

Joel Gustavo Teleken

**MODELAGEM MATEMÁTICA E ANÁLISE
FLUIDODINÂMICA DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO POR
FILME LÍQUIDO DESCENDENTE**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do Grau de Doutor em Engenharia de Química.
Orientador: Prof. Dr. Ricardo Antonio Francisco Machado.
Coorientadora: Prof. Dr^a. Ana Paula Meneguelo.

Florianópolis
2013

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Teleken, Joel Gustavo

Modelagem Matemática e Análise Fluidodinâmica do Processo de Destilação por / Joel Gustavo Teleken ; orientador, Ricardo Antonio Francisco Machado ; coorientadora, Ana Paula Meneguelo. - Florianópolis, SC, 2013.

151 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Inclui referências

1. Engenharia Química. 2. Destilação. 3. Filme descendente. 4. sistema de distribuição. 5. Otimização energética. I. Machado, Ricardo Antonio Francisco Machado. II. Meneguelo, Ana Paula Meneguelo. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. IV. Título.

Este trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Controle de Processos (LCP) do Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos, Centro Tecnológico, Universidade Federal de Santa Catarina. Contou com o apoio financeiro CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento Pessoal de Nível Superior), Agência Nacional de Petróleo e Gás (ANP) e da Petrobras.



AGRADECIMENTOS

À Deus por tudo.

Primeiramente a Deus por permitir que mais uma etapa da minha tenha sido realizada, mais um sonho alcançando;

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina, de maneira especial ao Laboratório de Controle de Processos, que ofereceu as melhores condições para realização deste trabalho;

À CAPES – Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior pelo apoio financeiro durante a realização de parte deste trabalho;

Ao professor e amigo Dr. Ricardo Antonio Franciso Machado, pelo apoio, ideias, cobrança e em especial sua confiança que contribuíram muito para o desenvolvimento e finalização deste trabalho. À minha coorientadora Prof^a. Ana Paula Meneguelo pela amizade, orientação, conhecimentos transmitidos e a grande paciência que teve comigo;

À Universidade Federal do Paraná que possibilitou a continuação e término deste doutorado;

Aos professores e muito além disso amigos Cintia Marangoni, Bruno Carciofi e Franciolo Vendruscolo, pelo total apoio, ideias, sugestões e principalmente cobrança para realização deste trabalho;

Aos amigos de trabalho, em especial Ronny, Carlos Alberto, Rafael Dias, Leticia, Iaçanã, André, Mayra, Alessandra, Magda, Jaque, os quais sempre estiveram muito presentes e contribuíram não só com sugestões para o trabalho como também melhoraram e tornaram nosso ambiente de trabalho muito agradável;

Expressar meu agradecimento de maneira muito especial a Emanuelle I. B. Parisotto por todo amor, paciência, amizade, conforto e principalmente apoio durante a realização do trabalho;

À minha família, Jorge, Deonici, Junior e Jhony, por todo apoio, confiança, carinho, força, união, fé e por estarem sempre ao meu lado.

RESUMO

No mercado atual, competitivo e globalizado, é importante agregar rentabilidade às unidades de negócios através do desenvolvimento de soluções tecnológicas diferenciadas. Neste sentido, a adequação da produção de derivados de petróleo extraído deve ser realizada de maneira competitiva, com a integração e a otimização de toda a cadeia produtiva. Dentre as formas para alcançar estes objetivos destacam-se a redução do custo de fracionamento e o desenvolvimento de novas concepções de equipamentos. Estes dois fatores podem ser obtidos quando implementada uma maneira alternativa de troca de calor e massa entre as fases em um processo de destilação, que permita a redução do consumo energético e aumente a eficiência de separação. Desta maneira a destilação por filme líquido é uma opção para otimizar a transferência de calor e massa devido a grande área de contato. As principais dificuldades para este processo são a seleção e localização adequada do sistema de distribuição de alimentação, os limites das vazões de alimentação para maximizar a transferência de calor e massa, o layout do tubo de destilação para escoamento das fases líquida e vapor, além da modelagem para estudar a capacidade de separação do processo e sua viabilidade. O objetivo deste trabalho foi o estudo fluidodinâmico e avaliação da eficiência do sistema de distribuição de alimentação (SDA) sobre o processo de destilação por filme líquido descendente. Com posterior avaliação da eficiência deste sobre o processo de destilação com dois perfis de temperatura distintos, isotérmico e não isotérmico, na superfície de evaporação utilizando-se fluidodinâmica computacional (CFD). A técnica de CFD é uma importante e poderosa ferramenta para pesquisa e desenvolvimento de processos de engenharia. Neste trabalho utilizou-se um modelo tridimensional de colunas de destilação por filme líquido. O trabalho foi dividido em três partes: desenvolvimento e estudo de refino da malha numérica visando diminuir os efeitos de difusão numérica para obtenção de resultados mais acurados com menor tempo e custo computacional, análise do escoamento e avaliação do SDA desenvolvido na formação e manutenção do filme líquido descendente sobre a superfície de evaporação (CFD e experimental) e validação dos modelos propostos para avaliação da eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente utilizando-se dois perfis de temperatura. As simulações foram realizadas considerando escoamento multifásico, modelo de turbulência Shear Stress Transport (SST) e esquema de interpolação upwind. Os resultados obtidos demonstram a eficiência e

viabilidade de utilização do SDA desenvolvido sobre a capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente. O modelo tridimensional proposto foi capaz de prever os resultados de separação da unidade com erro relativo máximo de 10%.

Palavras-chave: Destilação, filme descendente, sistema de distribuição da alimentação, otimização energética.

ABSTRACT

In the current, competitive and globalized market, it is important to aggregate profitability to business units by developing new and different technological solutions. In this sense, the adequacy of manufacturing of products deriving from petroleum extracted must be carried out in a competitive way, with the integration and optimization of the whole production chain. Among the ways to reach these goals it is possible to highlight the fractioning cost reduction and the development of new conceptions of equipments. These two factors can be obtained when a new way of heat and mass exchange is implemented between the stages of a distillation process, which allows the reduction of energetic consummation and increases the separation efficiency. In this way, the distillation through liquid film is an option in order to optimize heat and mass transference due to its great area of contact. The main difficulties for this process are the adequate sealing and location of the feeding distribution system, the limits of the feeding flow rate in order to maximize the heat and mass transference, the layout of the distillation tube for the flowing of the liquid and vapor stages, besides modeling, in order to study the separation capacity of the process and its viability. Therefore, this paper aims to design and build a distillation system by descending liquid film, with posterior evaluation of its efficiency on the distillation process with two distinct temperature profiles, isothermal and non-isothermal one, on the evaporation surface by using computational fluid dynamics (CFD). The CFD technique is an important and powerful tool for research and development of the engineering process. In this paper a tridimensional model of distillation columns through liquid film was used. The paper was divided into three parts: development and study of the refine of the numerical grid, aiming to decrease the effects of numeric diffusion in order to obtain more accurate results in a shorter time and computational effort, analysis of flowing and evaluation of SDA developed on the formation and maintenance of the descending liquid film on the evaporation surface (CFD and experimental) and validation of the models proposed for evaluating the SDA efficiency on the separation capacity of the distillation unit through descending liquid film, by using two temperature profiles. The simulations were carried out considering the multiphase flowing, turbulence model Shear Stress Transport (SST) and upwind interpolation scheme. The results obtained show the efficiency and viability of using SDA developed on the capacity of separation of the distillation unit through descending liquid film. The tridimensional

model proposed was able to predict the results of the separation of the distillation unit with relative error of 10% maximum.

Keywords: distillation, descending film, feeding distribution system, energetic optimization.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Esquema de uma coluna de destilação HIDiC ideal (Fonte: Huang et al. 1996).	34
Figura 2.2: Em (a) representação da coluna Petlyuk com um pré fracionador e coluna principal, em (b) implementação pratica que integra o pré fracionador e uma coluna principal e, em (c) esquema da coluna de destilação proposta por Kaibel (1987) para separação de.....	37
Figura 2.3: Esquema simplificado de um destilador molecular de filme descendente. (Fonte: Zuñiga et al. 2009).	38
Figura 2.4: Seções que compõem a proposta da destilação horizontal. (Fonte: Arrison, 2000).	40
Figura 2.5: Esquema da destilação horizontal com uma série de tanques interconectados. (Fonte: Arrison 2000).	41
Figura 2.6: Representação esquemática dos tubos da Tecnologia Linas. (Fonte: Saifutdinov et al. 1999).	42
Figura 2.7: Escoamento de filme fino descendente (a), escoamento em tubo (b). (FONTE Ticona, 2003).	45
Figura 2.8: Representação esquemática de evaporador por filme líquido descendente. (Fonte: Stroefer et al. 2007).	47
Figura 2.9: Tipos de malhas computacionais de discretização: (a) estruturada, (b) não estruturada e (c) malha híbrida. (Fonte: SANTOS, 2008).	52
Figura 3.1: Representação esquemática geral em forma de diagrama de blocos, com organização da metodologia empregada para o desenvolvimento do SDA.....	56
Figura 3.2: Detalhe do SDA projetado.....	58
Figura 3.3: Vista superior do sistema de distribuição da alimentação. .	61
Figura 3.4: Vista frontal do sistema de distribuição da alimentação.	61
Figura 3.5: Etapas para simulação em CFD.....	63
Figura 3.6: Locais onde foram estudadas as variáveis e assumidas as condições de contorno.....	70
Figura 3.7: Representação esquemática de um filme líquido descendente.....	71
Figura 3.8: Condições iniciais e de contorno assumidas para realização das simulações com a unidade operando na condição de perfil de temperatura isotérmico.....	76
Figura 3.9: Regressão polinomial realizada para obtenção do perfil de temperatura ao longo do comprimento do tubo de destilação.....	77

Figura 3.10: Condições de contorno e iniciais assumidas para realização das simulações com a unidade operando na condição de fornecimento de energia com perfil de temperatura.	78
Figura 4.1: Diagrama esquemático para ilustração da sequência da apresentação dos resultados com as etapas do desenvolvimento do SDA e posterior avaliação da eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente.	82
Figura 4.2: Modelos do SDA previamente usinados (a) superfície livre (b) superfície com pequenos canais.	83
Figura 4.3: Filme líquido descendente nas paredes do tubo de destilação para SDA liso.	84
Figura 4.4: Filme líquido descendente nas paredes do tubo de destilação para SDA com canais.	84
Figura 4.5: Esquema do SDA com as distâncias entre este e o tubo de destilação.	85
Figura 4.6: Ruptura do filme líquido descendente para o SDA com 21 (mm) de diâmetro.	86
Figura 4.7: Ruptura do filme líquido descendente para o SDA com 25 (mm) de diâmetro.	86
Figura 4.8: Variação da altura do sistema de distribuição da alimentação para realização dos testes experimentais com água a temperatura de 298 K.	88
Figura 4.9: Resultado experimental para avaliação da eficiência de manutenção do filme líquido descendente sobre a superfície evaporante para SDA com 20 mm de altura.	88
Figura 4.10: Vazão limite de operação: Início da ruptura do filme líquido descendente ao longo do tubo de destilação para uma vazão de 5 kg.h ⁻¹	90
Figura 4.11: Características do filme líquido na superfície do tubo de destilação para diferentes vazões de alimentação.	91
Figura 4.12: Diagrama esquemático para ilustração da sequência de etapas na obtenção dos resultados de simulação em CFD durante o desenvolvimento e otimização do SDA.	93
Figura 4.13: Malha híbrida (parte superior=SDA + parede lateral).	94
Figura 4.14: Ampliação na base com detalhe da malha tetraédrica no centro e prismática nas bordas do tubo de destilação.	94
Figura 4.15: Ampliação na Figura (4.14) detalhando a malha prismática e tetraédrica.	95
Figura 4.16: Detalhes da malha do SDA.	95
Figura 4.17: Malha híbrida do tubo de destilação construída a partir da extrusão da malha superior.	95

Figura 4.18: Detalhe da junção das malhas.	95
Figura 4.19: Detalhe da malha prismática utilizada no tubo de destilação.	96
Figura 4.20: Detalhe da malha prismática mostrando as paredes do tubo de destilação e da base do tubo.	96
Figura 4.21: Representação da malha numérica utilizada para realização das simulações.	96
Figura 4.22: Representação esquemática para determinação da espessura do filme líquido descendente.	98
Figura 4.23: Perfis da fração mássica de líquido para vazão mássica de 25 kg.h^{-1} com SDA (a) sem rotação (b) 750 rpm e (c) 1000 rpm.	98
Figura 4.24: Número de Reynolds médio para o teste de rotação do SDA.	99
Figura 4.25: Perfil da fração volumétrica de líquido na parede do tubo de destilação (a) sem rotação (b) com rotação de 750 rpm no SDA. ...	100
Figura 4.26: Esquema dos SDA usados para realização das simulações.	101
Figura 4.27: Perfil da fração mássica de líquido ao longo do raio para os três níveis de altura, (a) SDA 20 mm de altura e (b) SDA 28,5 mm de altura.	102
Figura 4.28: Desenvolvimento dos perfis radiais de velocidade superficial do líquido (a) 10 mm, (b) 65 mm e (c) 165 mm abaixo do SDA de alimentação.	103
Figura 4.29: Escoamento de filme líquido descendente (a) ilustração teórica, (b) experimental SDA com 20 mm (c) SDA com 28,5 mm altura.	104
Figura 4.30: Perfil da fração volumétrica de líquido nas paredes do tubo de destilação (a) SDA com 20 mm de altura e (b) SDA com 28,5 mm de altura.	105
Figura 4.31: Perfis da fração volumétrica de líquido (a) 10 mm (b) 65 mm e (c) 165 mm abaixo do SDA para as vazões mássicas de 50, 25 e 10 kg.h^{-1}	108
Figura 4.32: Perfis da velocidade superficial do líquido (a) 10 mm (b) 65 mm e (c) 165 mm abaixo do SDA para as vazões mássicas de 50, 25 e 10 kg.h^{-1}	109
Figura 4.33: Perfil da velocidade superficial da mistura de hidrocarbonetos nos três níveis de altura (10, 65 e 165 mm) de um fluido viscoso.	112
Figura 4.34: Perfis da fração mássica de líquido nos três níveis de altura para escoamento do fluido viscoso.	112
Figura 4.35: Versão final do sistema de distribuição de alimentação.	114

Figura 4.36: Esquema do SDA desenvolvido para alimentação da unidade de destilação por filme líquido descendente.....	116
Figura 4.37: Condições iniciais e de contorno utilizadas para realização das simulações com mistura de etanol e água para o perfil de temperatura isotérmico.....	119
Figura 4.38: Velocidade superficial da fase líquida representada a partir de vetores operando com perfil de temperatura isotérmico.	121
Figura 4.39: Perfis axiais de temperatura da fase líquida ao longo do perímetro da superfície evaporante operando com perfil de temperatura isotérmico.....	122
Figura 4.40: Perfis axiais de temperatura da fase líquida com variação radial operando com perfil de temperatura isotérmico.....	122
Figura 4.41: Perfil de temperatura da mistura vapor (etanol/água) no plano XZ operando com perfil de temperatura isotérmico.	123
Figura 4.42: Perfis axiais da fração mássica de etanol na fase vapor ao longo do raio operando com perfil de temperatura isotérmico.	125
Figura 4.43: Perfis axiais da temperatura da fase vapor ao longo do raio operando com perfil de temperatura isotérmico.....	125
Figura 4.44: Perfil axial da fração mássica de etanol na fase vapor em $r = 0$ operando com perfil de temperatura isotérmico.	125
Figura 4.45: Perfil axial de temperatura da fase vapor em $r = 0$ operando com perfil de temperatura isotérmico.	125
Figura 4.46: Perfil axial de velocidade superficial da fase vapor, no plano XY operando com perfil de temperatura isotérmico.	127
Figura 4.47: Representação da velocidade superficial da fase vapor através de vetores operando com perfil de temperatura isotérmico.	128
Figura 4.48: Perfil axial ($r=0$) da velocidade superficial da fase vapor operando com perfil de temperatura isotérmico.....	129
Figura 4.49: Condições contorno utilizadas para realização das simulações com mistura de etanol e água para um sistema com perfil de temperatura não isotérmico na superfície evaporante.	131
Figura 4.50: Velocidade superficial da fase líquida representada a partir de vetores para unidade com perfil de temperatura não isotérmico.	131
Figura 4.51: Perfis axiais de temperatura da fase líquida ao longo do perímetro da superfície evaporante para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.....	132
Figura 4.52: Perfis axiais de temperatura da fase líquida com variação radial para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.	132

Figura 4.53: Perfil de temperatura da mistura vapor (etanol/água) no plano XZ operando a unidade com perfil de temperatura não isotérmico.	134
Figura 4.54: Perfis axiais da fração mássica de etanol na fase vapor ao longo do raio para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.	135
Figura 4.55: Perfis axiais da temperatura da fase vapor ao longo do raio para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.	135
Figura 4.56: Perfil axial da fração mássica de etanol na fase vapor em $r = 0$ para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.	135
Figura 4.57: Perfil axial de temperatura da fase vapor em $r=0$ para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.	135
Figura 4.58: Perfil axial de velocidade superficial da fase vapor, no plano XY para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.	136
Figura 4.59: Representação da velocidade superficial da fase vapor através de vetores para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.	137
Figura 4.60: Perfil axial ($r = 0$) da velocidade superficial da fase vapor para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.	138

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Dados do projeto de coluna de destilação convencional em escala piloto.....	57
Tabela 3.2: Cálculo da altura e diâmetro correspondente para destilação por filme líquido descendente.	57
Tabela 3.3: Coeficientes de fechamento do modelo SST.....	68
Tabela 3.4: Condições de contorno utilizadas nas simulações de CFD para desenvolvimento do SDA.....	69
Tabela 3.5: Propriedades do etanol e água (SMITH 1995).	72
Tabela 3.6: Parâmetros da equação de Wilson para mistura etanol e água (SMITH 1995).....	73
Tabela 3.7: Condições de contorno utilizadas nas simulações de CFD para avaliar eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente.	75
Tabela 3.8: Modelos utilizados para estudo dos fenômenos envolvidos durante a destilação por filme líquido descendente.....	75
Tabela 4.1: Dados das malhas numéricas testadas para realização das simulações.....	94
Tabela 4.2: Condições de alimentação e rotação do SDA assumidas para realização das simulações.....	97
Tabela 4.3: Número de Reynolds do filme em função da vazão de alimentação.	110
Tabela 4.4: Características físicas da mistura de hidrocarbonetos utilizado nas simulações.....	111
Tabela 4.5: Dimensões do sistema de distribuição de alimentação desenvolvido.	115
Tabela 4.6: Corroboração do modelo fluidodinâmico com os dados experimentais para o sistema operando com perfil de temperatura isotérmico.....	119
Tabela 4.7: Corroboração do modelo fluidodinâmico com os dados experimentais para o sistema operando com perfil de temperatura não isotérmico.....	130
Tabela 4.8: Comparação dos resultados de eficiência de operação da unidade de destilação com perfil de temperatura isotérmico e não isotérmico.....	139
Tabela 4.9: Comparação entre os resultados obtidos para a separação de etanol e água com a destilação convencional e com filme líquido descendente.	140

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Abreviatura/ Sigla	Descrição
A	Constante da equação de Antoine
B	Constante da equação de Antoine
C	Constante da equação de Antoine
F	Fração volumétrica
R	Constante universal do gases ideais
Re	Número de Reynolds
SDA	Sistema de distribuição de alimentação

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descrição	Unidade
D	Diâmetro do tubo	m
G	Vetor aceleração da gravidade	$m.s^{-2}$
L_s	Escala de comprimento	m
M	Massa	Kg
\dot{M}	Vazão mássica	$kg.s^{-1}$
$M_{g,l}$	Transferência de momento	
M_i	Massa molar	$g.gmol^{-1}$
P	Pressão	Pa
P^{sat}	Pressão de Saturação	Pa
P_k	Produção de turbulência	$kg.m^{-1}.s^{-3}$
Q	Calor	J
S	Tensor de tensões médias absolutas	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
T	Temperatura	K
T_s	Temperatura da superfície evaporante	K
T	Tempo	S
U	Vetor velocidade	$m.s^{-1}$
U	Componente de velocidade na direção x	$m.s^{-1}$
U_s	Velocidade do vapor no furo	$m.s^{-1}$
V	Componente de velocidade na direção y	$m.s^{-1}$

V	Volume molar	$\text{cm}^3 \cdot \text{gmol}^{-1}$
W	Componente de velocidade na direção z	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
Z	Coordenada cartesiana	m
α, β, β'	Constantes adimensionais do modelo turbulento SST	
E	Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-3}$
Γ	Vazão mássica por unidade de perímetro da coluna	$\text{kg} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$
Ω	Frequência turbulenta	Hz
K	Energia cinética	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$
M	Viscosidade dinâmica	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
P	Massa específica	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
Δ	Espessura da camada destilante	mm
Σ	Tensão Superficial	$\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$
$\sigma\kappa, \sigma\omega$	Constantes do modelo de turbulência SST	
Z	Vetor unitário na direção ortogonal à parede	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
ν	Viscosidade Turbulenta	

Sobrescrito

E	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
K	Geração de energia cinética turbulenta
T	Turbulento

Subscrito

0	Valor inicial
G	Fase gasosa
K	Fase genérica
L	Fase líquida
T	Turbulento
X	Coordenada x
Y	Coordenada y
Z	Coordenada z
1	Água
2	Álcool
Ent	Entrada
Ref	Referência

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	27
1.1 IMPORTÂNCIA DO ESTUDO	28
1.2 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	30
1.3 OBJETIVOS	31
1.3.1 Objetivo geral	31
1.3.2 Objetivos específicos	31
2 REVISÃO DA LITERATURA.....	33
2.1 INTRODUÇÃO	33
2.2 COLUNAS DE DESTILAÇÃO COM MAIOR EFICIÊNCIA ENERGÉTICA	34
2.2.1 Tecnologia HIDiC	34
2.2.2 Configurações energeticamente otimizadas.....	35
2.2.3 Destilação Molecular	37
2.2.4 Destilação Horizontal.....	39
2.2.5 Tecnologia Linas	41
2.2.6 Destilação por película – filme líquido descendente.....	43
2.2.7 Sistema de distribuição de alimentação	46
2.3 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL - CFD	47
2.3.1 Geração de Malhas	52
2.4 CONCLUSÕES	54
3 MATERIAIS E MÉTODOS	55
3.1 INTRODUÇÃO	55
3.2 DESENVOLVIMENTO DO SISTEMA DE DISTRIBUIÇÃO DE ALIMENTAÇÃO (SDA)	56
3.2.1 Metodologia Experimental – Desenvolvimento do SDA	56
3.3 MODELAGEM MATEMÁTICA - CFD.....	62
3.3.1 Geração da malha numérica	64
3.3.2 Modelo de escoamento turbulento Shear Stress Transport (SST).....	65
3.3.3 Condições de contorno – Simulações do escoamento com água/ar	68
3.3.4 Avaliação da eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da coluna de destilação por filme líquido descendente.....	70
3.3.5 Modelagem do equilíbrio líquido-vapor.....	71
3.3.5.1 Lei de Raoult Modificada	72
3.4 CONCLUSÕES	78
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	81
4.1 DESENVOLVIMENTO DO SDA	82
4.1.1 Sistema de distribuição de alimentação: Liso versus Canais	83
4.1.2 Avaliação do diâmetro do SDA.....	85
4.1.3 Estudo da variação da altura do SDA	87
4.1.4 Estudo da variação da vazão de alimentação sobre a eficiência do SDA	89

4.2	ESTUDO FLUIDODINÂMICO PARA DESENVOLVIMENTO DO SDA	92
4.2.1	Estudo de refino e ajuste de malha.....	93
4.2.2	Sistema de distribuição da alimentação “estático” ou “rotacional” ..	97
4.2.3	Influência da altura do sistema de distribuição de alimentação	101
4.2.4	Influência da vazão de alimentação na eficiência do SDA - CFD	107
4.2.5	Avaliação da eficiência do SDA utilizando-se um fluido viscoso	111
4.2.6	Conclusões sobre a concepção do SDA	113
4.3	AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA DO SDA DESENVOLVIDO NA CAPACIDADE DE SEPARAÇÃO DA UNIDADE DE DESTILAÇÃO POR FILME LÍQUIDO DESCENDENTE UTILIZANDO TÉCNICAS DE CFD	117
4.3.1	Avaliação da eficiência do SDA na capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente operando com perfil de temperatura isotérmico	117
4.3.2	Avaliação da eficiência do SDA na capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente operando com perfil de temperatura não isotérmico	129
4.3.2.1	Comparação dos modos de operação com perfil de temperatura: “Isotérmico” e “Não Isotérmico”	138
5	CONCLUSÕES	141
5.1	SUGESTÕES	141
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	143

1 INTRODUÇÃO

São inúmeros os trabalhos disponíveis na literatura que abordam a modelagem matemática, simulação computacional e o controle de processos de destilação. Tal esforço se justifica pelo fato de que a referida operação é considerada uma das mais importantes na cadeia petroquímica. Além disso, possui elevado custo operacional e complexa sintonia das malhas de controle. Outro fato que justifica o interesse do estudo desta operação unitária é a necessidade de se reduzir suas dimensões e incrementar sua eficiência energética. Uma coluna de destilação típica de uma unidade petroquímica pode atingir acima de 20 metros de altura.

Nos últimos anos pôde-se observar que os trabalhos possuem um enfoque direcionado à busca de concepções de unidades de destilação que não apresentam uma configuração convencional. Neste contexto, abordagens que recebam o nome de destilação intensificada tem se proliferado. Entretanto, os avanços obtidos na redução das dimensões dos processos de destilação ainda podem ser considerados muito pequenos.

A questão da redução das dimensões das unidades de destilação não é devida apenas à necessidade de se elevar a sua eficiência energética. Em ambientes com áreas restritas, como as plataformas de produção offshore, é praticamente inviável a instalação e operação de uma unidade de destilação convencional. Em uma primeira análise é questionável o motivo pelo qual seria necessário instalar e operar um processo de destilação em uma plataforma offshore. Entretanto, tais plataformas frequentemente exploram reservatórios de petróleo ditos “maduros”. Reservatórios maduros são aqueles em que o hidrocarboneto disponível apresenta elevada viscosidade, sendo necessário o emprego de diluentes para a sua extração. Dentre os diluentes estão as frações leves de nafta, obtidas em refinaria. Essas frações são transportadas, via polidutos, para as plataformas e injetadas sob pressão nos reservatórios. A mistura de hidrocarbonetos pesados com a fração de nafta leve é denominada de petróleo sintético, o qual é novamente transportado para a refinaria, onde a fração leve é recuperada em uma unidade de destilação e novamente empregada como diluente. Se tal operação fosse viabilizada na própria plataforma, em ambiente offshore, os custos operacionais seriam reduzidos de forma significativa.

Neste trabalho é proposta a realização de simulações da dinâmica do escoamento do processo de destilação via filme líquido descendente à pressão atmosférica, visando analisar a influência e eficiência do sistema

de distribuição da alimentação (SDA) na formação e manutenção do filme descendente e também sobre a capacidade de separação da mistura etanol e água, para o sistema operando com dois perfis de temperatura distintos.

O estudo do processo de destilação por filme líquido descendente à pressão atmosférica surge como uma opção à destilação molecular, que por definição não é um processo de destilação convencional caracterizando-se como um caso especial de evaporação, que opera em alto vácuo, temperaturas reduzidas e curto tempo de exposição do material à temperatura de operação sendo considerada uma operação de não-equilíbrio.

O processo de destilação por filme líquido descendente é uma maneira eficaz de transferir calor e massa nos processos de evaporação e condensação. Isso ocorre devido a grande superfície de contato da fina camada de líquido em circulação, que possibilita altas taxas de transferência de calor e massa, necessitando de um pequeno fluxo de líquido. É de fundamental importância a melhor distribuição do filme líquido sobre a superfície evaporante e qual a quantidade de massa evaporada em um determinado comprimento do tubo. Desta maneira a destilação por filme líquido descendente nada mais é do que a utilização de um evaporador de filme líquido descendente para separar uma mistura em seus componentes de maior valor agregado.

A realização dos testes para avaliar a capacidade de separação do processo de destilação por filme líquido descendente à pressão atmosférica foi feito utilizando uma mistura de etanol e água. A escolha desta mistura foi baseada na facilidade de aquisição do álcool, nas propriedades físicas e químicas dos materiais puros e da mistura, nas condições de segurança, manuseio e trabalho com a mistura a ser destilada, o grande número de dados científicos conhecidos e fornecidos pela literatura, que foram utilizados para efeitos de projeto e comparação com os resultados obtidos neste trabalho, a volatilidade relativa dos componentes, além da experiência em se trabalhar com esta mistura com os trabalhos desenvolvidos no Laboratório de Controle de Processos (WERLE 2007 e MARANGONI 2005).

1.1 IMPORTÂNCIA DO ESTUDO

O desenvolvimento de novas tecnologias ou soluções tecnológicas é importante para superar os frequentes desafios que se apresentam no mercado. Desta maneira, a adequação das tecnologias de produção passa a ser mandatória de forma que garanta, técnica e

economicamente a produção, gerando a integração e a otimização de toda cadeia. Processos de destilação não convencionais, estão sendo estudadas com o objetivo de melhorar a eficiência energética e obter maior rendimento e pureza nas separações.

Huang et al. (2007) observaram que uma coluna de destilação ideal com integração energética (HIDiC), por não possuir refeedor ou condensador, tem um enorme potencial para redução do consumo energético. Nesta, toda ou parte da seção de retificação, está conectada com a seção de esgotamento com objetivo de trocar calor entre as seções e consequentemente aumentar a eficiência energética do processo. No entanto, este alto grau de integração energética entre as seções de retificação e esgotamento, pode inviabilizar uma operação estável. Em um estudo Iwakabe et al. (2006) observaram uma economia de energia de 30% a 50% na separação de misturas, quando comparados com a mesma separação em destilação convencional. Buscando uma redução no consumo energético como o capital de investimento, Wright (1949) propôs a inserção de uma parede vertical no interior de uma coluna convencional, conhecido como “Dividing Wall Column (DWC)” a fim de separar a alimentação e retirada dos produtos. Esta configuração vem sendo objeto de estudo por Petlyuk et al. (1965), Kaibel (1987) e Atle et al. (1997).

Outra alternativa estudada para redução do consumo energético e das dimensões é o processo de destilação molecular que, segundo Hickman (1943) e Zuñiga et al. (2009), opera em alto vácuo, sendo considerada uma operação de não equilíbrio, pois a molécula evaporada é governada pelos fenômenos de transferência de calor e massa e a probabilidade da molécula condensada retornar ao evaporador é praticamente nula devido ao vácuo. Segundo Batistella (1999) existem diversos tipos de equipamentos para essa tecnologia, entre eles, o destilador de filme descendente, com raspadores deslizantes, multicompartimentado e o centrífugo.

Arrison (2000) depositou uma patente sobre destilação horizontal, cujo sistema inclui uma série de tanques interconectados por tubos de condensação. O principal objetivo do autor foi diminuir a altura de colunas de destilação, uma vez que na destilação horizontal os pratos são substituídos pelos tanques.

Saifutdinov et al. (1999) patentearam uma unidade de separação compacta que utiliza um fluido térmico para realizar a transferência de calor. Esse fluido térmico é conhecido como mistura funcional e qualquer líquido ou mistura de líquido que possua as características físico-químicas apropriadas poderá ser utilizado. Como uma forma de

umentar a eficiência da transferência de massa e calor, os tubos de transferência da parte de retificação e/ou na parte do evaporador possuem meios para fornecerem quantidades variáveis de calor entre o interior e o exterior do tubo ao longo de sua altura. Isso reduz as dimensões de uma unidade padrão em cerca de 3 a 10 vezes. A transferência de massa e calor é realizada nas superfícies interna e externa de tubos que funcionam como trocadores de calor. A condensação dos vapores ocorre na superfície interna, enquanto a extração de calor da superfície externa do trocador é garantida pela evaporação da mistura.

A destilação por filme líquido descendente surge como uma opção eficiente de transferência de calor e massa em processos com escoamento de um líquido em superfície livre, tendo como principal vantagem a grande superfície de contato. As principais dificuldades deste processo são: a seleção e localização adequada do sistema de distribuição de alimentação, quais os limites de vazões mássicas permitidas para a adequada operação do sistema, qual o melhor layout do tubo para o escoamento dos vapores provenientes do filme líquido descendente, qual a melhor distribuição do filme na parede interna do tubo de destilação, a modelagem e conhecimento dos fenômenos de transferência de calor e massa para estudar a capacidade de separação do processo e sua viabilidade. Estas dificuldades podem ser estudadas utilizando-se fluidodinâmica computacional.

1.2 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

A fim de facilitar a apresentação, este trabalho está dividido em seis capítulos.

O capítulo 1 apresenta uma introdução em relação ao tema da proposta e também qual a importância do seu desenvolvimento no cenário atual. Além de estarem contemplados quais os objetivos a serem alcançados com a realização deste trabalho.

No capítulo 2 é apresentada a revisão bibliográfica tratando dos principais conceitos relacionados ao tema, com ênfase para processos de destilação não convencionais, suas principais características e relevâncias.

No capítulo 3 é relatada a metodologia aplicada. Primeiramente é feito uma descrição da metodologia utilizada para desenvolvimento do sistema de distribuição da alimentação (SDA). Iniciaram-se com testes experimentais avaliando-se o SDA, com parede lisa ou com canais, seu diâmetro, altura e por fim os limites de vazão mássica. Em paralelo

implementou-se uma modelagem matemática com as respectivas condições de contorno utilizadas nas simulações de análise fluidodinâmica. Esta fase do trabalho iniciou-se com a construção e definição da malha numérica a qual foi utilizada para realização das simulações do SDA, estático ou rotacional, variando-se a altura, vazão mássica de alimentação e por fim estudou-se o comportamento de um fluido viscoso nesta unidade. Definida a melhor geometria e condições de operação para o SDA, a partir dos resultados experimentais e simulados, seguiu-se para avaliação da eficiência do SDA na formação e manutenção do filme líquido descendente sobre a capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente funcionando com dois perfis de temperatura distintos. Para isso, foram implementados modelos de transferência de momento, calor e massa, utilizando-se condição de equilíbrio de fases. Este modelo foi corroborado com valores experimentais.

No capítulo 4 primeiramente são apresentados os resultados experimentais para desenvolvimento do SDA, depois os resultados do estudo fluidodinâmico. Posteriormente é apresentado o modelo matemático implementado para o estudo da eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade, os valores utilizados para corroboração do modelo e qual a influência das variáveis vazão de alimentação e composição sobre a capacidade de separação e produção da unidade. Para finalizar, no capítulo 5 são apresentadas as principais conclusões da tese e sugestões para trabalhos futuros e no capítulo 6 são apresentadas as referências bibliográficas.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo geral

O objetivo geral desta tese é o estudo fluidodinâmico e avaliação da eficiência do sistema de distribuição de alimentação sobre o processo de destilação por filme líquido descendente, com posterior avaliação da eficiência deste sobre o processo de destilação com dois perfis de temperatura distintos, isotérmico e não isotérmico, na superfície de evaporação utilizando-se fluidodinâmica computacional (CFD) e dados experimentais.

1.3.2 Objetivos específicos

- Os principais objetivos específicos são:

- Realizar simulações da dinâmica do escoamento do processo de destilação por filme líquido descendente;
- Avaliar a influência do sistema de distribuição da alimentação sobre o escoamento do filme líquido descendente utilizando simulações fluidodinâmicas e dados experimentais;
- Implementar um modelo fluidodinâmico com transferência de momento, calor e massa, assumindo-se condição de equilíbrio entre as fases;
- Corroborar os modelos fluidodinâmicos com os dados experimentais;
- Avaliar a eficiência do SDA desenvolvido sobre a capacidade de separação e produção da unidade de destilação por filme líquido descendente;
- Comparar a capacidade de separação da unidade operando com duas formas distintas de perfil de temperatura (isotérmico e não isotérmico) na superfície evaporante;
- Avaliar a eficiência energética e de separação da coluna de destilação por filme líquido descendente à pressão atmosférica com o SDA desenvolvido.

2 REVISÃO DA LITERATURA

Neste capítulo será apresentada uma revisão bibliográfica sobre os processos de destilação não convencionais e sobre a técnica de fluidodinâmica computacional utilizada na simulação.

Com a necessidade crescente da melhora na eficiência energética dos processos, concomitantemente com um maior rendimento e pureza nas separações, surgiram alguns processos de destilação chamados de não convencionais como, tecnologia HIDiC, configurações otimizadas energeticamente, destilação molecular, destilação horizontal e destilação por filme líquido descendente. Estudos de fluidodinâmica computacional têm sido utilizados para quantificar fenômenos físicos e químicos na indústria petroquímica, sendo de grande importância para o conhecimento destes fenômenos nos processos estudados.

2.1 INTRODUÇÃO

As indústrias petroquímicas possuem como um dos seus principais objetivos operarem suas plantas de maneira que o produto final obtido alcance os padrões de qualidade especificados com o menor custo. Torna-se necessário a implementação de processos de produção otimizados, porém a dificuldade é diretamente proporcional à complexidade da destilação.

Por isso o desenvolvimento de processos de destilação ditos não convencionais, que apresentem menor consumo energético com manutenção da qualidade dos produtos, é de extrema importância. Assim a utilização de técnicas de fluidodinâmica computacional é uma ferramenta adequada para o estudo destas novas concepções de destilação.

Na busca pelo desenvolvimento destes processos de destilação ditos não convencionais, várias pesquisas são realizadas entorno do desenvolvimento de processos capazes de reduzir seus custos de operação. Geralmente estão baseados em sistemas de integração energética.

Desta forma, a modelagem fluidodinâmica, aplicada aos estudos de novas concepções de destilação não convencionais, pode ser utilizada para maior conhecimento dos fenômenos envolvidos a fim de facilitar a otimização destes processos.

2.2 COLUNAS DE DESTILAÇÃO COM MAIOR EFICIÊNCIA ENERGÉTICA

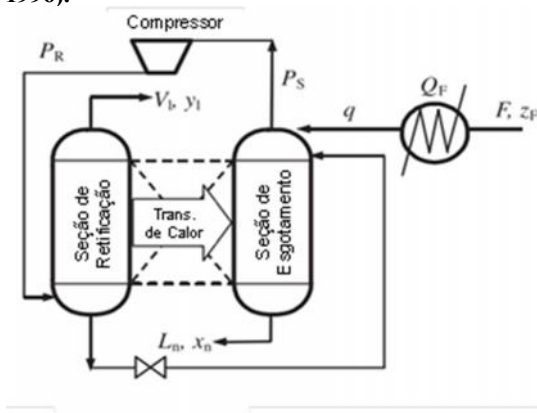
Tendo por objetivo aumentar a eficiência energética, uma série de modificações são propostas, entre elas, a coluna de destilação termicamente acoplada, que consiste de duas colunas convencionais acopladas em uma única recebendo o nome de HIDiC.

2.2.1 Tecnologia HIDiC

Com a utilização desta tecnologia, toda ou parte da seção de retificação está conectada com a seção de esgotamento com o objetivo de trocar calor entre as seções e conseqüentemente aumentar a eficiência energética do processo. Uma coluna HIDiC é composta por uma seção de retificação, uma seção de esgotamento, um compressor e uma válvula. A alimentação é realizada no topo da seção de esgotamento (IWAKABE et al. 2006).

O vapor do topo da seção de esgotamento é então comprimido por um compressor para aumentar a pressão da seção de retificação. A pressão do líquido na base da seção de retificação pode então ser ajustada por meio de válvulas. Caso a pressão na retificação seja suficientemente maior que da seção de esgotamento, a temperatura da retificação ficará mais alta que da seção de esgotamento, inviabilizando o processo de destilação (HUANG et al. 1996). Na Figura 2.1 é possível observar o layout de uma unidade de destilação HIDiC.

Figura 2.1: Esquema de uma coluna de destilação HIDiC ideal (Fonte: Huang et al. 1996).



Vale salientar que na concepção de um projeto de uma coluna do tipo HIDiC a etapa mais complexa é determinar a localização dos cortes que são necessários nas seções da coluna. Em muitos casos as seções possuem diâmetros diferentes ao longo da coluna de forma a maximizar a área de troca térmica.

Hugill e van Dorst (2005) estudaram a utilização de trocadores de calor compactos em colunas de destilação com integração energética, devido ao seu tamanho, estrutura modular e flexibilidade de planejamento. Para estudar a viabilidade destes trocadores de calor compactos um modelo para destilação convencional, que leva em conta as restrições geométricas da planta, foi desenvolvido e implementado. Este serviu para um estudo preliminar da mistura propano e propeno, confirmando a possibilidade de redução do consumo energético na ordem de 40%.

A avaliação da concepção e controle de uma coluna HIDiC para separar uma mistura ternária com pontos de ebulição próximos foi estudada por Huang et al. (2007). Um dos grandes desafios encontrados para este processo foi a possibilidade de fortes interações entre as seções envolvidas. Avaliaram o desempenho estático e dinâmico da coluna de destilação HIDiC mostrando ser uma alternativa competitiva com grande economia de energia e um desempenho dinâmico comparável à destilação convencional.

Suphanit (2010) observou que uma coluna de destilação ideal com integração energética (HIDiC), por não possuir refeedor ou condensador, possui um enorme potencial para redução do consumo de energia. No entanto, este alto grau de integração energética entre as seções de retificação e esgotamento intensifica substancialmente as interações, podendo inviabilizar uma operação estável.

Jana (2010) tratou em seus estudos das dificuldades da HIDiC, como interações das variáveis, não linearidades, projetos e identificação de sistemas de controle, identificando suas deficiências e sugerindo pesquisas em modelagem dinâmica rigorosa, projetos, desenvolvimento de malhas e sistemas de controle não-lineares de alta qualidade, para melhor aproveitamento das potencialidades da coluna de destilação HIDiC.

2.2.2 Configurações energeticamente otimizadas

Na mesma linha de pesquisa, com o objetivo de reduzir o consumo energético, duas alternativas têm sido propostas tanto na literatura como em aplicações industriais. O cerne das configurações

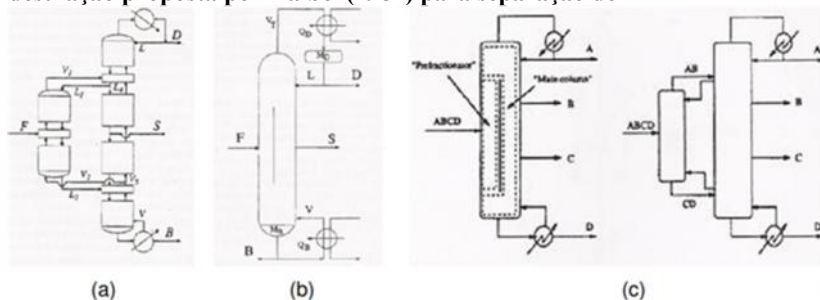
gira em torno da integração de colunas de destilação convencionais ou o projeto de novas configurações. Tipicamente são feitos arranjos de colunas em série com a integração de energia entre as mesmas ou parte de outras plantas.

A maneira encontrada por Wright (1949) para minimizar o consumo de energia e o capital de investimento foi inserir uma parede vertical no interior de uma coluna convencional, conhecido como “Dividing Wall Column (DWC)”. Esta separa a seção de alimentação da retirada dos produtos. Na sequência Petlyuk et al. (1965) e Gomez-Castro et al. (2008) estudaram uma aplicação para separação de uma mistura de três componentes nesta coluna. Uma ilustração deste projeto pode ser visualizada na Figura 2.2-a. Observa-se que consiste de um pré fracionador com refluxo e boilup oriundos da coluna com um único condensador e refeedor. Na configuração apresentada na Figura 2.2-b observa-se a inclusão da DWC integrando o pré fracionador a uma única coluna.

Segundo Atle et al. (1997) esta configuração para uma mistura de três componentes forneceu uma economia em 30% de energia quando comparada com uma unidade convencional de colunas em sequência. Devido à unidade contar apenas com uma estrutura de um condensador e um refeedor, o capital investido chega a ser da ordem de 30% menor que uma configuração tradicional (SMITH, 1995). Porém há uma penalidade em se utilizar apenas um condensador e um refeedor que é há necessidade de se aumentar o número de estágios necessários para separação.

Kaibel (1987) utilizou a configuração de Wright (1949) com DWC internas na coluna e estendeu os estudos, para uma mistura com 4 componentes. Um esquema da coluna proposta por Kaibel (1987) pode ser visualizada na Figura 2.2-c.

Figura 2.2: Em (a) representação da coluna Petlyuk com um pré fracionador e coluna principal, em (b) implementação pratica que integra o pré fracionador e uma coluna principal e, em (c) esquema da coluna de destilação proposta por Kaibel (1987) para separação de



Tanto a configuração da coluna Petlyuk como de Kaibel são configurações capazes de promover uma economia de energia em termos de custos de operação.

2.2.3 Destilação Molecular

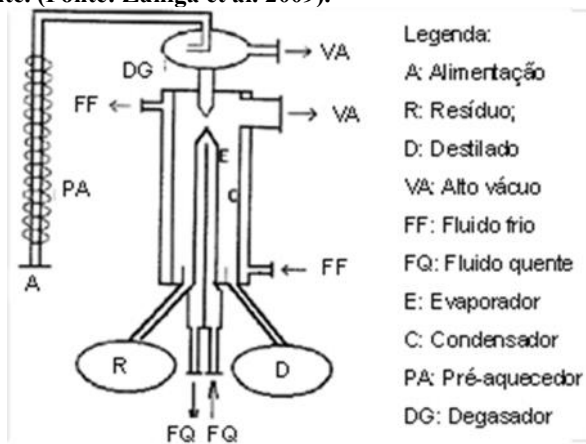
A destilação molecular, por definição, não é um processo de destilação convencional. Trata-se de um caso especial de evaporação que opera a alto vácuo. Na destilação molecular o equipamento consegue atingir 10⁻⁵ bar de pressão residual através de um sistema específico de bombeamento. Resumidamente, a destilação molecular pertence ao tipo de processo que utiliza a técnica de separação sob condições de alto vácuo, temperaturas reduzidas e curto tempo de exposição do material à temperatura de operação, logrando assim, uma diminuição no risco de degradação térmica dos produtos sensíveis ao calor.

Observa-se que o vácuo é a força-motriz desse tipo de operação de transferência de massa difusional. Com a presença do alto vácuo, a lei cinética dos gases mostra que uma molécula evaporável migra para a zona de condensação praticamente sem obstruções. Assim, a transferência de massa entre a zona de evaporação e a zona de condensação caminha somente em uma direção devido à ausência de colisões durante o seu percurso com outras moléculas. Para isso é necessário que as moléculas geradas encontrem um caminho livre entre o evaporador e o condensador, fato que é facilitado pela baixa pressão no sistema. Como consequência, o condensador deve estar separado do evaporador por uma distância menor que o caminho livre médio (“mean

free path”) das moléculas que estão sendo evaporadas (BATISTELLA 1996, BATISTELLA 1999 e BASTISTELA et al. 1999). Desta forma, a destilação molecular é uma operação de não equilíbrio, pois a molécula evaporada é governada somente pelos fenômenos simultâneos de transferência de massa e calor e a probabilidade da molécula condensada retornar ao evaporador é praticamente nula (HICKMAN, 1943).

Um esquema de um destilador molecular de filme descendente, baseado em Zuñiga et al. (2009) pode ser observado na Figura 2.3, onde as partes principais do equipamento consistem de um evaporador e de um condensador, através dos quais se geram duas correntes: a de destilado – constituída pelas moléculas evaporadas, e a de resíduo – constituídas pelas moléculas não evaporadas. Estes dois produtos são armazenados nos recipientes coletores projetados para tal finalidade.

Figura 2.3: Esquema simplificado de um destilador molecular de filme descendente. (Fonte: Zuñiga et al. 2009).



Este processo pode ser caracterizado através da comparação com os dois tipos convencionais de separação líquido-vapor (BURROWS, 1960): destilação convencional e evaporação.

Na destilação convencional, o vapor é geralmente formado no seio do líquido em forma de bolhas cuja taxa é proporcional ao calor cedido ao líquido pelo refeedor. A pressão total ativa no sistema é a pressão de vapor termodinâmica da fase líquida. A superfície do destilando é, a qualquer instante, uma amostra verdadeira do líquido devido à alta turbulência na fase líquida. A convecção por ebulição e fluxos cruzados de líquido e vapor, assim como a difusão das moléculas

voláteis para a superfície é rápida em comparação com a velocidade de evaporação.

Na evaporação, o vapor é gerado na superfície de um líquido, cuja condição termodinâmica se encontra abaixo do seu ponto de bolha, a uma taxa que é função da temperatura da superfície do líquido e da condição do vapor acima da superfície, como ocorre na umidificação e secagem de sólidos, por exemplo.

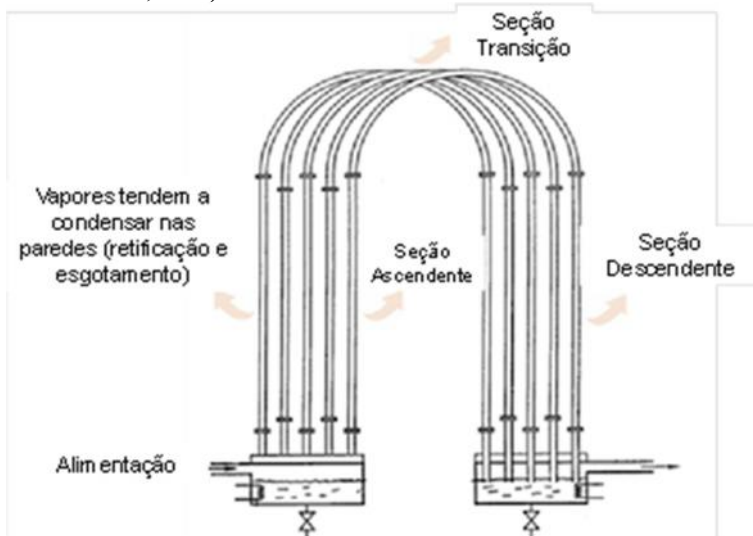
A destilação molecular pode ser considerada uma forma de evaporação em que a taxa é governada somente pela taxa de moléculas que escapam da superfície do líquido; isto difere da Tecnologia HIDiC por não existir praticamente retorno das moléculas evaporadas para fase líquida (não há equilíbrio líquido-vapor), e a temperatura e taxa de evaporação são determinadas pela quantidade de calor fornecido ao líquido (pela superfície aquecida do evaporador) e não são influenciadas pela condição do vapor. O fluxo de líquido destilando é extremamente comportado, assim a convecção devido à ebulição não existe (PERRY e CHILTON, 1980).

Atualmente, de acordo com Batistella et al. (1999), existem diversos tipos de equipamentos para essa tecnologia, entre eles, o destilador de filme descendente, o destilador com raspadores deslizantes, o destilador multicompartimentado e o destilador centrífugo, o mais comumente utilizado, devido à sua construção e a sua alta taxa de destilação.

2.2.4 Destilação Horizontal

No ano de 2000, Arrison (2000) publicou uma patente sobre destilação horizontal. Esta consiste de uma série de tanques interligados por tubos, chamados de tubos de condensação. São nesses tubos que ocorre a destilação por película. Na Figura 2.4 é apresentado um esquema indicando as distintas seções que constituem o processo de destilação horizontal.

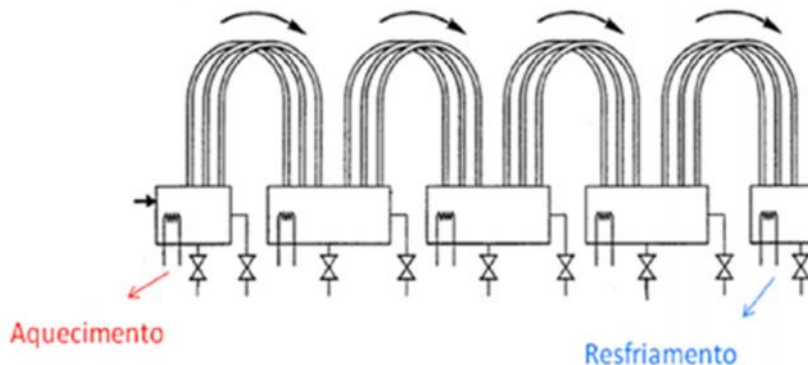
Figura 2.4: Seções que compõem a proposta da destilação horizontal. (Fonte: Arrison, 2000).



É possível observar que cada tubo possui uma porção ascendente, uma de transição e uma descendente. O líquido oriundo da condensação de uma alimentação multicomponente em fase vapor é, pela ação da gravidade, armazenado em um tanque na base do tubo. A configuração final pode consistir de uma série de tanques interconectados pelos tubos de condensação. Cada tanque pode conter elementos de aquecimento ou resfriamento. O aquecimento tem a finalidade de vaporizar o líquido coletado de forma a constantemente enriquecer o produto final no composto desejado. No último tanque da série pode existir um condensador cuja finalidade passa a ser a condensação do vapor remanescente. Na Figura 2.5 é apresentado um esquema da sequência de tanques.

A destilação horizontal apresentada pelo autor mostra um procedimento de separação que compreende o princípio da destilação, com transferência de calor controlada em cada estágio e a destilação por película. No estudo, o autor não controla a temperatura no interior dos tubos nas diversas seções, uma vez que estão expostos ao ambiente. Também não é citada a utilização de vácuo.

Figura 2.5: Esquema da destilação horizontal com uma série de tanques interconectados. (Fonte: Arrison 2000).



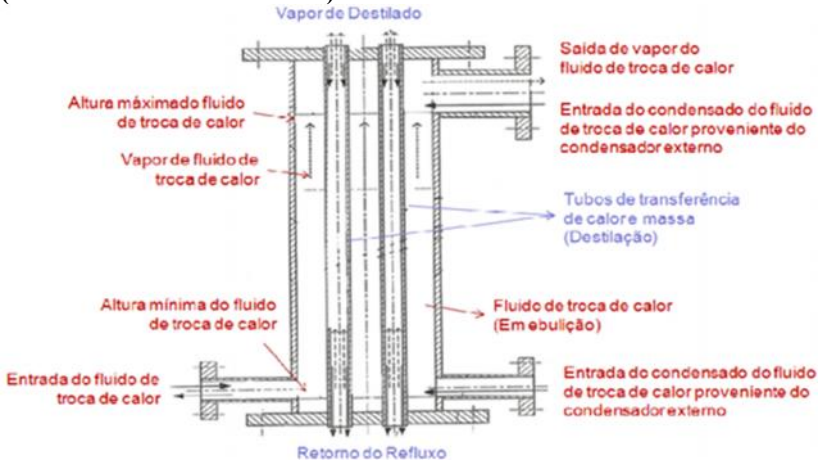
A eficiência de separação mostrou ser dependente dos seguintes fatores:

- i) diâmetro e comprimento da tubulação: quanto menor o diâmetro maior a área de contato e conseqüentemente maior o enriquecimento;
- ii) número de tubos de condensação: depende do tamanho do tanque e da necessidade de aumento da capacidade de separação.

2.2.5 Tecnologia Linas

Essa tecnologia, patenteada e publicada por Saifutdinov et al. (1999), contempla modificações consideráveis no projeto, construção e operação de uma coluna de destilação. Não se trata mais de um processo de destilação ocorrendo em colunas de pratos ou recheios, mas sim de destilação ocorrendo em um filme líquido formado no interior de tubos verticais isolados termicamente por fluidos transportadores de energia. É uma unidade compacta de retificação para a separação de misturas utilizando a transferência de calor transportada por um fluido e seus vapores nas paredes do tubo. A partir das paredes dos tubos ocorre a transferência de massa e calor. De forma esquemática, na Figura 2.6, é ilustrado o layout da invenção.

Figura 2.6: Representação esquemática dos tubos da Tecnologia Linas. (Fonte: Saifutdinov et al. 1999).



Percebe-se pelo esquema representado na Figura 2.6 que a parte externa à destilação é preenchida por um fluido transportador de energia. Os autores trabalharam com fluidos multicomponentes e com variações na espessura desta parede de forma a aumentar a eficiência do processo de troca de calor. Desta forma, são fornecidas quantidades variadas de calor entre o interior e a parte externa da parede do tubo ao longo da altura. Os autores realizaram algumas avaliações sobre o princípio de funcionamento de colunas de destilação convencionais. Algumas contradições e desvantagens do processo foram levantadas. Os principais problemas do processo tradicional são concentrados no arranjo do refluxo ao longo da coluna e na transferência de massa e calor.

A Tecnologia Linas é baseada na destilação por filme líquido descendente. Certamente, a destilação não convencional por filme tem algumas vantagens tais como: baixa resistência ao escoamento e boa capacidade de separação. Quando comparado com outras técnicas, a destilação por filme é a que possui a menor altura teórica dos pratos, cerca de 5 mm. A velocidade elevada do vapor ao longo das superfícies verticais de um filme uniforme cessa os processos de troca de calor e massa. Isso torna o processo instável e todas as vantagens da destilação por filme são perdidas.

A Tecnologia Linas foi desenvolvida para tentar resolver os problemas citados. Tratam-se de tubos verticais com um comprimento de 0,5 a 3 m e um diâmetro variando de 6 a 25 mm. Seu foco concentra-

se principalmente na energia de condensação dos compostos. O uso desta tecnologia oferece soluções para os problemas básicos da destilação convencional na medida que controla a temperatura da parede e a operação se dá com refluxo interno. Como consequências das melhorias da nova tecnologia podem ser citadas:

- i) filme líquido de destilação estável sob uma velocidade de corrente de vapor da ordem de 1,5 a 3,0 m.s⁻¹;
- ii) adaptação do calor e processos de troca dentro da coluna às propriedades físicas da mistura a ser separada;
- iii) novo arranjo do processo de refluxo, todo destilado evaporado é produto final.

2.2.6 Destilação por película – filme líquido descendente

A destilação por filme líquido descendente é um processo com baixo tempo de residência e estrutura simples quando comparado à destilação convencional. Consiste basicamente de um tubo vertical por onde o líquido flui descendentemente formando uma película nas paredes do tubo. Além disso, é possível obter altas taxas de transferência de massa e calor (BATISTELLA, 1999). Entretanto, este é um processo de não equilíbrio, onde o efeito do vapor gerado sobre o líquido praticamente não influencia na taxa e no fator de separação. Resumidamente, o processo apresenta baixa resistência ao escoamento do líquido e elevada capacidade de separação (BATISTELLA e WOLF MACIEL, 1996).

O filme líquido descendente tem se tornado uma das formas mais eficazes de transferir calor e massa nos processos de evaporação e condensação. No campo das aplicações industriais, o escoamento de um líquido em superfície livre encontra sua principal utilização em trocadores com transferência de calor e massa. A principal vantagem desse tipo de dispositivo é a grande superfície de contato da fina camada de líquido em circulação, que possibilita altas taxas de transferência de calor e massa, necessitando de um pequeno fluxo de líquido. Por conseguinte, é de fundamental importância o conhecimento da quantidade de massa evaporada em um determinado comprimento de tubo. Existem diversos tipos de evaporadores como, descontínuos, convecção natural, película ascendente, película descendente, circulação forçada, película agitada, serpentina rotativa e múltiplos efeitos.

A destilação por filme líquido descendente é um fenômeno de superfície. Pode ser considerado um evaporador de película descendente para separar uma mistura em seus componentes de maior valor

agregado. Por isso, é crucial que a área superficial seja a máxima possível por unidade de volume destilando, condição esta que pode ser obtida quando uma camada fina (3 mm) de filme líquido descendente é formada na superfície do evaporador (tubo trocador de calor). Esse efeito favorece imediatamente a transferência de calor da superfície aquecida do evaporador até a superfície de evaporação (REES, 1975 e BHANDARKAR e FERRON, 1988).

Segundo Ticona (2003), estudos indicam que os escoamentos dos filmes podem ser categorizados em três regimes, dependendo do número de Reynolds do filme, definido conforme equação 2.1:

$$Re_{\delta} = \frac{2\Gamma}{\mu_l} \quad (2.1)$$

onde:

- i) Γ : é a vazão mássica por unidade de perímetro do tubo;
- ii) μ_l : viscosidade dinâmica do fluido;

A vazão mássica por unidade de perímetro do tubo pode ser calculada pela equação 2.2:

$$r = \frac{\overset{\text{calculada pela}}{\dot{m}}}{\pi D} \quad (2.2)$$

onde:

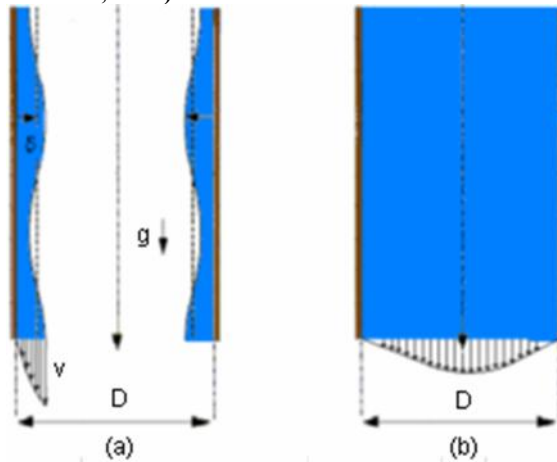
- i) \dot{m} é a vazão mássica kg.h^{-1} ;
- ii) D : diâmetro do tubo m.

Os três regimes de escoamento são separados da seguinte forma:

- i) fluxo laminar, se $Re_{\delta} \leq 20$;
- ii) fluxo com ondas na superfície, de natureza parcialmente laminar e parcialmente turbulenta, $20 \leq Re_{\delta} \leq 4000$; e
- iii) fluxo completamente turbulento, se $Re_{\delta} \geq 4000$.

Na Figura 2.7 poder ser observada a representação do perfil de velocidade do escoamento do filme líquido descendente no interior de um tubo em comparação ao perfil de velocidade do escoamento de um fluido em tubo.

Figura 2.7: Escoamento de filme fino descendente (a), escoamento em tubo (b). (FONTE Ticona, 2003).



A espessura do filme líquido descendente pode ser calculada utilizando-se a equação 2.3 desenvolvida por Nusselt (1916) a partir de um balanço de forças viscosas e gravitacionais. Para $Re_\delta < 1600$ tem-se:

$$\delta = \left(\frac{3\mu L}{4\rho_1^2 g} \right) Re_\delta^{(1/3)} \quad (2.3)$$

A equação 2.4 é uma correlação empírica para números de Reynolds (Re_δ) maiores do que 1600.

$$\delta = \left(0,137^2 \frac{\mu_1^2}{\rho_1^2 g} \right) Re_\delta^{(1/3)} \quad (2.4)$$

Outros autores apresentaram mais alguns estudos importantes sobre a destilação por filme líquido descendente. Drosos et al. (2003), estudaram as características e fenômenos de um filme líquido descendente com um fluxo multifásico e contracorrente (gás-líquido) em estreitos canais verticais, avaliando a influência do número de Reynolds sobre as características do escoamento, principalmente no que se refere a formação de pequenas ondas no filme líquido descendente. Demonstraram que os efeitos, tanto da vazão de líquido como de vapor, possuem grande influência nas características do escoamento, principalmente, no que se refere na frequência das ondas superficiais do filme líquido descendente.

Zhang et al. (2008) avaliaram a distribuição de temperatura de filmes líquidos aquecidos escoando de forma descendente sobre superfícies aquecidas além de desenvolverem um modelo matemático 2-D para distribuição da temperatura. Realizaram testes com água, etanol, soluções aromáticas e soluções aquosas de glicerol com obtenção dos dados de temperatura. Para soluções aquosas com menor concentração de glicerol alcançaram maior temperatura na superfície do filme, devido à diminuição da viscosidade do líquido, enquanto que para solução de etanol a concentração deste teve pouca influência sobre a distribuição de temperatura na superfície do filme. O modelo desenvolvido foi capaz de descrever adequadamente a distribuição da temperatura do filme de líquido descendente.

Observa-se, dos trabalhos encontrados na literatura sobre destilação por filme líquido descendente, que não existem dados divulgados sobre o sistema de alimentação deste processo. Porém, este é de suma importância, pois a formação e escoamento do filme líquido nas paredes do tubo de destilação deve ser homogêneo e distribuído por toda área disponível da superfície evaporante, a fim de garantir a utilização da maior área superficial para evaporação do filme descendente. Estes estudos são de grande importância e podem ser realizados através da fluidodinâmica computacional. Com esta ferramenta é possível observar e caracterizar o escoamento do filme nas paredes internas do tubo de destilação e verificar a influência do sistema de alimentação sobre o escoamento do filme líquido descendente.

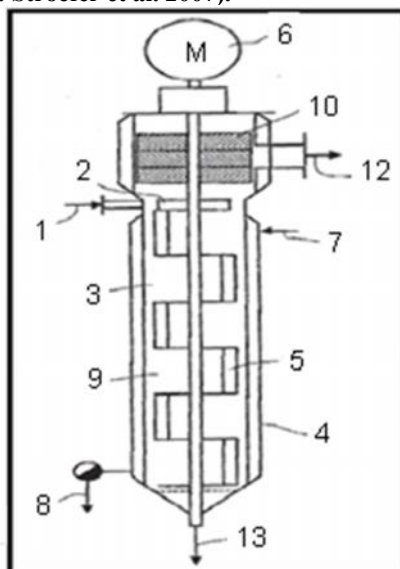
2.2.7 Sistema de distribuição de alimentação

A garantia da uniformidade da distribuição do líquido nas paredes do tubo de destilação é fundamental no funcionamento do processo de destilação por filme líquido descendente a pressão atmosférica. Realizou-se um levantamento em bases de dados de patentes sobre aparatos desenvolvidos para promover esta distribuição, entretanto, os trabalhos encontrados são, em sua grande maioria, referentes às configurações distintas de pratos de destilação, cuja finalidade é melhorar o contato entre as fases. Podem ser citados os trabalhos de Lavin (1988) sobre diferentes geometrias de pratos de destilação e de Bosmans e Uijen (2003) que mostram uma coluna cujo contato gás/líquido é realizado por uma pluralidade de pratos axialmente espaçados.

O trabalho de Stroofer et al. (2007) é uma patente de um evaporador por filme líquido descendente para separação de misturas

líquidas. Apresenta que a separação de polioximetileno glicol foi realizada em um evaporador com 3 m de altura e 50 mm de diâmetro interno. Lâminas rotativas internas distribuem a mistura líquida por toda superfície do evaporador garantindo a manutenção e o transporte do filme, além de intensificar os processos de transferência de massa e calor. Na Figura 2.8 são apresentados alguns detalhes importantes do aparato.

Figura 2.8: Representação esquemática de evaporador por filme líquido descendente. (Fonte: Stroefler et al. 2007).



No esquema de funcionamento, os números representam: (1) a alimentação da mistura; (2) o aparato distribuidor do líquido; (3) a superfície de evaporação; (4) a jaqueta de isolamento; (5) o rotor. O vapor passa pelo espaço de separação das fases (9) e é então coletado em (10). O líquido que foi arrastado com as gotículas de vapor é removido da fase gasosa em (10) e é recirculado para a fase líquida. O concentrado é retirado em (13).

2.3 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL - CFD

O conjunto das técnicas de simulação computacional utilizadas para prever os fenômenos físicos ou físico-químicos que ocorrem em

escoamentos relacionados com a ação e a interação de fatores como dissipação, difusão, convecção, ondas de choque, superfícies escorregadias, condições de contorno e turbulência, pode ser denominado de Fluidodinâmica Computacional (CFD) (MALISKA, 2004).

A hidrodinâmica do contato líquido-vapor possui uma função essencial no projeto da destilação por filme líquido descendente uma vez que determina os limites fluidodinâmicos da coluna e controla as taxas de transferência de calor e massa. O uso de CFD apresenta um grande interesse para modelar o escoamento multifásico no interior de inúmeros equipamentos da engenharia química (NORILER et al. (2008), NIKOU e EHASANI (2008), LI et al. (2009)) dentre eles os processos de separação via filme líquido descendente. Como consequência, esta se tornou uma boa ferramenta para análise e projeto de processos químicos.

Assad e Lampinen (2002) desenvolveram uma modelagem matemática para representar o processo de evaporação de um filme líquido descendente sobre uma placa vertical com temperatura constante, através do qual avaliaram os efeitos da tensão de cisalhamento sobre a variação de pressão, velocidade da fase vapor e a taxa de resfriamento. Através dos resultados obtidos concluíram que a diminuição da temperatura pode ser obtida utilizando-se menor vazão volumétrica de líquido. Já a tensão de cisalhamento possui um efeito negativo no que diz respeito à taxa de resfriamento, existindo uma diferença ótima entre as placas para otimizar a taxa de transferência de calor.

Pinto et al. (2003), simularam os processos de transferência de calor e massa que ocorrem em uma película de líquido descendente ao longo da parede interna de um tubo cilíndrico aquecido, para estimar, através de métodos numéricos, a taxa de evaporação de uma substância pura em um trocador de calor compacto em função dos parâmetros de projeto, apresentando resultados consistentes com relação a expectativa do seu comportamento físico.

A influencia das propriedades físicas do líquido em escoamentos de filme líquido descendente devem ser levadas em consideração durante o desenvolvimento destes projetos. Mouza et al. (2005) estudaram estas influências em um escoamento em tubos verticais de pequeno diâmetro com objetivo de conhecer os mecanismos de escoamento nestas geometrias. O principal parâmetro estudado e analisado foi a espessura média do filme líquido descendente para líquidos com diferentes propriedades físicas. Os dados experimentais confirmaram as observações obtidas através das simulações, onde o

desenvolvimento da espessura do filme líquido descendente é influenciado pela velocidade da fase gasosa e as propriedades físicas do líquido.

O conhecimento dos fenômenos de transferência de massa que ocorrem durante o escoamento de filmes líquidos descendentes é muito importante para avaliar a influência do escoamento sobre o processo de transferência de massa. Liu e Peng (2005) estudaram a distribuição de um soluto na camada limitante de um filme líquido descendente utilizando técnicas de CFD. Estes resultados foram corroborados a partir de dados obtidos de uma metodologia numérica com solução analítica para um problema clássico de difusão. Com isto obtiveram os perfis de fração mássica de soluto ao longo do comprimento da superfície de escoamento e na espessura do filme líquido descendente.

Heari e Hashemabadi (2008) realizaram simulações 3 D com o objetivo de prever o perfil de velocidade e a espessura do filme líquido descendente sobre placas inclinadas, corroborando estes dados com resultados experimentais. Testaram três diferentes concentrações de soluções de carboximetil celulose, com diferentes ângulos de inclinação de 0 a 90° com três diferentes rugosidades para superfície de escoamento. Para realização das simulações levaram em consideração os efeitos da tensão superficial e do ângulo de contato, através dos quais conseguiram ajustar os dados simulados aos dados experimentais.

Zhang et al. (2008) estudaram a distribuição dos perfis de temperatura durante o aquecimento de filmes líquidos descendentes através de técnicas de fluidodinâmica computacional. Implementaram um modelo teórico bidimensional para representar a distribuição da temperatura em filme líquido descendente sobre uma superfície vertical aquecida a temperatura constante. Foram avaliados os gradientes de temperatura para diferentes vazões de fluidos. Uma das primeiras características observadas é que à temperatura na superfície do filme líquido descendente que flui sobre a superfície aquecida tem relação direta com o fluxo deste filme. Quanto menor a vazão do líquido ou maior a temperatura da parede maior a temperatura da superfície do filme. Observou-se também, quanto maior a viscosidade do fluido, menor a temperatura na superfície do filme líquido descendente. O modelo fluidodinâmico implementado descreveu adequadamente a distribuição da temperatura na superfície do filme líquido descendente o que é de extrema importância, pois esta afeta propriedades que interferem no escoamento, como viscosidade e tensão superficial.

Além do conhecimento das características do escoamento de filme líquido descendente é de extrema importância o conhecimento

sobre os processos de transferência de calor que acontecem durante estes escoamentos. Pensando nisso, Raach e Somasundaram (2008) investigaram a transferência de calor em filmes líquidos descendentes sobre placas verticais, nas quais existem anteparos metálicos que promovem a turbulência do escoamento a fim de aumentar a eficiência na transferência de calor. Foram realizadas simulações fluidodinâmicas com o objetivo de determinar qual a distância ótima entre estes anteparos metálicos. Realizaram simulações bidimensionais do escoamento de filme líquido descendente sobre a superfície com os anteparos e compararam os resultados obtidos de velocidade da fase líquida e a espessura máxima do filme com os resultados experimentais, encontrando resultados satisfatórios. Após a corroboração do modelo, prosseguiram os estudos fluidodinâmicos com adição de dois e três aparatos que provocam a turbulência. A temperatura média do filme líquido descendente foi determinada após o líquido passar pelos três aparatos que provocam a turbulência em diferentes tempos. Os melhores resultados foram obtidos para distâncias de quinze a vinte vezes o raio do aparato utilizado para provocar a turbulência.

A avaliação do escoamento de um filme líquido descendente escoando sobre três cilindros horizontais, utilizando fluidodinâmica computacional com modelos 2 D e 3 D corroborados com dados experimentais, foi objeto de estudo do grupo Jafar et al. (2010). Este estudo foi desenvolvido com o objetivo de estudar a influência do fluxo de líquido, diâmetro do cilindro e fluxo de calor para reduzir o consumo de energia e água no resfriamento de hortaliças. Desta maneira a utilização da solução numérica permitiu uma investigação detalhada do fluxo e das características de transferência de calor, as quais não estavam disponíveis na literatura.

Kolek et al. (2010), desenvolveram um modelo matemático de um processo de evaporação de um filme líquido descendente de uma solução de água e propilenoglicol sob pressão reduzida utilizando a técnica de CFD. Para interface das fases gasosa e líquida no processo de evaporação foi utilizado um modelo de equilíbrio termodinâmico. O modelo foi utilizado para obtenção e representação de perfis de concentração de água, temperatura, pressão e velocidades das fases líquida e vapor. Com isso obteve-se um gradiente de concentração na fase líquida próxima à interface das fases. A concentração do componente mais volátil é menor na fase líquida do que na fase vapor na região próxima ao evaporador. Observou-se que o gradiente de concentração na fase líquida em determinada seção transversal do evaporador, é maior para valores menores da espessura do filme líquido

descendente. Este gradiente de concentração na fase líquida faz com que um aumento não esperado nos valores de temperatura do líquido, possa levar à degradação de componentes sensíveis presentes na mistura a ser evaporada, dependendo da espessura, velocidade de escoamento e propriedades dos fluidos que compõe o filme líquido descendente.

Dziak e Kubala (2010) e Dziak (2011) estudaram os processos de transferência de calor e massa na evaporação de um filme líquido descendente em um evaporador estático para uma mistura água e álcool isopropílico através de dados experimentais e técnicas de CFD. Uma equação específica para os cálculos dos coeficientes de transferência de calor foi desenvolvida com base nas medições da transferência de calor durante a evaporação do líquido. Para interface entre as fases líquida e gasosa foi utilizado um modelo de equilíbrio termodinâmico. Observou-se também a resistência à transferência de massa na fase líquida durante a evaporação da mistura. Concluiu-se que os valores teóricos obtidos para composição do destilado para mistura binária de álcool isopropílico e água foram bastante diferentes dos valores experimentais, também existe uma resistência à transferência de massa na fase líquida durante a destilação por filme líquido de misturas água e álcool que deve ser levada em consideração para avaliação dos coeficientes de transferência de calor.

Pawar et al. (2012) analisaram o padrão de fluxo de um filme líquido descendente em um evaporador rotativo, o qual está aderido a parede do tubo entre a lâmina rotativa e a parede do evaporador. Esta região apresenta alta taxa de cisalhamento e dissipação da energia cinética. Esta análise foi realizada utilizando-se técnicas de CFD, com um modelo matemático multifásico com superfície livre, considerando as duas fases contínuas em toda geometria, com modelo de turbulência $k-\epsilon$, no estado estacionário e sistema isotérmico. Nos resultados obtidos observaram que os padrões dos perfis de fluxo eram similares independente da natureza da alimentação e a velocidade do rotor. Foram simulados apenas escoamentos com fluidos de baixa viscosidade não encontrando diferenças significativas nos perfis de velocidade radial e axial obtidos com o modelo de turbulência $k-\epsilon$, concluindo-se que o mesmo pode ser utilizado para realização das simulações de escoamento de filmes em evaporadores.

Como é possível perceber, existem diversos trabalhos publicados na literatura que utilizam técnicas de CFD para modelar o processo de destilação por filme líquido descendente de uma mistura ou escoamentos de filmes líquidos descendente sobre superfícies. Isso motivou ainda mais a utilização desta técnica para desenvolver um

sistema de alimentação do processo de destilação por filme líquido descendente, estudar o comportamento do escoamento deste filme sobre as paredes do tubo de destilação e qual é a influência deste sistema sobre a capacidade de separação de misturas com o sistema operando com dois perfis distintos de temperatura (isotérmico e não isotérmico) na superfície evaporante.

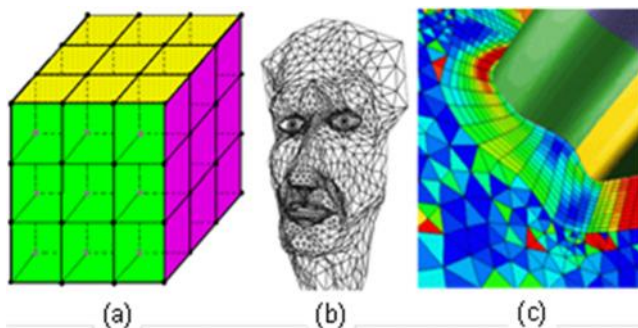
O levantamento bibliográfico permitiu observar as principais vantagens na utilização desta técnica e também serviu como base para identificação dos modelos de transferência de momento, calor, massa e equilíbrio termodinâmico a serem implementados nas simulações do processo de destilação por filme líquido descendente.

2.3.1 Geração de Malhas

Numa modelagem fluidodinâmica, em função das características do problema a ser resolvido e das equações utilizadas para descrever o processo são empregados métodos numéricos baseados em elementos finitos. Tal abordagem requer o emprego de técnicas de discretização as quais são chamadas de geração de malhas.

Os tipos de malha basicamente são definidos como estruturadas, não estruturadas e híbridas, as quais estão ilustradas na Figura 2.9 (a, b e c) respectivamente.

Figura 2.9: Tipos de malhas computacionais de discretização: (a) estruturada, (b) não estruturada e (c) malha híbrida. (Fonte: SANTOS, 2008).



a) Malha Estruturada

A malha estruturada é disposta em um padrão regular, repetido, chamado de bloco, que pode ser quadrilátero quando em 2-D e

elementos hexaédricos regulares em 3-D. Embora a topologia de elemento seja fixa, a grade pode ser moldada para sofrer alterações como torcer ou esticar. Geradores de malhas bem estruturados utilizam equações elípticas sofisticadas para aperfeiçoar a forma da malha automaticamente buscando a uniformidade e a ortogonalidade.

A principal vantagem sobre outros tipos de malhas é que a malha estruturada permite a condensação ou dispersão de pontos nas regiões com gradientes de fluxo da grandeza a estudar. Malhas estruturadas possuem um número constante de células vizinhas, o que após a discretização das equações, dão origem a um sistema de equações algébricas, que possuem uma matriz de coeficientes diagonal. Matrizes diagonais possuem alto índice de esparsidade (elementos nulos na matriz). Dependendo do método de resolução do sistema linear, somente os elementos não-nulos da matriz serão manuseados, influenciando grandemente na taxa de convergência e no tempo de simulação (MALISKA, 2004).

A principal desvantagem das malhas de bloco estruturado é o tempo e a perícia exigidos para se obter uma ótima estrutura de bloco. Algumas geometrias, como os SDA (Sistema de Distribuição de Alimentação), não comportam formatos de blocos estruturados.

b) Malha Não-Estruturada

A malha não-estruturada distribui os elementos de maneira aleatória, sem apresentar um padrão repetido. Estes tipos de grade geralmente utilizam elementos triangulares em 2-D e tetraédricos em 3-D, porém atualmente já existem códigos capazes de gerar elementos hexaédricos não-estruturados em 3-D. A conectividade das malhas não estruturadas varia ponto a ponto ocorrendo elementos de formas e tamanhos diferentes dentro da malha e assim, podem apresentar vizinhos locais arbitrariamente variados. Em discretizações não estruturadas, podem-se ter diferentes números de vizinhos para cada volume, o que exige métodos mais elaborados para a solução dos sistemas lineares (MALISKA, 2004).

A vantagem de métodos de malha não-estruturada é que eles moldam facilmente as geometrias complexas, por apresentarem número ímpar de pontos de amarração, habilitando a solução destes problemas em um período relativamente curto de tempo.

A principal desvantagem destas malhas é a falta de controle do usuário sobre a disposição da malha, que se limita a definir os limites e tamanhos das células da malha. Além disso, simulações utilizando malhas não-estruturadas demandam mais tempo e memória computacional do que as malhas estruturadas (SANTOS, 2008).

c) Malhas Híbridas

O método de malhas híbridas consiste na utilização simultânea das malhas estruturada e não estruturada em regiões específicas de forma a evidenciar as vantagens individuais de cada uma. O elemento de controle é subdividido em regiões distintas, onde se aplicam elementos de grade estruturada e não estruturada, como mostra a Figura 3.9 - c.

2.4 CONCLUSÕES

Neste capítulo foram apresentados alguns dos principais processos de destilação existentes, com ênfase em processos otimizados energeticamente enfatizando o emprego do processo de destilação por filme líquido descendente. Além de apresentar alguns conceitos sobre a técnica de modelagem utilizando fluidodinâmica computacional, suas vantagens e principais trabalhos que a utilizaram para estudar processos de destilação ditos não convencionais ou escoamento de filme líquido sobre superfície.

Através deste levantamento bibliográfico foram apresentados alguns trabalhos que utilizaram CFD com objetivo de estudar e conhecer quais os principais fenômenos que ocorrem durante a destilação de um filme líquido descendente, como perfis de velocidade e concentração, perfis de temperatura, comportamento da camada de líquido escoando e condições de equilíbrio termodinâmico na interface das fases.

No próximo capítulo apresentam-se os materiais e métodos utilizados no desenvolvimento do sistema de distribuição da alimentação e na implementação do modelo fluidodinâmico para o processo de destilação de filme líquido descendente a pressão atmosférica.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Este capítulo está dividido em duas seções. No item 3.2 serão apresentadas as rotinas utilizadas para desenvolvimento do sistema de distribuição de alimentação (SDA). Esta etapa está subdividida em duas seções, uma experimental e outra em simulações de CFD, com apresentação do modelo matemático implementado com as respectivas condições de contorno. Na segunda seção é apresentado o modelo matemático implementado para realização das simulações com objetivo de estudar a eficiência e influência do SDA desenvolvido sobre a capacidade de separação da destilação por filme líquido descendente operando à pressão atmosférica. Esta etapa também está subdividida em duas seções, a primeira para estudo da capacidade de separação do processo de destilação por filme líquido descendente operando com perfil de temperatura isotérmico e na segunda com o processo operando com um perfil de temperatura não isotérmico.

3.1 INTRODUÇÃO

A partir do levantamento bibliográfico realizado anteriormente, sobre processo de destilação por filme líquido descendente, notou-se a grande influência que o sistema de distribuição da alimentação tem sobre o processo. Por isso, foi realizado um estudo para o desenvolvimento de um SDA capaz de realizar uma distribuição e manutenção adequada do filme líquido descendente nas paredes do tubo de destilação.

Para isso foram realizados testes experimentais em um equipamento de vidro (para facilitar a visualização do escoamento do filme nas paredes do tubo) e em paralelo foram realizadas simulações utilizando a técnica de CFD. Estas simulações foram realizadas utilizando-se um sistema bifásico (água e ar) para simplificar o modelo, pois nesta fase do trabalho o objetivo era analisar o escoamento do filme nas paredes do tubo. A importância destas simulações justifica-se pela obtenção de perfis de velocidade da fase líquida, do número de Reynolds, do comportamento fluidodinâmico do escoamento e espessura do filme líquido descendente, utilizados para complementar os dados experimentais e desta forma obter um amplo estudo sobre o escoamento do filme líquido nas paredes do tubo de destilação.

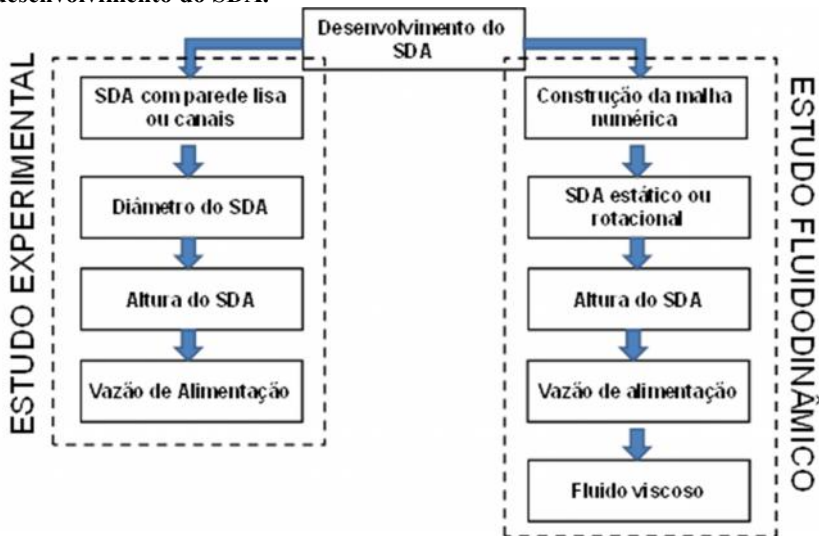
Posteriormente foi implementado um modelo fluidodinâmico para estudar os fenômenos de transferência de momento, calor e massa no processo de destilação por filme líquido descendente para uma

mistura binária (água e etanol) utilizando-se um modelo de equilíbrio termodinâmico na interface das fases e assim avaliar a eficiência do SDA sobre a capacidade de purificação.

3.2 DESENVOLVIMENTO DO SISTEMA DE DISTRIBUIÇÃO DE ALIMENTAÇÃO (SDA)

Para o desenvolvimento do SDA foram seguidas as etapas apresentadas na representação esquemática em forma de diagrama de blocos da Figura 3.1.

Figura 3.1: Representação esquemática geral em forma de diagrama de blocos, com organização da metodologia empregada para o desenvolvimento do SDA.



A metodologia adotada para o desenvolvimento do SDA utiliza dados experimentais e um estudo fluidodinâmico das características do escoamento do filme líquido descendente sobre a parede do tubo de destilação.

3.2.1 Metodologia Experimental – Desenvolvimento do SDA

O projeto do SDA partiu da definição do projeto da unidade de destilação por filme líquido descendente, o qual baseou-se na área de

transferência de calor e massa para separação da mistura a ser destilada e do compromisso entre altura do tubo de destilação e diâmetro do mesmo. Para isso foi utilizado como base de cálculo o projeto da planta piloto de destilação convencional (MARANGONI 2005) instalada no Laboratório de Controle de Processos, no Departamento de Engenharia Química e de Alimentos da Universidade Federal de Santa Catarina. A partir dos dados desta coluna, a área efetiva de troca de calor e massa para o processo de destilação da coluna foi calculada, para a separação da mistura etanol e água. Na Tabela 3.1 são apresentados os dados do projeto desta coluna.

Tabela 3.1: Dados do projeto de coluna de destilação convencional em escala piloto.

Dados do projeto da Coluna	
Diâmetro da Coluna	0,20 m
Espaçamento entre pratos	0,15 m
Tipo de prato	Perfurado Espessura 0,01 m Diâmetro dos furos $3 \cdot 10^{-3}$ m
Holdup	1 L
Altura do vertedouro	0,05 m
Área do prato	0,26 m ²
Fração da área do prato para o vertedouro	0,4
Área de troca	0,312 m ²

Estes cálculos de área de troca foram baseados em equações tradicionais sobre destilação e correspondem à área total de borbulhamento que há na coluna como um todo. Com base neste valor, foram calculados os parâmetros de projeto para o tubo de transferência de calor e massa para o processo de destilação por filme líquido descendente (PERRY e CHILTON 1980).

Foram então analisadas diferentes combinações entre alturas e diâmetros de tubos para destilação por filme líquido descendente baseadas na área de troca calculada. Na Tabela 3.2 são apresentados os principais resultados.

Tabela 3.2: Cálculo da altura e diâmetro correspondente para destilação por filme líquido descendente.

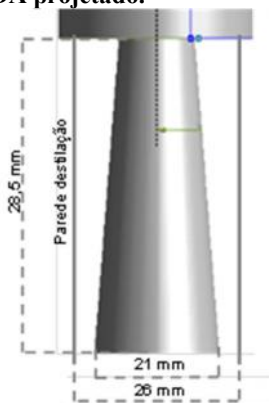
Altura do tubo (m)	Diâmetro (mm)
1,00	100
1,98	50
3,97	25
16,59	6

Observando-se os dados da Tabela 3.2 e analisando os resultados encontrados na literatura (SAIFUTDINOV 2003 e SAIFUTDINOV et al. 1999) que afirmam ser possível a destilação por filme líquido descendente com tubos de diâmetro de 6 a 25 (mm) decidiu-se por utilizar um tubo vertical com 1 (m) de altura e 26 (mm) de diâmetro. Esta a altura e diâmetro do tubo de destilação foram definidas em virtude da necessidade de fixação de algumas variáveis do projeto, para que fosse possível avaliar o comportamento da unidade proposta com estas dimensões para posterior ajustes.

A garantia da uniformidade da distribuição do líquido nas paredes do tubo de destilação é peça fundamental no funcionamento da destilação por filme líquido descendente a pressão atmosférica. Por isso realizou-se um levantamento bibliográfico sobre aparatos desenvolvidos para promover a distribuição do filme líquido descendente nas paredes do destilador (BATISTELLA et al. 1999).

Com base nos trabalhos anteriormente citados e no de Saifutdinov et al. (1999) e Saifutdinov (2003) definiu-se como ponto de partida para o desenvolvimento do SDA um aparato em forma de “cone” com escoamento da fase líquida na parede externa deste e o vapor gerado pela parte interna conforme dimensões apresentadas na Figura 3.2.

Figura 3.2: Detalhe do SDA projetado.



Como base de cálculo para determinação da altura e diâmetro do SDA utilizou-se os trabalhos de Saifutdinov et al. (1999) e Saifutdinov (2003), que ressaltam a importância do compromisso entre a espessura do filme líquido descendente e as velocidades superficiais da fase líquida e vapor, além do trabalho de Stroofer et al. (2007) para avaliar a

distância entre o sistema de distribuição da alimentação e o local de escoamento da fase líquida.

Logo para o dimensionamento inicial do SDA foram assumidas algumas considerações necessárias para o projeto: o escoamento do filme líquido descendente precisa cobrir toda superfície do tubo de destilação a fim de utilizar toda superfície disponível para evaporação do filme, a velocidade superficial da fase líquida descendente não pode ultrapassar os 3 m.s^{-1} , espessura do filme líquido de 3 mm, velocidade máxima da fase vapor $0,3 \text{ m.s}^{-1}$, segundo Saifutdinov et al. (1999) além do mesmo estar localizado no topo da unidade.

A justificativa para iniciar o estudo com um SDA no formato de cone partiu da análise dos sistemas de distribuição encontrados na literatura e a necessidade que se apresentou no presente projeto. A opção pelo formato cone parte inicialmente da decomposição dos vetores velocidade do escoamento do filme líquido descendente sobre o SDA que encontram-se direcionados para parede do tubo de destilação. Outra justificativa foi a necessidade do local para escoamento da fase vapor contra corrente ao filme, assim, com o SDA vazado existe o local para o escoamento e coleta da fase vapor.

Desta maneira assumiu-se como hipóteses iniciais para realização dos experimentos:

- i) escoamento bifásico (água e ar);
- ii) processo isotérmico (temperatura ambiente);
- iii) vazão inicial de alimentação 25 kg.h^{-1} ,

A definição da vazão de alimentação é de extrema importância para garantir o escoamento do filme sobre toda superfície evaporante, respeitando-se o limite de velocidade superficial da fase líquida. Buscando na literatura pesquisas sobre destilação por película, encontrou-se nos trabalhos de Batistella (1996) maiores detalhes operacionais. Nos resultados de simulações de uma destilação por filme líquido descendente o autor trabalha com vazões que chegam a 50 kg.h^{-1} e pressões de 0,001 mmHg. Entretanto, experimentalmente Batistella (1999) na destilação de óleo de palma trabalhou com vazões de 500 kg.h^{-1} a 3 kg.h^{-1} . Sendo assim baseando-se nos trabalhos de Parisotto et al. (2010) e Parisotto et al. (2011) definiu-se como vazão inicial para realização dos testes o valor de 25 kg.h^{-1} a pressão atmosférica.

Apesar de características diferentes entre os sistemas citados, todos os autores reportam a dificuldade em se manter o perfil de temperatura ao longo do tubo de destilação. Nesta proposta de tese foi utilizado um sistema de fornecimento de energia composto por uma câmara de vapor (MANTELLI et al. 2006) que é responsável pela

manutenção do perfil de temperatura desejado, visando eliminar os problemas de manutenção de perfil de temperatura na superfície evaporante.

iv) inicialmente desconsiderou-se o efeito da fase vapor contra corrente sobre o filme líquido descendente.

As características do tubo de vidro, onde foram realizados os testes experimentais para avaliação do escoamento do filme líquido são:

- i) Tubo vertical em vidro de 3 mm de espessura;
- ii) Altura de 1 m e diâmetro interno de 26 mm;
- iii) Bocal para alimentação localizado no topo do tubo de destilação;
- iv) Alimentação realizada por meio de um sistema distribuidor na forma de “cone”.

A metodologia seguida para o desenvolvimento do SDA foi realizada respeitando-se as considerações necessárias e hipóteses assumidas. Inicialmente o sistema de distribuição da alimentação foi construído com parede lisa. A partir deste modelo inicial de SDA foram sendo realizadas alterações com base nos resultados experimentais, simulados e dados da literatura, sempre respeitando as hipóteses assumidas, até chegar ao SDA final.

Logo em seguida da concepção do modelo do SDA, foram realizadas simulações fluidodinâmicas a fim de avaliar a influência da rotação do SDA na formação e manutenção do filme líquido descendente, com base no trabalho de Stroofer et al. (2007).

As características do SDA foram definidas com base em dados da literatura, levando-se em consideração a área total para transferência de calor e massa além da área para escoamento da fase vapor (TAVARES et al. 2009). Estes valores foram definidos com base no conceito de comprimento equivalente que consiste em adicionar à extensão da tubulação, para efeito de cálculo, comprimentos tais que correspondam à mesma perda de carga que causariam as peças especiais existentes na tubulação. Utilizou-se para estes cálculos a formulação de Hazen-Williams e a teoria do comprimento equivalente.

Com isso avaliou-se a eficiência do sistema da distribuição da alimentação (SDA) no que diz respeito a formação de um filme de líquido ao longo do tubo de destilação. Os experimentos para teste do escoamento foram realizados apenas com água, em temperatura ambiente e sem avaliar o contra fluxo da fase vapor na formação do filme líquido descendente. Nas Figuras 3.3 e 3.4 está representada a forma inicial do sistema de distribuição da alimentação utilizado.

Figura 3.3: Vista superior do sistema de distribuição da alimentação.



Figura 3.4: Vista frontal do sistema de distribuição da alimentação.



Esta unidade em vidro foi utilizada para o desenvolvimento do sistema de distribuição da alimentação. Foi projetado um sistema de alimentação, em aço inox 304, liso e em seguida foram feitos canais a superfície onde escoo o líquido para diminuir a velocidade superficial de escoamento e melhorar a distribuição do líquido sobre toda superfície do SDA garantindo a formação de um filme uniforme sobre toda superfície evaporante.

A construção do equipamento em vidro foi essencial para a visualização do escoamento e consequente avaliação da eficiência do sistema de alimentação proposto. Os experimentos realizados no equipamento em vidro seguiram as etapas apresentadas na Figura 3.1.

A opção pelo emprego da água para avaliar o escoamento foi primeiramente pela facilidade de se trabalhar com este fluido, suas características físicas muito semelhantes a uma mistura 10 % etanol e 90 % água, além de simplificar a modelagem matemática e consequentemente a solução da simulação de fluidodinâmica computacional. É importante salientar que a utilização de água para os testes do escoamento não acarretam em nenhum prejuízo do ponto de vista de análise do escoamento do filme líquido sobre a parede do tudo de destilação, por isso foi utilizada esta simplificação no início do projeto.

3.3 MODELAGEM MATEMÁTICA - CFD

O primeiro passo na resolução de problemas envolvendo a fluidodinâmica computacional é a especificação do problema incluindo a geometria, condições de fluxo, e as necessidades da simulação. A geometria pode resultar de medidas de uma configuração existente ou pode ser associada a um novo projeto. 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 (LOURENÇO, 2006 e FONTES et al. 2005).

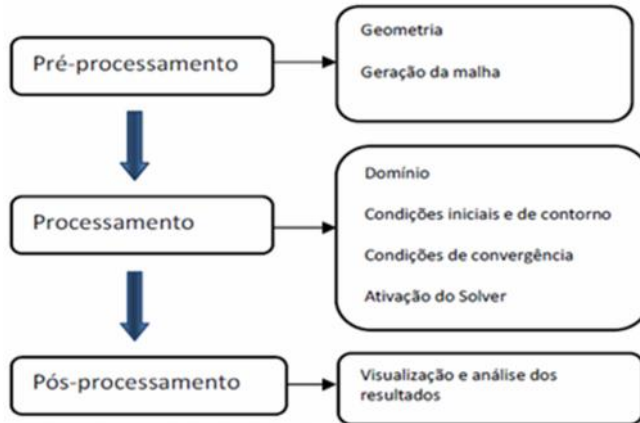
Uma vez que o problema foi especificado, apropriadas equações e condições de contorno devem ser definidas. As equações diferenciais parciais resultantes das leis de conservação referem-se às equações de Navier-Stokes. As equações de equilíbrio utilizadas, quando avaliou-se a eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade, foram baseadas na Lei de Raoult Modificada utilizando os coeficientes de atividade calculados pelo modelo de Wilson, obtidos com a pressão de saturação estimada pela equação de Antoine. A maioria dos aspectos importantes dessas relações é não-linear e, como consequência, não possuem soluções analíticas (MICOV et al. 1997).

Estas equações são resolvidas em volumes de controle, que são escolhidos arbitrariamente, desde que 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 subdividido em três elementos principais:

- i. gerador de geometria,
- ii. gerador de malha,
- iii. pré-processador,
- iv. processador e,
- v. pós-processador.

Na Figura 3.5 está representado de maneira esquemática o processo de realização de simulações utilizando CFD.

Figura 3.5: Etapas para simulação em CFD.



Uma derivação mais detalhada das equações de conservação em suas formas mais adequadas para aplicação em CFD pode ser obtida em Anderson (1995). O modelo matemático desenvolvido considera os fluxos de vapor e líquido em um enfoque euleriano-euleriano.

O fenômeno estudado é o escoamento multifásico, que ocorre no interior do tubo cilíndrico vertical. Assim, a primeira decisão tomada foi como tratar o comportamento de cada uma das fases, contínua ou dispersa. De forma resumida, seria adotar um sistema euleriano-euleriano ou euleriano-lagrangeano. Escolheu-se o sistema euleriano-euleriano, pois com esse nível de formulação pretende-se, inicialmente, observar o equipamento como um todo, pelo fato de ser inviável tratar o problema na escala de comprimento das partículas.

As equações diferenciais parciais possuem uma classificação segundo o comportamento do sistema, e são classificadas em elíptica (associada a problemas estacionários, em estado de equilíbrio) parabólicas e hiperbólicas, evolutivas com características difusiva e convectiva.

As simulações foram realizadas utilizando-se o software comercial ANSYS-CFX 12.0, em uma máquina Intel Core² Quad, CPU Q9300, 2.5 GHz, 8,0 GB RAM, NVIDIA GeForce 8600 GT o que resultou em um tempo computacional médio de 15 dias para cada simulação. A metodologia usada neste trabalho foi rodar as simulações em regime transiente convergida em cada intervalo de tempo. Após verificar a convergência foi necessário apenas uma iteração por meio da ferramenta “Trn STATISTIC” do software comercial ANSYS CFX

12.0, onde se inicia o cálculo da média e desvio padrão. Ou seja, a dinâmica do processo foi avaliada pela média temporal das variáveis.

3.3.1 Geração da malha numérica

A precisão das soluções em CFD é governada pelo número de células da malha. O tempo de simulação e o custo computacional também são dependentes deste refinamento, o que pode tornar os códigos de CFD mais robustos quando bem construída. Sendo assim, a etapa de geração da malha tem se tornado uma das etapas mais importantes e que demanda tempo no pré-processamento de CFD.

Uma malha gerada que respeita as concentrações de células no local requerido pelo problema físico, evitando-se elementos distorcidos e com variação suave de espaçamento entre os elementos, não é uma tarefa fácil de realizar. É necessário, portanto, conhecer os métodos de geração de malhas para escolher o mais adequado ao problema estudado (MALISKA, 2004). É muito importante o refinamento da malha na região de escoamento do filme líquido descendente, pois, este foi um dos principais objetivos deste trabalho.

A busca pela obtenção de uma malha adequada é realizada para diminuir os efeitos de difusão numérica e obtenção de resultados mais acurados. Para o refino da malha foram adicionados elementos prismáticos junto à parede do tubo de destilação por filme líquido descendente. Determinou-se esta região por apresentar maiores gradientes de concentração e de velocidade de escoamento.

A construção da malha foi feita realizando-se a extrusão da mesma do SDA. Quando se opta por usar esta ferramenta de construção, a malha extrudada possui as mesmas características da malha “original”, ou seja, neste caso, formada por prismas e tetraedros. A malha possui refinamento na região de formação do filme líquido descendente (região próxima do SDA), com objetivo de evitar o fenômeno de oscilação numérica e obtenção de resultados confiáveis.

A camada limite cinética se caracteriza pela presença de gradientes de velocidade e tensões de cisalhamento. A camada limite térmica se caracteriza pelos gradientes de temperatura e pela transferência de calor. A camada limite de concentração caracteriza-se pelos gradientes de concentração e pela transferência de espécies químicas.

Inserido neste contexto, as principais manifestações destas camadas limites referem-se ao atrito superficial, a transferência convectiva de calor e a transferência convectiva de massa. Tratando-se

de modelagem, os parâmetros chave das camadas limites são: coeficiente de atrito, coeficiente de transferência convectiva de calor e transferência convectiva de massa.

Observa-se que o estudo e conhecimento dos fenômenos que acontecem na camada limite são de extrema importância e indispensáveis para o completo entendimento do processo de destilação por filme líquido descendente. Por isso, a malha numérica construída para ser utilizada nas simulações de fluidodinâmica computacional apresentam um elevado grau de refino na região onde escoo o filme líquido descendente.

Os passos para construção da malha numérica foram:

- i) construção tridimensional do domínio físico a ser simulado;
- ii) geração da malha no SDA;
- iii) geração da malha na parede do tubo de destilação;
- iv) estudo e refino da malha para obtenção dos resultados.

Os principais parâmetros levados em consideração para o desenvolvimento da malha foram:

- i) tamanho da malha: onde foram analisados o número de volumes e nós que compõe a malha e qual sua influência sobre o resultado final da simulação, principalmente no que diz respeito ao fenômeno de difusão numérica;
- ii) erro residual médio (RSM): este parâmetro foi definido como critério de convergência, com valor de 10^{-5} baseado nos trabalhos de Kolek et al (2010) e Dziak e Kubala (2010);
- iii) custo computacional: qual a necessidade computacional para realização da simulação e uso de memória RAM e processador;
- iv) tempo de simulação: qual o tempo médio de simulação para um determinado tempo real de experimento.

A partir da análise destas variáveis foi definida qual a malha numérica que apresentou os melhores resultados com menor esforço e tempo computacional, sendo esta a utilizada para realização de todas as simulações.

3.3.2 Modelo de escoamento turbulento Shear Stress Transport (SST)

O modelo SST foi criado por Menter. É um modelo mais completo em relação aos modelos $k-\varepsilon$ e $k-\omega$, pois introduz uma nova equação, a do transporte de tensões de cisalhamento turbulentas. O principal problema do modelo $k-\omega$ é uma forte sensibilidade da solução para valores de ω fora da camada limite (MENTER, 1992).

Afim de resolver este problema, uma combinação do modelo $k-\omega$ próximo à superfície e do modelo $k-\varepsilon$ na região afastada foi proposto, levando ao desenvolvimento por Menter (1992) do modelo SST (Shear-Stress Transport – Transporte de tensão cisalhante). O modelo SST consiste em uma transformação do modelo $k-\varepsilon$ para uma formulação $k-\omega$ e uma subsequente adição das equações correspondentes. Desta forma, o modelo SST também é capaz de rastrear o comportamento do escoamento envolvendo tanto as grandes quanto as pequenas escalas de turbulência num escoamento. O modelo $k-\omega$ é (SKLAVOUNOS e RIGAS, 2004) mais recomendado em simulações onde se requer uma grande precisão das condições nas diferentes camadas do escoamento. Assim, na camada limite o modelo $k-\omega$ é usado e, na borda e fora da camada limite, o modelo $k-\varepsilon$ padrão é usado. Após manipulação matemática, as equações finais do modelo para k e ω são:

Equações finais do modelo

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + (\rho U k) = \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla^2 k \right] + P_k - \beta \cdot \rho \cdot k \cdot \omega \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + (\rho U \omega) = \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\omega} \right) \nabla^2 \omega \right] + (1 - F_1) \frac{\rho \cdot \omega \cdot k}{\kappa} - \beta' \cdot \rho \cdot \omega^2 \quad (3.2)$$

sendo U o vetor velocidade em $m \cdot s^{-1}$, μ a viscosidade dinâmica em $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$, σ_k e σ_ω são constantes adimensionais das equações com valores iguais a 2, P_k é a produção de turbulência devido às forças viscosas em $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-3}$, e α , β e β' são constantes empíricas adimensionais.

O último termo do lado direito da equação 3.2 é conhecido como termo de difusão cruzada. Menter (1992) demonstrou que a introdução deste termo na equação ω diminui a dependência da solução em relação ao valor de ω na corrente livre. O efeito principal deste termo é o aumento da produção de ω , e o conseqüente aumento da dissipação de κ . Na equação 3.2 o termo de difusão cruzada é multiplicado pela função peso, ou função de mistura, F_1 , esta, por sua vez, baseada na distância para a parede mais próxima, e definida como:

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4) \quad (3.3)$$

$$arg^1 = MINIMO \left[MÁXIMO \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta\omega y}, \frac{5C_D v}{y^2\omega} \right), \frac{4f_f}{CD_{k\omega}\sigma\omega y^2} \right] \quad (3.4)$$

Onde y é a distância para a superfície mais próxima e $CD_{k\omega}$ é a parte positiva do termo de difusão cruzada, expressa pela equação 3.5.

$$CD_{k\omega} = MÁXIMO \left(2\rho \frac{1}{\sigma\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right) \quad (3.5)$$

A principal característica do modelo SST é a presença de um limite superior para a tensão cisalhante turbulenta na camada limite. Isto evita níveis excessivos de tensão cisalhante, que é um problema presente em outros modelos baseados na hipótese de viscosidade turbulenta. A definição da viscosidade turbulenta, segundo a hipótese de Bradshaw, assume que o tensor de Reynolds é proporcional à energia cinética turbulenta, sendo dada por:

$$\mu_T = \rho \frac{\alpha_1 K}{\max(\alpha_1\omega, S F_2)} \quad (3.6)$$

Sendo α_1 uma constante com valor típico de 0,31, S é o modulo da taxa de cisalhamento média, S_{ij} definido pelas equações 3.7 e 3.8, e F_2 é uma função de mistura para a viscosidade turbulenta no modelo SST, definida pelas equações 3.9 e 3.10.

$$S = \sqrt{2s_{ij}s_{ij}} \quad (3.7)$$

$$s_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^i}{\partial x_j} + \frac{\partial u^j}{\partial x_i} \right) \quad (3.8)$$

$$F_2 = \tanh(arg^2) \quad (3.9)$$

$$arg^2 = MÁXIMO \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta\omega y}, \frac{5C_D v}{y^2\omega} \right) \quad (3.10)$$

No modelo SST, a produção da energia cinética turbulenta é limitada a fim de prevenir o acúmulo de turbulência na região de estagnação (Equação 3.11):

$$f_{\kappa} = \min(\beta, \frac{1}{\sigma_{\kappa}}) \quad (3.11)$$

Seja ϕ o conjunto de constantes de fechamento para o modelo SST, e sejam ϕ_1 e ϕ_2 as constantes dos modelo κ - ω padrão e κ - ϵ , respectivamente. As constantes ϕ são então calculadas utilizando-se a função de mistura entre as constantes de ϕ_1 (κ - ω) e ϕ_2 (κ - ϵ), as quais podem ser visualizadas na Tabela 3.3, da seguinte forma:

$$\phi = \frac{f_1 \phi_1 + f_2 \phi_2}{f_1 + f_2} \quad (3.12)$$

Tabela 3.3: Coeficientes de fechamento do modelo SST.

	β	B'	σ_{κ}	σ_{ω}	σ_d	α
ϕ_1 (κ - ω)	0,075	0,09	0,5	0,5	0,856	5/9
ϕ_2 (κ - ϵ)	0,0828	0,09	1,0	0,856	0,856	0,44

Um fenômeno importante é a separação do escoamento da superfície quando sujeito a um gradiente de pressão adverso. A separação tem grande efeito na turbulência próxima da parede (MENTER 1992). O modelo SST leva em consideração o transporte das tensões turbulentas e fornece boas previsões do início e da quantidade de separação do fluxo sob gradientes adversos de pressão, fato demonstrado por Bardina et al. (1997) para vários casos.

3.3.3 Condições de contorno – Simulações do escoamento com água/ar

Baseado nos trabalhos de Assad e Lampinen (2002), Xubin et al. (2005) e Mayor et al. (2007), as hipóteses assumidas para o modelo foram:

- 1) propriedades físicas do líquido e do vapor constantes,
- 2) a corrente gasosa é composta unicamente de vapor,
- 3) temperatura constante na parede do tubo de destilação,
- 4) pela análise do número de Weber para este sistema bifásico as forças viscosas podem ser desprezadas,
- 5) fluxo estável do líquido,
- 6) efeitos advectivos no filme são desprezados,

Para realização das simulações foram utilizadas as condições de contorno do tipo Neumann, sendo:

- i) Entrada de Líquido: condição de entrada de líquido com fluxo normal a superfície. Entra somente líquido;

- ii) Saída de líquido: no limite de saída do líquido foram especificadas as pressões com as frações mássicas; as especificações assumem que líquido ou vapor deixam a fronteira da geometria de simulação;
- iii) Saída de vapor: abertura na parte superior do sistema de distribuição de alimentação, condição de aberto, ou seja, ela permite que vapor ou líquido, entre ou saia do topo do sistema de distribuição de alimentação, o que determina a entrada ou saída é a equalização da pressão;
- iv) Parede do SDA e tubo de destilação: foi assumida a condição "não-aderente" ou "não deslizamento".

Na Tabela 3.4 é possível observar as condições de contorno assumidas para solução numérica utilizando fluidodinâmica computacional. Estas condições de contorno foram utilizadas para realização das simulações multifásicas (água e ar), com o objetivo de estudar o escoamento do filme líquido descendente nas paredes do tubo de destilação durante o desenvolvimento do SDA.

Tabela 3.4: Condições de contorno utilizadas nas simulações de CFD para desenvolvimento do SDA.

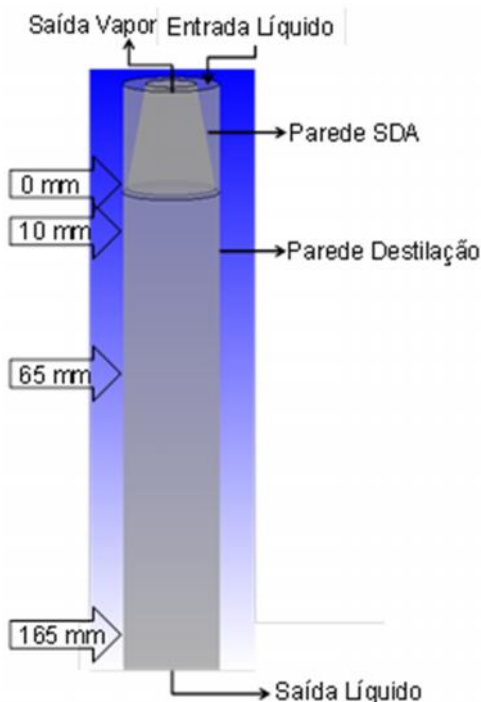
Posição	Tipo	Detalhe	Situação
Entrada Líquido	Inlet	Subsônico Taxa de fluxo de Massa Direção de fluxo normal Turbulência média (5%) Temperatura estática	Constante 25°C
Saída Líquido	Outlet	Pressão estática Subsônico	
Parede SDA	Wall	Sem deslizamento Parede lisa Transferência de calor	Isotérmico
Saída Vapor	Open	Subsônico Direção de fluxo normal Turbulência média (5%)	
Parede Destilação	Wall	Sem deslizamento Parede lisa Transferência de calor	Isotérmico

O valor das variáveis de interesse, como a fração mássica de líquido e a velocidade superficial da água, foram investigados em três níveis diferentes de altura no tubo de destilação. Estas alturas foram definidas com base no estudo preliminar do escoamento. Percebeu-se que a partir de 165 mm abaixo do SDA o escoamento apresentava-se completamente desenvolvido. As alturas de 10 e 65 mm foram definidas devido a necessidade de conhecimento das variáveis de interesse próximas a região de formação no filme líquido descendente (próximas ao SDA). Para esta finalidade foram criadas linhas radiais no tubo de

destilação nestes três níveis de altura, avaliando-se 1000 pontos ao longo do raio.

Considerando a base inferior do sistema de distribuição de alimentação como zero (0) as linhas foram traçadas a 10, 65 e 165 mm. Os estudos foram centralizados na análise dos perfis de fração volumétrica de água, espessura do filme de líquido, velocidade superficial do líquido e formação de pontos secos ao longo do tubo de destilação. Na Figura 3.6 estão demonstrados os locais de análise das variáveis de interesse e as condições de contorno.

Figura 3.6: Locais onde foram estudadas as variáveis e assumidas as condições de contorno.

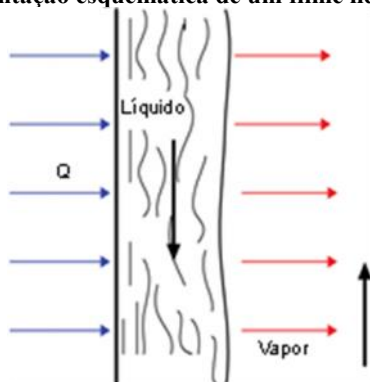


3.3.4 Avaliação da eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da coluna de destilação por filme líquido descendente

Neste item está descrita a metodologia seguida para avaliação da eficiência do SDA desenvolvido sobre a capacidade de separação da coluna de destilação por filme líquido descendente, a partir de

simulações utilizando a técnica de fluidodinâmica computacional. Na Figura 3.7 pode ser visualizada a representação esquemática do problema físico a ser estudado e modelado.

Figura 3.7: Representação esquemática de um filme líquido descendente.



Após a concepção do SDA para o processo de destilação por filme líquido descendente, utilizando-se um sistema isotérmico apenas com água e ar, iniciou-se o estudo da influência deste sistema sobre o processo de separação com a unidade operando com dois perfis diferentes de temperatura na parede do tubo de destilação. Para o estudo da eficiência do SDA no processo de separação implementou-se os modelos de transferência de massa e energia, assumindo-se condições de equilíbrio na interface das fases líquidas e gasosas, condição esta baseada nos trabalhos de Henley (1981), Xu e Khoo (2008), Kolek et al. (2010); Dziak e Kubala (2010), Dziak (2011) e Nars et al. (2011) (a e b).

3.3.5 Modelagem do equilíbrio líquido-vapor

Quando fases com diferentes composições são colocadas em contato, e quando elas não estão em equilíbrio, a transferência de massa entre as fases altera sua composição. Tanto a extensão da mudança como a taxa de transferência de massa depende do afastamento do sistema do equilíbrio. Por isso, para o tratamento quantitativo da transferência de massa, temperatura (T), pressão (P) e composições das fases no equilíbrio precisam ser conhecidas.

O equilíbrio é uma condição “pseudo-estática” na qual não ocorrem gradientes das propriedades macroscópicas de um sistema com o tempo, implicando numa igualdade de todos os potenciais que podem

causar mudanças. No entanto, no nível microscópico as condições não são estáticas, as moléculas que constituem uma fase em um determinado instante não são as mesmas que ocuparão esta mesma fase mais tarde. Moléculas com velocidades suficientemente altas, posicionadas na proximidade da interface superam as forças superficiais e passam para outra fase. Contudo, a taxa média de passagem das moléculas é a mesma nas duas direções, ocorrendo um equilíbrio dinâmico de transferência líquida de matéria entre as fases.

3.3.5.1 Lei de Raoult Modificada

A Lei Raoult Modificada é obtida quando um (γ_i) coeficiente de atividade é inserido na Lei de Raoult, equação 3.13.

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{\text{sat}} \quad (3.13)$$

Coefficientes de atividade são funções da temperatura e da composição da fase líquida. Para o modelo de equilíbrio interfacial, utilizou-se a Lei de Raoult modificada com uso dos coeficientes de atividade. Estes foram calculados com auxílio dos valores apresentados na Tabela 3.5.

Tabela 3.5: Propriedades do etanol e água (SMITH 1995).

Água	Etanol
$A_1 = 16,3872$	$A_2 = 16,8958$
$B_1 = 3885,70 \text{ (K)}$	$B_2 = 3795,17 \text{ (K)}$
$C_1 = 230,170 \text{ (K)}$	$C_2 = 230,918 \text{ (K)}$
$\rho_1 = 998,5 \text{ (kg m}^{-3}\text{)}$	$\rho_2 = 789 \text{ (kg m}^{-3}\text{)}$
$V_1 = 18,07 \text{ (cm}^3 \text{ mol}^{-1}\text{)}$	$V_2 = 76,92 \text{ (cm}^3 \text{ mol}^{-1}\text{)}$

Na equação 3.14 está apresentada a equação de Antoine utilizada para calcular a pressão de vapor de cada um dos componentes puros em função da temperatura.

$$P_i^{\text{sat}} = \exp \left(A - \frac{B}{T+C} \right) \quad (3.14)$$

Wilson apresentou em 1964 um modelo relacionando a energia de Gibbs em excesso com as frações molares, baseado em considerações moleculares, usando o conceito da composição local. Basicamente, o conceito de composição local estabelece que a composição do sistema nas vizinhanças de uma molécula não é igual à composição global do sistema, por causa das forças intermoleculares. As equações 3.17 e 3.18 para o cálculo dos coeficientes de atividade são funções dos parâmetros

binários $\Lambda_{12}(T)$ e $\Lambda_{21}(T)$. Estes parâmetros binários estão relacionados com os volumes molares dos líquidos puros e as diferenças de energia características das interações moleculares. Os dados auxiliares para o cálculo dos coeficientes de atividade a partir da equação de Wilson são apresentados na Tabela 3.6.

Tabela 3.6: Parâmetros da equação de Wilson para mistura etanol e água (SMITH 1995).

Parâmetros da Equação de Wilson	
$a_{12}=437,98$ (cal mol ⁻¹)	$a_{21}=1238$ (cal mol ⁻¹)

$$\Lambda_{12}(T) = \frac{V_2}{V_1} \cdot \exp\left(\frac{-a_{12}}{R \cdot T}\right) \quad (3.15)$$

$$\Lambda_{21}(T) = \frac{V_1}{V_2} \cdot \exp\left(\frac{-a_{21}}{R \cdot T}\right) \quad (3.16)$$

$$\gamma_1(x_1, x_2, T) = \exp\left[-\ln(x_1 + x_2 \cdot \Lambda_{12}(T)) - x_2 \cdot \left(\frac{\Lambda_{12}(T)}{x_1 + x_2 \cdot \Lambda_{12}(T)} - \frac{\Lambda_{21}(T)}{x_2 + x_1 \cdot \Lambda_{21}(T)}\right)\right] \quad (3.17)$$

$$\gamma_2(x_1, x_2, T) = \exp\left[-\ln(x_2 + x_1 \cdot \Lambda_{21}(T)) - x_1 \cdot \left(\frac{\Lambda_{12}(T)}{x_1 + x_2 \cdot \Lambda_{12}(T)} - \frac{\Lambda_{21}(T)}{x_2 + x_1 \cdot \Lambda_{21}(T)}\right)\right] \quad (3.18)$$

Onde γ_1 e γ_2 são energias de interação entre as moléculas. Num sentido estrito, as diferenças entre as energias devem ser consideradas como dependentes da temperatura, mas em muitos casos esta dependência pode ser desprezada sem introduzir erros muito significativos. Se essas diferenças são consideradas independentes da temperatura, pelo menos ao longo de pequenos intervalos, a equação de Wilson proporciona não apenas uma expressão para os coeficientes de atividade em função da composição, mas também uma estimativa da variação dos coeficientes de atividade com a temperatura. Isto é uma grande vantagem em cálculos isobáricos, onde a temperatura varia com a composição.

A equação de Wilson apresenta também como vantagem o fato de ser facilmente estendida para soluções multicomponentes, mas apresenta também duas desvantagens: a primeira, menos importante, não são

aplicáveis aos sistemas onde os logaritmos dos coeficientes de atividade. No entanto, esses sistemas não são comuns. A segunda, um pouco mais séria, é que o modelo de Wilson não é capaz de prever miscibilidade limitada, ou seja, não é útil para cálculos de equilíbrio líquido-líquido.

Fazendo-se uso dos coeficientes de atividade calculados pelas equações 3.17 e 3.18, utilizou-se a relação de equilíbrio entre as fases líquida e gasosa definidas nas equações 3.19 e 3.20, para um sistema binário (água/álcool).

$$y_1 \cdot P = x_1 \cdot \gamma_1(x_1, x_2, T) \cdot P^{\text{sat}1}(T) \quad (3.19)$$

$$y_2 \cdot P = x_2 \cdot \gamma_2(x_1, x_2, T) \cdot P^{\text{sat}2}(T) \quad (3.20)$$

Vale lembrar que o desenvolvimento do SDA foi feito utilizando-se apenas água com um sistema isotérmico (298,15 K), sem levar em consideração os efeitos causados pelo escoamento contra corrente da fase vapor gerada pela evaporação do filme líquido descendente, como também os perfis de temperatura e pressão existentes no interior da coluna de destilação.

Por isso, após a construção do SDA realizada com base nos resultados experimentais e simulados, o próximo passo foi testar a eficiência deste sistema de alimentação no processo de destilação por filme líquido descendente a pressão atmosférica com a unidade operando com dois perfis diferentes de temperatura na superfície evaporante, isotérmico e não isotérmico, avaliando-se a capacidade de separação da unidade e o consumo energético.

Para avaliar a eficiência do SDA sobre o processo de destilação por filme líquido descendente à pressão atmosférica, através da realização de simulações de fluidodinâmica computacional, foram assumidas as condições de contorno apresentadas na Tabela (3.7). Estas condições de contorno, para realização das simulações fluidodinâmicas, foram assumidas com base nas condições utilizadas para realização dos experimentos e baseados em Senhaji et al. (2009) e Nars et al. (2011) (a).

Tabela 3.7: Condições de contorno utilizadas nas simulações de CFD para avaliar eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente.

Posição	Tipo	Detalhe	Situação
Entrada Líquido	Inlet	Subsônico	Variável
		Taxa de fluxo de Massa Direção de fluxo normal Turbulência média (5%) Temperatura estática Composição	
Saída Líquido	Outlet	Pressão estática Subsônico	Variável
Parede SDA	Wall	Sem deslizamento Parede lisa Transferência de calor	Isotérmico
Saída Vapor	Open	Subsônico Direção de fluxo normal Turbulência média (5%)	
Parede Destilação	Wall	Sem Deslizamento	
		Parede lisa	Isotérmico
		Transferência de calor	Não Isotérmico

Para estudo e solução dos processos de transferência de calor, massa, equilíbrio de fases e turbulência foram assumidos os modelos apresentados na Tabela 3.8.

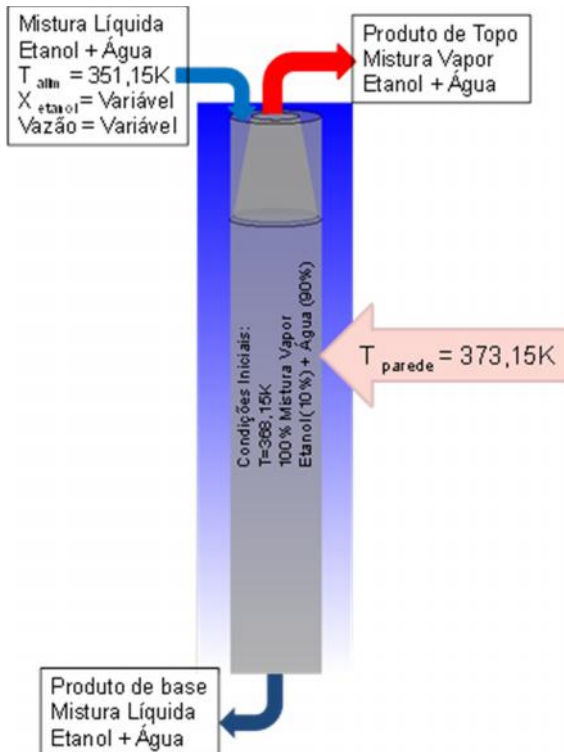
Tabela 3.8: Modelos utilizados para estudo dos fenômenos envolvidos durante a destilação por filme líquido descendente.

Fenômeno	Modelo
Transferência de calor	Total Energy
Transferência de massa	Homogeneous Models
Equilíbrio de fases	Raoult Modificado
Turbulência	Shear Stress Transport

Na unidade de destilação por filme líquido descendente existem duas maneiras distintas de operação no que diz respeito ao perfil de temperatura na parede de destilação para evaporação do filme líquido descendente. Uma maneira é a manutenção radial e longitudinal da temperatura da parede do tubo de destilação para evaporação do filme descendente, chamada de condição de operação com perfil de temperatura isotérmico. Na Figura 3.8 podem ser observadas as principais condições de operação assumidas para realização das simulações da unidade de destilação por filme líquido descendente operando na condição isotérmica. A temperatura de parede 373,15 K, foi definida com base na temperatura de bolha da mistura etanol e água e a

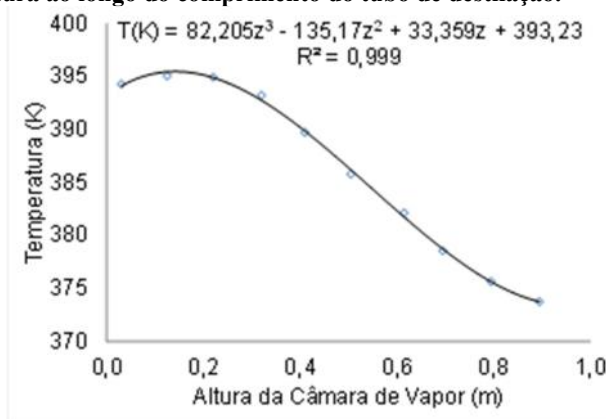
temperatura da alimentação foi definida com base nos trabalhos de Marangoni (2005) e Werle (2007), utilizando-se 351,15 K mantendo-se a corrente de alimentação na condição de líquido subresfriado.

Figura 3.8: Condições iniciais e de contorno assumidas para realização das simulações com a unidade operando na condição de perfil de temperatura isotérmico.



A temperatura da parede do tubo de destilação é função da altura deste tubo ($T=T(z)$). Na Figura 3.9 pode ser observado o perfil de temperatura obtido ao longo do comprimento do tubo destilação, tomando como base ($z = 0 \text{ cm}$) a saída dos produtos de base até o topo da coluna ($z = 1 \text{ m}$) onde ocorre a alimentação da coluna e saída dos produtos de topo a partir da realização de um estudo preliminar.

Figura 3.9: Regressão polinomial realizada para obtenção do perfil de temperatura ao longo do comprimento do tubo de destilação.



O perfil de temperatura na superfície evaporante está representado por um polinômio de terceiro grau, ajustado a partir de dados experimentais com um coeficiente de regressão quadrática igual a $R^2=0,999$, como pode ser visualizado na equação 3.21.

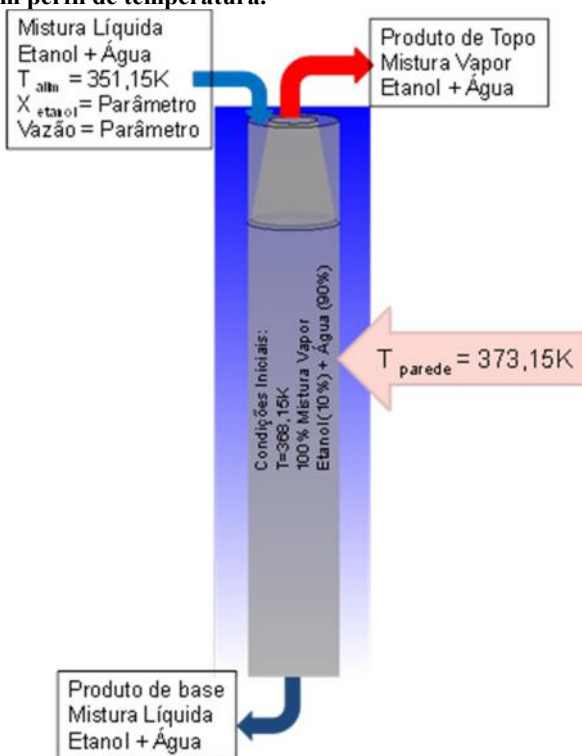
$$T(K) = 82,205z^3 - 135,17z^2 + 33,359z + 393,23 \quad (3.21)$$

onde z é o comprimento do tubo de destilação em centímetros.

A representação esquemática das condições de contorno utilizada para realização das simulações fluidodinâmicas podem ser observadas na Figura 3.10.

Após a definição dos modelos e condições de contorno foram feitas as validações dos modelos fluidodinâmicos, para os dois modos de fornecimento de energia para a unidade (isotérmico e não isotérmico). Para validação dos modelos foram utilizadas as variáveis experimentais monitoradas durante a realização dos experimentos, fração mássica de etanol no topo, vazão volumétrica no topo, temperatura no topo, temperatura na base. Os valores utilizados para estas foram obtidos na condição de operação no estado estacionário do processo de destilação por filme líquido descendente, a partir da estabilização da vazão de produto de topo, além das temperaturas envolvidas no processo.

Figura 3.10: Condições de contorno e iniciais assumidas para realização das simulações com a unidade operando na condição de fornecimento de energia com perfil de temperatura.



A avaliação na formação e manutenção do escoamento do filme líquido descendente sobre toda superfície evaporante com o SDA desenvolvido é de extrema importância para a eficiência de separação e energética da unidade de destilação à pressão atmosférica. Por isso foi realizado um conjunto de simulações avaliando-se estas variáveis para verificar a eficiência do SDA, pois em um processo de destilação por filme, a formação e manutenção do filme têm importância e efeito direto sobre as eficiências de separação e energéticas.

3.4 CONCLUSÕES

Foi apresentada neste capítulo a caracterização do sistema de distribuição da alimentação, a obtenção dos dados experimentais para

concepção deste, os quais foram utilizados para comparação e complementação dos dados obtidos a partir de simulações fluidodinâmicas.

Neste trabalho, foi utilizado o software comercial ANSYS CFX 12.0 como ferramenta para realização dos estudos de CFD. A utilização de softwares comerciais para simulação de processos representa um grande avanço para a pesquisa e ampara o setor industrial, devido a rapidez e facilidade de manipulação das variáveis, permitindo assim, a execução de testes sem a utilização de plantas reais. O software ANSYS CFX apresentou-se adequado para realização das simulações e estudos do escoamento do filme líquido descendente como também para estudo dos fenômenos de transferência de calor, massa, turbulência e equilíbrio que ocorrem no processo de destilação por filme líquido descendente.

Em relação ao procedimento apresentado buscou-se esclarecer ao leitor a metodologia empregada, detalhando os critérios adotados e a fundamentação teórica nas quais as decisões sobre determinados modelos implementados foram baseadas, buscando oferecer ferramentas suficientes para o entendimento e avaliação do referido trabalho.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos durante o desenvolvimento do sistema de distribuição da alimentação (SDA) envolvendo resultados experimentais e simulados (CFD). Os resultados experimentais foram obtidos em unidade de vidro para visualização do escoamento do filme líquido descendente, realizados à temperatura ambiente, utilizando água para avaliação do escoamento.

As obtenções dos resultados de fluidodinâmica computacional iniciaram com a realização de estudos e simulações para desenvolvimento e construção da malha numérica que foi utilizada para realização das simulações. Após a construção da malha partiu-se para obtenção dos resultados de filme líquido descendente com objetivo de desenvolver um SDA que possibilite o escoamento do líquido sobre toda superfície evaporante do tubo de destilação.

A análise do escoamento do filme líquido descendente para o desenvolvimento do SDA através de fluidodinâmica computacional foi realizada utilizando-se a malha numérica desenvolvida anteriormente, com um sistema multifásico utilizando-se água e ar, fase líquida e gasosa respectivamente, tendo em vista que as características físicas do fluido assemelha-se a uma mistura de etanol água, com fração volumétrica de 10% de etanol.

O estudo fluidodinâmico possibilita o conhecimento de diversas variáveis do escoamento que não podem ser obtidos facilmente a partir de dados experimentais. Como exemplos podem ser citados a espessura do filme, os perfis de velocidade das fases líquida e gasosa, regime de escoamento e perfis de temperatura quando existirem.

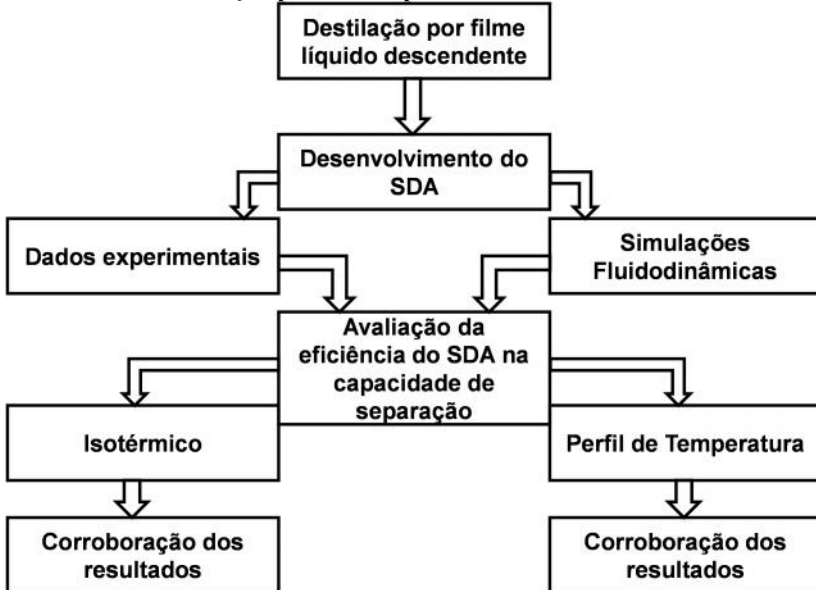
Com o SDA desenvolvido, foram realizados estudos fluidodinâmicos de escoamento de filme descendente para um fluido viscoso, para avaliar o comportamento deste escoamento sobre o SDA e a superfície evaporante do tubo de destilação, avaliando-se a eficiência do sistema de distribuição de alimentação desenvolvido.

São apresentados os resultados obtidos a partir de simulações de fluidodinâmica computacional para avaliação da eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade de destilação. Inicialmente os modelos fluidodinâmicos implementados foram comparados com dados experimentais para os dois modos de operação da unidade de destilação por filme líquido descendente, aqui denominado de: perfil de temperatura isotérmico e não isotérmico.

Na Figura 4.1 é mostrada a sequência da apresentação dos resultados deste projeto, ilustrando as principais etapas para o

desenvolvimento do SDA e posterior avaliação da eficiência deste sobre a capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente.

Figura 4.1: Diagrama esquemático para ilustração da sequência da apresentação dos resultados com as etapas do desenvolvimento do SDA e posterior avaliação da eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descende.



4.1 DESENVOLVIMENTO DO SDA

A escolha deste sistema justifica-se pelo fato de que os encontrados na literatura são baseados em pratos rotativos (LAVIN 1988), pratos vazados rotativos (BOSMANS et al. 2001 e BOSMANS e UIJEN 2003), sistema de distribuição do filme com raspadores (STROEFER et al. 2007), os quais apresentam para esta aplicação algumas limitações ou dificuldades operacionais como: funcionam com sistema rotativos, não apresentam um compromisso entre sistema de distribuição de alimentação e velocidades superficiais das fases líquida e vapor.

Por isso o SDA foi projetado com objetivo de possuir vantagens como, ser estático, garantir a formação e manutenção do filme líquido

descendente sobre toda superfície evaporante, possuir uma região de escoamento e coleta da fase vapor no topo da unidade, garantir que as velocidades superficiais das fases líquida e vapor não ultrapassem os limites sugeridos pela literatura (SAIFUTDINOV et al. 1999).

Em paralelo as análises de CFD para definição do sistema de distribuição de alimentação (SDA), foram realizados testes experimentais para avaliar a efetividade do sistema de distribuição da alimentação e corroboração das simulações.

4.1.1 Sistema de distribuição de alimentação: Liso versus Canais

Inicialmente para obtenção do SDA construiu-se uma peça metálica com superfície lisa em formato de “cone” Figura 4.2-a, com a qual se obteve um escoamento de filme líquido nas paredes do tudo de destilação cobrindo apenas 38% da sua área total Figura 4.3. Este valor foi obtido pela visualização do escoamento no tubo de destilação em vidro (1 m) e determinado com auxílio de fita métrica. Sendo determinado pela distância da alimentação da unidade até a altura em que o filme líquido iniciava o escoamento por um caminho preferencial deixando de cobrir toda área da superfície evaporante.

Para avaliação do escoamento do filme líquido descendente utilizou-se como vazão de alimentação o valor de 25 kg.h^{-1} , sendo necessário a manutenção do compromisso da vazão de alimentação, o escoamento do filme líquido sobre 100 % superfície evaporante, a velocidade superficial da fase líquida (SAIFUTDINOV et al. 1999) e o tempo de contato do filme líquido com a superfície, para possibilitar a melhor eficiência de separação e energética.

Figura 4.2: Modelos do SDA previamente usados (a) superfície livre (b) superfície com pequenos canais.



(a)



(b)

Figura 4.3: Filme líquido descendente nas paredes do tubo de destilação para SDA liso.

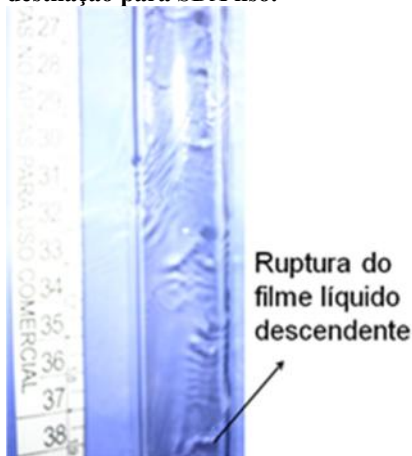


Figura 4.4: Filme líquido descendente nas paredes do tubo de destilação para SDA com canais.



Para aumentar a área da superfície evaporante coberta pelo filme líquido descendente foram feitos pequenos canais na superfície do SDA Figura 4.2-b, com o objetivo de diminuir a velocidade superficial de escoamento do líquido, homogeneizar sua distribuição sobre a superfície SDA e também na parede do tubo de destilação. Estes canais foram feitos de maneira aleatória. Com a realização desta modificação na superfície de escoamento do SDA obteve-se um escoamento de filme líquido descendente sobre 74 % (obtido pela visualização do escoamento no tubo de vidro) da parede do tubo de destilação (Figura 4.4) evidenciando o melhor resultado obtido, porém distante do objetivo de cobrir em 100 % da superfície, como se assumiu no início do projeto do SDA, através de considerações e hipóteses.

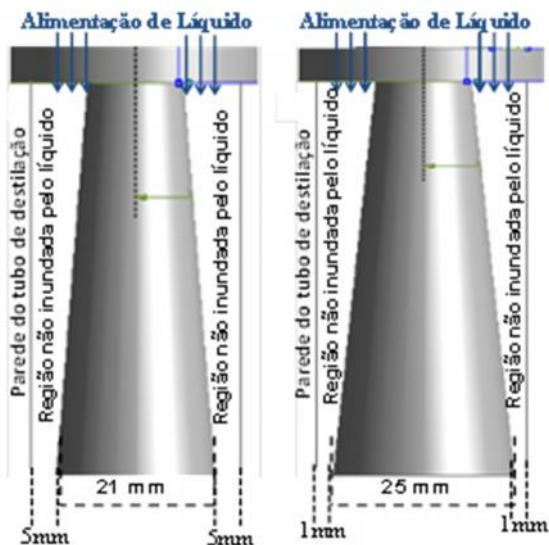
A partir da obtenção dos resultados do escoamento do filme líquido descendente sobre a superfície evaporante com a presença dos canais no SDA os próximos passos do projeto foram realizados sempre estes canais pois melhoraram a eficiência de distribuição e manutenção do filme líquido. A fim de alcançar as considerações assumidas no início do projeto do SDA e com base nos resultados experimentais e simulados somadas as informações obtidas na literatura, novas alterações foram propostas para aumentar a área da superfície evaporante coberta pelo filme líquido descendente. A próxima variável estudada no projeto foi o diâmetro da base do SDA.

4.1.2 Avaliação do diâmetro do SDA

O sistema de distribuição de alimentação utilizado nos testes anteriores possuía um diâmetro na base de 21 mm (Figura 4.5) e não apresentou resultados superiores a 74 % (Figura 4.4) de manutenção do escoamento do filme líquido descendente sobre a parede do tubo de destilação. Este diâmetro inicial da base do SDA de 21 mm foi determinado com base na literatura, Saifutdinov et al. (1999) e Stroefel et al. (2007), tendo como principais variáveis observadas a espessura do filme (3 mm) e a velocidade superficial do filme líquido descendente (1 a 3 m.s^{-1}). Lembrando que o diâmetro interno do tubo de destilação é de 26 mm.

Como a distância entre o SDA e a parede interna do tubo de destilação era de 5 mm, observou-se experimentalmente que a região entre o SDA e a parede interna do tubo de destilação (Figura 4.5) não ficava com líquido armazenado, o que poderia estar provocando a distribuição não uniforme do filme líquido na parede interna do tubo. Desta maneira foram realizados alguns ajustes do diâmetro de base do SDA por tentativa e erro.

Figura 4.5: Esquema do SDA com as distâncias entre este e o tubo de destilação.



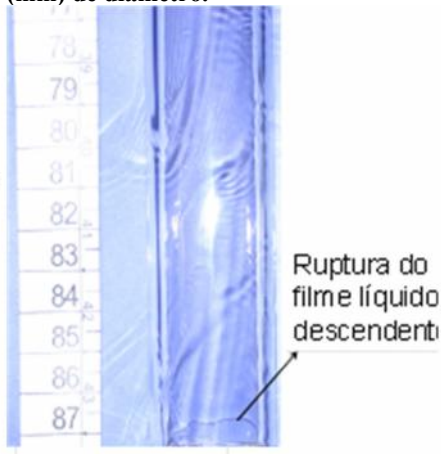
Com objetivo de manter a região inundada com líquido e garantir que todo perímetro do SDA possua líquido escoando em direção a parede interna do tubo de destilação construiu-se um SDA de diâmetro 25 mm (Figura 4.5). Este valor do diâmetro da base foi determinado por tentativa e erro, levando em consideração a necessidade de inundação da região entre o SDA e a parede do tubo de destilação (que só foi possível ser obtida com este diâmetro), o escoamento do filme líquido com uma espessura máxima de 3 mm, velocidade superficial máxima de 3 m.s^{-1} , e a vazão de alimentação utilizada de 25 kg.h^{-1} . As condições operacionais utilizadas para realização dos experimentos foram vazão de alimentação de 25 kg.h^{-1} , a temperatura ambiente (298 K) com água pura, variando-se o diâmetro do SDA de 21 para 25 mm.

Após a realização da alteração do diâmetro de base do SDA, os resultados experimentais obtidos em relação à manutenção do filme líquido descendente na parede do tubo de destilação ao longo do seu comprimento (1 m) mostram que 87 % (Figura 4.7) da superfície evaporante do tubo de destilação está completamente coberta pelo filme líquido descendente (observado no tubo de destilação de vidro com auxílio de fita métrica), ou seja, obteve-se um aumento de 12 % de área do tubo coberta pelo filme em relação ao obtido quando do SDA possuía um diâmetro de base de 21 mm.

Figura 4.6: Ruptura do filme líquido descendente para o SDA com 21 (mm) de diâmetro.



Figura 4.7: Ruptura do filme líquido descendente para o SDA com 25 (mm) de diâmetro.



Com os experimentos realizados ficou comprovada a melhor eficácia de manutenção do filme líquido na parede do tubo de destilação para o SDA com diâmetro de 25 mm, porém o valor de 87 % ainda estava abaixo do objetivo que era cobrir 100 % da área disponível do tubo de destilação. Uma possível explicação para este resultado foi que a região entre a parede do tubo de destilação e superfície do SDA (Figura 4.5) não estava completamente inundada de líquido durante todo tempo de funcionamento, contendo uma parte preenchida por ar, o que provocava o surgimento de algumas bolhas no filme líquido descendente facilitando o escoamento por caminhos preferencias pela variação da tensão superficial no filme.

Baseado no trabalho do Stroefler et al. (2007), que apresentou o projeto de um prato alimentador, o qual encontrava-se sempre completo de líquido, realizaram-se alguns testes por tentativa e erro para garantir a completa inundação da região entre a parede do tubo de destilação e a superfície do SDA variando-se a altura do mesmo e mantendo-se o diâmetro de base com 25 mm, haja visto que este diâmetro apresentou resultados melhores que os obtidos com 21 mm.

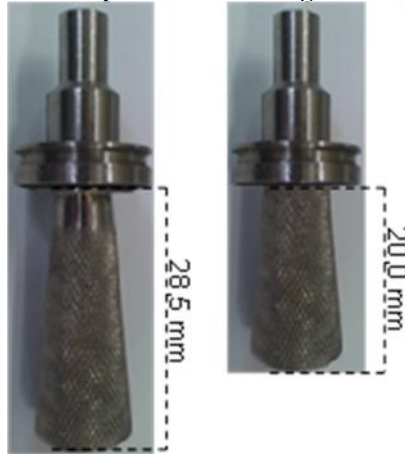
4.1.3 Estudo da variação da altura do SDA

Após a definição do diâmetro do SDA (25 mm), fez-se o ajuste na altura, buscando a manutenção do filme líquido em 100 % da superfície evaporante. Com base nas simulações de CFD, que estavam sendo realizadas em paralelo aos estudos experimentais, os resultados experimentais observados e os dados encontrados na literatura, principalmente nos trabalhos de Stroefler et al. (2007) e Saifutdinov (2003), optou-se por avaliar a variação da altura do SDA por tentativa e erro levando-se em consideração as informações da literatura, experimentos (item 4.1.2) e simulações realizadas (item 4.2.3) com o objetivo de garantir a inundação da região entre a parede do tubo de destilação e a superfície do SDA, menor velocidade superficial do filme líquido descendente possível, diminuir a quantidade de ar disperso no líquido, além de manter a espessura do filme líquido próximo a 3 mm.

Esta variação da altura foi realizada mantendo-se o diâmetro de base de 25 mm. Levando-se em consideração o diâmetro do tubo de destilação, 26 mm, diâmetro do SDA (25 mm), região anular para posterior avaliação do escoamento da fase vapor, usinagem da peça, área superficial do SDA que garanta, o escoamento do filme sobre esta e a formação do filme líquido sobre a parede do tubo de destilação, a altura

do SDA foi diminuída de 28,5 mm até 20 mm, como observado na Figura 4.8.

Figura 4.8: Variação da altura do sistema de distribuição da alimentação para realização dos testes experimentais com água a temperatura de 298 K.



Foram realizados testes experimentais com a água, o sistema a 298 K e vazão de alimentação de $25 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$. Experimentalmente, a manutenção do filme líquido descendente sobre a superfície evaporante do tubo de destilação com o SDA de 20 mm de altura foi de 100 % da área de destilação (Figura 4.9).

Figura 4.9: Resultado experimental para avaliação da eficiência de manutenção do filme líquido descendente sobre a superfície evaporante para SDA com 20 mm de altura.



Com este resultado decidiu-se pela utilização do SDA com altura de 20 mm de altura, que também forneceu os melhores resultados nas análises fluidodinâmicas (item 4.2.3). A partir da avaliação dos resultados experimentais e simulados (CFD) obtidos até esta etapa verificou-se que o SDA em desenvolvimento forneceu os resultados esperados com relação às considerações assumidas no início do projeto, ou seja, o primeiro objetivo de manutenção do filme líquido descendente sobre toda superfície do tubo de destilação foi alcançado. Porém este é apenas um dos objetivos, haja vista que os resultados apresentados até o momento foram obtidos com uma vazão de alimentação de 25 kg.h^{-1} .

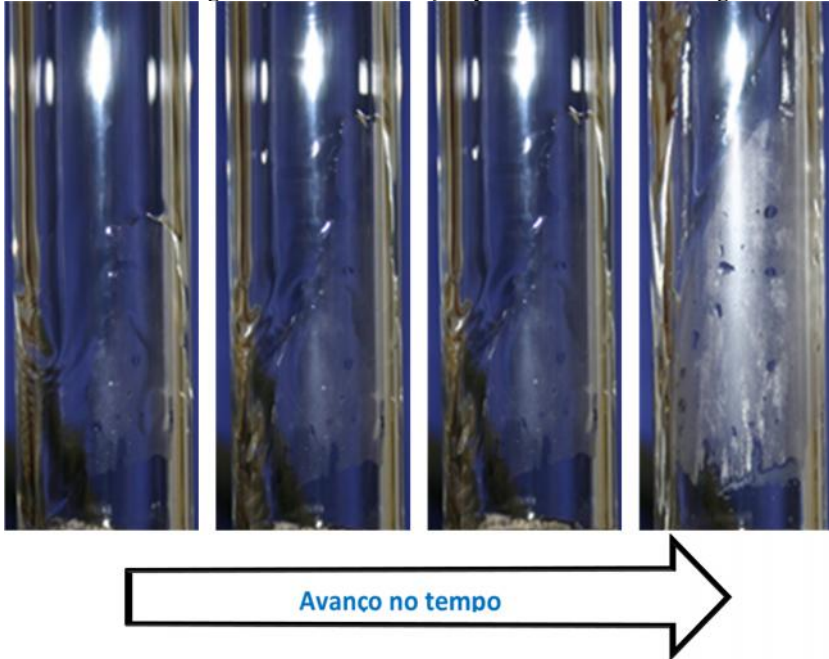
Para avaliar a eficiência do SDA em relação à manutenção do filme líquido descendente sobre toda superfície do tubo de destilação, estudou-se a faixa de vazão de alimentação para qual o SDA conseguiria manter sua eficiência de formação e escoamento do filme líquido, respeitando os limites de velocidade superficial do líquido, espessura do filme e tempo de detenção.

Além disso, é necessário o conhecimento desta faixa de vazão de trabalho para posterior avaliação da eficiência do SDA sobre o processo de destilação por filme líquido descendente. Ou seja, a determinação dos limites de vazão que podem ser utilizados é de extrema importância para avaliação da eficiência do SDA sobre a eficiência de separação e energética do processo de destilação por filme líquido descendente à pressão atmosférica. Por isso, no próximo item são apresentados os valores experimentais obtidos para avaliar a eficiência do SDA quanto à formação e manutenção do filme sobre a superfície evaporante.

4.1.4 Estudo da variação da vazão de alimentação sobre a eficiência do SDA

Inicialmente foi determinada a vazão mínima de alimentação necessária para manter o filme líquido descendente sobre 100 % da superfície evaporante. Para realização destes testes experimentais foram utilizadas as condições de água a temperatura ambiente (298 K), para vazões de alimentação de 5, 10, 25 e 50 kg.h^{-1} . Na Figura 4.10 está apresentada de maneira sequencial a ruptura do filme líquido na parede interna do tubo de destilação e a formação de caminhos preferenciais ao longo do tubo para vazão de alimentação de 5 kg.h^{-1} .

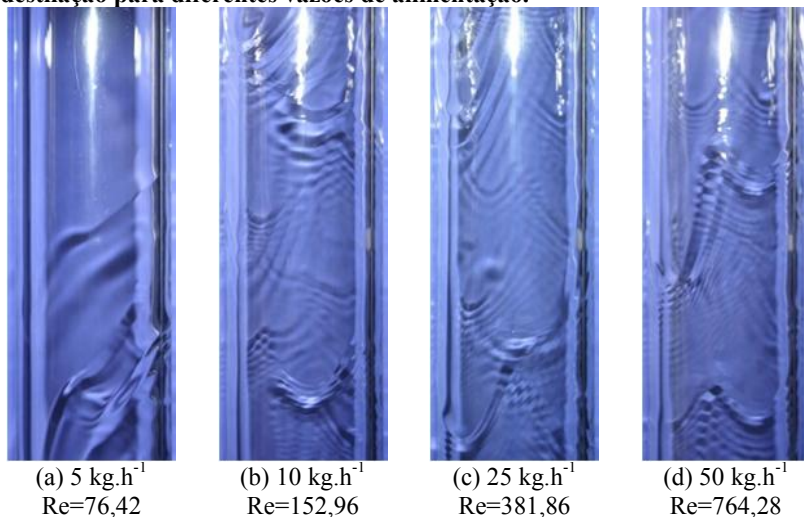
Figura 4.10: Vazão limite de operação: Início da ruptura do filme líquido descendente ao longo do tubo de destilação para uma vazão de 5 kg.h^{-1} .



A partir deste estudo definiu-se como vazão mínima de operação, para manutenção filme líquido ao longo do tubo de destilação, valores superiores a 5 kg.h^{-1} , resultando em um número de Reynolds, $Re = 76,42$, classificado como regime laminar.

Foi realizado um estudo do comportamento do filme líquido descendente com o aumento gradativo da vazão de alimentação, para avaliar o comportamento do escoamento em função do Re , como pode ser visualizado na Figura 4.11.

Figura 4.11: Características do filme líquido na superfície do tubo de destilação para diferentes vazões de alimentação.



A partir das imagens do escoamento do filme líquido na Figura 4.11 observa-se qualitativamente a influência da vazão de alimentação na manutenção e características do escoamento. Aumentando a vazão de alimentação o escoamento passa de um regime laminar, $Re = 76,42$, para vazão de alimentação de 5 kg.h^{-1} , para transição, $Re = 152,96$ e $Re = 381,86$, para vazões de alimentação de 10 e 25 kg.h^{-1} respectivamente e posterior turbulento, $Re = 764,28$, para vazão de alimentação de 50 kg.h^{-1} , onde o número de Reynolds foi calculado pela equação (2.1). Nos experimentos com vazões de 10 , 25 e 50 kg.h^{-1} obteve-se 100 % de cobertura da superfície evaporante pelo filme líquido descendente.

Os resultados obtidos para vazão de alimentação encontram-se dentro da faixa de valores obtida por Batistella (1996), com uma vazão máxima de 50 kg.h^{-1} e uma vazão mínima de 5 kg.h^{-1} . Lembrando que os resultados obtidos até o momento são apenas para o escoamento isotérmico (298 K) de água e ar. Mas vale salientar que o SDA desenvolvido forneceu uma eficiência de cobertura da superfície evaporante para uma ampla faixa de vazão de alimentação. Segundo Ticona (2003) a melhor faixa de vazão de alimentação encontra-se entre 10 e 25 kg.h^{-1} por fornecer um regime de escoamento de filme de transição, o qual possibilita a renovação do filme e a agitação necessária para que ocorra o processo de evaporação das moléculas do componente mais volátil.

É importante ser observado esse comportamento, pois para altas vazões a velocidade do filme líquido descendente torna-se muito alta elevando o número de ondas na superfície do filme e também resultando em um menor tempo de residência sobre a superfície evaporante do tubo de destilação, o que pode prejudicar o processo de destilação, quanto a eficiência de separação e energética.

Com base nestes valores de vazão de alimentação foram realizados estudos fluidodinâmicos (item 4.2.4) para avaliar os valores da velocidade superficial do líquido, o tempo de residência, a distribuição do filme sobre a superfície do tubo e a espessura do filme. Sendo assim definiu-se que a faixa de valores a ser testada posteriormente para avaliação da eficiência do SDA sobre o processo de separação estava compreendida entre 10 e 25 $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ com ponto central de 17,5 $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$.

4.2 ESTUDO FLUIDODINÂMICO PARA DESENVOLVIMENTO DO SDA

Neste item serão apresentados os resultados obtidos a partir das simulações de fluidodinâmica computacional conduzidas em paralelo aos testes experimentais para auxiliar no desenvolvimento do sistema de distribuição da alimentação.

A realização destas simulações foi de grande importância, pois permitiram o estudo detalhado sobre o escoamento do filme líquido descendente na superfície evaporante, através do conhecimento de perfis de velocidade (das fases líquida e gasosa), espessura do filme, regimes de escoamento e tempo de detenção.

Para realização do estudo fluidodinâmico do escoamento do filme líquido descendente durante a etapa de desenvolvimento do SDA foram seguidas as etapas visualizadas no diagrama esquemático ilustrado na Figura 4.12.

Figura 4.12: Diagrama esquemático para ilustração da sequencia de etapas na obtenção dos resultados de simulação em CFD durante o desenvolvimento e otimização do SDA.



A sequência de etapas visualizadas na Figura 4.12 foi definida com base na literatura (BOSMANS e UIJEN 2003 e STROEFER et al. 2007) e nos testes experimentais que foram realizados em paralelo as simulações. A última etapa destas simulações fluidodinâmicas foi realizada com um fluido viscoso para avaliar o comportamento do escoamento do filme líquido descendente sobre a parede interna do tubo de destilação. A seguir são apresentados os principais resultados de cada uma das etapas no desenvolvimento do SDA.

4.2.1 Estudo de refino e ajuste de malha

Neste item são apresentados os resultados obtidos através do estudo realizado para construção, refino e ajuste da malha numérica, que representa o domínio físico onde serão realizadas as simulações. Este processo foi feito para construção de uma malha numérica capaz de gerar os resultados com menor esforço e tempo computacional atendendo a faixa de erro desejado (10^{-5}), estabelecido com base nos trabalhos de Mayor et al. (2007), Kolek et al. (2010) e Dziak e Kubala (2010) garantindo um compromisso entre a solução do sistema de equações e a convergência. Estudos sobre a configuração mais adequada dos elementos da malha foram realizados, com isto observou-se a necessidade de refinamento da mesma na região onde ocorre o escoamento do filme líquido descendente. Desta forma, construiu-se uma malha onde na região próxima a parede do tubo os elementos são

prismas e nas regiões mais afastadas tetraedros. As principais características destas malhas estão resumidas na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Dados das malhas numéricas testadas para realização das simulações.

	Malha 01	Malha 02	Malha 03
Número Total de Nós	64082	533528	669333
Número Total de Elementos	118097	769376	1216804
Tempo Total de Simulação (s)	81000	259200	432000
Erro Médio (RMS)	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
Convergência (sim ou não)	não	sim	sim

A escolha da malha para realização das simulações, foi baseada no tempo e custo computacional, além do erro médio resultante da solução do sistema de equações dos modelos implementados. Com base nestes parâmetros e nos testes realizados a malha escolhida para realização das simulações foi a “Malha 02”, que apresentou o menor tempo e custo computacional gerando resultados abaixo do erro desejado (10^{-5}).

Na Figura 4.13 observa-se a geometria do SDA utilizando uma malha híbrida (elementos de volumes tetraédricos e prismáticos). Na Figura 4.14 e na Figura 4.15 observam-se com mais clareza a região formada por prismas e por tetraedros. Por fim, na Figura 4.16 observa-se o esquema utilizado para fechamento da malha.

Figura 4.13: Malha híbrida (parte superior=SDA + parede lateral).

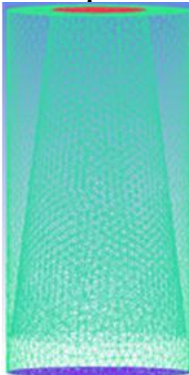


Figura 4.14: Ampliação na base com detalhe da malha tetraédrica no centro e prismática nas bordas do tubo de destilação.

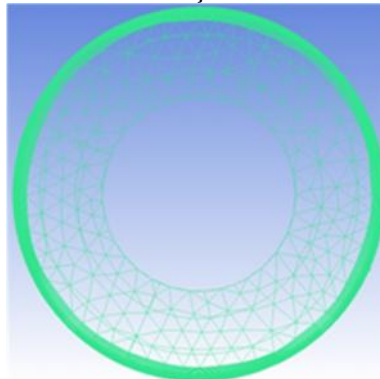
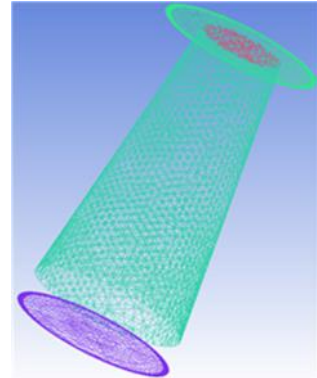


Figura 4.15: Ampliação na Figura (4.14) detalhando a malha prismática e tetraédrica.



Figura 4.16: Detalhes da malha do SDA.



Foi realizada a extrusão da malha do SDA para construção do domínio do tubo de destilação. Quando se opta por usar esta ferramenta, a malha extrudada possui as mesmas características da malha “original”, ou seja, neste caso, formada por prismas e tetraedros. Nas Figuras 4.17 a 4.20 está ilustrada uma sequência de detalhes da malha do SDA e do tubo de destilação. Uma visualização da disposição e grau de refino desta malha pode ser observada na Figura 4.21.

Figura 4.17: Malha híbrida do tubo de destilação construída a partir da extrusão da malha superior.

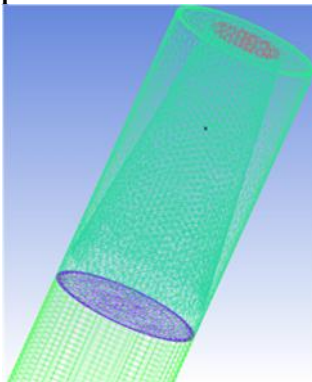


Figura 4.18: Detalhe da junção das malhas.

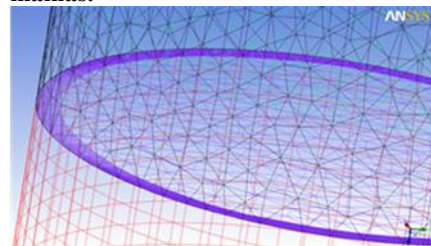


Figura 4.19: Detalhe da malha prismática utilizada no tubo de destilação.

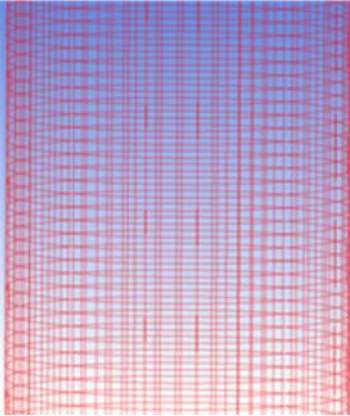


Figura 4.20: Detalhe da malha prismática mostrando as paredes do tubo de destilação e da base do tubo.

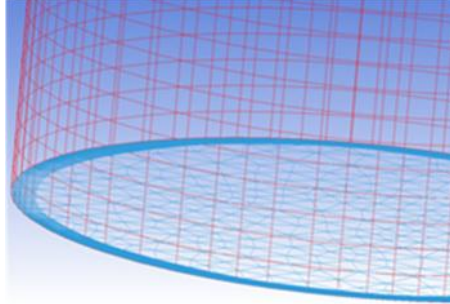
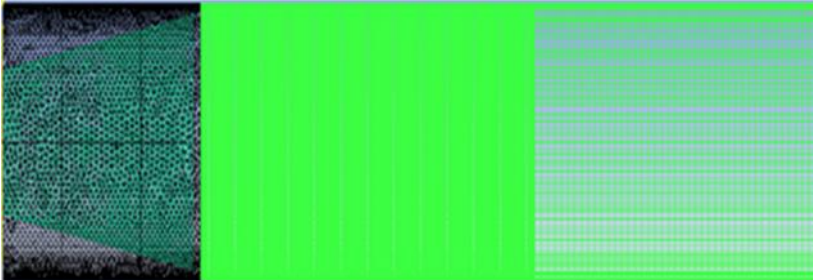


Figura 4.21: Representação da malha numérica utilizada para realização das simulações.



A malha construída é alinhada com o sentido do fluxo além de possuir refinamento na região de escoamento do filme líquido descendente. É importante ressaltar que, para realização das simulações do escoamento do filme de líquido descendente, foi utilizado um sistema bifásico composto por ar e água (viscosidade semelhante à mistura de etanol e água (10 % fração volumétrica)) durante a etapa de desenvolvimento do SDA. Foram utilizadas condições isotérmicas (298 K), tanto para os fluidos como para as paredes do tubo de destilação, pois o objetivo foi verificar o escoamento do filme líquido. Consequentemente a utilização do sistema ar/água isotérmico foi de grande importância para simplificação dos modelos e obtenção dos resultados.

As principais condições utilizadas para realização destas simulações foram: somente líquido na alimentação, temperatura da parede e do líquido de 298 K, para uma vazão de alimentação de 25 kg.h⁻¹. Estas condições operacionais foram assumidas para todas as simulações realizadas na fase de desenvolvimento do SDA para efeitos de simplificação dos modelos matemáticos utilizados nos estudos fluidodinâmicos.

4.2.2 Sistema de distribuição da alimentação “estático” ou “rotacional”

Com base nos trabalhos encontrados na literatura sobre sistemas de distribuição de alimentação, Lavin (1988); Bosmans, et al. (2001) e Stroefel et al. (2007), o desenvolvimento e projeto de alguns pratos distribuidores de alimentação operam com sistema rotacional, ou seja, o prato distribuidor da alimentação gira em torno do seu próprio eixo com o objetivo de melhorar a distribuição no filme líquido sobre a superfície evaporante. Por isso foram realizadas simulações para estudar as vantagens e desvantagens em utilizar o SDA estático ou rotacional.

Os perfis radiais das variáveis de interesse foram analisados em três diferentes alturas do tubo de destilação (Figura 3.6). Os estudos foram direcionados para análise dos perfis de fração mássica de água, espessura e uniformidade do filme líquido descendente ao longo do tubo de destilação. Na Tabela 4.2 são listadas as condições das simulações apresentadas neste item.

Tabela 4.2: Condições de alimentação e rotação do SDA assumidas para realização das simulações.

	Mistura água/ar		
Vazão mássica da alimentação kg.h ⁻¹	25	25	25
Velocidade de rotação do SDA rpm	750	1000	Sem rotação
Temperatura na parede do tubo de destilação K	298	298	298

Os perfis radiais da fração mássica de líquido foram obtidos a partir das simulações fluidodinâmicas no tubo de destilação para os três níveis de altura (Figura 3.6) na região próxima a parede do tubo, de $r = 0$ até $r = R$ ($R =$ parede do tubo de destilação), conforme esquema demonstrado na Figura 4.22.

Figura 4.22: Representação esquemática para determinação da espessura do filme líquido descendente.

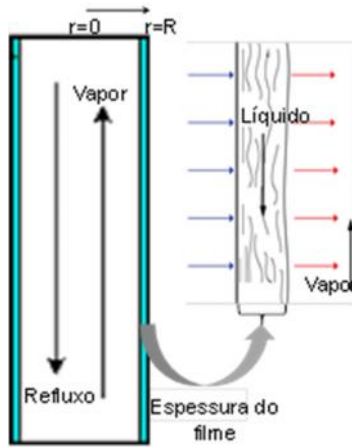
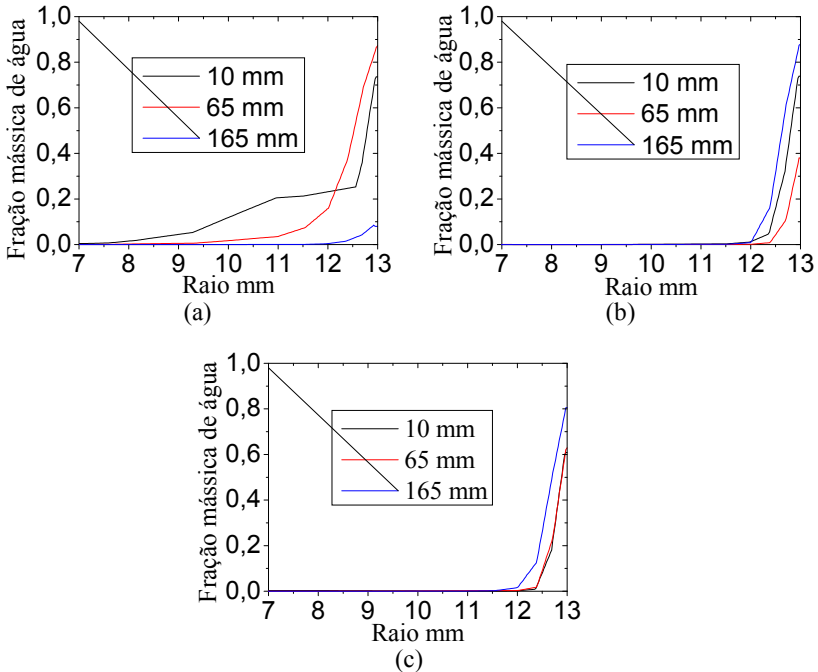


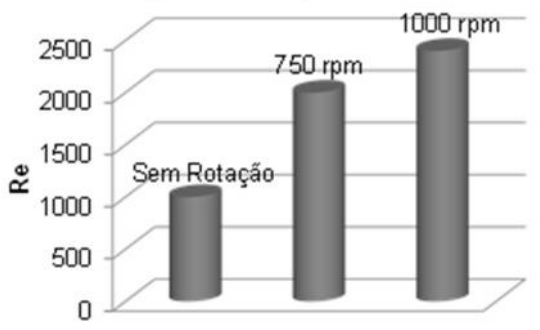
Figura 4.23: Perfis da fração mássica de líquido para vazão mássica de $25 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ com SDA (a) sem rotação (b) 750 rpm e (c) 1000 rpm.



Observa-se na Figura 4.23 que não foram encontradas diferenças significativas entre os perfis radiais da fração mássica de água no tubo de destilação. A espessura do filme líquido descendente sofre variações com o desenvolvimento do escoamento ao longo da altura do tubo de destilação. Ocorre variação quando utilizado o SDA estático (de 0,5 mm), entretanto é possível de ser observado que com o sistema rotacional de alimentação a espessura do filme permanece uniforme, porém com uma espessura de filme abaixo de 2 mm, o que é indesejável para o processo de destilação por filme líquido descendente segundo Saifutdinov et al. (1999), Saifutdinov (2003) e Xubin et al. (2005).

Na Figura 4.24 podem ser visualizados os valores do número de Reynolds para cada uma das simulações realizadas, para o teste de rotação do SDA.

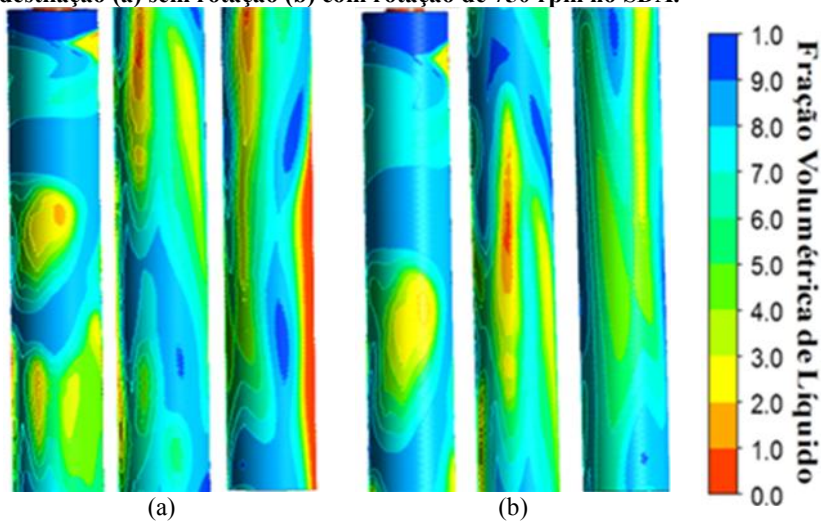
Figura 4.24: Número de Reynolds médio para o teste de rotação do SDA.



O número de Reynolds aumenta a medida que aumenta-se a rotação do SDA. Isso ocorre por que o filme líquido descendente adquire aceleração em virtude da rotação do sistema alimentador adquirindo velocidade maior quando entra em contato com o tubo de destilação. Esse comportamento de aumento da velocidade superficial do líquido é indesejável para o processo, pois resultará em menor tempo de detenção do mesmo sobre a superfície evaporante, causando perdas de eficiência de separação e térmica, além de extrapolar o limite de velocidade superficial do líquido, que é de $0,3 \text{ m.s}^{-1}$ segundo Saifutdinov et al. (1999), para o processo de destilação por filme líquido descendente.

Na Figura 4.25 é apresentada a comparação da fração volumétrica de líquido na parede do tubo de destilação tanto em (a) com o sistema estático, como em (b) com o sistema rotacional.

Figura 4.25: Perfil da fração volumétrica de líquido na parede do tubo de destilação (a) sem rotação (b) com rotação de 750 rpm no SDA.



Observando-se na Figura 4.25 a fração volumétrica de líquido na parede do tubo de destilação, percebe-se uma pequena diferença entre os resultados obtidos, porém não é possível afirmar que o sistema rotacional gerou ou forneceu ganho ou melhora significativa no escoamento do filme líquido descendente sobre a parede do tubo de destilação, por isso seu uso não é justificável em virtude da complexidade de projeto e operacionalidade que o mesmo traria à unidade.

Com os resultados obtidos para o SDA estático ou com rotação e comparando com os resultados obtidos por Bosmans et al. (2001) e Stroofer et al. (2007) observa-se que o sistema de distribuição de alimentação rotacional forneceu como principal resultado, a manutenção do filme líquido descendente sobre a superfície evaporante e a capacidade de renovação do filme pela velocidade tangencial adquirida pelo líquido, sendo estas suas vantagens, se comparado ao sistema estático, resultados estes que foram ao encontro dos fornecidos na literatura. As principais desvantagens observadas com o sistema rotacional foi a alta velocidade de escoamento da fase líquida (superior a 0,3 m.s⁻¹), a espessura do filme líquido descendente inferior a 2 mm que segundo Saifutdinov et al. (1999) estão fora da faixa de valores ideais para o sistema de destilação por filme líquido descendente, além de apresentar complexidade de projeto e operacionalidade.

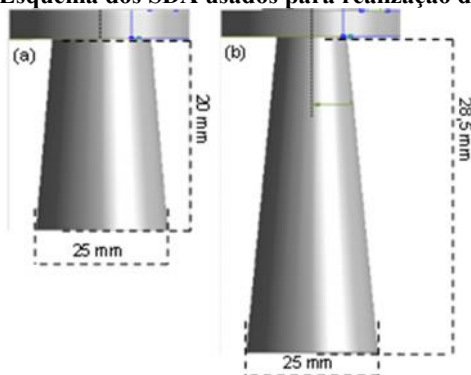
Porém, mesmo operando com SDA estático, ocorreu o escoamento do filme líquido sobre toda superfície evaporante, tendo este sistema a vantagem de fornecer a velocidade do escoamento do líquido dentro da faixa desejada (abaixo de $0,3 \text{ m.s}^{-1}$) e com espessura do filme próximo a 3 mm, que segundo a literatura (SAIFUTDINOV et al. 1999 e BATISTELLA et al. 1999) são faixas de valores ideais para operação de um sistema de destilação por filme líquido descende. Além destas vantagens fluidodinâmicas, outras que devem ser citadas são a construção e operacionalidade de um sistema estático frente ao sistema rotacional. A partir da análise dos resultados anteriores e comparando com os encontrados na literatura concluiu-se que o SDA estático deveria ser utilizado para obtenção dos próximos resultados.

4.2.3 Influência da altura do sistema de distribuição de alimentação

Com a definição de utilização do SDA estático e com objetivo de obter o maior número de informações possíveis com relação ao escoamento do filme líquido sobre a superfície evaporante, foram realizadas simulações fluidodinâmicas para avaliar a influência da altura do SDA sobre o escoamento do filme líquido e complementar os resultados obtidos experimentalmente, já apresentados no item (4.1.3).

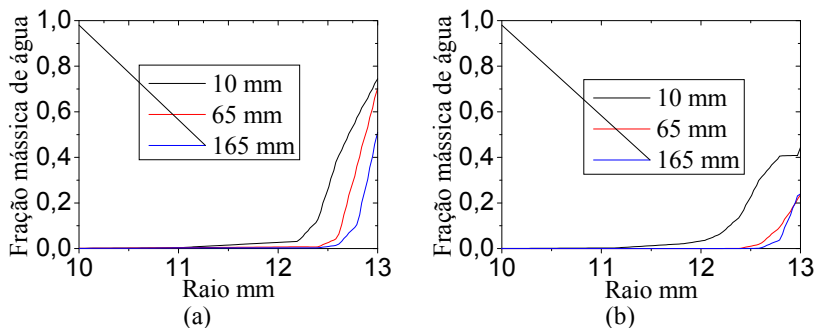
Os resultados fluidodinâmicos foram obtidos a partir do estudo da influência da altura do DAS, mantendo-se o mesmo diâmetro da base (25 mm) e vazão de alimentação de 25 kg.h^{-1} . Foram simuladas as duas alturas para o SDA (20 e 28,5 mm) testadas experimentalmente.

Figura 4.26: Esquema dos SDA usados para realização das simulações.



É importante ressaltar que, mesmo variando a altura do sistema de distribuição da alimentação, o diâmetro da base foi mantido constante (25 mm), pois os resultados experimentais (itens 4.1.1 e 4.1.2) e simulados (itens 4.2.1 e 4.2.2) obtidos até esta fase do projeto apresentavam as vantagens na utilização do SDA com este diâmetro, além da necessidade de avaliar apenas uma variável do projeto em cada etapa afim de conhecer sua influência sobre o processo. Podem ser visualizados na Figura (4.28), os perfis radiais da fração mássica de líquido para os três níveis de altura (Figura 3.6).

Figura 4.27: Perfil da fração mássica de líquido ao longo do raio para os três níveis de altura, (a) SDA 20 mm de altura e (b) SDA 28,5 mm de altura.



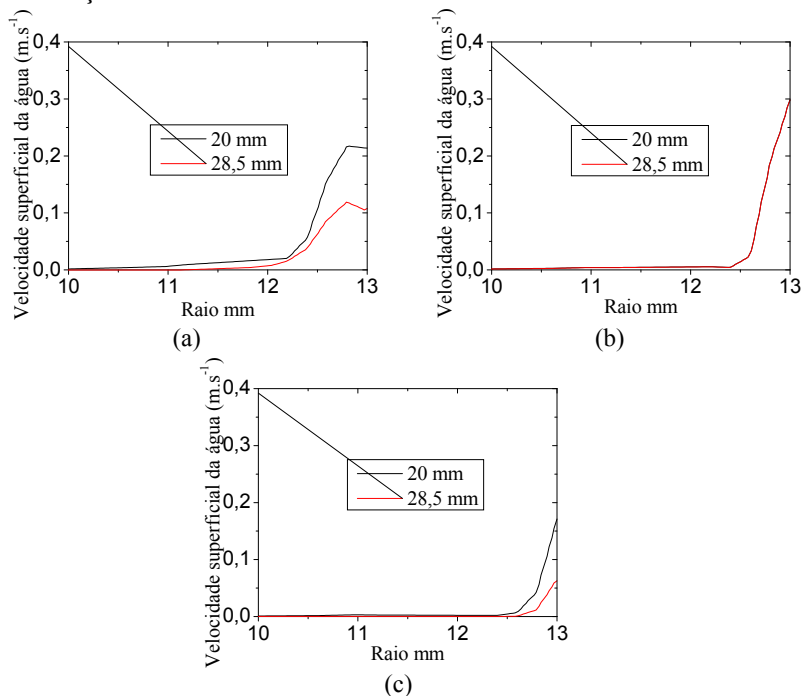
Comparando-se os perfis radiais para os três níveis de altura, o valor da fração mássica de líquido é maior quando se utilizou o SDA com altura de 20 mm (Figura 4.27 (a)) e a espessura do filme formado sofre pequenas variações com o desenvolvimento do escoamento, porém esta variação não ultrapassa 0,2 mm.

Com base nos perfis da fração mássica de líquido, obtidos a partir das simulações fluidodinâmicas, encontrou-se o valor da espessura média do filme líquido descendente, através da distribuição do líquido na região próxima da parede do tubo de destilação, avaliando-se a presença deste, de $r = 0$ até $r = R$ ($R =$ parede do tubo de destilação), conforme esquema demonstrado na Figura 4.22.

Os valores da espessura média do filme líquido descendente são 3 e 2,8 mm respectivamente para o SDA com 20 e 28,5 mm, espessura desejável para os dois casos estudados (SAIFUTDINOV, 2003). Com base nos trabalhos de Saifutdinov (2003), Mayor et al. (2007), Kolek et al. (2010) e Dziak (2011), este valor da espessura média do filme líquido

é desejável, pois para o processo de destilação por filme descendente, existe a necessidade de compromisso entre a espessura do filme escoando com os processos de transferência de calor e massa. Desta maneira, se o filme possuir uma espessura menor do que 2 mm corre-se o risco de completa evaporação do filme líquido quando em contato com a superfície evaporante (quente), ocasionando a formação de pontos secos e diminuindo a eficiência do processo. Caso a espessura do filme seja muito elevada (maior que 4 mm) ocorrerá o problema da transferência de calor da superfície evaporante até a interface líquido vapor, devido ao pequeno tempo de detenção que o filme líquido possui, além de ocorrer a estagnação na interface líquido vapor sem a renovação do filme, o que também implica na diminuição na eficiência do processo de destilação. Na Figura 4.28 é possível observar o comportamento radial da velocidade superficial de líquido, nas alturas especificadas na Figura 3.6.

Figura 4.28: Desenvolvimento dos perfis radiais de velocidade superficial do líquido (a) 10 mm, (b) 65 mm e (c) 165 mm abaixo do SDA de alimentação.



A velocidade superficial do líquido vai diminuindo à medida que o filme líquido se afasta da região de alimentação, Figuras (4.28 - a, c). À medida que o filme líquido descendente afasta-se da região de alimentação, onde ocorre um estrangulamento da área disponível para o escoamento do filme (lembrando que a diâmetro do tubo de destilação é 26 mm e o diâmetro do SDA 25 mm) e por consequência uma velocidade de escoamento maior, a velocidade superficial do líquido vai diminuindo devido ao atrito entre o filme líquido e a parede.

Analisando-se os resultados demonstrados na Figura 4.28 percebe-se que a velocidade superficial média do filme líquido descendente não ultrapassou 0,3 m.s-1 o que é extremamente desejável do ponto de vista operacional para um processo de destilação com filme líquido descendente (SAIFUTDINOV, 2003, SAIFUTDINOV et al. 1999 e BATISTELLA et al. 1999), devido ao maior tempo de contato entre o filme líquido e a superfície evaporante, facilitando o processo de destilação além de aumentar o tempo de contato entre as fases líquida e gasosa.

Outro comportamento importante é com relação ao escoamento do filme líquido na superfície do tubo de destilação. Este apresenta a formação de ondas (pequenas oscilações da espessura do filme líquido descendente ao longo do tubo de destilação) devido às características do escoamento (TICONA 2003), como pode ser observado na Figura 4.29, onde estão representados o modelo teórico do escoamento e dois resultados experimentais para as alturas de SDA estudadas, e na Figura 4.30 os resultados obtidos a partir da realização das simulações fluidodinâmicas.

Figura 4.29: Escoamento de filme líquido descendente (a) ilustração teórica, (b) experimental SDA com 20 mm (c) SDA com 28,5 mm altura.

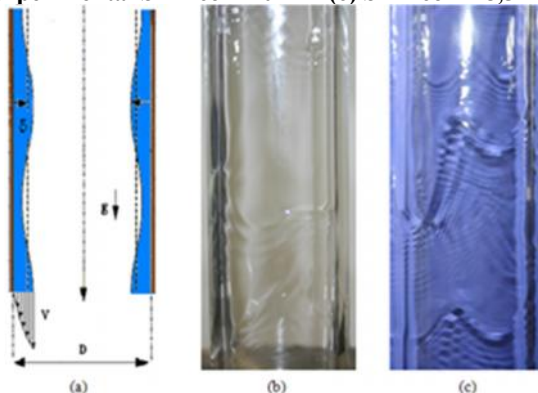
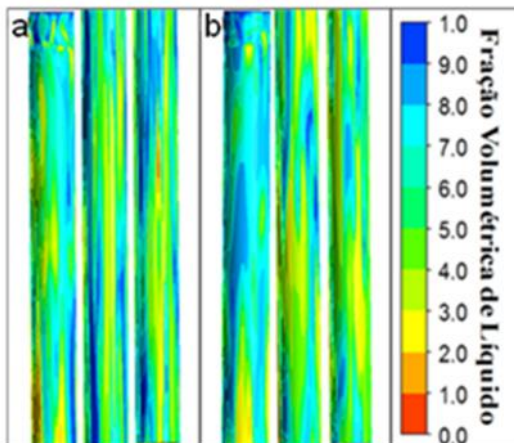


Figura 4.30: Perfil da fração volumétrica de líquido nas paredes do tubo de destilação (a) SDA com 20 mm de altura e (b) SDA com 28,5 mm de altura.



É importante ressaltar que a variação da espessura do filme descendente deve ser minimizada, para não ocorrer toda evaporação e como consequência a formação de pontos secos (ponto onde não há presença de líquido sobre a superfície evaporante) ao longo do tubo de destilação, o que prejudicará o processo de transferência de calor e massa, diminuindo a eficiência do processo devido a menor utilização da superfície evaporante. Na Figura 4.30 é possível perceber a variação da fração volumétrica de líquido no escoamento do filme líquido descendente sobre a parede do tubo de destilação, indicando que também ocorreram pequenas variações da espessura do filme líquido durante o escoamento, como observado em estudos experimentais (Figura 4.29 “b” e “c”).

Quando se utilizou o SDA com 20 mm de altura, obteve-se um filme líquido descendente com espessura muito parecida com a obtida com o SDA de 28,5 mm de altura. Para os dois estudos de caso, obteve-se o regime de escoamento situado na região de transição, o que é desejável de acordo com a literatura, pois um escoamento laminar poderia dificultar os fenômenos de transferência de calor e massa, em virtude da não renovação do filme líquido descendente e criação de uma interface estagnada entre as fases líquida e gasosa. Em relação à manutenção do filme líquido descendente na parede do tubo de destilação foi obtido melhor resultado com o SDA de 20 mm de altura.

Os resultados obtidos a partir da realização das simulações fluidodinâmicas serviram para o conhecimento de variáveis importantes

do escoamento, distribuição radial da fração mássica de líquido, espessura e velocidade superficial do filme líquido, as quais são importantes para conhecimento e caracterização do escoamento e avaliação dos fenômenos de transferência de momento que não puderam ser obtidos experimentalmente.

Analisando-se os resultados obtidos via CFD com o SDA estático, 20 mm de altura e diâmetro de 25 mm, condições estas baseadas na literatura, Bosmans, et al. (2001) e Stroefler et al. (2007) e nos resultados experimentais e simulados até esta fase, chegou-se ao escoamento do filme líquido sobre toda área disponível da superfície evaporante sem a necessidade de utilização de rotação do SDA, como utilizado por Stroefler et al. (2007), mas com a eficiência desejada para cobrir toda área da superfície evaporante com o filme líquido.

Outras variáveis importantes analisadas e comparadas com a literatura e obtidas a partir das simulações fluidodinâmicas foram a espessura e velocidade superficial da fase líquida que apresentaram valores compreendidos dentro da faixa ideal, 3 mm de espessura para o filme líquido e até $0,3 \text{ m.s}^{-1}$ para velocidade superficial do filme segundo os trabalhos de Saifutdinov et al. (1999) e Saifutdinov (2003), que abordam o processo de destilação por filme descendente. Estes valores demonstram a eficiência do SDA no que diz respeito à manutenção do filme líquido descende sobre a superfície evaporante, além de estar de acordo com os valores da literatura para espessura e velocidade superficial. Estes valores de espessura e velocidade superficial do filme são de extrema importância no que diz respeito aos próximos passos de avaliação da eficiência do SDA, avaliando-se os fenômenos de transferência de calor e massa e qual a influência sobre o processo de destilação por filme líquido descendente. Os valores de espessura e velocidade do filme encontrados estão dentro da faixa considerada ideal por Xubin et al. (2005), Mayor et al. (2007), Dziak e Kubala (2010), Kolek et al. (2010) e Dziak (2011) para maximizar a transferência de calor e massa.

Os resultados obtidos e apresentados para vazão de alimentação de 25 kg.h^{-1} no projeto e desenvolvimento do SDA apresentam-se de acordo com as considerações iniciais do projeto, a hipótese de toda área da superfície evaporante estar preenchida pelo filme líquido descendente está contemplada, além de fornecer valores da espessura e velocidade superficial do filme coerentes aos encontrados na literatura. Porém, é de extrema importância que o SDA forneça estas características ao filme para uma ampla faixa de vazão de alimentação, haja vista que será avaliada qual é a importância e a eficiência do SDA no processo de

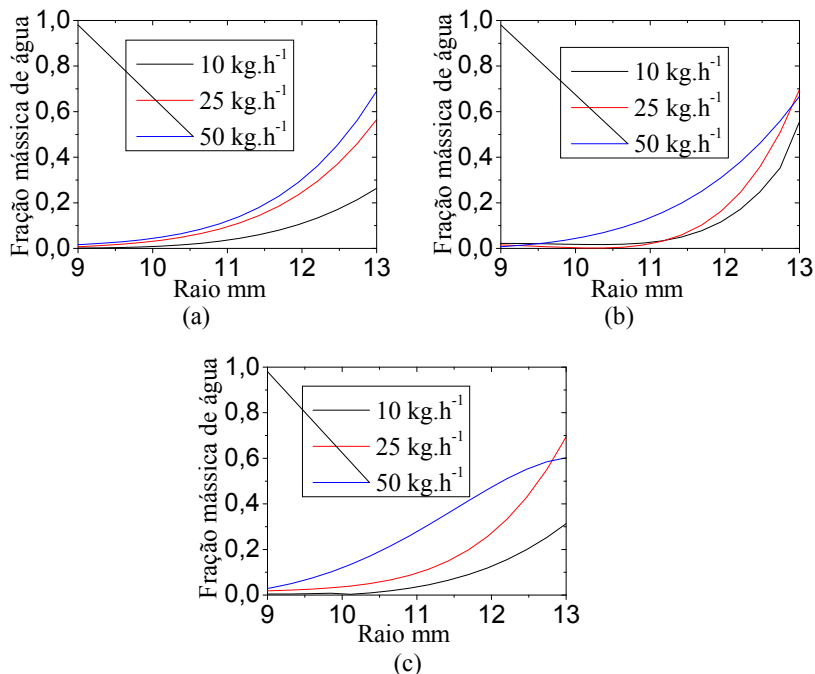
destilação por filme líquido descendente. Sendo assim, no item (4.2.4) são apresentados os resultados obtidos a partir das simulações fluidodinâmicas variando-se a vazão de alimentação.

4.2.4 Influência da vazão de alimentação na eficiência do SDA - CFD

Avaliar a influência da vazão de alimentação sobre a eficiência do SDA na manutenção do filme líquido descendente na parede do tubo de destilação e na velocidade superficial do líquido é importante para definição dos limites de operação do sistema. É importante ressaltar que, segundo Saifutdinov (2003), a velocidade superficial do líquido deve estar próxima a $0,3 \text{ m.s}^{-1}$. A definição das condições utilizadas para realização das simulações foi baseada nas simulações anteriores, a fim de avaliar especificamente qual a eficiência do SDA variando-se a vazão de alimentação. Os valores das vazões de alimentação foram definidos com base nos resultados experimentais apresentados no item (4.1.4), onde observou-se que para vazão de alimentação de 5 kg.h^{-1} o SDA não conseguia manter a eficiência de formação e escoamento do filme. As condições utilizadas para realização das simulações foram: temperatura da alimentação e da parede 298 K e vazão de alimentação de $10, 25$ e 50 kg.h^{-1} para o SDA com 20 mm de altura e diâmetro de 25 mm . A realização destas simulações permitiu um estudo mais completo das propriedades fluidodinâmicas do filme líquido descendente.

Na Figura 4.31 estão representados os perfis radiais da fração volumétrica de líquido para os três níveis de altura (Figura 3.6). Estes apresentam diferenças significativas, principalmente quando comparados aos valores obtidos a partir da realização das simulações com vazão de alimentação de 10 kg.h^{-1} com os outros dois valores de vazão utilizados nas simulações.

Figura 4.31: Perfis da fração volumétrica de líquido (a) 10 mm (b) 65 mm e (c) 165 mm abaixo do SDA para as vazões mássicas de 50, 25 e 10 kg.h⁻¹.

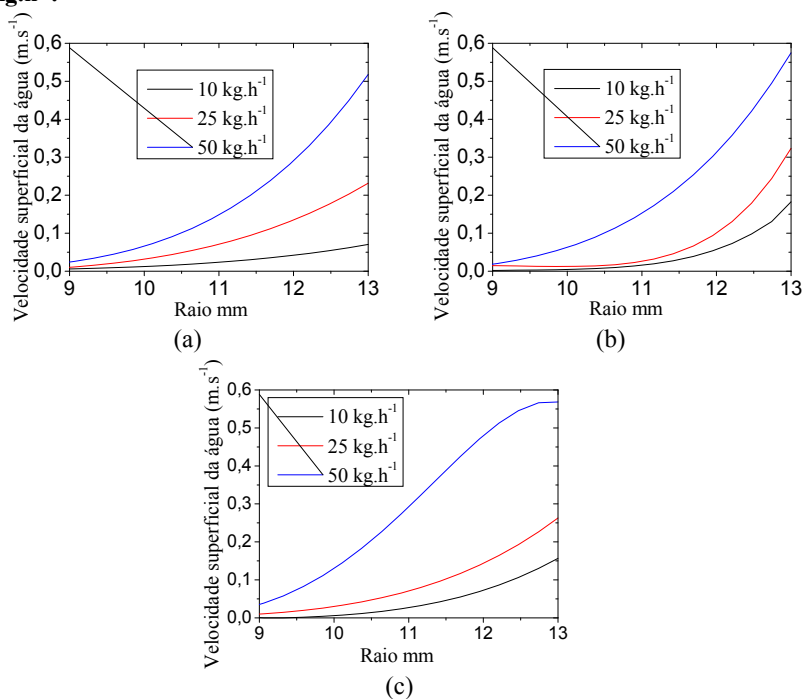


Quanto menor o valor da vazão de alimentação menor o valor da espessura do filme líquido descendente. Os valores obtidos a partir da realização das simulações fluidodinâmicas foram 3,2, 3,0 e 2 mm respectivamente para as vazões de alimentação de 50, 25 e 10 kg.h⁻¹. Percebe-se maior variação entre os valores na espessura do filme para vazão de 10 kg.h⁻¹ em comparação as demais. Porém, cabe ressaltar que segundo Saifutdinov (2003), para destilação por filme líquido descendente sugere-se como valor da espessura do filme 3 mm, ou seja, utilizando-se a vazão de alimentação de 50 kg.h⁻¹ este valor é extrapolado. Se comparado aos valores obtidos por Batistella (1996), o qual trabalhou com vazões que chegam a 50 kg.h⁻¹ ou Santos (2005) que trabalhou com vazões muito baixas (0,3 a 1,5 kg.h⁻¹), a faixa de valores encontrados para formação e manutenção do filme líquido descendente, utilizando-se o SDA desenvolvido, encontra-se dentro da faixa de valores sugeridas pelos autores. Agora é importante avaliar o comportamento da velocidade superficial da fase líquida e comparar

com Saifutdinov et al. (1999) para garantir o tempo de detenção necessário do filme líquido sobre a superfície evaporante.

O ideal é a espessura do filme líquido descendente ser uniforme ao longo do comprimento do tubo, porém devido às próprias características do escoamento isso não acontece, tornando-se necessário buscar um compromisso entre vazão de alimentação, espessura do filme e velocidade superficial do líquido. O comportamento da velocidade superficial do líquido é muito importante para o processo de destilação por filme líquido descendente, pois existem limites máximos para esta variável estabelecidos na literatura (SAIFUTDINOV 2003 e SAIFUTDINOV et al. 1999). Por isso na Figura 4.32 estão demonstrados os perfis radiais da velocidade superficial do líquido.

Figura 4.32: Perfis da velocidade superficial do líquido (a) 10 mm (b) 65 mm e (c) 165 mm abaixo do SDA para as vazões mássicas de 50, 25 e 10 kg.h⁻¹.



Os valores da velocidade superficial do líquido dentro da faixa sugerida pela literatura foram obtidos para os valores de vazão de

alimentação de 25 e 10 kg.h^{-1} . Para vazão de alimentação de 50 kg.h^{-1} estes ficaram acima, por isso na continuidade dos estudos experimentais e realização das simulações foram sempre adotados valores na faixa de 25 a 10 kg.h^{-1} .

Outro parâmetro importante a ser analisado para caracterização do escoamento é o número de Reynolds. Segundo Provenzano (2007), os estudos indicam que os escoamentos de filmes líquidos descendentes podem ser categorizados em três regimes, dependendo do número de Reynolds. De acordo com os resultados obtidos nas simulações os valores de Reynolds podem ser visualizados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Número de Reynolds do filme em função da vazão de alimentação.

Vazão (kg.h^{-1})	50	25	10
Γ ($\text{kg.h}^{-1}\text{m}^{-1}$)	0,170	0,085	0,034
Re_{filme}	764,3	381,9	152,9

Analisando-se os valores de Reynolds do filme descendente e comparando com os fornecidos pela literatura (PROVENZANO 2007) é possível afirmar que para as três vazões de alimentação utilizadas, o regime de escoamento encontra-se na região de transição, o qual, segundo a definição, apresenta ondas na interface da fase líquida com a fase vapor. Ou seja, condição necessária para que ocorra a evaporação do componente mais volátil do filme líquido descendente.

Concluiu-se que a vazão de 50 kg.h^{-1} da fase líquida é impactante no que diz respeito à renovação do filme, porém, para um sistema com as características da mistura ar/água a alimentação com vazões entre 25 e 10 kg.h^{-1} se mostra mais adequada, com formação de filme de líquido ao longo do tubo de destilação e velocidade superficial da fase líquida e espessura do filme.

Com base nestes valores de vazão de alimentação e comparando-se com os valores encontrados na literatura, Batistella (1996), Batistella (1999), Batistella et al. (1999) e Santos (2005), definiu-se que a faixa de valores a ser utilizada para avaliação da eficiência do SDA sobre o processo de separação seria entre 10 e 25 kg.h^{-1} com ponto central de 17,5 kg.h^{-1} , pois esta faixa de vazão forneceu resultados satisfatórios, com relação à formação e manutenção do filme líquido descendente sobre a superfície evaporante, com valores de velocidade superficial do líquido e espessura do filme dentro da faixa esperada (SAIFUTDINOV et al. 1999).

4.2.5 Avaliação da eficiência do SDA utilizando-se um fluido viscoso

Os resultados obtidos para formação e escoamento do filme líquido descendente com água a temperatura ambiente demonstraram a eficiência do SDA desenvolvido. Vislumbrando a aplicação deste sistema de distribuição de alimentação na aplicação prática, realizaram-se simulações para avaliação do SDA em relação à formação e escoamento do filme sobre a superfície evaporante com um fluido possuindo propriedades físicas de uma mistura de hidrocarbonetos.

Estes estudos foram realizados para avaliar a eficiência do SDA na capacidade de distribuição do filme líquido na parede do tubo de destilação, pois em muitos casos na indústria petroquímica há necessidade de destilação ou separação de fluidos de alta viscosidade, logo verificar a possibilidade de utilização do sistema desenvolvido para esta aplicação é importante.

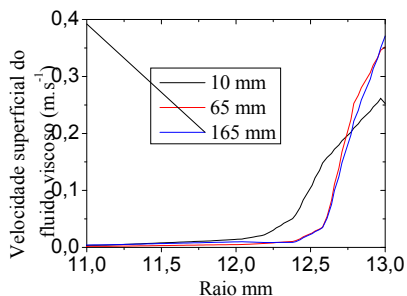
Para realização deste conjunto de simulações, inicialmente foi necessário a implementação no software, ANSYS CFX 14.0, as características físicas da mistura de hidrocarbonetos para posterior avaliação do seu escoamento. Na Tabela 4.4 estão representadas as principais características do fluido utilizado para realização das simulações.

Tabela 4.4: Características físicas da mistura de hidrocarbonetos utilizado nas simulações.

Características	Valor
Massa molar	18,95 (kg.kmol ⁻¹)
Massa específica	997,2 (kg.m ⁻³)
Capacidade calorífica	4129 (J.kg ⁻¹ K ⁻¹)
Viscosidade dinâmica	0,000934 (kg.m ⁻¹ s ⁻¹)
Condutividade térmica	0,5893 (W.m ⁻¹ K ⁻¹)

Importante ressaltar que para realização destas simulações foi utilizado um modelo 3D, multifásico, com fluido viscoso como fase líquida e ar como fase gasosa em um sistema isotérmico. Na Figura 4.33 estão mostrados os perfis radiais da velocidade superficial do fluido viscoso, para vazão de alimentação de 25 kg.h⁻¹.

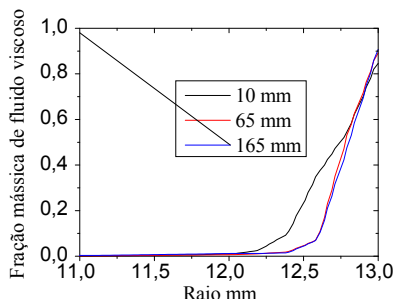
Figura 4.33: Perfil da velocidade superficial da mistura de hidrocarbonetos nos três níveis de altura (10, 65 e 165 mm) de um fluido viscoso.



Os valores de velocidade superficial da mistura são menores do que os obtidos nas simulações realizadas utilizando-se água como fase líquida. Isso está diretamente ligado à viscosidade do fluido, pois este possui uma resistência maior ao escoamento. Porém é possível observar que, para os três níveis de altura os perfis radiais de velocidade superficial do líquido foram muito semelhantes, indicando que a maior viscosidade da mistura favorece um escoamento com menor formação de ondas na superfície, caracterizado por um $Re_{\delta} = 443$ (equação 2.1), ou seja, faixa de regime de transição segundo Ticona (2003).

A distribuição radial da fração mássica do fluido viscoso na parede do tubo de destilação nos três níveis de altura (Figura 3.6) pode ser observada na Figura 4.34.

Figura 4.34: Perfis da fração mássica de líquido nos três níveis de altura para escoamento do fluido viscoso.



Os perfis da fração mássica do fluido viscoso representados para os três níveis de altura são muito semelhantes. Na altura de 165 mm foi

obtido o menor valor para espessura do filme líquido descendente (2,5 mm) em comparação as outras duas alturas (3,2 mm). Estes resultados indicam que a utilização do SDA desenvolvido para o escoamento de um filme líquido com maior viscosidade é possível. O SDA foi capaz de manter uma eficiência de 100% do que diz respeito a cobertura da superfície evaporante pelo filme líquido. Também forneceu resultados de velocidade superficial do líquido e espessura do filme recomendados pela literatura (SAIFUTDINOV et al. 1999 e Xubin et al. 2005), o que permite afirmar que o SDA pode ser utilizado, teoricamente.

4.2.6 Conclusões sobre a concepção do SDA

Após os primeiros testes experimentais realizados (ver item 4.1.1), os resultados mostraram a melhor eficiência do SDA com canais na superfície onde escoo o líquido para posterior formação do filme descendente. Por isso todos os ensaios experimentais foram realizados utilizando-se o SDA possuindo os canais. Estes canais servem para melhorar a distribuição do líquido sobre a superfície do SDA (diminuindo a ocorrência de escoamento por caminhos preferenciais) resultando na melhor formação de filme líquido, além de diminuir a velocidade superficial do líquido, o que é de extrema importância, haja visto que segundo a literatura (SAIFUDINOV et al. 1999) esta não pode ultrapassar $0,3 \text{ m.s}^{-1}$ para não prejudicar os fenômenos de transferência de calor e massa e a eficiência do processo de destilação.

Com auxílio dos estudos fluidodinâmicos e dos testes experimentais realizados para concepção e construção do sistema de alimentação, foi possível concluir que os melhores resultados obtidos foram para o SDA que apresenta canais em sua superfície, com um diâmetro de base de 25 mm, fornecendo um filme líquido descendente ao longo de toda superfície do tubo de destilação, operando em uma faixa de vazão ótima entre 10 e 25 kg.h^{-1} e altura de 20 mm.

Para melhor distribuir a alimentação sobre a superfície do SDA, seis orifícios igualmente espaçados com diâmetro de 2 mm foram feitos na superfície da flange (Figura 4.35 – b). Ao passar pelos orifícios o líquido é distribuído na superfície do SDA, através dos canais feitos, permitindo a formação uniforme do filme líquido na parede do tubo de destilação.

Figura 4.35: Versão final do sistema de distribuição de alimentação.

(a)



(b)

A perfuração na superfície do flange que sustenta o SDA, como também a confecção dos canais na superfície do SDA, foi feita justamente para uniformizar a distribuição do líquido nesta, pois a maioria dos resultados encontrados na literatura estão baseados em pratos rotativos (LAVIN (1988); BOSMANS, et al. (2001) e STROEFER et al. (2007)), onde o líquido escoar por um canal central e tem sua distribuição uniformizada pela rotação do prato, ou em alguns casos são utilizados sistemas distribuidores do líquido como “espinha de peixe” que também é baseado em um sistema rotacional. As utilizações dos furos e canais são realmente necessárias para a eficiência do SDA no que diz respeito à formação e manutenção do filme líquido descendente sobre a superfície do tubo de destilação, pois o teste de escoamento do filme realizado com o SDA sem os canais apresentou uma eficiência muito baixa.

Definidos diâmetro (25 mm), altura (20 mm), distribuição dos furos na superfície do flange (6 igualmente espaçados), canais na superfície do SDA obteve-se a eficiência de 100% com relação ao escoamento do filme líquido sobre a superfície evaporante disponível, dentro da faixa de vazão estudada. O próximo passo foi realizar a avaliação do comportamento do SDA sobre a formação e escoamento do filme líquido durante o processo de destilação por filme líquido descendente.

Para isso foi necessário determinar a melhor configuração do SDA que permitisse o escoamento contra corrente da fase vapor gerado pela evaporação do filme líquido descendente. Baseando-se em trabalhos encontrados na literatura Bosmans, et al. (2001), Bosmans e

Uijen (2003) e Stroefler et al. (2007), onde as configurações utilizam um canal anular no sistema de distribuição por onde ocorre o escoamento da fase vapor, optou-se pela construção de um canal no interior do SDA para o escoamento da fase vapor.

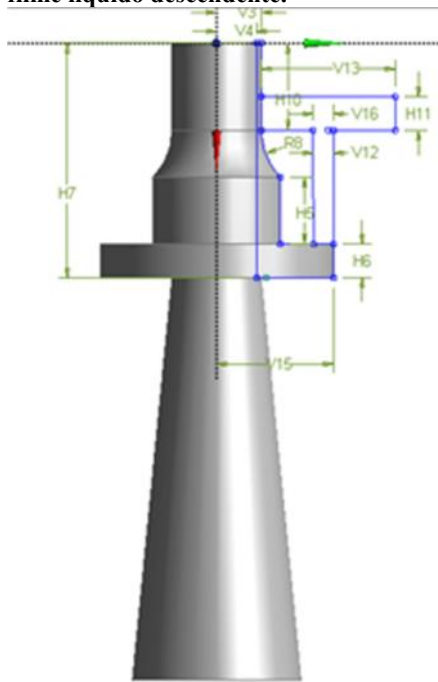
A construção deste canal no interior do SDA foi feita com base nos dados de projeto. O diâmetro interno na parte superior do SDA é de 12 mm (Figura 4.36) desta maneira manteve-se este valor para construção do canal através do qual escoar o vapor. Porém, vale ressaltar que o diâmetro externo na base do SDA, determinado a partir dos estudos fluidodinâmicos e experimentais é de 25 mm. Desta maneira foram feitos estudos para minimizar os efeitos de perda de carga e condensação da fase vapor ao escoar pelo canal, de maneira que na base do SDA foi feito um corte angular (retirando o ângulo reto) para que a fase vapor pudesse escoar com maior facilidade e ser recolhida no topo da unidade.

Para facilitar o escoamento da fase vapor, foi feito um corte com ângulo de 50° na base do SDA com objetivo de eliminar ângulos retos e diminuir a resistência ao escoamento do vapor. Este ângulo foi determinado realizando-se o corte até a metade da altura do SDA (10 mm). O resultado desta etapa foi a confecção de um aparato para alimentação do tubo de destilação em formato vazado (Figura 4.36). Na Tabela 4.5, são apresentados os dados de projeto do sistema de alimentação utilizado no protótipo de destilação.

Tabela 4.5: Dimensões do sistema de distribuição de alimentação desenvolvido.

Dimensão	Unidade (mm)
V3	6,75
V4	6,00
V12	3,00
V13	20,00
V15	17,5
V16	3,00
H5	10,00
H6	5,00
H7	2,00
H10	13,00
H11	5,00
R8	10,00

Figura 4.36: Esquema do SDA desenvolvido para alimentação da unidade de destilação por filme líquido descendente.



Realizada esta última modificação no projeto do DAS, o próximo passo foi avaliar sua eficiência na formação e manutenção do escoamento do filme líquido descendente durante o processo de destilação por filme líquido descendente à pressão atmosférica.

A concepção final do SDA desenvolvido tem como principal característica, frente aos sistemas de distribuição encontrados na literatura, ser estático, com um formato cônico, muito diferente dos encontrados que possuem formato de pratos rotativos ou pás deslizantes para formação do filme. No sistema desenvolvido já existe um canal anular por onde ocorre o escoamento da fase vapor gerada pela evaporação do filme líquido encaminhada até o condensador. Se levar em conta o fato de ser estático e possuir o canal para escoamento da fase vapor, em comparação aos sistemas propostos por Lavin (1988), Bosmans et al. (2001), Bosmans e Uijen (2003) ou Stroofer et al. (2007), este SDA apresenta grandes vantagens de construção e operação.

4.3 AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA DO SDA DESENVOLVIDO NA CAPACIDADE DE SEPARAÇÃO DA UNIDADE DE DESTILAÇÃO POR FILME LÍQUIDO DESCENDENTE UTILIZANDO TÉCNICAS DE CFD

A partir deste item serão apresentados os principais resultados obtidos através de simulações utilizando a técnica de CFD para avaliação da eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente para uma mistura binária água e etanol. Foram realizadas simulações para a unidade de destilação com dois perfis de temperatura:

- i) Isotérmica: recebe esta denominação, pois toda superfície evaporante é mantida à mesma temperatura radial e longitudinalmente;
- ii) Não Isotérmico: esta denominação é utilizada para indicar que existe um perfil longitudinal de temperatura na superfície evaporante, com temperatura maior na base (saída do filme líquido) e menor no topo (entrada do filme líquido), mantendo-se a temperatura radial uniforme.

Inicialmente os modelos implementados (para os dois perfis de temperatura) utilizando CFD foram corroborados com dados experimentais. Após a corroboração dos modelos matemáticos partiu-se para o estudo da eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade de destilação e determinação das melhores condições de operação.

A utilização da técnica de CFD para realização deste estudo justifica-se pelo grande número de informações possíveis de serem obtidos a partir dos resultados, dentre os quais se destacam perfis radiais e longitudinais de temperatura, concentração, velocidades das fases líquida e vapor, caracterização do escoamento multifásico, identificação de possíveis problemas de geometria, fornecimento de energia para evaporação do filme líquido descendente, além da redução dos custos com relação à execução dos experimentos.

4.3.1 Avaliação da eficiência do SDA na capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente operando com perfil de temperatura isotérmico

O primeiro passo para realização deste estudo foi a validação do modelo fluidodinâmico implementado, com suas respectivas condições de contorno. Para realização desta validação foram comparados dados de composição, vazão e temperatura na corrente de topo e temperatura da corrente de base.

Na Tabela (4.6) podem ser visualizados os dados experimentais em comparação aos dados obtidos via simulações fluidodinâmicas. Os dados experimentais foram obtidos em duplicata com valores das variáveis independentes, vazão de alimentação $17,5 \text{ kg.h}^{-1}$ e composição de alimentação 10 % (fração volumétrica) álcool e água. O valor da vazão de alimentação foi determinado com base nos resultados obtidos e apresentados nos itens (4.1.4) e (4.2.4), a partir dos quais optou-se pela utilização da vazão de alimentação média entre os dois extremos de valores encontrados (10 e 25 kg.h^{-1}) para os quais o SDA apresentou boa eficiência na formação e manutenção do filme líquido. Já a composição de alimentação foi definida com base nos trabalhos de Marangoni (2005) e Werle (2007) para efeito de comparação com uma unidade de destilação convencional a pratos.

Para comparação com os resultados obtidos das simulações, utilizou-se as condições de contorno apresentadas na Figura 4.37. Esta condição foi utilizada como ponto central no DCCR para o estudo dos efeitos das variáveis independentes sobre as variáveis dependentes (respostas).

Figura 4.37: Condições iniciais e de contorno utilizadas para realização das simulações com mistura de etanol e água para o perfil de temperatura isotérmico.

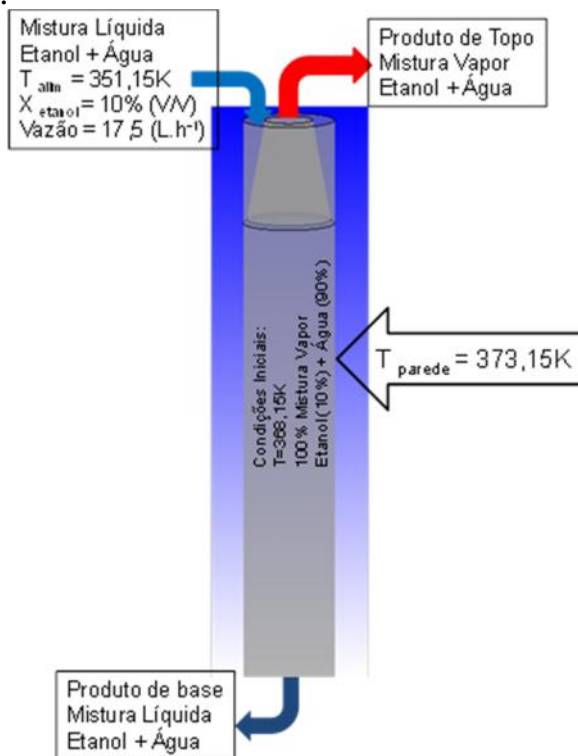


Tabela 4.6: Corroboração do modelo fluidodinâmico com os dados experimentais para o sistema operando com perfil de temperatura isotérmico.

Variável	Fração mássica de etanol no topo	Vazão Volumétrica topo (L.h ⁻¹)		Temperatura do topo (K)		Temperatura da base (K)		
Experimental	0,68	0,64	2,01	1,98	355,69	353,77	365,54	370,02
Modelo CFD	0,69		1,79		350,72		367,93	
Erro %	4,54		10,00		4,92		0,16	

Observando-se os dados apresentados na Tabela 4.6 pode-se concluir que o modelo fluidodinâmico implementado para realização das simulações foi capaz de representar o processo de destilação por filme líquido descendente a pressão atmosférica de maneira satisfatória,

apresentando um erro relativo máximo, calculado levando-se em consideração o valor experimental como parâmetro real, para a vazão volumétrica da corrente de topo de 10,00 % e 4,54 % na fração mássica de etanol.

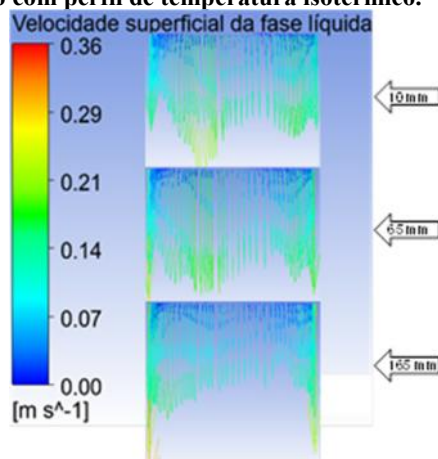
Esse erro pode ter ocorrido pelo fato de ter sido empregado um modelo ideal de equilíbrio na interface líquido vapor, com base nos trabalhos de Kolek et al. (2010) e Dziak e Kubala (2010), considerando que o processo de destilação por filme líquido descendente é um processo no qual ocorre o equilíbrio termodinâmico entre as fases líquidas e vapor. Além disso, desconsiderou-se a presença do azeótropo, mesmo tratando-se de uma mistura etanol e água. Estas hipóteses foram assumidas com objetivo de simplificar a modelagem fluidodinâmica empregada para realização das simulações. Considerou-se um modelo ideal de equilíbrio (Raoul e Antoine) assumindo-se que, durante o processo de destilação por filme líquido descendente à pressão atmosférica, ocorre um equilíbrio termodinâmico entre as fases líquida e gasosa, através da evaporação/condensação das moléculas e da existência de um refluxo interno. Porém o erro relativo encontrado para a vazão volumétrica da corrente de topo chegou aos 10 %, indicando que a utilização do modelo ideal de equilíbrio apresenta limitação para descrever o processo de destilação por filme líquido descendente à pressão atmosférica, quando se utiliza o perfil de temperatura isotérmico na superfície evaporante.

A seguir são apresentados os principais resultados obtidos a partir das simulações fluidodinâmicas utilizando-se as condições de contorno apresentadas na Figura 4.37 para mistura de etanol e água, analisando os fenômenos de transferência de calor, massa, momento e equilíbrio. A temperatura de parede (373,15 K) foi definido com base na temperatura de bolha da mistura etanol e água e a temperatura da alimentação foram definidas com base nos trabalhos de Marangoni (2005) e Werle (2007), utilizando-se 351,15 K mantendo-se a corrente de alimentação na condição de líquido subresfriado. Vale salientar que esta condição de operação da unidade foi utilizada como ponto central do DCCR utilizado para o planejamento das simulações.

A partir da realização das simulações fluidodinâmicas com objetivo de avaliar a eficiência do SDA sobre a capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente foi possível estudar o comportamento de variáveis importantes para o processo e que influenciam os fenômenos de transferência de calor, massa e momento. Na Figura 4.38 podem ser observados os vetores de velocidade

superficial da fase líquida que escoar sobre a parede do tubo de destilação.

Figura 4.38: Velocidade superficial da fase líquida representada a partir de vetores operando com perfil de temperatura isotérmico.



O comportamento da velocidade superficial da fase líquida sobre a superfície evaporante possui pequenas oscilações próximas à região de alimentação. Afastando-se desta região as oscilações vão diminuindo, apresentando uma velocidade superficial média de escoamento próxima a $0,2 \text{ m.s}^{-1}$. Este valor está de acordo para um processo de destilação por filme líquido descendente segundo Saifutdinov et al. (1999) e Kolek et al. (2010) que sugerem velocidade superficial da fase líquida abaixo de $0,3 \text{ m.s}^{-1}$.

Tal comportamento para velocidade superficial da fase líquida foi possível de ser obtido devido a geometria e relações de projeto do SDA, através das quais obteve-se a formação e escoamento do filme líquido descendente sobre toda superfície evaporante com valores de velocidade superficial de escoamento dentro da faixa desejada. A manutenção dos valores desta variável abaixo de $0,3 \text{ m.s}^{-1}$ é importante para garantir o tempo de detenção do líquido em contato com a superfície evaporante e garantir os processos de transferência de calor e massa.

O fato da velocidade média superficial ser aproximadamente $0,2 \text{ m.s}^{-1}$ implica em um tempo de detenção médio de 5 s, tempo este que o filme líquido fica em contato direto com a superfície evaporante que estava com um perfil de temperatura isotérmico (373,15 K). Observando-se a Figura 4.38 existem pequenas variações na velocidade

superficial da fase líquida, o que pode forçar um processo de não equilíbrio nestas regiões diminuindo a eficiência de separação e também a eficiência energética.

O estudo do comportamento do processo de transferência de energia na fase líquida é importante para o conhecimento e avaliação do processo de destilação por filme líquido descendente. Por isso nas Figuras 4.39 e 4.40 estão representados os perfis axiais de temperatura da fase líquida.

Figura 4.39: Perfis axiais de temperatura da fase líquida ao longo do perímetro da superfície evaporante operando com perfil de temperatura isotérmico.

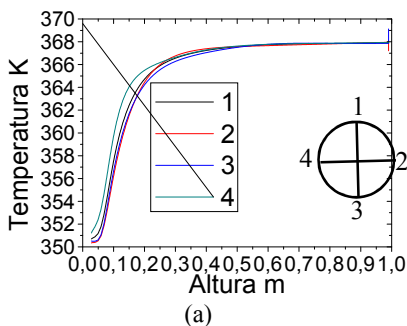
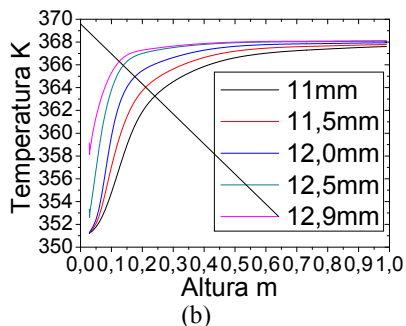


Figura 4.40: Perfis axiais de temperatura da fase líquida com variação radial operando com perfil de temperatura isotérmico.

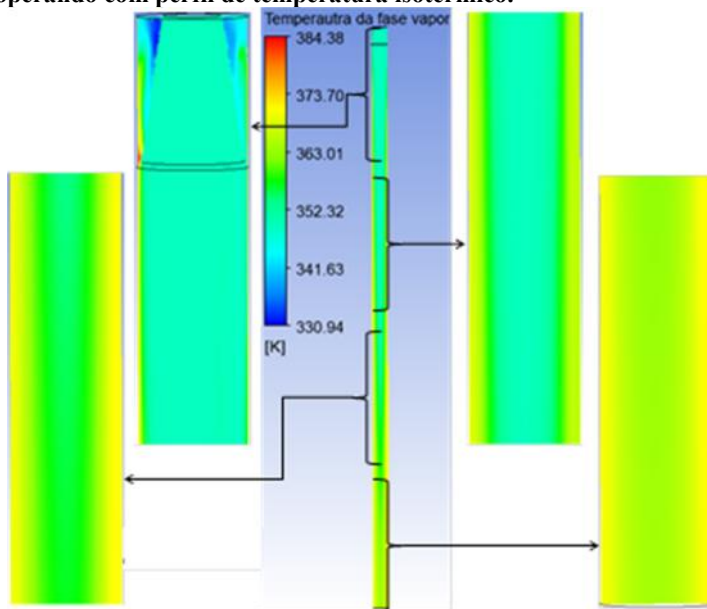


Observando-se os perfis axiais de temperatura na Figura 4.39 percebe-se que a superfície evaporante manteve a transferência de calor constante para o filme líquido descendente ao longo do perímetro do tubo de destilação, assim a temperatura do filme líquido apresentou perfis axiais muito parecidos. Esse comportamento é muito bom e indica que temperatura radial foi mantida constante ao longo do tubo como o desejado e também demonstra que a espessura do filme líquido e sua velocidade superficial apresentaram valores muito parecidos ao longo do comprimento do tubo de destilação. Este comportamento favorece os processos de transferência de calor e massa de maneira uniforme ao longo do tubo, aumentando a eficiência energética e de separação. O comportamento dos perfis axiais de temperatura fornece indícios de que a altura do tubo foi dimensionada corretamente e está de acordo com a capacidade de fornecimento de energia para manutenção destes perfis. Além disso, demonstra a eficiência do SDA na distribuição e

manutenção do filme líquido descendente, mesmo com o escoamento contra corrente da fase vapor gerada pela evaporação do filme.

Na Figura 4.40 pode-se observar que os perfis axiais de temperatura da fase líquida ao longo do raio do tubo apresentam uma variação, com temperatura maior do filme líquido próximo à superfície evaporante e diminuindo à medida que se afasta desta e aproxima-se da interface com a fase vapor, indicando um processo de transferência de calor da superfície evaporante para o filme líquido destilante. Esta diferença de temperatura vai diminuindo a medida que o líquido se afasta da região de alimentação e aproxima-se da saída, devido ao maior tempo de contato do filme líquido com a superfície evaporante, além da menor concentração de etanol na fase líquida. Na Figura 4.41 está representado um plano (Plano XZ) axial da temperatura da mistura vapor no interior do tubo de destilação, para as condições apresentadas na Figura 4.37.

Figura 4.41: Perfil de temperatura da mistura vapor (etanol/água) no plano XZ operando com perfil de temperatura isotérmico.



É possível observar na Figura 4.41 que processo de transferência de calor ocorre da parede do tubo para o filme líquido e posteriormente para fase vapor. Concluindo-se que a quantidade de energia fornecida

para manutenção do perfil isotérmico de temperatura na superfície evaporante para esta vazão de alimentação $17,5 \text{ kg.h}^{-1}$ é o suficiente para garantir o aquecimento e evaporação do filme líquido descendente para separação do componente mais volátil. O gradiente de temperatura vai diminuindo a medida que se afasta da região de alimentação e aproxima-se da região de saída do tubo de destilação, indicando a manutenção do perfil isotérmico na superfície evaporante e o aquecimento da fase líquida e vapor ao longo do comprimento do tubo devido ao maior tempo de contato entre o filme líquido e a superfície evaporante, fornecendo um perfil de temperatura decrescente da base para o topo da unidade de destilação.

Analisando apenas a fase vapor, é possível observar que existe um gradiente de temperatura axial e radial no interior tubo em decorrência do processo de evaporação do filme líquido descendente. Lembrando que a mistura etanol e água é alimentada na unidade de destilação como líquido subresfriado (351,15 K), com velocidade média superficial de $0,2 \text{ m.s}^{-1}$, entrando em contato com a superfície evaporante a 373,15 K. Próximo à região de alimentação o gradiente de temperatura é muito pequeno, pois nesta fase inicial ocorre a transferência de calor da superfície evaporante para o aquecimento do filme líquido de subresfriado até sua temperatura de bolha 370,95 K. Observando-se o gradiente de temperatura a medida em que afasta-se da região de alimentação é possível observar que ocorre a evaporação de parte do filme líquido descende até chegar próximo a saída do tudo onde praticamente inexistente um gradiente de temperatura pelo empobrecimento da fase líquida em etanol o que eleva a temperatura de bolha da mistura e esta estar muito próxima a 373 K.

Vale lembrar que foi utilizado um modelo ideal de equilíbrio para modelar este processo. Observando-se o gradiente radial de temperatura percebe-se que a escolha pelo modelo ideal de equilíbrio pode apresentar algumas limitações para geração dos resultados nos pontos do tubo de destilação, onde o gradiente de temperatura da fase vapor aproxima-se de um gradiente característico de um evaporador, principalmente na região próxima a base da unidade de destilação.

Para estudar os fenômenos de transferência de calor e massa que ocorrem no interior do tudo de destilação foram traçados perfis axiais ao longo do raio para a fração mássica de etanol e temperatura na fase vapor, conforme podem ser visualizados nas Figuras 4.42 a 4.45.

Figura 4.42: Perfis axiais da fração mássica de etanol na fase vapor ao longo do raio operando com perfil de temperatura isotérmico.

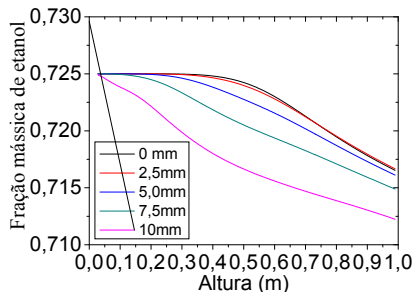


Figura 4.43: Perfis axiais da temperatura da fase vapor ao longo do raio operando com perfil de temperatura isotérmico.

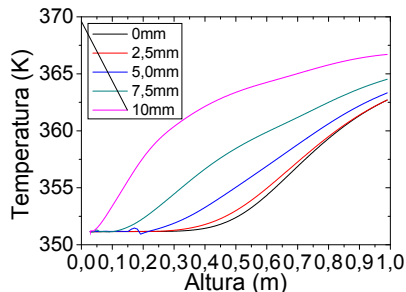


Figura 4.44: Perfil axial da fração mássica de etanol na fase vapor em $r = 0$ operando com perfil de temperatura isotérmico.

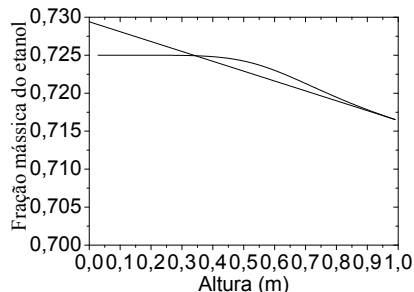
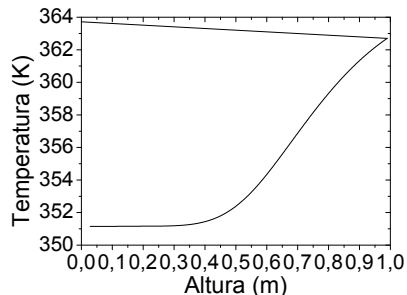


Figura 4.45: Perfil axial de temperatura da fase vapor em $r = 0$ operando com perfil de temperatura isotérmico.



Observando-se os perfis da fração mássica de etanol percebe-se que a medida que afasta-se do centro do tubo ($r = 0$) em direção à interface com a fase líquida, a fração mássica de etanol vai diminuindo, indicando que existe um processo de transferência de calor e massa radial no tubo de destilação com enriquecimento em etanol na direção de $r = 0$. Axialmente também ocorre um processo de enriquecimento da fase vapor em etanol, porém com menor intensidade, indicando que nesta forma de operação com perfil de temperatura isotérmico a unidade destilação aproxima-se do modo de operação de um evaporador e a utilização dos modelos ideais de equilíbrio podem apresentar algumas limitações, pois apesar de haver um perfil decrescente de temperatura na

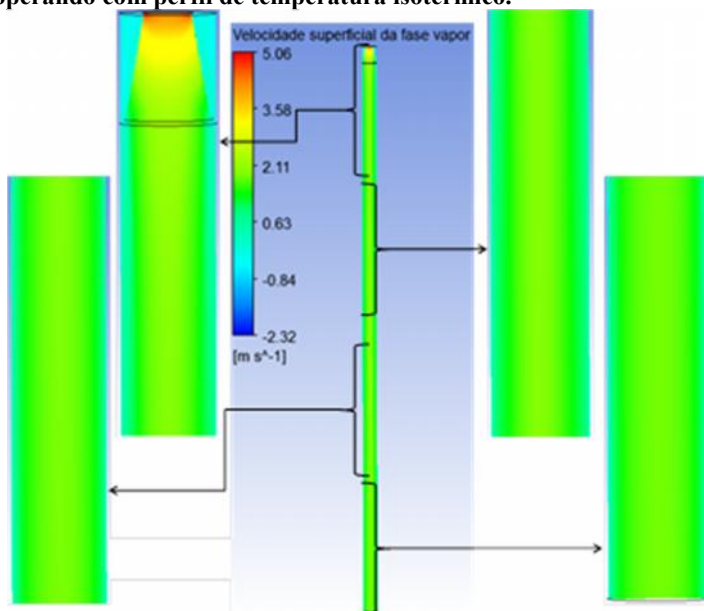
fase vapor em $r = 0$, a variação da fração mássica ao longo do tubo é muito pequena Figura 4.44.

A partir dos perfis de temperatura da fase vapor apresentados nas Figuras 4.43 e 4.45 é possível perceber que o processo de transferência de calor ocorre da superfície evaporante para o centro do tubo de destilação, de maneira que em $r = 0$ encontra-se o menor valor para a temperatura da fase vapor e esta vai aumentando na medida em que se aproxima de $r = R$, onde R indica a superfície da parede. Axialmente observa-se que ocorre uma variação de aproximadamente 18 K na temperatura da fase vapor devido ao maior tempo de contato do filme com a superfície evaporante.

Outra variável importante a ser analisada e estudada é a velocidade superficial da fase vapor no interior do tubo de destilação, estando diretamente ligada ao comportamento da fase líquida, pois o escoamento da fase vapor contra corrente pode influenciar na manutenção do filme líquido sobre a superfície evaporante, através da perturbação do escoamento ou até mesmo provocar o aparecimento de caminhos preferenciais, de escoamento do filme, o que prejudica a eficiência energética e de separação devido ao menor aproveitamento da superfície evaporante e também o tempo de contato entre as fases para que ocorra o processo de transferência de massa e enriquecimento da fase vapor em etanol. Caso as velocidades superficiais de escoamento de ambas as fases sejam muito elevadas, maiores do que $0,3$ e 3 m.s^{-1} para as fases líquidas e vapor respectivamente, segundo Saifutdinov et al. (1999), e quanto maior a distância entre estas velocidades superficiais de escoamento, menor o tempo de contato entre elas, menor a probabilidade de ocorrer equilíbrio termodinâmico e maior a probabilidade da unidade se comportar como um evaporador ao invés de uma destilação (FEDDAOUI et al. 2003).

Por isso, deve se manter um compromisso entre as velocidades na tentativa de aumentar o contato entre as fases e forçar um equilíbrio termodinâmico para aumentar a eficiência de transferência de calor e massa. Na Figura 4.46 está representado o perfil da velocidade superficial da fase vapor no plano XY ao longo do comprimento do tubo de destilação.

Figura 4.46: Perfil axial de velocidade superficial da fase vapor, no plano XY operando com perfil de temperatura isotérmico.



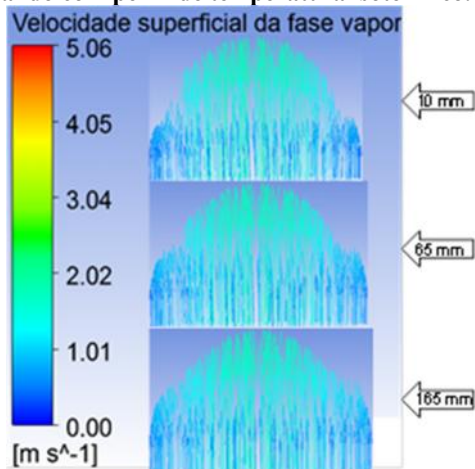
Observando-se o comportamento da velocidade superficial da fase vapor no plano XY, percebe-se que ela vai aumento na direção de $r = 0$ e também à medida que se aproxima da região de alimentação (topo da unidade destilação) onde existe um estrangulamento da área de escoamento desta fase. Não é possível perceber uma diferença significativa no valor da velocidade superficial da fase vapor ao longo da altura do tubo (Figura 4.46) reforçando a hipótese desta maneira de que a utilização do perfil de temperatura isotérmico pode aproximar o sistema de destilação por filme líquido descendente a um evaporador.

Em um evaporador convencional não ocorre o enriquecimento da fase vapor no seu interior, ou seja, a molécula desprendida da fase líquida, uma vez na fase vapor encaminha-se até o condensador sem ocorrer o processo de transferência de massa, não ocorrendo o equilíbrio termodinâmico entre as fases líquida e vapor. O vapor é gerado na superfície do líquido, cuja condição termodinâmica encontra-se abaixo do seu ponto de bolha, a uma taxa que é apenas função da temperatura da superfície do líquido e a da condição do vapor acima da superfície. Por isso, os perfis de fração mássica de etanol, das velocidades das fases líquida e vapor, quando a unidade opera com perfil de temperatura

isotérmico na superfície evaporante, aproxima-se do modo de operação de um evaporador, assim a condição de equilíbrio termodinâmica assumida apresenta limitações.

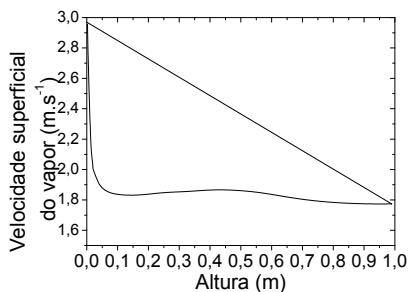
Analisar o comportamento dos vetores velocidade da fase vapor é importante para determinar o comportamento desta fase no interior do tubo de destilação, além de avaliar se o mesmo está sendo simétrico, como esperado pelas condições de contorno assumidas para realização das simulações e dos experimentos. Desta maneira na Figura 4.47 estão representados os vetores velocidade da fase vapor no interior do tubo de destilação.

Figura 4.47: Representação da velocidade superficial da fase vapor através de vetores operando com perfil de temperatura isotérmico.



A velocidade média de ascensão da fase vapor está entre 1,0 e 2,0 m.s⁻¹, dentro da faixa indicada por Saifutdinov et al. (1999), Saifutdinov (2003), Feddaoui e Mir (2007) e Kolek et al. (2010), com um perfil parabólico e simétrico no interior do tubo de destilação. Na Figura 4.48 está representado o perfil axial de velocidade da fase vapor em $r = 0$ (centro do tubo).

Figura 4.48: Perfil axial ($r=0$) da velocidade superficial da fase vapor operando com perfil de temperatura isotérmico.



Observa-se na Figura 4.48 pelo perfil de velocidade superficial da fase vapor no centro do tubo de destilação que não existe uma grande variação desta ao longo a altura do tubo de destilação, apresentando um aumento apenas na região de saída do vapor, onde ocorre um estrangulamento na área de escoamento desta fase, pois a fase vapor passa no interior do SDA. Pelo fato de não existir uma grande variação da velocidade superficial da fase vapor, isso indica que a operação do sistema de destilação por filme líquido descendente, com um perfil de temperatura isotérmico na superfície evaporante, torna a operação da unidade um sistema de difícil formação de equilíbrio entre as fases líquida e vapor.

Porém os resultados obtidos para o sistema operando com perfil de temperatura isotérmico demonstraram a eficiência do SDA desenvolvido na formação e manutenção do filme líquido descendente durante o processo de separação da mistura etanol água.

4.3.2 Avaliação da eficiência do SDA na capacidade de separação da unidade de destilação por filme líquido descendente operando com perfil de temperatura não isotérmico

Inicialmente foi realizada a validação do modelo fluidodinâmico implementado, com suas respectivas condições de contorno. Para realização desta validação foram comparados dados de composição, vazão e temperatura na corrente de topo e temperatura da corrente de base, com um perfil de temperatura não isotérmico na superfície evaporante do filme líquido descendente.

Na Tabela 4.7 podem ser visualizados os dados experimentais em comparação aos dados obtidos a partir da realização de simulações

fluidodinâmicas. Os dados experimentais foram obtidos em duplicata com valores das variáveis independentes, vazão de alimentação 17,5 L.h⁻¹ e composição de alimentação 10 % (fração volumétrica) álcool e água.

Para efeito de comparação com os resultados obtidos a partir das simulações, utilizaram-se exatamente as condições experimentais descritas anteriormente para as variáveis independentes e condições de contorno. Esta condição foi utilizada como ponto central no DCCR para estudo do efeito das variáveis independentes sobre as variáveis dependentes (respostas).

Tabela 4.7: Corroboração do modelo fluidodinâmico com os dados experimentais para o sistema operando com perfil de temperatura não isotérmico.

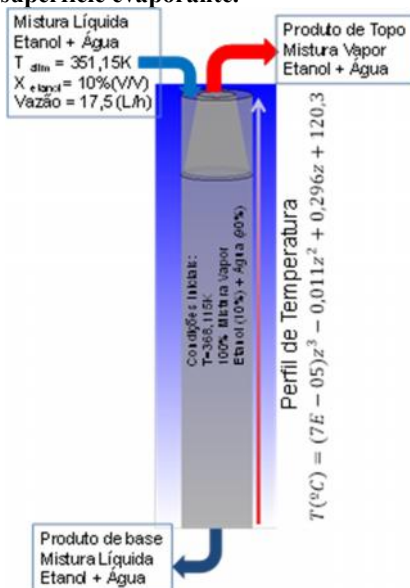
Variável	Fração mássica de etanol		Vazão Volumétrica topo L.h ⁻¹		Temperatura do topo K		Temperatura da base K	
Experimental	0,73	0,75	1,67	1,64	365,89	362,35	371,28	368,58
Modelo CFD	0,73		1,71		369,24		374,93	
Erro (%)	1,35		3,64		5,62		5,17	

Observando-se os dados apresentados na Tabela 4.7 pode-se concluir que o modelo fluidodinâmico implementado para realização das simulações da unidade de destilação, operando com perfil de temperatura não isotérmico foi capaz de representar o processo de destilação por filme líquido descendente a pressão atmosférica de maneira satisfatória, apresentando um erro relativo máximo para a temperatura da corrente de topo de 5,62 %.

Em comparação ao erro encontrado para simulação da unidade operando com perfil de temperatura isotérmico, este valor foi menor, o que pode estar indicando que a utilização dos modelos ideais de equilíbrio para operação com perfil de temperatura não isotérmico pode ser satisfatório para representar a existência do equilíbrio termodinâmico.

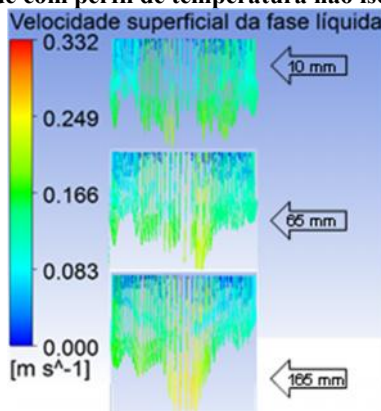
A seguir são apresentados os principais resultados obtidos a partir das simulações fluidodinâmicas utilizando-se o modo de operação com perfil de temperatura não isotérmico na superfície evaporante e as condições de contorno apresentadas na Figura 4.49, sendo esta condição o ponto central do DCCR utilizado para o planejamento das simulações.

Figura 4.49: Condições contorno utilizadas para realização das simulações com mistura de etanol e água para um sistema com perfil de temperatura não isotérmico na superfície evaporante.



Na Figura 4.50 podem ser observados os vetores de velocidade superficial da fase líquida que escoam sobre a parede interna do tubo de destilação.

Figura 4.50: Velocidade superficial da fase líquida representada a partir de vetores para unidade com perfil de temperatura não isotérmico.



Observando-se os vetores que representam a velocidade superficial do líquido escoando sobre a superfície evaporante nota-se que existem alguns pontos com velocidades maiores que outros, o que pode ser explicado pela própria característica do escoamento de filme que, segundo Ticona (2003), apresenta ondulações ao longo do escoamento, o que pode provocar estas pequenas oscilações na velocidade superficial. Mas é importante notar que a velocidade superficial média de escoamento do líquido não ultrapassou $0,25 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, encontrando-se dentro da faixa indicada para este tipo de processo de destilação segundo Saifutdinov et al. (1999) e Batistella et al. (1999).

Mantendo-se a velocidade superficial abaixo de $0,3 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, é possível favorecer o maior contato entre as fases líquida e vapor, além de aumentar o tempo de contato da fase líquida com a superfície evaporante, aumentar a eficiência de separação por maximizar os processos de transferência de calor e massa e aumentar a eficiência energética devido ao maior aproveitamento do calor fornecido pela superfície evaporante em virtude do maior tempo de contato. Esta maximização das eficiências de separação e energética só é possível pela eficiência do SDA na formação e manutenção do filme líquido sobre toda superfície evaporante. Quanto maior a uniformidade de distribuição do filme líquido, maiores serão os índices de separação e aproveitamento energético. Nas Figuras 4.51 e 4.52 estão representados os perfis axiais de temperatura da fase líquida.

Figura 4.51: Perfis axiais de temperatura da fase líquida ao longo do perímetro da superfície evaporante para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.

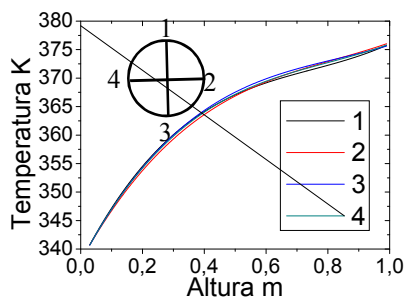
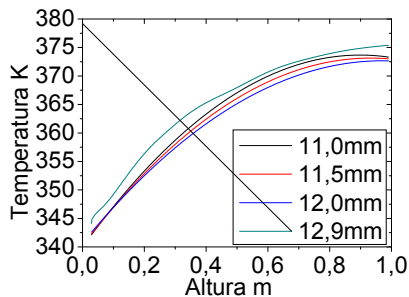


Figura 4.52: Perfis axiais de temperatura da fase líquida com variação radial para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.



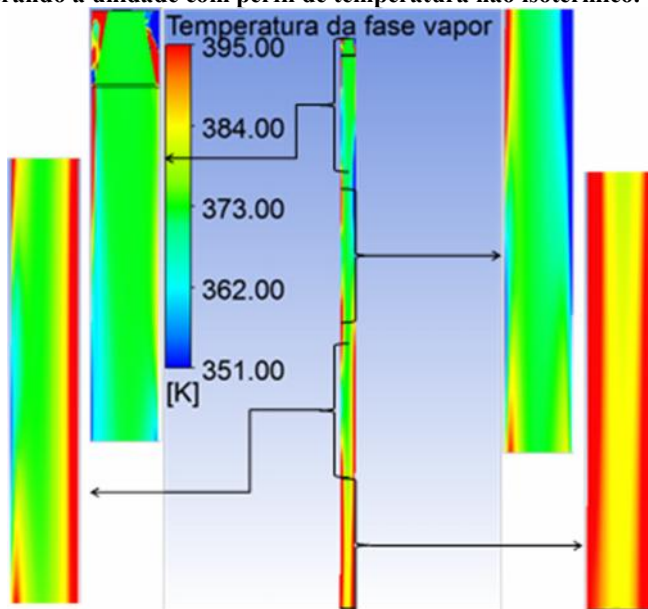
Observando-se a Figura 4.51 os perfis axiais de temperatura ao longo do perímetro da superfície evaporante, percebe-se que a temperatura da superfície evaporante mantém-se constante radialmente, apresentando os perfis de temperatura muito parecidos ao longo do tubo. Isso indica a presença uniforme do filme líquido descendente sobre toda superfície evaporante, demonstrando a eficiência do SDA. Pode-se concluir também que a hipótese de manutenção da temperatura no perfil radial é atendida, ou seja, o fornecimento de energia atende a necessidade prevista, além de perceber a grande variação de temperatura (aproximadamente 20 K) da base para o topo da unidade (1 m de tubo de destilação). Pode ser indício de operação da unidade com a presença de equilíbrio termodinâmico entre as fases. Alcançando-se uma condição de equilíbrio espera-se que a eficiência de separação e energética sejam maiores.

Na Figura 4.52 pode-se observar que os perfis de temperatura da fase líquida com mudança radial apresentam variação. É maior a temperatura do filme líquido próximo à superfície evaporante e diminui à medida que se afasta desta e aproxima-se da interface com a fase vapor, indicando um processo de transferência de calor da superfície evaporante para o filme líquido descendente. Existe uma variação de temperatura da fase líquida da base para o topo da coluna próxima a 20 K, induzido pelo próprio perfil de temperatura não isotérmico que a superfície evaporante está exposta.

Na Figura 4.53 está representado um plano (Plano XZ) axial da temperatura da mistura vapor no interior do tubo de destilação obtido, para as condições apresentadas na Figura 4.50. É possível observar na Figura 4.53 que o processo de transferência de calor ocorre com maior intensidade na região próxima a base da coluna, onde a superfície evaporante está exposta a maior temperatura. Analisando apenas a fase vapor é possível observar que existe um gradiente de temperatura axial e radial no interior tubo em decorrência do processo de evaporação.

Estas observações permitem concluir que a quantidade de energia fornecida para manutenção do perfil não isotérmico na superfície evaporante para esta vazão de alimentação $17,5 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ é suficiente para garantir o aquecimento e evaporação do filme líquido descendente para separação do componente mais volátil. A manutenção do perfil não isotérmico na superfície evaporante e o aquecimento da fase líquida e vapor ao longo do comprimento do tubo devido ao maior tempo de contato entre o filme líquido e a superfície evaporante fornece um perfil de temperatura decrescente da base para o topo da unidade de destilação e também da superfície evaporante para o centro do tubo de destilação.

Figura 4.53: Perfil de temperatura da mistura vapor (etanol/água) no plano XZ operando a unidade com perfil de temperatura não isotérmico.



Analisando apenas a fase vapor é possível observar que existe um gradiente de temperatura axial e radial no interior do tubo em decorrência do processo de evaporação do filme líquido. Lembrando que a mistura etanol e água é alimentada na unidade de destilação como líquido subresfriado (351,15 K), com velocidade média superficial de $0,25 \text{ m.s}^{-1}$, entrando em contato com a superfície evaporante que está exposta a um perfil de temperatura não isotérmico. Próximo à região de alimentação o gradiente de temperatura é pequeno, pois nesta fase inicial ocorre a transferência de calor da superfície evaporante para o aquecimento do filme líquido subresfriado até sua temperatura de bolha (370,95 K). Analisando-se o gradiente de temperatura, à medida que se afasta da região de alimentação é possível observar que ocorre a evaporação de parte do filme líquido descendente até chegar próximo a saída do tubo onde praticamente inexiste um gradiente de temperatura axial pelo empobrecimento da fase líquida em etanol, o que eleva a temperatura de bolha da mistura.

Nas Figuras 4.54 a 4.57 apresentam-se os perfis para fração mássica de etanol e temperatura da fase vapor com variação radial ao longo do tubo de destilação.

Figura 4.54: Perfis axiais da fração mássica de etanol na fase vapor ao longo do raio para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.

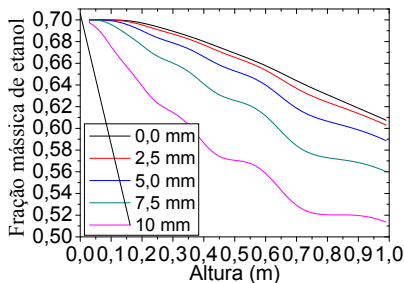


Figura 4.55: Perfis axiais da temperatura da fase vapor ao longo do raio para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.

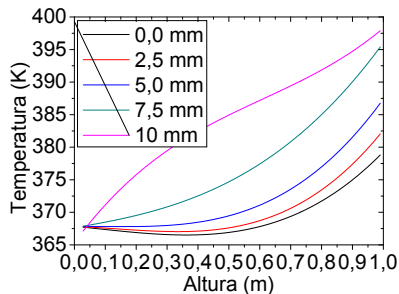


Figura 4.56: Perfil axial da fração mássica de etanol na fase vapor em $r = 0$ para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.

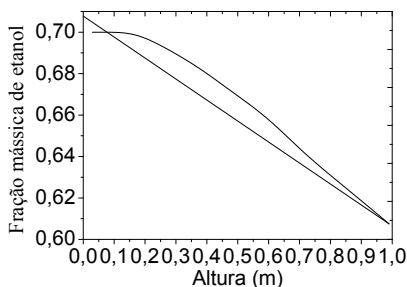
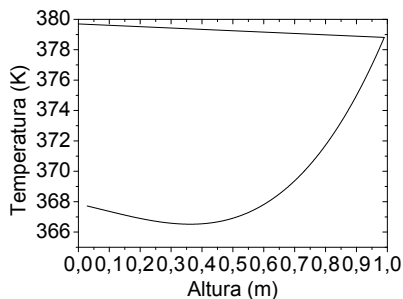


Figura 4.57: Perfil axial de temperatura da fase vapor em $r=0$ para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.



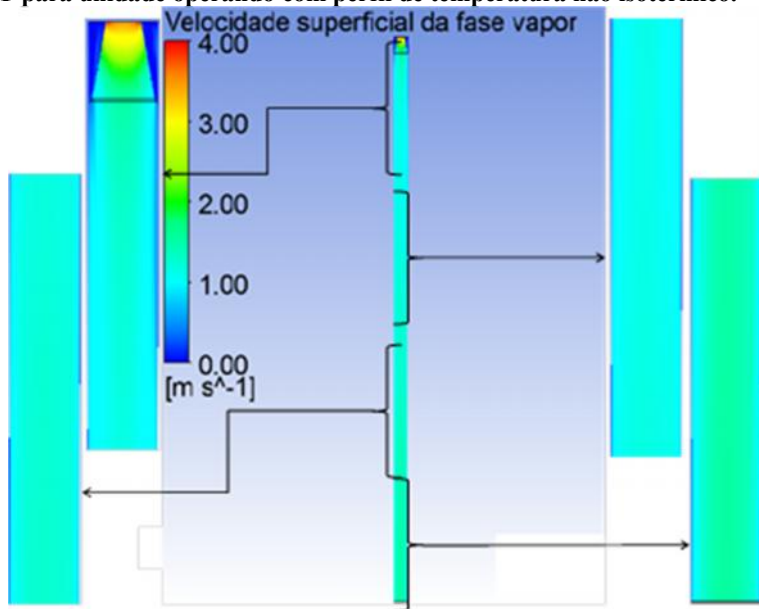
Observando-se os perfis da fração mássica de etanol à medida que se afasta do centro do tubo ($r = 0$) em direção à interface com a fase líquida, a fração mássica de etanol diminui, indicando um processo de transferência de calor e massa radial no tubo de destilação com enriquecimento em etanol na direção de $r = 0$. Axialmente também ocorre um processo de enriquecimento da fase vapor em etanol com maior variação da concentração de etanol na fase vapor próximo à interface das fases líquida e vapor.

A partir dos perfis de temperatura da fase vapor, apresentados nas Figuras 4.54 e 4.57, é possível perceber que o processo de transferência

de calor ocorre da superfície evaporante para o centro do tubo de destilação, de maneira que em $r = 0$ encontra-se o menor valor para a temperatura da fase vapor e esta vai aumentando a medida em que se aproxima de $r = R$ (em direção a parede da superfície evaporante). Axialmente observa-se que ocorre uma variação de, aproximadamente, 25 K na temperatura da fase vapor.

Na Figura 4.58 está representado o perfil da velocidade superficial da fase vapor no plano XY ao longo do comprimento do tubo de destilação.

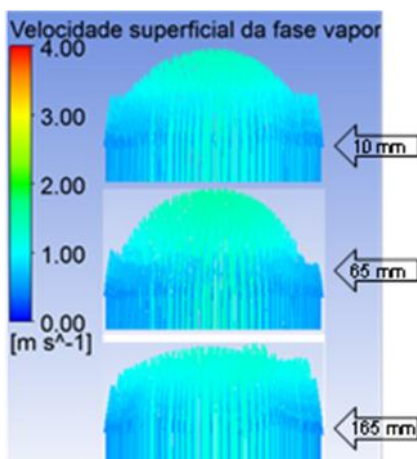
Figura 4.58: Perfil axial de velocidade superficial da fase vapor, no plano XY para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.



Observando-se o comportamento da velocidade superficial da fase vapor no plano XY, percebe-se que ela vai aumentando na direção $r = 0$ e próximo à região de alimentação onde existe um estrangulamento da área de escoamento desta fase. Observa-se na Figura 4.58 a existência de uma diferença no valor da velocidade superficial da fase vapor ao longo da altura do tubo reforçando a hipótese, desta maneira, a utilização do perfil de temperatura não isotérmico para o sistema de destilação por filme líquido descendente aproxima-se de uma operação de equilíbrio. O que pode justificar a utilização de um modelo ideal de

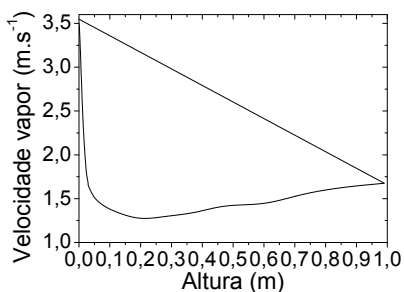
equilíbrio para previsão da destilação por filme líquido à pressão atmosférica. Por isso, os perfis de fração mássica de etanol, das velocidades das fases líquida e vapor, quando a unidade opera com perfil de temperatura não isotérmico na superfície evaporante aproxima-se do modo de operação de uma destilação, assim a condição de equilíbrio termodinâmica assumida pode ser válida. Na Figura 4.59 estão representados os vetores velocidade da fase vapor no interior do tubo de destilação.

Figura 4.59: Representação da velocidade superficial da fase vapor através de vetores para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.



Observa-se que a fase vapor está no sentido ascendente, contracorrente com o líquido descendente nas paredes do tubo. Percebe-se também que a velocidade média de ascensão da fase vapor está entre $1,0$ e $2,0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, com um perfil parabólico e simétrico no interior do tubo de destilação. Na Figura 4.60 está representado o perfil de velocidade da fase vapor em $r = 0$.

Figura 4.60: Perfil axial ($r = 0$) da velocidade superficial da fase vapor para unidade operando com perfil de temperatura não isotérmico.



Observa-se pelo perfil de velocidade superficial da fase vapor no centro do tubo de destilação que existe uma variação desta ao longo da altura do tubo de destilação. Como em um processo de destilação convencional, aqui a velocidade da fase vapor próximo à base (evaporador) é maior e vai diminuindo à medida que se aproxima do topo, encontrando um fluxo de líquido contra corrente com o qual vai trocando massa e energia. A velocidade da fase vapor tem um aumento apenas na região de saída do vapor, onde ocorre um estrangulamento na área de escoamento desta fase, pois a fase vapor passa no interior do SDA.

É muito importante ressaltar também que os resultados obtidos para o sistema operando com perfil de temperatura não isotérmico demonstraram a eficiência do SDA desenvolvido na formação e manutenção do filme líquido descendente durante o processo de destilação da mistura etanol água.

4.3.2.1 Comparação dos modos de operação com perfil de temperatura: “Isotérmico” e “Não Isotérmico”

Neste item são apresentados de maneira sintetizada (Tabela 4.8) os principais resultados obtidos a partir da realização das simulações fluidodinâmicas. Avaliando-se a eficiência do SDA na formação e manutenção do filme líquido no funcionamento da unidade de destilação por filme líquido descendente com perfil de temperatura isotérmico e não isotérmico, sobre a eficiência de separação e energética.

Tabela 4.8: Comparação dos resultados de eficiência de operação da unidade de destilação com perfil de temperatura isotérmico e não isotérmico.

	$X_{\text{etanol topo}}$	Vazão	Vazão	$T_{\text{topo K}}$	$T_{\text{base K}}$	Recuperação	Etanol
		Topo L.h ⁻¹	Base L.h ⁻¹			Etanol	Recuperado/W.h
Isotérmico	0,73	2,21	23,17	355,35	368,20	0,91	0,81
Não Isotérmico	0,91	1,90	23,42	377,02	380,02	0,96	1,04

Analisando-se os resultados apresentados conclui-se que o SDA desenvolvido para formação e manutenção do filme líquido descendente na unidade de destilação apresentou uma grande eficiência em se tratando da quantidade de etanol recuperado no topo da coluna. Isso demonstra que o filme líquido formado e distribuído pelo SDA cobriu grande parte da área da superfície evaporante, maximizando a eficiência de separação e energética. Mesmo com o fluxo contra corrente da fase vapor o filme líquido manteve-se escoando sobre toda superfície evaporante.

Em relação ao perfil de temperatura utilizado na superfície evaporante, o que forneceu os melhores resultados com relação à eficiência de separação e energética foi o não isotérmico, além da obtenção de melhor purificação entre as condições de operação testadas.

Os resultados obtidos para os experimentos realizados com perfil de temperatura não isotérmico na superfície evaporante foram comparados com os resultados obtidos por Marangoni (2005) em unidade experimental convencional. Primeiramente, é importante observar que a área total de borbulhamento na unidade a pratos convencional é de 0,312 m², ou seja, esta é a área de troca fornecida para promover a separação de uma mistura com composição volumétrica de etanol na alimentação de 10 % obtendo-se cerca de 90 % (fração volumétrica) de etanol no topo da coluna. Esta mesma área seria obtida para a destilação por filme líquido descendente (espessura do filme de 3 mm), com um tubo de 26 mm de diâmetro e aproximadamente 4 m de altura. No entanto, o sistema de calor fornecido à unidade por filme descendente é eficiente, uma vez que não apresenta as perdas comuns observadas em uma destilação convencional e o SDA desenvolvido apresenta boa eficiência de formação e manutenção do filme líquido descendente sobre a superfície evaporante. Além disso, trabalhos como Saifutdinov et al. (1999) e Saifutdinov (2003) demonstram que é possível ter unidades compactas e separações adequadas com fornecimento de energia otimizado.

A unidade que está sendo simulada possui 26 mm de diâmetro e apenas 1 m de altura. Esta comparação visa verificar em qual estágio de uma destilação convencional a separação obtida estaria situada. Os resultados convencionais comparados com os obtidos na destilação por filme líquido descendente com perfil de temperatura não isotérmico são apresentados na Tabela 4.9.

Tabela 4.9: Comparação entre os resultados obtidos para a separação de etanol e água com a destilação convencional e com filme líquido descendente.

Variável	Destilação Convencional	Destilação por filme
Temperatura na base da coluna	98°C	95°C
Fração volumétrica de etanol no topo	92%	90%
Relação entre vazão de destilado e de alimentação	0,016	0,104

Analisando-se a relação entre a vazão de alimentação e a de destilado observa-se que, proporcionalmente à vazão de alimentação, a produção de destilado é maior para a destilação por filme líquido descendente. O resultado da fração mássica de etanol no destilado, obtido através da realização das simulações fluidodinâmicas com a unidade por filme líquido descendente é muito próxima ao desejado 92 % o que demonstra a grande viabilidade de utilização do SDA desenvolvido e também do processo de destilação por filme líquido descendente a pressão atmosférica.

5 CONCLUSÕES

O desenvolvimento do projeto do SDA baseado em dados da literatura, modelagem fenomenológica, resultados experimentais e simulados forneceu como resultado um sistema de distribuição de alimentação capaz de manter a eficiência de distribuição e manutenção do filme líquido descendente sobre toda superfície evaporante, para uma faixa ideal de vazão de 10 a 25 ($\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$), operando a temperatura ambiente com água. O sistema desenvolvido também se mostrou eficiente com relação a manutenção do filme quando utilizou-se um fluido com características físicas diferentes da água. Com estes resultados mostrou-se a viabilidade de utilização do SDA para utilização no processo de destilação por filme líquido descendente à pressão atmosférica.

A eficiência na formação e manutenção do filme líquido descendente possui influência direta sobre a eficiência de separação e energética no processo de destilação por filme. Assim, o SDA desenvolvido foi testado no processo de destilação de uma mistura binária etanol e água, com objetivo de avaliar sua eficiência sobre o processo de separação e eficiência energética para a unidade de destilação com dois perfis distintos de temperatura na superfície evaporante, isotérmico e não isotérmico. Os resultados obtidos a partir da realização de testes experimentais e simulações fluidodinâmicas realizadas comprovaram a eficiência do SDA no que diz respeito ao processo de separação, com os dois perfis de temperatura na superfície evaporante, demonstrando a grande viabilidade de utilização do SDA.

5.1 SUGESTÕES

Este trabalho consistiu na proposta de uma modelagem fluidodinâmica para o processo de destilação por filme líquido descendente a pressão atmosférica, até o presente momento muito pouco estudado. Por isso foram identificados alguns aspectos que devem ser mais bem explorados. Estes são apresentados na forma de sugestões como:

1. avaliar se o processo de destilação por filme líquido descende a pressão atmosférica opera com equilíbrio de fases;
2. realização de um estudo completo sobre a forma do perfil de temperatura, isotérmico e não isotérmico, utilizando outras quantidades de energia fornecida para evaporação do filme líquido descendente e outros perfis de temperatura;

3. testar outras misturas para avaliar eficiência do SDA sobre a capacidade de separação e produção da unidade de destilação por filme líquido descendente.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDERSON, J. D. *Computational Fluid Dynamics - The Basics with Applications*. New York, McGraw-Hill International Editions, 1995.

ARRISON N.L. *Horizontal Distillation Apparatus and Method*. B01D 3/00. CA, WO 00/64553. 23/04/1999, 2000.

ASSAD, M. E. H., LAMPINEN, M. J. Mathematical modeling of falling liquidfilm evaporation process. **International Journal Refrigeration**. 25, 2002, 985-991.

ATLE C. C., SIGURD S., KRISTIAN L. Complex distillation arrangements: Extending the petlyuk ideas. **Computers & Chemical Engineering**. 21, 1997, 237 – 242.

BATISTELLA, C.B. *Tecnologia da destilação molecular: da modelagem matemática à obtenção de dados experimentais aplicada a produtos de química fina*. 1999. 216 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas. 1999.

BATISTELLA, C. B. *Modelagem e simulação de destiladores moleculares de filme descendente e centrífugo*. 1996. 176p. Dissertação de Mestrado (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas. 1996.

BATISTELLA, C. B.; WOLF MACIEL, M. R. Modeling, simulation and analysis of molecular distillators: centrifugal and falling film. **Computer Chemical Engineering**., 20, 1996, 19-24.

BARDINA, J. E., HUANG, P. G. e COAKLEY, T. Turbulence modeling validation. **American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal**, 1997.

BATISTELLA, C. B., MORAES, E. B., WOLF MACIEL, M. R. Comparing Centrifugal And Falling Film Molecular Stills Using Reflux And Cascade For Fine Chemical Separations. **Computers and Chemical Engineering Supplement**, 1999, 767-770.

BHANDARKAR, M.; FERRON, J. R. Transport process in thin liquid films. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, 27, 1988, 1016-1026.

BOSMANS, B.H., KUSTERS K.A., KONIJN, G. *Gas-liquid contacting tray*. B01D 003/20, EP, Patent number: 00200522-1, 16/02/2000, 27/08/2001.

BOSMANS, B. H., UIJEN, W. A. T. *Gas Liquid Tray*. B01D3/20; B01D3/14; B01F3/04, Israel, Patent number: 6588735, 01/10/2001, 07/08/2003.

BURROWS, G. *Molecular Distillation*. Oxf. Univ. Press (Oxford), 1960.

DROSOS, E. I. P., PARAS, S. V. e KARABELAS, A. J. Counter-current gas-liquid flow in vertical narrow channels. In: *3rd Chemical Engineering Conference For Collaborative Research In Eastern Mediterranean*, Halkidik. 2003.

DZIAK, J., KUBALA, M. Heat and mass transfer during thin-film evaporation of two-component liquid solutions. In: *20th European Symposium On Computer Aided Process Engineergin – Escape20*, Ischia, Naples, Italy, 2010.

DZIAK, J. Mass and heat transfer during thin-film evaporation of liquid solutions. **Advanced Topics in Mass Transfer**. Edited by Prof. Mohamed El-Amin. INTECH, 2011.

FEDDAOUI, M., MIR, A., BELAHMIDI, E. Co-current turbulent mixed convection heat and mass transfer in falling film of water inside a vertical heated tube, **International Journal Heat Mass Transfer**, 46, 2003, 3497-3509.

FEDDAOUI, M., MIR, A., Turbulent mixed convection heat and mass exchanges in evaporating liquid film along a vertical tube. **International Journal Heat Exchangers**, 8, 2007, 15–13.

FONTES, C. E., SILVA, L. F. L. R., LAGE, P. L. C., RODRIGUES, R. C. *Introdução a Fluidodinâmica Computacional*. Escola Piloto Virtual, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2005.

GÓMEZ-CASTRO, F. I., SEGOVIA-HERNÁNDEZ, J. G., HERNÁNDEZ, S., GUTIÉRREZ-ANTONIO, C., BRIONES-RAMÍREZ, A. Dividing Wall Distillation Columns: Optimization and Control Properties. **Chemical Engineering Technology**, 31, 2008, 1246-1260.

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

HAERI, S., HASHEMABADI, S. H. CFD simulation and experimental verification for non-newtonian falling film on inclined plate. In: 3rd *Iasme/Wseas International Conference On Continuum Mechanics (CM'08)*, Iran, 48 – 55, 2008.

HICKMAN, K.C.D. **Chemical Review**, 34, 1943, 51.

HUANG, K.; NAKAIWA, M.; AKIYA, T.; OWA, M.; ASO, K.; TAKAMATSU, T. Dynamics of Ideal Heat Integrated Distillation Columns. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, 29, 1996, 656-661.

HUANG, K., SHAN, L., ZHU, Q., QUIAN, J. Design and control of an ideal heat-integrated distillation column (ideal HIDiC) system separating a close-boiling ternary mixture. **Energy**, 32, 2007, 2148 – 2156.

HUGILL, J. A. and van DORST, E. M. The use of compact heat exchangers in heat-integrated distillation columns. **Engineering and Technology**, Eds. R. K. Shah, M. Ishizuka, T. M. Rudy, and V. V. Wadekar, Engineering Conferences International, Hoboken, NJ, USA, September, 2005. 310 – 317.

IWAKABE, K., NAKAIWA, M., HUANG, K., NAKANISHI, T., RØSJORDE, A., OHMORI, T., ENDO, A. and YAMAMOTO, T. Energy saving in multicomponent separation using an internally heat-integrated distillation column (HIDiC). **Applied Thermal Engineering**, 26, 2006, 1362-1368.

JANA, A. K., Heat integrated distillation operation. **Applied Energy**. v. 84, 2010, 1477 – 1494.

JAFAR, F. A., THORPE, G. R., TURAN, Ö. F. Falling film transition and heat transfer on horizontal circular cylinders. In: *17th Australasian Fluid Mechanics Conference*. Auckland, New Zealand, 5 – 9 December, 2010.

KAIBEL, G., Distillation columns with vertical partitions. **Chemical Engineering Technology**, 10, 1987, 92 – 98.

KOLEK, A., DZIAK, J, KROLIKOWSKI L. CFD simulations of flow, heat and mass transfer in thin-film evaporator. In: *Distillation Absorption 2010*, A.B. de Haan, H. Kooijman and A. Górak (Editors), All rights reserved by authors as per DA 2010 copyright notice, 2010.

LAVIN, J.T. *Distillation Trays*, B01D3/22; B01D3/14; B01F3/04, Patent number: 4749528, 15/12/1986, 06/07/1988.

LI, X. G., LIU, D. X., XU, S. M., LI, H. CFD simulation of hydrodynamics of valve tray. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, 48, 2009, 145-151.

LIU, S. X.; PENG, M. Verification of mass transfer simulation with CFD using highly accurate solutions. **Computers and Electronics in Agriculture**, 49, 2005, 309-314.

LOURENÇO, R. O. *Identificação e monitoramento de regimes de escoamento em leito de jorro*. 2006. 109 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) Uberlândia: Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2006.

LUDWIG, W., DZIAK, J., SAWIŃSKI, W., KRÓLIKOWSKI, L., KAPŁON, J., TUTA, J. Modelling of hydrodynamics of a thin-layer evaporator with gravitational liquid flow using CFD method. **Chemical and Process Engineering**, 29, 2008, 215-220.

MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004.

MANTELLI, M. B. H., ÂNGELO, W. B., MILANEZ, F. H. Aquecedores de GN para City-Gates Assistidos por Termossifões e Câmara de Vapor. In: *1º Seminário Da Rede Gás & Energia*, Rio de Janeiro, 2006.

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

MAYOR, T. S.; PINTO, A. M. F. R.; CAMPOS, J. B. L. M. Hydrodynamics of gas-liquid slug flow along vertical pipes in turbulent regime. **Chemical Engineering Research and Design**, Trans. IChemE, Part A, 85, 2007, 1497-1513.

MENTER, F. R. Influence of free stream value on $k-\omega$ turbulence model predictions. **American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal**, 30, nº 6, 1992, 1657-1659.

MICOV, M.; LUTISAN, J.; CVENGROS, J. Balance equations for molecular distillation. **Separation Science and Technology**, 32, nº.18, 1997, 3051-3066.

MORAES, Marlene Silva de et al. Experimento para quantificar a eficiência de aspersão de líquidos: aplicação em distribuidores espinha de peixe. **Revista Escola Minas [online]**, 61, n.1, 2008, 25-28.

MOUZA, A. A., PANTZALI, M. N., PARA, S. V. Falling film and flooding phenomena in small diameter vertical tubes: The influence of liquid properties. **Chemical Engineering Science**, 60, 2005, 4981-4991.

NARS, A., DEBBISSI, C., BEN NASRALLAH, S. Evaporation of a Binary Liquid Film by Forced Convection, **Journal Thermal Science**, 15, 2011, 773-784, (a).

NARS, A., DEBBISSI, C., BEN NASRALLAH, S. Numerical study of evaporation by mixed convection of a binary liquid film, **Energy**, 36, 2011, 2316-2327, (b).

NETO BARROS, B., SCARMINIO, I. S., BRUNS, R. E. *Como fazer experimentos: pesquisa e desenvolvimento na ciência e na indústria*. Campinas: Editora da UNICAMP, 2001.

NIKOU, M. R. K., EHSANI, M. R. Turbulence models application on CFD simulation of hydrodynamics, heat and mass transfer in a

structured packing. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, 35, 2008, 1211-1219.

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. **Chemical Engineering Journal**, 136, 2008, 133-143.

NUSSELT, W., *Die Oberflächenkondensation des Wasserdampfes*, Z. Vereinsdeutscher Innuere, 60, 541-575, 1916.

PARISOTTO, I. G. B. ; WERLE, L. O. ; TELEKEN, J.G ; MENEGUELO, A.P ; MARANGONI, C. ; MACHADO, R. A. F. Recuperação de Diluente de Petróleo Extra-Pesado em Ambiente Offshore. In: *Congreso Interamericano de Computación Aplicada a la Industria de Procesos* - CAIP 2011, Girona – Espanha, 2011.

PARISOTTO, I. G. B. ; WERLE, L. O. ; TELEKEN, J.G ; MARANGONI, C. ; MENEGUELO, A.P ; MACHADO, R. A. F. . Simulação do Processo de Recuperação de Diluente Leve em Petróleo Extra-Pesado em Ambiente Offshore. In: *XVIII Congresso Brasileiro De Engenharia Química COBEQ*, 2010, Foz do Iguaçu, 2010.

PAWAR, S. B., MUJUMDAR, A. S., THORAT, B. N. CFD analysis of flow pattern in the agitated thin film evaporator. **Chemical Engineering Research and Design**, 90, 2012, 757 – 765.

PINTO, J. C. P., PADILHA, A., SCALON, V. L. Simulação teórica da transferência de calor e massa de uma película líquida descendente ao longo da parede vertical interna de um tubo cilíndrico. **Mecânica Computacional**, 23. 2003.

PERRY, R. H., CHILTON, C. H. *Manual de Engenharia Química*. Seção 13. Ed. Guanabara dois, Rio de Janeiro, 1980.

PETLYUK, F. B., PLATONOV, V. M. SLAVINSKII, D. M. Thermodynamically Optimal Method for Separating Multicomponent Mixtures. **International Chemical Engineering**, 5, 1965, 555.

PROVENZANO, C. E. C. *Previsão numérica de escoamento bifásico em tubulações utilizando o modelo de deslizamento*. 2007. Dissertação

(Mestrado em Engenharia Mecânica) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2007.

RAACH, H., SOMASUNDARAM, S. Numerical investigations on heat transfer in falling films around turbulence wires. In: 5th *European Thermal-Sciences Conference*, The Netherlands, 2008.

REES, G. J.. Medium-Vacuum Centrifugal Molecular Distillation in the Isolation of High-Boiling and Heat-Sensitive Compounds. **Vacuum**, 25, 1975, 415-419.

SAIFUTDINOV, A. F. *A compact rectifying unit for separation of mixed fluids and rectifying process for separation of such mixed fluid*. Int. Publication Number WO 03/078014 A1, 20 march 2003. World Intellectual Property Organization, Moscou, 2003.

SAIFUTDINOV, A. F.; TLUSTY, A. S.; BEKETOV, O. E.; LADOSHKIN, V. S. (1999). *Separation method of multi components mixtures*. B 01 D 3/14- 3/28, RU, Patent number: (11) 2132214 (13)C1, 06/01/1998, 27/06/1999.

SANTOS, Paula Sbaite Duarte. *Extensão da curva do ponto de ebulição verdadeiro para petróleo pesados nacionais através do processo de destilação molecular*. 2005, 187p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

SANTOS, K. G. *Estudo da Fluidodinâmica do Leito de Jorro por CFD com Malhas Tridimensionais*. 2008. 128 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia - MG, 2008.

SKLAVOUNOS, S, RIGAS, F. Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles. **Journal of Hazardous Materials**, 108, 2004, 9–20.

SENHAJI, S., FEDDAOUI, M., MEDIOUNI, T., MIR, A. Simultaneous heat and mass transfer inside a vertical tube in evaporating a heated falling alcohols liquid film into a stream of dry air, **Heat Mass Transfer**, 45, 2009, 663-671.

SMITH, R. *Chemical Process Design*. McGraw-Hill, 1995.

STROEFER E., LANG N., LICHTFERS UTE, STEINBRENNER U., HASSE H. *Separation of liquid mixture in a film evaporator*. US 2007/0106096 A1, Patent number: 7414159, 04/03/2003, 2007

SUPHANIT B. Design of internally heat-integrated distillation column (HIDiC): Uniform heat transfer area versus uniform heat distribution. **Energy**, 35, 2010, 1505-1514.

TAVARES, E. G.; MILANEZ, K. W.; MILANEZ, F. H.; MANTELLI, M. B. H.; MENDINA, L. C.; SANTOS, M. C.; OLIVEIRA, A. G. Thermal Analysis of a Distillation Unit Aided by a Vapor Chamber and Non-condensable Gas. In: *International Congress of Mechanical Engineering - COBEM, 2009*, Gramado (RS), 2009.

TICONA, E. M. *Determinação experimental do coeficiente de troca de calor em um gerador de "pasta de gelo"*. 2003. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2003.

XU, Z. F.; KHOO, B. C. Mass transfer across the falling film: Simulations and experiments. **Chemical Engineering Science**, 63, 2008, 2559-2575.

XUBIN, Z.; CHUNJIAN, X.; MING, Z. Modeling of falling film molecular distillator. **Separation Science and Technology**, 40, 2005, 1371-1386.

ZHANG, F., TANG, D.L., GENG, J., WANG, Z. X., Zhang, Z.B. Study on the temperature distribution of heated falling liquid films. **Physica**, 237, 2008, 867–872.

ZUÑIGA, L.; LIMA, N. M. N.; WOLF MACIEL, M. R.; MACIEL FILHO, R.; BATISTELLA, C. B.; MANCA, D.; MANENTI F.; MEDINA, L. C. Modeling and simulation of molecular distillation process for heavy petroleum fractions. **Chemical Engineering Transactions**, 17, 2009, 1639-1644.

WERLE, L. O. *Minimização dos transientes através do aquecimento distribuído em coluna de destilação*. 2007. Dissertação. (Mestrado em

Engenharia Química) – Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC. Florianópolis, 2007.

WRIGHT, R.O. *Fractionation apparatus*. US Patent No. 247113, 1949.