa. Os vetores de velocidade da fase líquida ficaram muito desordenados sobre a superfície do prato devido o fluxo cruzado da fase vapor, gerando grande turbulência, porém o holdup está comprometido.

6.2.5 Caso E 3-D Multi

Para este caso manteve-se a velocidade de entrada de líquido ($v_y=0,06$ m/s) e aumentou-se a velocidade de entrada de vapor ($u_s=0,5$ m/s). As demais condições de contorno foram mantidas. Na Tabela 6.6 podem ser visualizadas as condições operacionais utilizadas para realização da simulação.

6.2.5.1 Resultados da Simulação Caso E 3-D Multi

Os resultados obtidos da simulação podem ser visualizados na Figura 6.11, a qual apresenta a distribuição da fração volumétrica de líquido em três planos diferenciados e

também o comportamento dos vetores velocidade na superfície do prato para um escoamento multifásico.

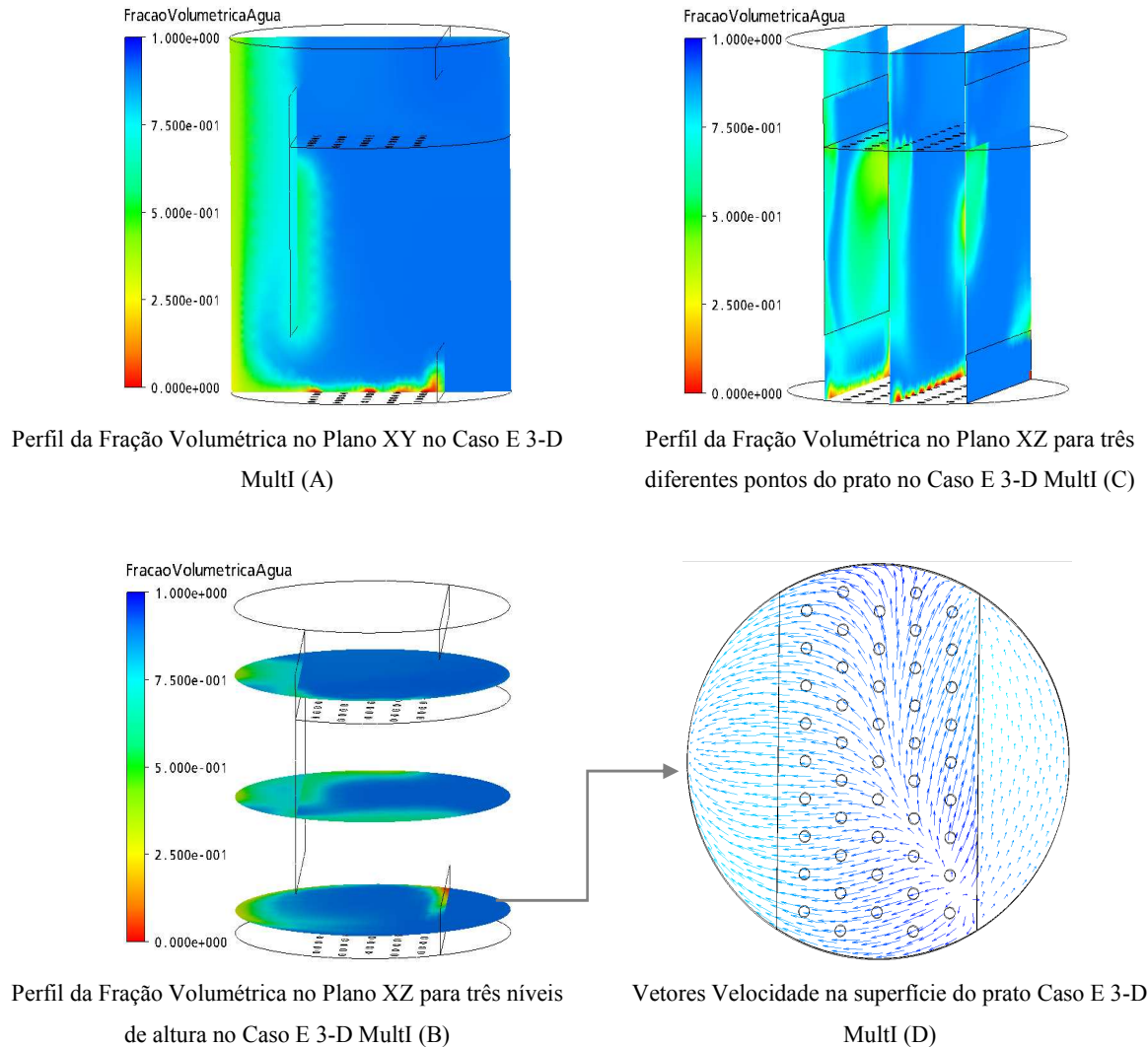


Figura 6.11 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso E 3-D Multi.

Percebe-se claramente ao se observar a Figura 6.11 que ocorre uma mistura intensa das duas fases. Isso ocorre pois tem-se uma alta vazão de vapor se comparada com a vazão de líquido, e esta é capaz de elevar uma certa quantidade de líquido formando uma grande quantidade de espuma sobre a superfície do prato. Este é um fenômeno muito indesejável na destilação por isso que altas velocidades de gás não são utilizadas.

Observando-se os vetores de velocidade, percebe-se que existe uma grande variação nas regiões próximas as paredes e nas regiões centrais do prato. Isso ocorre devido alta a vazão de ar que ascende pelos furos. As regiões de circulação próximas à parede, com sentido

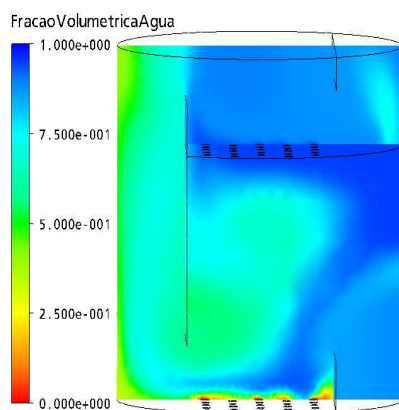
oposto ao do fluxo natural do líquido, provavelmente aparecem devido ao componente radial de velocidade sofrer um maior impacto do campo de pressão em comparação ao escoamento do componente axial de velocidade. Os efeitos do borbulhamento aumentam a energia cinética turbulenta, sendo muito importante no estudo do escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de uma coluna de destilação.

6.2.6 Caso F 3-D Multi

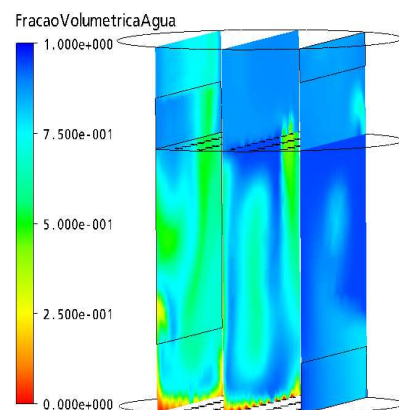
Na Tabela 6.6, apresentam-se as condições operacionais utilizadas para realização da simulação, a qual utilizou uma velocidade alimentação de líquido ($v_y=0,06$ m/s) e para o vapor ($u_s=0,7$ m/s).

6.2.6.1 Resultados da Simulação Caso F 3-D Multi

A Figura 6.12 apresenta os resultados obtidos da simulação, referentes a distribuição da fração volumétrica de líquido e também como se comportam os vetores velocidade na superfície do prato para um escoamento multifásico, alterando a velocidade de alimentação de vapor.



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso F 3-D Multi (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso F 3-D Multi (C)

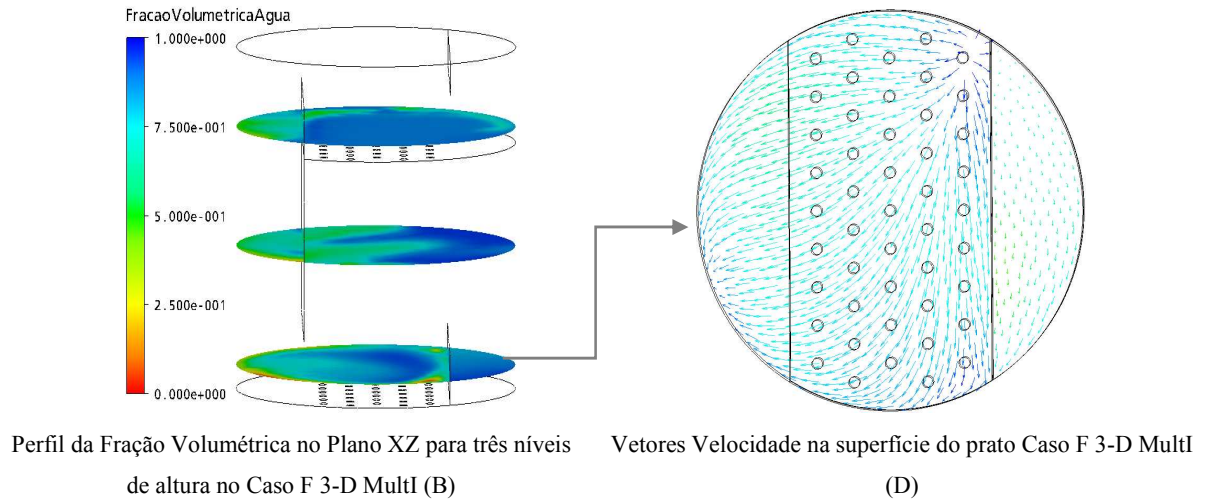


Figura 6.12 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso F 3-D Multi.

Na Figura 6.12 percebe-se um comportamento muito semelhante ao Caso E 3-D Multi, onde a velocidade do vapor é extremamente alta se comparada com a velocidade de entrada de líquido o que causa um grande arraste da fase líquida, ou seja, uma grande formação de espuma sobre a superfície do prato chegando a gerar um outro fenômeno que pode ocorrer, chamado emulsão, o que é indesejável em um processo de destilação. Pelo fato da velocidade de alimentação de vapor ser alta percebe-se uma certa homogeneidade na mistura líquido/vapor sobre a superfície do prato, mas em contrapartida têm-se uma grande elevação de líquido. Os campos de velocidade estão muito caóticos e não seguem a direção de fluxo de líquido para saída do prato, devido a grande velocidade de entrada do ar.

6.2.6.2 *Altura de Líquido Claro sobre o prato para uma velocidade de líquido de (0,06 m/s)*

Os valores da altura de líquido claro foram obtidos em um intervalo de tempo suficientemente grande para garantir a condição de quasi estado estacionário, determinados pela fração volumétrica média de líquido vezes a altura do domínio computacional. Estes valores estão demonstrados na Figura 6.13, em comparação com os valores obtidos pela correlação experimental de Bennett et. al. (1983), Equação 4.8.

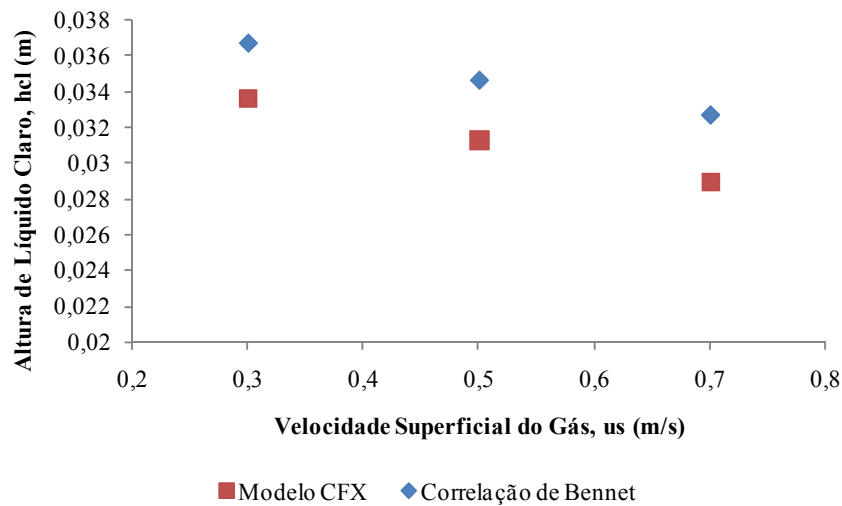


Figura 6.13 Comparação entre o Modelo 3-DHom com a correlação de Bennett *et. al.* (1983) para altura de líquido claro para uma velocidade de alimentação de água de 0,06 (m/s).

Pode-se observar na Figura 6.13 que existe uma pequena diferença entre os valores simulados e os obtidos pela correlação de Bennett *et. al.* (1983). O modelo 3-D Homogêneo multifásico com uma velocidade de líquido de ($v_y = 0,06$ m/s) mostrou uma tendência similar à correlação experimental de Bennett, de maneira que os resultados preditos pelo modelo homogêneo predizem de forma aceitável a altura de líquido claro em um prato perfurado de destilação, contendo uma diferença média de 9,89%. Novamente a altura de líquido de claro calculada pelo modelo tridimensional, homogêneo apresentou todos os valores abaixo daqueles preditos pela correlação experimental, e isso pode ser explicado pelos fatores já mencionados anteriormente como também pelo modelo homogêneo fazer algumas simplificações utilizando um valor médio da mistura para o cálculo dos parâmetros, pelo fato da alta turbulência do processo não ser descrita fielmente pelo modelo k- ϵ , e também pelas forças de interface entre as bolhas vapor e o líquido fluindo horizontalmente.

6.2.7 Caso G 3-D Multi

Nas próximas três simulações, utilizou-se uma velocidade de líquido constante e maior que nos casos anteriores, variando-se novamente a velocidade de entrada da fase vapor.

Nesta simulação utilizou-se uma velocidade de entrada da fase vapor de ($u_s=0,3$ m/s) e a velocidade de alimentação de líquido de ($v_y=0,1$ m/s). Na Tabela 6.6, apresentam-se as condições operacionais utilizadas na simulação.

6.2.7.1 Resultados da Simulação Caso G 3-D Multi

Os resultados da simulação podem ser visualizados na Figura 6.14, a qual demonstra a distribuição da fração volumétrica de líquido e o comportamento dos vetores velocidade da fase líquida na superfície do prato para o escoamento multifásico.

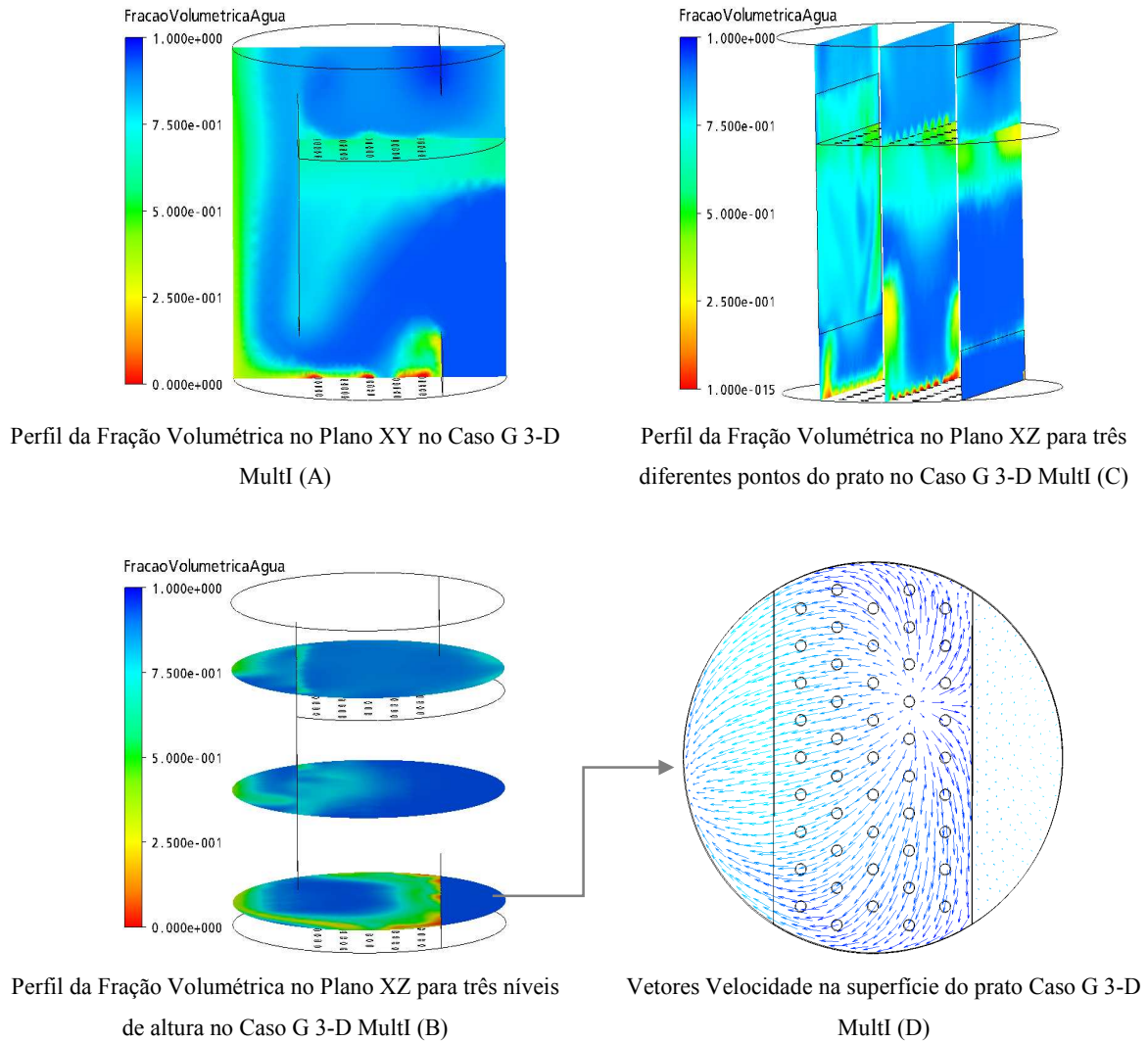


Figura 6.14 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso G 3-D Multi.

Neste caso, pode-se observar que a massa de líquido retida pela barreira não é totalmente elevada como no caso anterior, ocorrendo uma mistura das duas fases. Mas percebe-se que a velocidade do gás está um pouco alta e tem uma certa quantidade de líquido que está sendo elevada, o que pode ser visualizado na Figura 6.14 (A). Isso do ponto de vista operacional de um prato de destilação, não é desejável, porém este estudo torna-se necessário

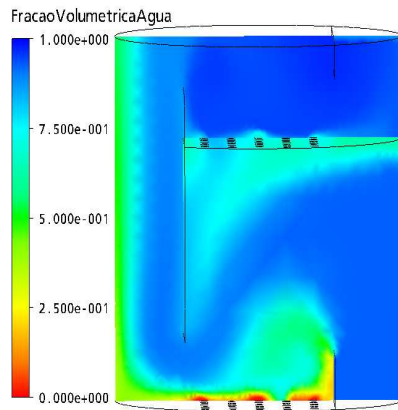
para otimizar as melhores vazões de vapor e líquido que são utilizadas em um processo de destilação. Observa-se na Figura 6.14 (B) a 1,5 cm da superfície do prato inferior não existe uma mistura homogênea das fases, o que é indesejável para o processo de destilação, pois não ocorrerá uma transferência de massa maximizada na região de borbulhamento devido a falta de homogeneidade da mistura. Já os vetores velocidade apresentam-se bastante desordenados, mas não existem grandes áreas de recirculação o que é desejável.

6.2.8 Estudo de Caso H 3-D Multi

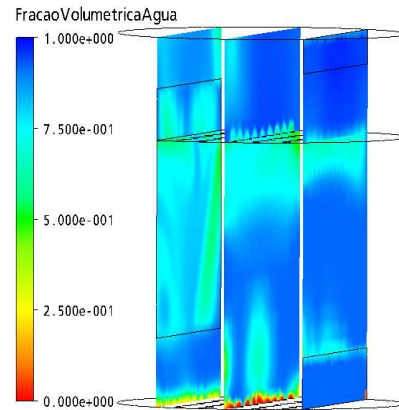
Fez-se uso de uma velocidade de alimentação de vapor intermediária entre as duas que vinham sendo utilizadas, para estudar algum efeito que pudesse ocorrer nesta faixa de vazão de vapor. Na Tabela 6.6 estão apresentadas as condições operacionais utilizadas para realização da simulação, onde a velocidade de alimentação do líquido e do vapor utilizadas foram respectivamente $v_y=0,1$ (m/s) e $u_s=0,4$ (m/s).

6.2.8.1 Resultados da Simulação Caso H 3-D Multi

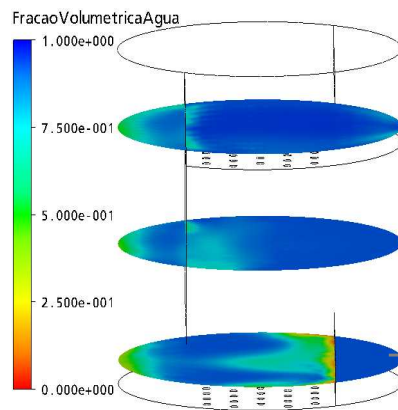
Os resultados obtidos da simulação estão demonstrados na Figura 6.15. Observam-se nestas figuras a distribuição da fração volumétrica de líquido e como se comportam os vetores de velocidade da fase líquida na superfície do prato para um escoamento multifásico.



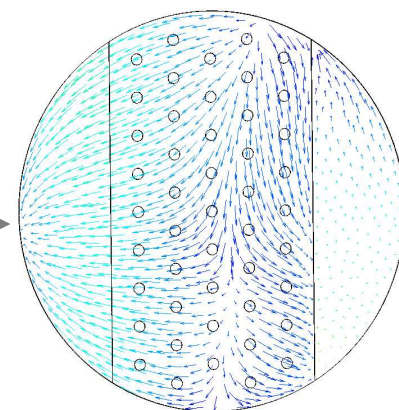
Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso H 3-D Multi (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso H 3-D Multi (C)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três níveis de altura no Caso H 3-D Multi (B)



Vetores Velocidade na superfície do prato Caso H 3-D Multi (D)

Figura 6.15 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso H 3-D Multi.

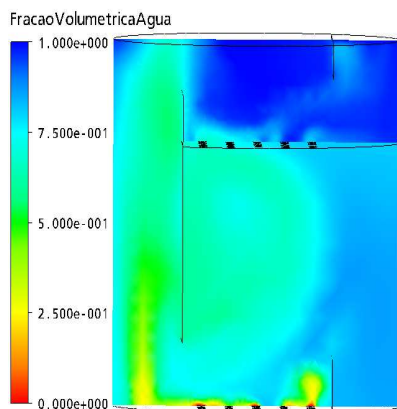
Observando-se a Figura 6.15, nota-se que a velocidade do ar está um pouco alta, porém um fato chama a atenção, que na região próxima a barreira que represa o líquido sobre a superfície do prato, ocorre uma maior elevação da massa de água e isso pode ser constatado analisando as figuras que mostram o perfil da fração volumétrica de líquido. Isso pode ocorrer principalmente pela distribuição dos furos na superfície do prato. Percebe-se também que não há uma mistura homogênea sobre a superfície do prato gerando perda de eficiência no processo. Os vetores de velocidade da fase líquida estão bastante desordenados, ou seja, estão sofrendo uma grande influência da vazão de vapor.

6.2.9 Estudo de Caso I 3-D Multi

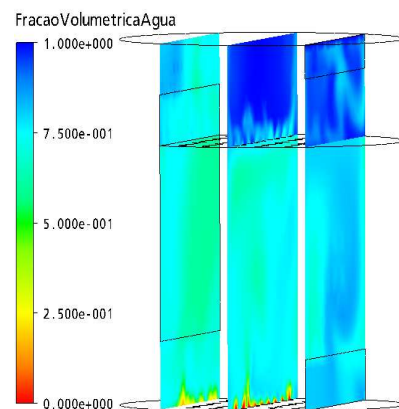
Para finalizar os estudos da hidrodinâmica do prato perfurado, utilizou-se uma velocidade de entrada de vapor ($u_s=0,5$ m/s) e para o líquido manteve-se a velocidade de ($v_y=0,1$ m/s). As condições de operação utilizadas na realização da simulação são visualizadas na Tabela 6.6.

6.2.9.1 Resultados da Simulação Caso I 3-D Multi

A Figura 6.16 demonstra os resultados obtidos na simulação para a distribuição da fração volumétrica de líquido e o comportamento dos vetores de velocidade da fase líquida na superfície do prato para um escoamento multifásico.



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso I 3-D Multi (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso I 3-D Multi (C)

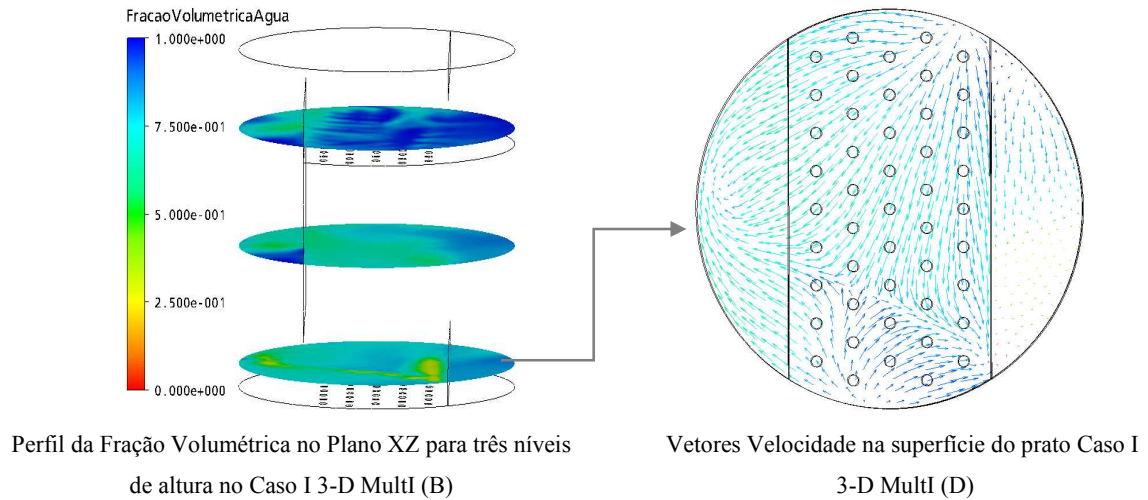


Figura 6.16 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso I 3-D Multi.

Na Figura 6.16 visualiza-se que ocorre uma elevação da massa líquida em virtude do maior valor da vazão de vapor. Com relação aos vetores velocidade da fase líquida, percebe-se um grande desordenamento com regiões de recirculação próximas as paredes o que é indesejável para o processo de destilação, pois os fenômenos de recirculação diminuem a eficiência do processo de transferência de massa, ao passo que um líquido saturado retorna a região ativa de troca.

6.2.9.2 Altura de Líquido Claro sobre o prato para uma velocidade de líquido de (0,1 m/s)

Os valores da altura de líquido claro foram obtidos em um intervalo de tempo suficientemente grande para garantir a condição de quasi-estado-estacionário, determinados pela fração volumétrica média de líquido vezes a altura do domínio computacional. Estes valores estão demonstrados na Figura 6.17, em comparação com os valores obtidos pela correlação experimental de Bennett *et. al.* (1983), Equação 4.8.

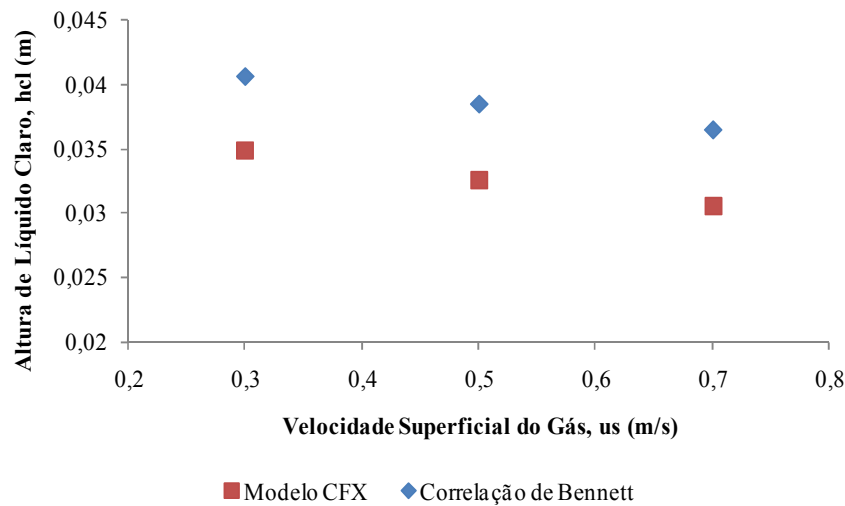


Figura 6.17 Comparação entre o Modelo 3-DHom com a correlação de Bennett *et. al.* (1983) para altura de líquido claro para uma velocidade de alimentação de água de 0,1 (m/s)..

Pode-se observar na Figura 6.17 que existe uma diferença entre os valores simulados e os obtidos pela correlação experimental de Bennett *et. al.* (1983). Os dados obtidos nas simulações utilizando o modelo 3-D Homogêneo Multifásico com velocidade de líquido ($v_y=0,1$ m/s) apresentaram uma tendência similar a correlação experimental de Bennett, de maneira que os resultados obtidos pelo modelo homogêneo predizem de forma aceitável a altura de líquido claro em um prato perfurado de destilação, contendo um erro médio de 15,26%.

6.3 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo II (3-D MultII)

Nesta etapa do projeto foi estudada qual a influência que as resistências colocadas sobre a superfície do prato têm na sua hidrodinâmica, visto que a unidade piloto de destilação que está sendo objeto de estudo, contém em cada prato uma resistência elétrica disposta sobre a superfície deste como pode ser visualizada na Figura 6.18. Para isso foi construída uma nova malha representando este domínio físico a ser estudado mantendo-se as dimensões reais e foram feitas algumas simulações.



Figura 6.18 Disposição da Resistência sobre a superfície do prato na Unidade Piloto de Destilação.

Nestas simulações foram utilizadas condições de contorno parecidas com os casos anteriores afim de se avaliar a influência que as resistências têm sobre a hidrodinâmica do prato.

As condições operacionais assumidas para o estudo do escoamento multifásico turbulento cruzado com a presença da resistência elétrica sobre a superfície do prato estão apresentadas na Tabela 6.6. Para realização das experimentações numéricas foram sempre utilizadas estas condições operacionais variando-se as velocidades de alimentação de líquido e de ar de acordo com cada caso.

Na Tabela 6.8 observam-se os valores das velocidades utilizadas com os respectivos estudos de casos realizados nas experimentações numéricas no ANSYS CFX.

Tabela 6.8 Velocidades dos Estudos de Caso para o Modelo Multifásico Homogêneo II

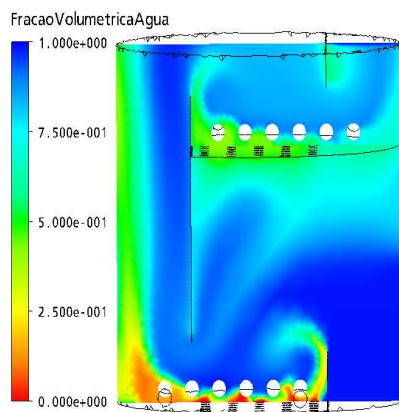
	u_s [m/s]	v_y [m/s]	Casos
Modelo Homogêneo Multifásico II (MultII)	0,5	0,7	A
	0,5	1,0	B
	0,3	0,5	C

6.3.1 Caso A 3-D MultII

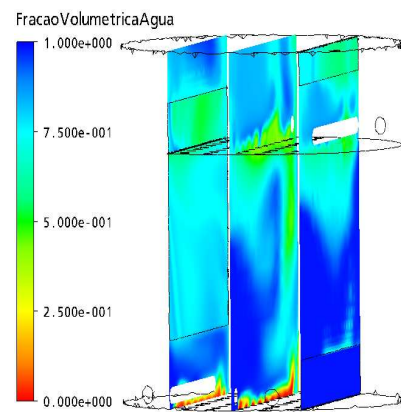
As condições operacionais assumidas para realização da experimentação numérica estão apresentadas na Tabela 6.6, com uma velocidade de alimentação de líquido ($v_y=0,7$ m/s) e de vapor ($u_s=0,5$ m/s).

6.3.1.1 Resultados da Simulação Caso A 3-D MultII

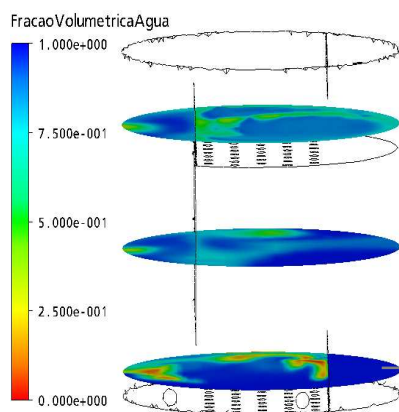
Na Figura 6.19 podem-se observar os resultados obtidos da simulação, quanto a distribuição da fração volumétrica de líquido e também como se comportam os vetores velocidade na superfície do prato para um escoamento multifásico. Outra alteração importante que foi feita para realização da simulação neste Caso 3-D MultII foi o acréscimo das resistências sobre a superfície do prato com o objetivo de estudar qual sua real influência na hidrodinâmica, pois a mesma ocupa a área entre os furos, como observado na Figura 6.18. Esta resistência possui um diâmetro de 1 cm.



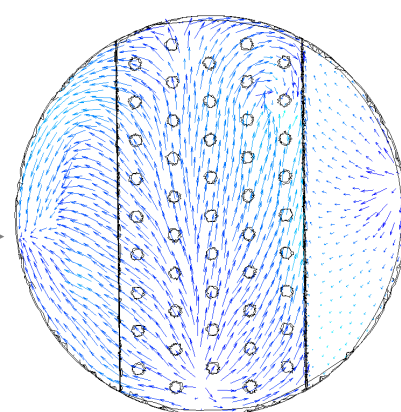
Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso A 3-D MultII (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso A 3-D MultII (C)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três níveis de altura no Caso A 3-D MultII (B)



Vetores Velocidade na superfície do prato Caso A 3-D MultII (D)

Figura 6.19 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso A 3-D MultII.

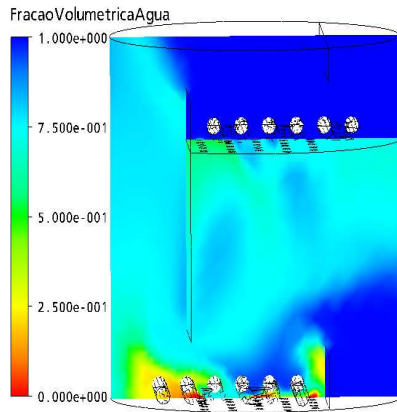
Observando-se a Figura 6.19 percebem-se algumas diferenças na distribuição da fração volumétrica de líquido, o que muito provavelmente está associada a presença das resistências na superfície do prato, visto que todas as condições de contorno foram as mesmas, a única alteração foi a adição das resistências. Isso mostra que as resistências que ocupam uma área útil da região de borbulhamento tem uma influência sobre a hidrodinâmica do prato. Esta influência mostrou-se positiva neste primeiro caso, pois ocorreu uma mistura maior entre as fases e uma disposição mais homogênea destas sobre a superfície do prato. Os vetores de velocidade da fase líquida também foram influenciados, visto que a resistência além de ocupar um volume útil sobre a superfície do prato é uma barreira ao fluxo normal, assim ao chocar-se com esta resistência tem-se uma maior turbulência, o que pode ser muito desejável no processo de transferência de massa.

6.3.2 Caso B 3-D MultII

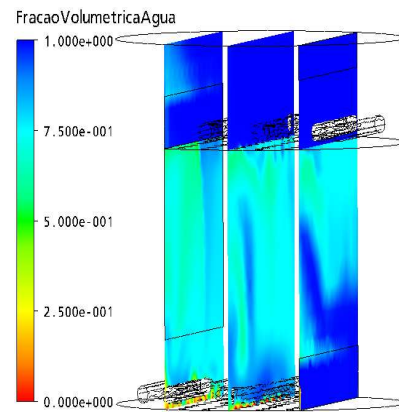
As condições operacionais utilizadas na simulação estão descritas na Tabela 6.6, com uma velocidade de alimentação de líquido ($v_y=1,0$ m/s) e de vapor ($u_s=0,5$ m/s).

6.3.2.1 Resultados da Simulação Caso B 3-D MultII

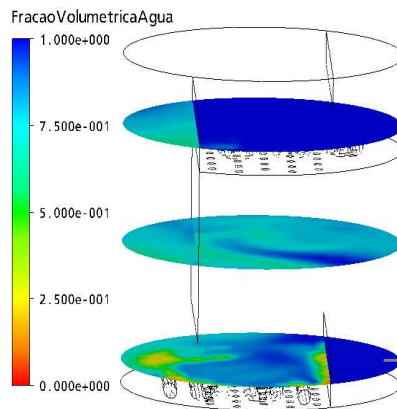
Fazendo-se uso das condições operacionais apresentadas na Tabela 6.6, obtiveram-se os resultados demonstrados na Figura 6.20. Estes resultados apresentam o comportamento da distribuição da fração volumétrica de líquido e o comportamento dos vetores de velocidade da fase na superfície do prato.



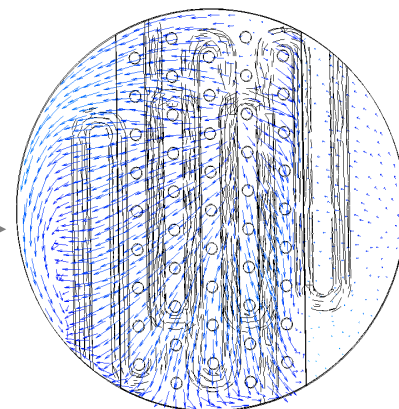
Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso B 3-D MultII (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso B 3-D MultII (C)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três níveis de altura no Caso B 3-D MultII (B)



Vetores Velocidade na superfície do prato Caso B 3-D MultII (D)

Figura 6.20 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso B 3-D MultII.

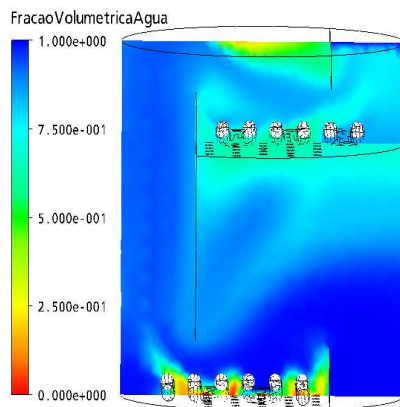
Neste caso tem-se uma vazão de alimentação de líquido e vapor muito grande o que pode ser facilmente verificado nas figuras anteriores, de modo que a presença das resistências tiveram pouca influência no escoamento, pois altas vazões de gás e líquido geram uma grande turbulência no escoamento, e os efeitos provocados pela presença da resistência ficam desprezíveis. Também vale ressaltar que estas altas vazões muito dificilmente são utilizadas em um processo no estado estacionário, porém para estudo são válidas haja visto que existem alguns momentos que talvez possam ser necessárias. Os vetores de velocidade estão completamente desordenados com formação de regiões de recirculação na superfície do prato que é extremamente indesejável do ponto de visto operacional e energético.

6.3.3 Caso C 3-D MultII

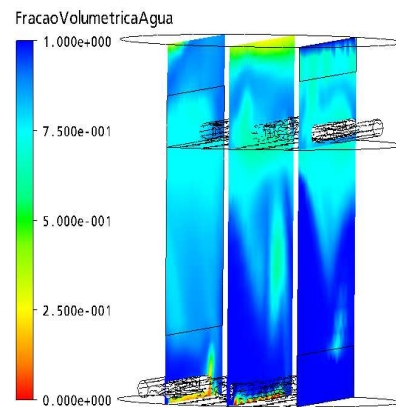
Para realização deste experimento numérico utilizou-se uma velocidade de entrada de ar ($u_s=0,3$ m/s) e líquido ($v_y=0,5$ m/s) e as demais condições operacionais estão apresentadas na Tabela 6.6.

6.3.3.1 Resultados da Simulação Caso C 3-D MultII

Os resultados obtidos da experimentação numérica realizada utilizando-se as condições operacionais anteriores aparecem na Figura 6.21. Estes resultados demonstram a distribuição da fração volumétrica de líquido e o comportamento dos vetores de velocidade da fase líquida na superfície do prato para um escoamento multifásico, alterando as velocidades de alimentação de líquido e vapor com relação ao caso anterior.



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso C 3-D MultII (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso C 3-D MultII (C)

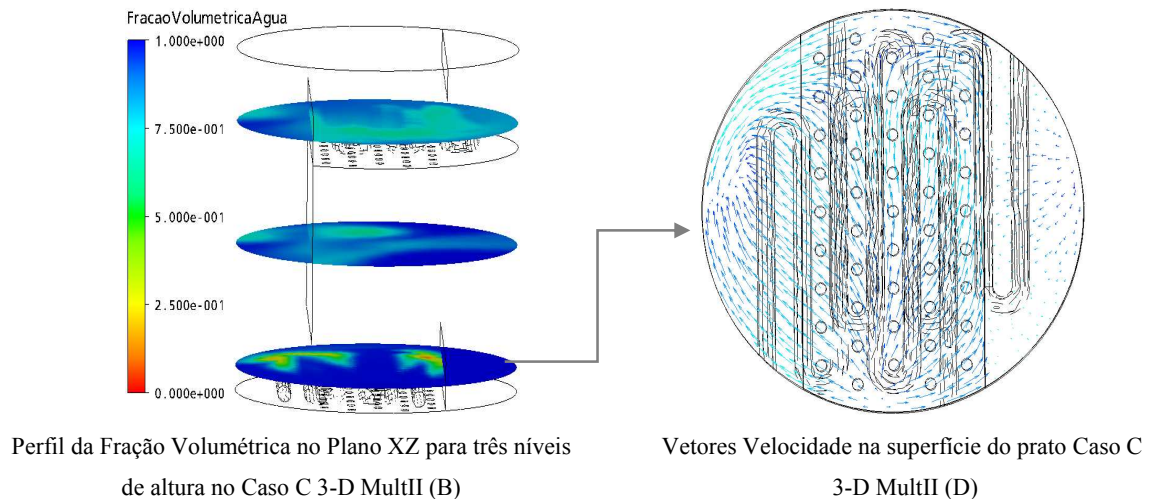


Figura 6.21 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso C 3-D MultII.

Ao observar-se a Figura 6.21 percebe-se que a presença das resistências sobre a superfície do prato tem uma influência um pouco maior sobre o escoamento do líquido. Isto pode ser verificado nos vetores velocidade os quais estão mais direcionados na sentido do fluxo de gás do que no fluxo de líquido, pois com a presença das resistências a quantidade de água que fica retida na represa é menor e isto facilita a passagem do vapor e a mistura. Também pode ser visto que a presença das resistências podem ajudar na homogeneização da mistura e também favorecer o contato entre as fazer nas suas paredes, pois de alguma maneira estas estarão servindo com uma espécie de recheio sobre a superfície do prato, e então o contato entre as fases é favorecido.

6.4 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo III (3-D MultIII)

Este estudo foi realizado para verificar o comportamento dos fenômenos de transferência de calor, massa e quantidade de movimento em um prato de destilação sem a presença da resistência, utilizando-se a Lei de Rault Modificada como relação de equilíbrio líquido-vapor. Também vale a pena ressaltar que nestas simulações foi utilizada uma mistura líquida de etanol e água para fase líquida e uma mistura vapor de etanol e água para fase vapor.

Para realização destas simulações utilizando mistura de etanol e água, tanto na alimentação da mistura líquido como da mistura vapor, utilizou-se as condições de operação demonstradas na Tabela 6.9.

Tabela 6.9 Condições de Operação para o Modelo Multifásico Homogêneo III e IV.

	Entrada de Vapor		Entrada de Líquido	
	Vapor	Líquido	Vapor	Líquido
Fração Volumétrica Mistura	1	0	0	1
Fração Mássica Água	0,67	0	0	0,3
Fração Mássica Etanol	0,33	0	0	0,7
Temperatura Entrada Mistura Líquida [K]	-	-	355	355
Temperatura Entrada Mistura Vapor [K]	358	358	-	-

Na Tabela 6.10 observam-se os valores das velocidades utilizadas com os respectivos estudos de casos realizados nas experimentações numéricas no ANSYS CFX.

Tabela 6.10 Velocidades dos Estudos de Caso para o Modelo Multifásico Homogêneo III.

Modelo Homogêneo Multifásico III	u_s [m/s]	v_y [m/s]	Casos
(MultIII)	0,3	0,7	A

6.4.1 Estudo de Caso A 3-D MultIII

A simulação realizada neste caso usou uma velocidade de entrada da mistura vapor de ($u_s=0,3$ m/s) e para mistura líquida de ($v_y=0,7$ m/s) e os demais dados operacionais estão apresentados na Tabela 6.6.

6.4.1.1 Resultados da Simulação Caso A 3-D MultIII

Na Figura 6.22 são observados os resultados obtidos da simulação, quanto a distribuição da fração volumétrica da mistura líquida e vapor de etanol e água, como se

comportam os vetores velocidade na superfície do prato para o escoamento multifásico. Já distribuição da fração molar do etanol e da água tanto na mistura líquida como na mistura vapor, alterando as velocidades de alimentação da mistura líquida e da mistura vapor, podem ser visualizadas nas Figuras 6.23 e 6.24.

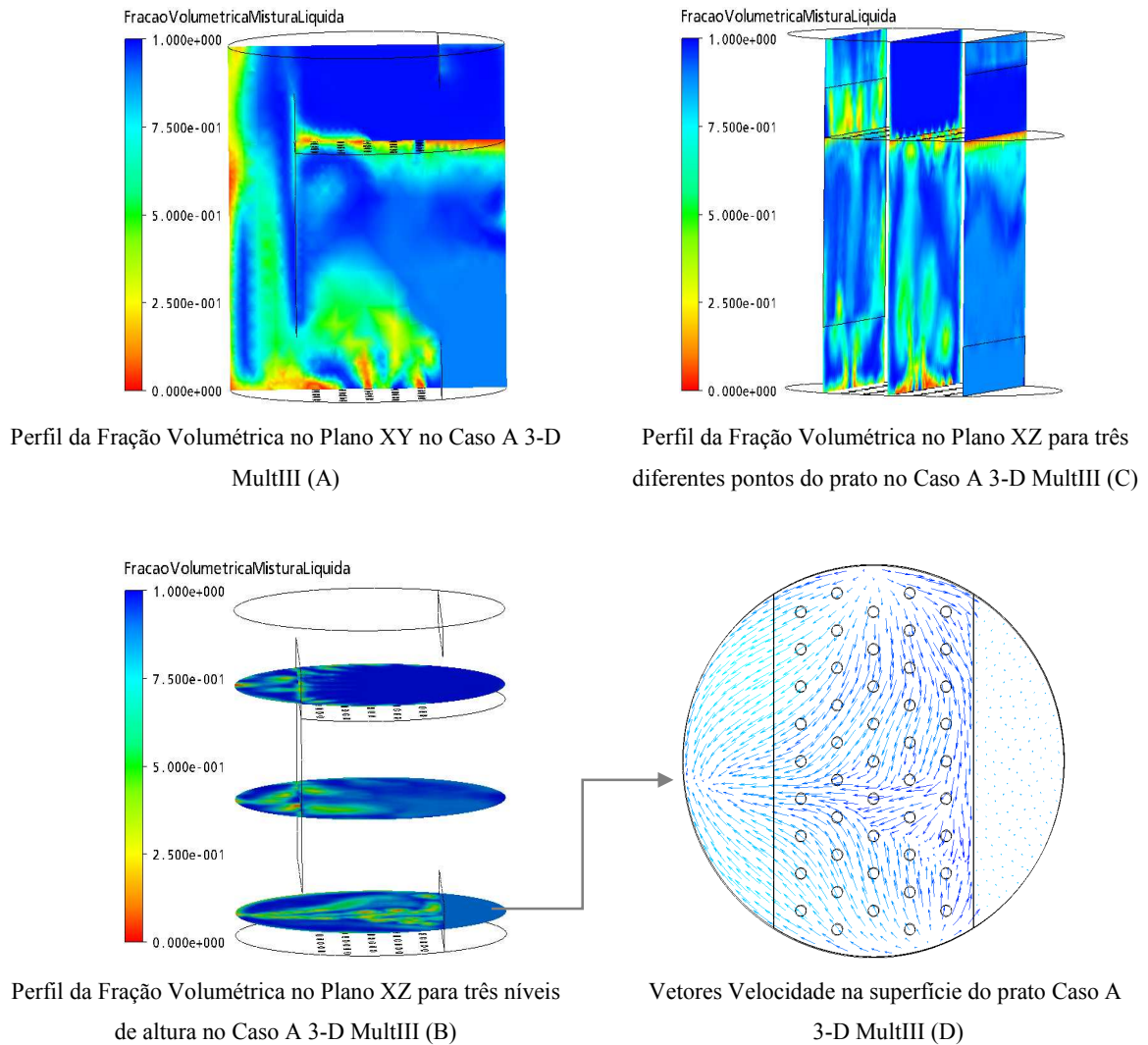
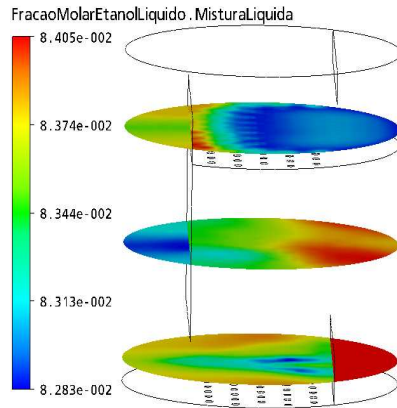


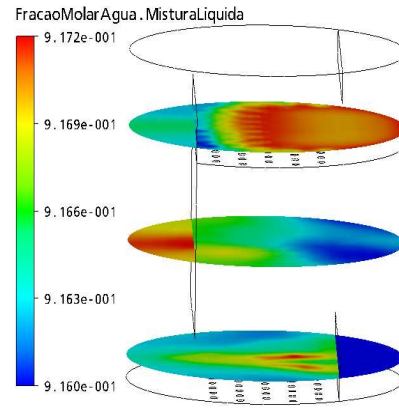
Figura 6.22 Distribuição da Fração Volumétrica de Líquido e Vetores Velocidade para o Caso A 3-D MultIII.

Observando-se a Figura 6.22 que apresenta a distribuição da fração volumétrica da mistura líquida e vapor tem-se um comportamento muito parecido com o escoamento água e ar. A hidrodinâmica do caso atual comparada com o anterior não tem grandes diferenças, ou seja, a distribuição das frações volumétricas da mistura líquida estão muito parecidas e os vetores de velocidade fase líquida também.



Perfil da Fração Molar Etanol mistura líquida no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso B 3-D MultIII

(A)

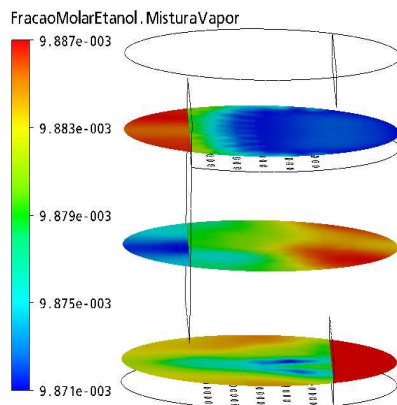


Perfil da Fração Molar Água mistura líquida no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso B 3-D MultIII

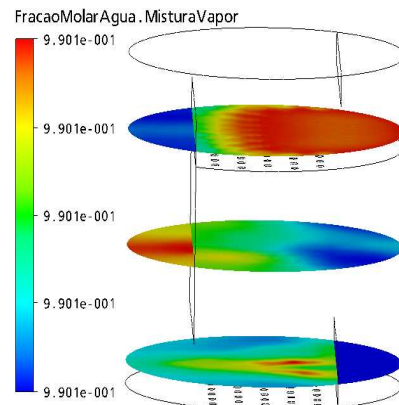
(B)

Figura 6.23 Distribuição da Fração Molar de Etanol na Mistura Líquida (A) e Vapor (B) para o Caso A 3-D MultIII.

Ao observar-se a Figura 6.23, percebe-se que o etanol não está distribuído de maneira homogênea na área ativa de borbulhamento, o que vai contra a hipótese assumida de mistura perfeita e homogênea utilizada nos projetos atuais de colunas de destilação. Esta disposição do etanol na superfície do prato demonstra que existem regiões que apresentam melhor mistura e maior turbulência, ou seja, uma transferência de massa mais efetiva, podendo-se afirmar que esta disposição dos furos não está totalmente ideal.



Perfil da Fração Molar Etanol fase vapor no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso B 3-D MultIII (A)



Perfil da Fração Molar Água fase vapor no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso B 3-D MultIII (B)

Figura 6.24 Distribuição da Fração Molar de Água na Mistura Líquida (A) e Vapor (B) para o Caso A 3-D MultIII.

Quando observa-se a Figura 6.24 que apresenta a distribuição de água, tanto na mistura líquida quanto na mistura vapor, percebem-se os mesmos efeitos provocados para a distribuição do etanol, pois a transferência dos componentes individuais ocorrem de uma fase para outra.

6.5 Modelo 3-D Multifásico Homogêneo IV (3-DMultIV)

Este estudo de caso foi feito para verificar o comportamento dos fenômenos de transferência de calor, massa e quantidade de movimento em um prato de destilação com a presença da resistência, utilizando-se a Lei de Rault Modificada como relação de equilíbrio líquido-vapor. Também vale a pena ressaltar que nestas simulações foi utilizada uma mistura líquida de etanol e água para fase líquida e uma mistura vapor de etanol e água para fase vapor, nas composições e temperaturas apresentadas na Tabela 6.9.

Na Tabela 6.11 observam-se os valores das velocidades utilizadas com os respectivos estudos de casos realizados nas experimentações numéricas no ANSYS CFX.

Tabela 6.11 Velocidades dos Estudos de Caso para o Modelo Multifásico Homogêneo II.

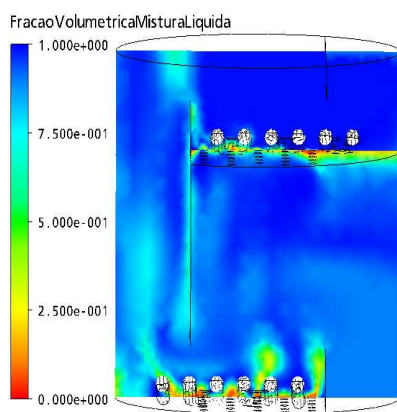
Modelo Homogêneo Multifásico IV	u_s [m/s]	v_y [m/s]	Casos
(MultIV)	0,3	0,5	A
	0,15	0,3	B

6.5.1 Estudo de Caso A 3-D MultIV

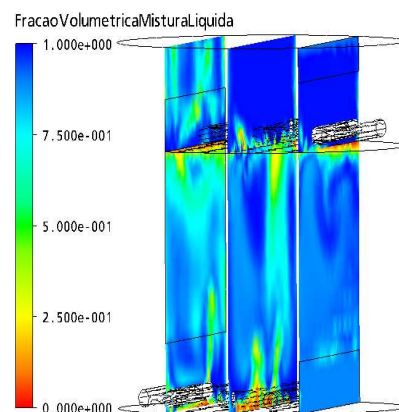
Neste estudo, utilizou-se uma velocidade de entrada da mistura vapor de ($u_s=0,3$ m/s) e para o mistura líquida de ($v_y=0,5$ m/s) para realização da simulação e os demais dados operacionais estão demonstrados na Tabela 6.6.

6.5.1.1 Resultados da Simulação Caso A 3-D MultIV

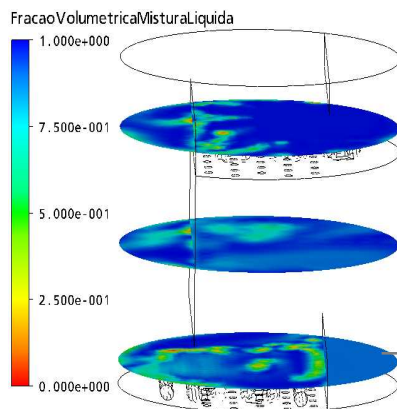
Na Figura 6.25 podem-se observar os resultados obtidos da simulação, quanto a distribuição da fração volumétrica das misturas líquida e vapor de etanol e água e também como se comportam os vetores de velocidade para mistura líquida na superfície do prato para um escoamento multifásico. A distribuição da fração molar do etanol e da água tanto na mistura líquida como na mistura vapor, podem ser visualizadas na Figura 6.26.



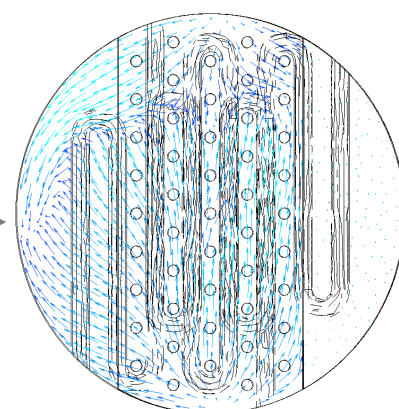
Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso A 3-D MultIV (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso A 3-D MultIV (C)



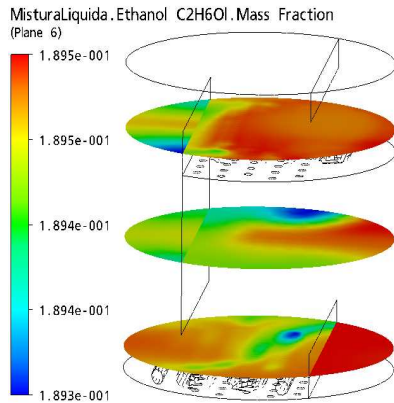
Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três níveis de altura no Caso A 3-D MultIV (B)



Vetores Velocidade na superfície do prato Caso A 3-D MultIV (D)

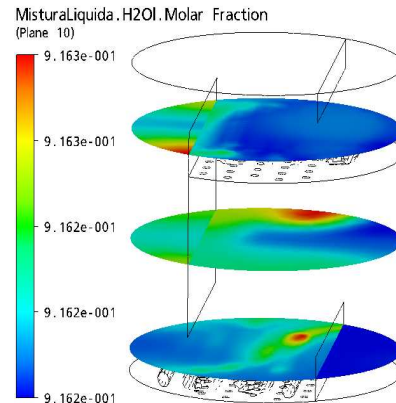
Figura 6.25 Distribuição da Fração volumétrica da mistura de etanol e água na fase líquida e vapor e os vetores velocidade para o Caso A 3-D MultIV.

Observando-se as figuras anteriores percebe-se que a presença das resistências tem uma certa influência sobre a hidrodinâmica de um prato de destilação, como já foi demonstrando para os casos onde utilizaram-se apenas água e ar.



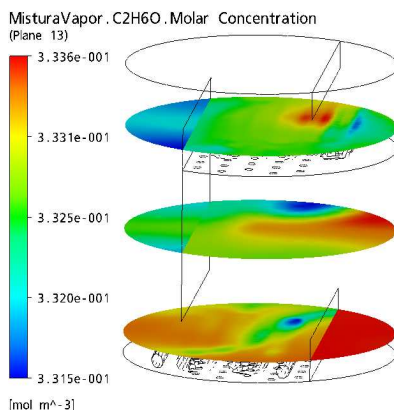
Perfil da Fração Molar Etanol mistura líquida no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso A 3-D MultIV

(A)

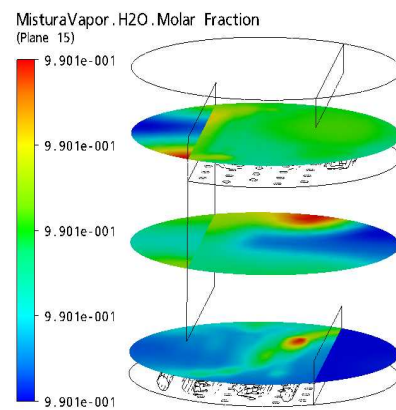


Perfil da Fração Molar Água mistura líquida no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso A 3-D MultIV

(B)



Perfil da Fração Molar Etanol fase vapor no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso A 3-D MultIV (C)



Perfil da Fração Molar Água fase vapor no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso A 3-D MultIV (D)

Figura 6.26 Distribuições das frações molares de etanol e água nas misturas líquida e vapor par ao Caso A 3-D MultIV.

Porém analisando como esta a distribuição dos componentes presentes na mistura destilada, percebe-se que a presença das resistências não afetam de maneira significativa a transferência de massa e calor entre as fases em contato, o que é muito benéfico do ponto de vista operacional, pois a sua presença está intimamente ligada as ações de controle para dinâmica da coluna e fica aqui demonstrado que sua presença não afeta de modo significativo

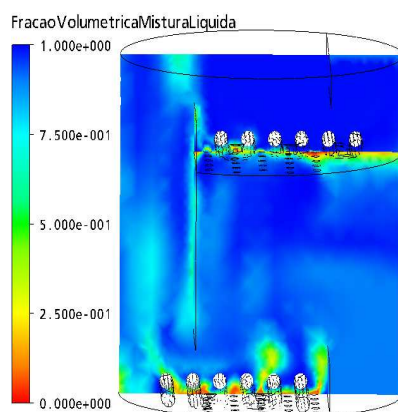
os fenômenos de transferência de calor e massa que são intrínsecos a este processo de separação.

6.5.2 Estudo de Caso B 3-D MultIV

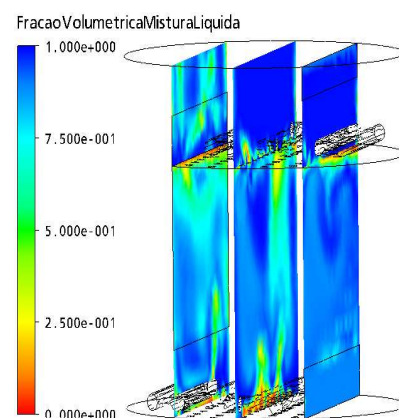
Utilizou-se uma velocidade de entrada da mistura vapor de ($u_s=0,15\text{m/s}$) e para o mistura líquida de ($v_y=0,3\text{m/s}$), com as composições e temperaturas das misturas de alimentação iguais as apresentadas na Tabela 6.9 além dos dados operacionais demonstrados na Tabela 6.6.

6.5.2.1 Resultados da Simulação Caso B 3-D MultIV

Na Figura 6.27 abaixo podem-se observar os resultados obtidos das simulações, quanto a distribuição da fração volumétrica da mistura líquida de etanol e água e também como se comportam os vetores velocidade da mistura líquida na superfície do prato para um escoamento multifásico, alterando as velocidades de alimentação da mistura líquida e da mistura vapor.



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XY no Caso B 3-D MultIV (A)



Perfil da Fração Volumétrica no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso B 3-D MultIV (C)

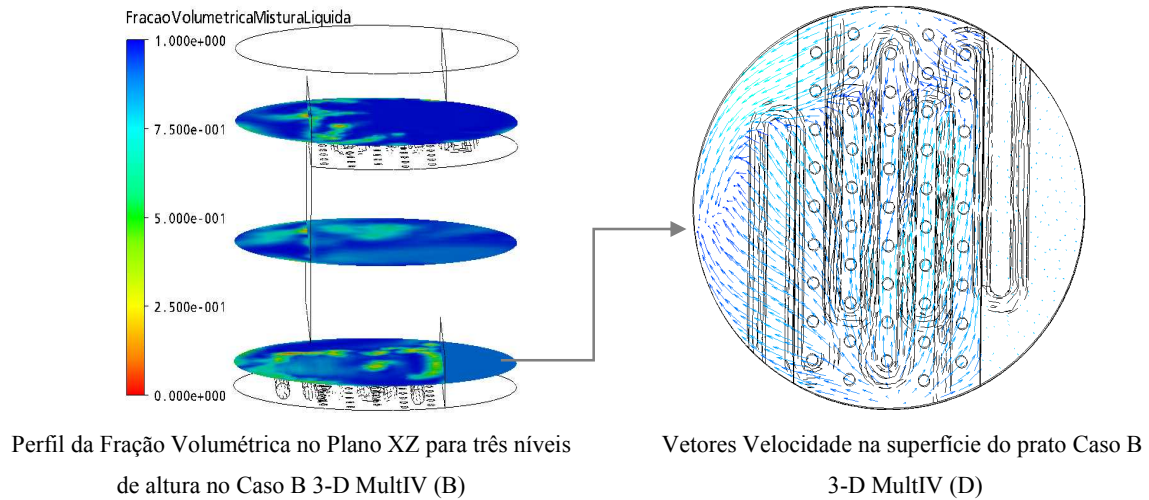
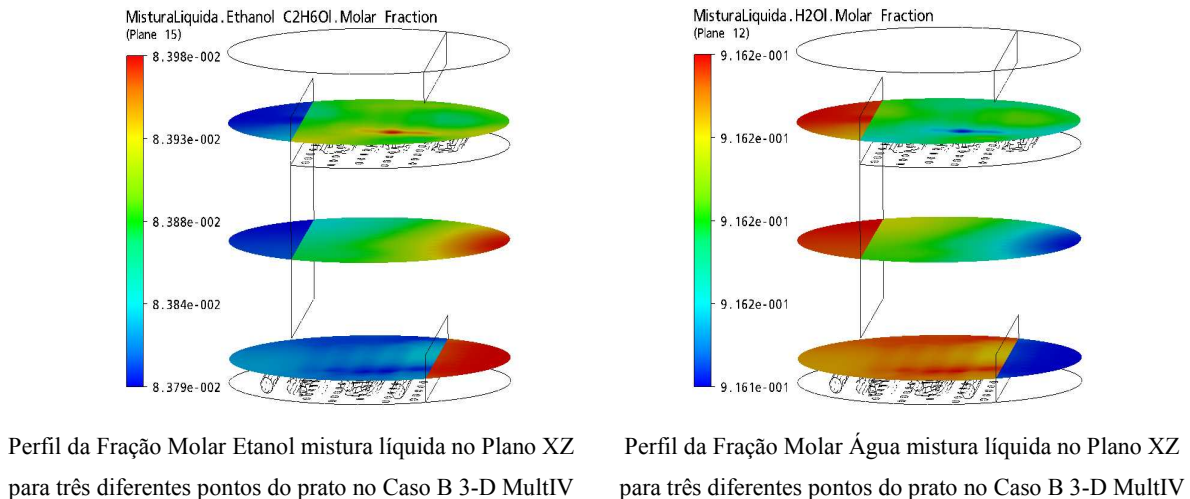
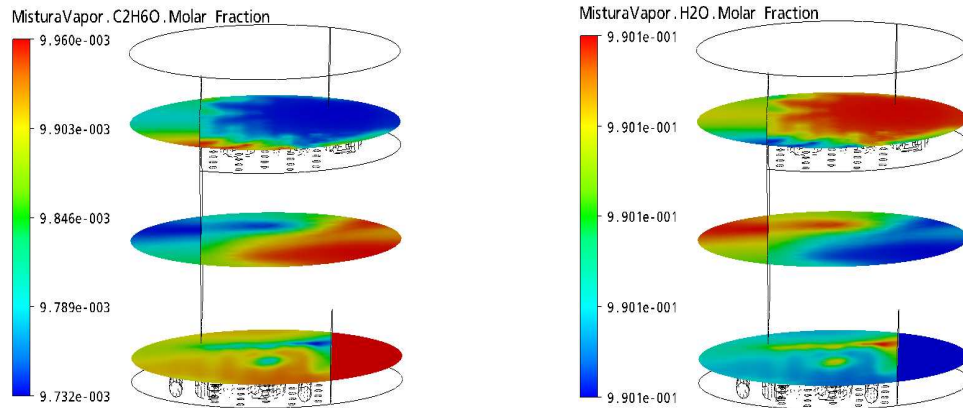


Figura 6.27 Distribuição da Fração volumétrica da mistura de etanol e água na fase líquida e vapor e os vetores velocidade para o Caso B 3-D MultIV.

Com relação a hidrodinâmica do prato de destilação, apresentada na Figura 6.27, é muito similar ao apresentado quando simulou-se apenas com água e ar, demonstradas nas figuras dos resultados obtidos das simulações do Modelo Homogêneo Multifásico I.

A Figura 6.28 apresenta os perfis de concentração molar dos componentes (etanol e água) tanto na mistura vapor quanto na mistura líquida.





Perfil da Fração Molar Etanol fase vapor no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso B 3-D MultIV

Perfil da Fração Molar Água fase vapor no Plano XZ para três diferentes pontos do prato no Caso B 3-D MultIV

Figura 6.28 Distribuições das frações molares de etanol e água nas misturas líquida e vapor par ao Caso B 3-D MultIV.

Observa-se na Figura 6.28 que a distribuição dos componentes em ambas as misturas ocorre de maneira bastante homogênea nas superfícies dos pratos, com apenas uma pequena região não muito homogênea. Isto é um resultando muito interessante, pois quanto mais homogênea a mistura sob a superfície do prato, maior é a eficiência de separação, pois não ocorrerá recirculações, caminhos preferenciais, zonas de estagnação e o processo poderá ser maximizado.

CAPITULO VII

7 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como principais conclusões alcançadas com os desenvolvimentos deste trabalho podem-se citar as seguintes:

- A metodologia que foi adotada para o desenvolvimento deste trabalho mostrou-se eficiente no que se refere aos objetivos propostos pois, a metodologia numérica foi desenvolvida e baseada em um estudo gradual e sistemático do escoamento líquido-vapor na superfície de um prato perfurado de uma unidade piloto de destilação, permitindo a análise de estratégias de solução, de modelos e métodos em CFD e também o desenvolvimento de um modelo homogêneo capaz de prever o escoamento líquido-vapor em nível microscópico na superfície de um prato perfurado;

- O modelo microscópico homogêneo conseguiu representar de maneira satisfatória as principais características fenomenológicas do escoamento líquido-vapor em um prato de destilação, e esta simulação microscópica tridimensional e transiente demonstrou-se viável do ponto de vista computacional e quanto a convergência numérica, pois este modelo homogêneo utilizado reduz o número de equações algébricas não lineares no domínio computacional em relação a um modelo heterogêneo;

- O modelo tridimensional conseguiu representar de forma realística as zonas de circulação, sendo que foi possível perceber que para baixas vazões de vapor a região de circulação encontra-se próxima a queda de líquido no prato e próxima as paredes;

- Percebeu-se que a utilização de esquemas de interpolação de primeira ordem causam efeitos de difusão numérica quando um dos componentes de velocidade é muito maior que os demais;

- Os efeitos do borbulhamento causados pela fase vapor promovem um aumento significativo da energia cinética turbulenta sendo um dos efeitos mais importantes no estudo do escoamento líquido-vapor em pratos perfurados de colunas de destilação;

- Existem diferentes padrões de escoamento no interior de uma coluna de destilação, e estes dependem principalmente das vazões de vapor e líquido, da altura da barreira de queda e da geometria do prato;

- A descrição de operação de um prato perfurado de uma coluna de destilação não é possível a partir de um único modelo matemático, sendo necessário determinar qual o padrão de escoamento que está ocorrendo para então descrever as características fluidodinâmicas. Quando trabalha-se com vazões da fase vapor muito baixas o comportamento do escoamento na superfície do prato pode ser regular e previsível, porém a medida que a taxa da fase aumenta o regime torna-se totalmente caótico e turbulento;

- Pelo fato do escoamento não ser uniforme na superfície do prato existem regiões que apresentam valores diferentes de energia cinética, sendo esta diferença decorrente dos fenômenos de circulação que estão presentes no escoamento, principalmente devido a existência da represa de queda do líquido e do vertedor de saída como obstáculos que afetam o comportamento do fluido.

- Foi concluído com os resultados obtidos que no fluxo cruzado das duas fases, o qual ocorre na superfície do prato perfurado, quando a fase vapor entra em contato com a fase líquida que está fluindo horizontalmente ela adquire uma certa energia cinética nesta direção de fluxo, pois no caminho do movimento a bolha curva-se, em alguma extensão, na direção do fluxo de líquido, exercendo uma força resistiva sobre a fase líquida;

- A técnica de CFD mostrou-se uma importante ferramenta na produção de escoamentos em regimes turbulentos nos pratos perfurados, podendo ser utilizado com cautela na otimização de projeto, na operação e no estudo de eficiência de pratos de colunas de destilação.

- Percebeu-se que a presença da resistência sobre a superfície do prato alterou a hidrodinâmica do escoamento, mas este feito foi benéfico do ponto de vista da homogeneidade da mistura, pois as simulações que foram realizadas com a presença da resistência apresentaram uma mistura mais homogênea sobre a superfície do prato.

- Como estas resistências estão sendo utilizadas em uma malha de controle com aquecimento distribuído, pode-se afirmar também que as mesmas ajudam no processo de transferência de massa, pois tornaram a mistura mais homogênea na superfície do prato, o que é desejável do ponto de vista da transferência de massa, pois quanto mais agitada e mais homogênea a mistura maior e melhor a taxa de transferência de massa entre as fases.

O presente trabalho concentrou-se no desenvolvimento de uma metodologia para avaliação numérica do escoamento líquido-vapor em pratos perfurados de colunas de destilação, porém em virtude da complexidade do escoamento na superfície de um prato perfurado muitos questionamentos surgiram durante o decorrer deste trabalho e podem ser

respondidos com a extensão do estudo desenvolvido. Os mais importantes são apresentados a seguir:

- Estudar a influência dos modelos de turbulência, pois a grande maioria dos autores utilizam o modelo k- ϵ padrão. Analisar qual a influência destes modelos neste sistema multifásico turbulento;

- Estudar a otimização de geometrias objetivando minimizar as resistências à transferência de calor e massa;

- Fazer a corroboração destes modelos com dados experimentais microscópicos;

- Fazer um estudo completo com os efeitos de transferência de calor e massa.

- Fazer estudos sobre o comportamento da resistência elétrica acionada (dissipando energia) sobre a hidrodinâmica do escoamento e qual seu efeito sobre a eficiência do prato.

- Fazer um estudo de eficiência dos pratos com e sem resistência sobre a superfície do prato.

CAPITULO VIII

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALMEIDA, N. H., **Determinação da eficiência do recheio estruturado Millapak 500Y na destilação da terebentina em coluna piloto.** Tese de Doutorado da USP, São Paulo, 1994.

BARATTI R., BERTUCCO A., DA ROLD A., MORBIDELLI M. **Development of a composition estimator for binary distillation columns. Application to a pilot plant.** Chemical Engineering Science, vol. 50, nº 10, p. 1541-1550, 1995.

BARROS, A. A. C., **Desenvolvimento do modelo de estágio de não equilíbrio e proposições de correlações para processos de destilação convencional e extrativa.** Tese de Doutorado, Unicamp, Campinas, São Paulo, 1997.

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

BOISSON, N., MALIN, M.R., **Numerical prediction of two-phases flow in bubble columns.** International Journal for Numerical Methods in Fluids, 23, 1289-1310, 1996.

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

- BIRD, R. Byron (Robert Byron); STEWART, Warren E; LIGHTFOOT, Edwin N., **Fenomenos de transporte: un estudio sistematico de los fundamentos del transporte de materia, energia y cantidad de movimiento.** Barcelona: Reverte, 1982.
- BRACKBILL, J. U., KOTHE, D. B., ZEMACH, C., **A continuum method for modeling surface tension.** Journal of Computational Physics, 100, 335-354, 1992.
- BREACH, M.R., ANSARI, N., **Modeling non-ideal vapor–liquid phase equilibrium, mass and energy transfer in a binary system via augmentation of computational fluid dynamical methods.** Computers & Chemical Engineering, Volume 31, Issue 9, 1047-1054, 2007.
- CHAN, Hong; FAIR, James R., **Prediction of point efficiencies on sieve trays. 1. Binary systems.** Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. V. 23, n. 4, p. 814-819, 1984.
- DELNOIJ, E., KUIPERS, J. A., SWAAIJ, W. P. M., **Dynamic Simulation of gás-liquid two-phase flow: effest of column aspect ratio on flow structure.** Chemical Enginnering Science, 52, 3759-3772, 1997.
- DRIBIKA, M. M., BIDDULPH, M. W., **Scaling-up distillation efficiencies.** AIChE Journal, v. 32, n. 11, p. 1864-1875, Novembro, 1986.
- FERREIRA, A. A., NETO, F. R. A., **Simulated distillation in the petroleum industry.** Revista Química Nova v.28 n.3 São Paulo May/June 2005. Disponível em: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-40422005000300020
Acesso em : Março, 2007.
- FOUST, A. S., WENZEL, L.A., CLUMP, C.W., MAUS, L., ANDERSEN, L. B., **Princípios das Operações Unitárias.** 2 ed., Guanabara Dois, 1982.
- GESIT, G., NANDAKUMAR, K., CHUANG, K. T., **CFD modeling of flow patterns and hydraulics of commercial-scale sieve trays.** AIChE J. 49, 910-924, 2003.

GOMIDE, R., **Operações Unitárias**. Edição do Autor, São Paulo, v.4 p. 445. 1988.

HAMILL, N., **CFD comes of age in the CPI: more companies are using computational fluid dynamics to solve equipment and process problem**. Chemical Engineering, v. 103, p. 68-72, 1996.

HENLEY, E. J., SEADER, J. D., **Equilibrium-Stage Separation Operation in Chemical Engineering**. John Wiley & Sons, Canada, 1981.

HIMMELBLAU, D. M.; BISCHOFF, K. B., **Process analysis and Simulation Deterministics system**. 1st edition, John Wiley & Sons Inc., New York, 1968.

HJERTAGER, B. H., MORUND, K., *Computational Fluid dynamics of bioreactors*. Mod. Indent. Control, v.16, p. 177, 1995.

HOLLAND, C. D., **Multicomponent distillation**. Englewood Cliffs, NJ: Prentice – Holl, 1963.

HOLLAND, C. D., **Fundamentals of multicomponent distillation**. New York: McGraw-Hill, 1981.

KALID, R. A., **Apostila do Curso de Controle de Processos. Publicação do Departamento de Engenharia Química da UFBA**, Salvador, Bahia, Brasil, 1999. Disponível em: <http://www.lacoi.ufba.br/> Acesso em: Maio, 2005.

KING, C. Judson., **Separation Processes**. New York: McGraw-Hill, 850 p., 1980.

KRISHNA, R., van BATEN, J. M., ELLENBERGER, J., HIGLER, A. P., TAYLOR, R., *CFD simulation of sieve tray hydrodynamics*. Chem. Eng. Res. Design, Trans IChE, 77, 639-646, 1999.

- KRISHNA, R., STANDART, G. L., **A multicomponent film model incorporating a general matrix method of solution to the Maxwell-Stefan equation.** *AIChE Journal*, v. 22, n. 2, Mar. 1976.
- KRISHNAMURTHY, R., TAYLOR, R., **A nonequilibrium stage model of multicomponent separation processes.** Part I: Model description and method of solution. *AIChE Journal*, v. 31, n. 3, p. 449-456, Mar. 1985 (a).
- KRISHNAMURTHY, R., TAYLOR, R., **A nonequilibrium stage model of multicomponent separation processes.** Part II: Comparasion with experiment. *AIChE Journal*, v. 31, n. 3, p. 456-465, Mar. 1985 (b).
- KRISHNAMURTHY, R., TAYLOR, R., **A nonequilibrium stage model of multicomponent separation processes.** Part III: The influence of unequal component efficiencies in process design problems. *AIChE Journal*, v. 31, n. 3, p. 456-465, Mar. 1985 (c).
- LIU, C. J. X., YUAN, G., YU, K. T., ZHU, X. J., *A fluid-dynamic model for flow pattern on a distillation tray.* *Chemical Engineering Science*, 55 2287-2294, 2000.
- LIU, B.T., *Study of a new mass transfer model of CFD and its application on distillation tray.* Ph.D. Dissertation, Tianjin University, Tianjin, China, 2003.
- MALISKA, C. R., **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional.** Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004.
- MALISKA, C. R., **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: fundamentos e coordenadas generalizadas.** Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1995.
- MARANGONI, C., **Implementação de uma Estratégia de Controle com Ação Distribuída em uma Coluna de Destilação.** Tese. (Doutorado em Engenharia Química). Programa de Pós-Graduação do Departamento de Engenharia Química e Alimentos, Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC. Florianópolis, 2005.

- MEHTA, B., CHUANG, K. T., NANDAKUMAR, K., **Model for liquid phase flow on sieve trays**. Trans. IChemE, v. 76, p. 843-848, 1998.
- MEIER, H. F., **Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional de Ciclones por Técnicas de Fluidodinâmica Computacional**. Tese (Doutorado), FEQ/UNICAMP, Campinas, 210p, 1998.
- MEIER, H. F., ALVES, J. J. N., MORI, M., **Comparison between staggered and collocated grids in the finite-volume method performance for single and multi-phase flows**. Computers and Chemical Engineering, 23, 247-262, 1999.
- MOURA, L.G., **Modelagem Empírica de Colunas de Destilação utilizando Redes Neurais de Wavelets para Otimização e Controle de Processos**. Dissertação. (Mestrado em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC, Florianópolis, 2003.
- NALLASAMY, M., **Turbulence models and their applications to the prediction of internal flow: a review**. Computers & Fluids, 15, 151-194, 1987.
- NORILER, D., MEIER, H. F., BARROS, A. A. C., WOLF MACIEL, M. R., **Thermal fluid dynamics analysis of gas-liquid flow on a distillation sieve tray**, Chem. Eng. J., doi:10.1016/j.cej.2007.03.023, 2007.
- PATANKAR, S. V., SPALDING, D. B., **A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows**. Int. Journal Heat Mass Transfer, 15, 1787-1806, 1971.
- PESCARINI, M. W. H., **Desenvolvimento de um algoritmo para simulação de colunas de destilação multicomponente em estado estacionário utilizando a modelagem de estágio de não equilíbrio**. Dissertação de Mestrado, Unicamp, Campinas, São Paulo, 1996.
- PESCARINI, M. W. H., BARROS, A. A. C., WOLF-MACIEL, M. R., **Development of a Software for Simulating Separation Processes Using a Nonequilibrium Stage Model**.

Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação (LDPS), DPQ, Faculdade de Engenharia Química. UNICAMP. CP. 6066, CEP. 13081-970, Campinas-SP. Brasil, 1996.

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

REIS, M. H. M., PESCARINI, M. H., WOLF-MACIEL, M. R., **Performance of Mathematical Methods to Solve Dynamics of Distillation Columns for Equilibrium and Nonequilibrium Stage Models.** Chemical Engineering School, State University of Campinas, 1996.

SCHUMB, W. C., SATTERFIELD, C. N., & WENTWORTH, R. L., **Hydrogen peroxide.** Reinhold Publishing Corp, 1955.

SMITH, J. M., VAN NESS, H. C.(Hendrick C.), ABBOTT, M. M., **Introdução a termodinâmica da engenharia química.** 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, 697p. ISBN 8521611943, 2000.

SOARES C., NORILER, D., BARROS, A. A. C., MEIER, H. F., WOLF Maciel , M. R., **Numerical Simulation of Liquid Flow On a Distillation Tray.** In: Iberian Latin-American Congress On Computational Methods In Engineering and Brazilian Congresso on Computational Mechanics, 22 e 2, 2001, Campinas – São Paulo – Brasil. Anais do 22nd Iberian Latin-American Congress On Computational Methods In Engineering and 2nd Brazilian Congresso on Computational Mechanics. São Paulo, 2001 (CD-Rom), 2001.

SOARES, C., **Avaliação experimental dos coeficientes de transferência de massa e calor em uma coluna com pratos perfurados.** Dissertação de Mestrado, Unicamp, Campinas, São Paulo, 2000.

SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G., **Applicability of standart k-ε turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns: Part I. Detailed numerical simulations.** Chemical Engineering Science, 54, 2273-2284, 1999.

STREETER, V. L., **Mecânica dos Fluidos**. McGraw-Hill Inc., 1977.

SUN, Z.M., LIU, B.T., YUAN, X.G., LIU, C.J., YU, K.T., **New turbulent model for computational mass transfer and its application to a commercial scale distillation column**. Industrial and Engineering Chemistry Research 44, 4427–4434, 2005.

SUN, Z.M., YU, K.T., Yuan, X.G., Liu, C.J., **A modified model of computational mass transfer for distillation column**. Chemical Engineering Science 62, 1839 – 1850, 2007.

TAYLOR R., KRISHNA R., **Modelling reactive distillation – Review**. Chemical Engineering Science, nº 55, p. 5183-5229, 2000.

TAYLOR, R., LUCIA, A., **Modeling and analysis of multicomponent separation processes**. A.I.Ch.E. Symposium Series, v. 91, n. 304, p. 9-18, 1994.

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

VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W., **An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method**. New York: Logman Scientific & Technical, 1995.

WALTER, J.F., SHERWOOD, T.K., **Gas absorption in bubble-cap columns**. Ind. Eng. Chem., v. 33, n. 4, p. 493-501, 1941.

WOZNY G, LI P., **Optimization and experimental verification of startup policies for distillation columns**. Computers and Chemical Engineering, vol. 28, p.253-265, 2004.