



UNICAMP – UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FEQ – FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

DPQ – DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

**LDPS – LABORATÓRIO DE DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS DE
SEPARAÇÃO**

**DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA PARA
AVALIAÇÃO NUMÉRICA E EXPERIMENTAL DO
ESCOAMENTO LÍQUIDO/VAPOR EM COLUNAS DE
DESTILAÇÃO**

CÍNTIA SOARES

Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de
Engenharia Química como parte dos requisitos
exigidos para a obtenção do título de Doutor
em Engenharia Química.

Orientadora: **Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel (FEQ – UNICAMP)**
Co-Orientadores: **Prof. Dr. António André Chivanga Barros (DEQ – FURB)**
 Prof. Dr. Henry França Meier (DEQ – FURB)

Campinas – SP
Dezembro / 2005

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

So11d Soares, Cíntia
Desenvolvimento de uma metodologia para avaliação numérica e experimental do escoamento líquido/vapor em colunas de destilação / Cíntia Soares.--Campinas, SP: [s.n.], 2005.

Orientadores: Maria Regina Wolf Maciel, António André Chivanga Barros, Henry França Meier.

Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação. 2. Escoamento instável (Dinâmica dos fluidos). 3. Dinâmica dos fluidos. 4. Anemômetros térmicos. 5. Escoamento bifásico. 6. Escoamento multifásico. 7. Escoamento turbulento. I. Maciel, Maria Regina Wolf. II. Barros, António André Chivanga. III. Meier, Henry França. IV. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. V. Título.

Título em Inglês:	Development of a methodology for numerical and experimental evaluation of liquid/vapour flow in distillation columns
Palavras-chave em Inglês:	Distillation column, Sieve plate, Computational fluid dynamics, Thermal anemometry
Área de Concentração:	Desenvolvimento de Processos Químicos
Titulação:	Doutora em Engenharia Química
Banca examinadora:	Eduardo Augusto Caldas Batista, Delba Nisi Cosme Melo, Eliana Luci Ligerio e Marcos Ákira D'Ávila
Data da defesa:	16/12/2005

**Tese de Doutorado defendida por CÍNTIA SOARES e aprovada em 16 de
Dezembro de 2005 pela banca examinadora constituída pelos doutores:**

**Dra. Maria Regina Wolf Maciel
FEQ / UNICAMP
(Orientadora)**

**Prof. Dr. Eduardo Augusto Caldas Batista
FEA / UNICAMP**

**Dra. Delba Nisi Cosme Melo
FEQ / UNICAMP – Pesquisadora**

**Dra. Eliana Luci Ligerio
FEM / UNICAMP – Pesquisadora**

**Dr. Marcos Akira D'Ávila
FEQ / UNICAMP – Pesquisador**

**Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia
Química.**

Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel
(Orientadora)

DEDICATÓRIA

Vocês deixaram seus sonhos para que eu sonhasse
Derramaram lágrimas para que eu fosse feliz
E o mais importante, acreditaram em mim.

A meus pais, com amor e gratidão.

Jamais esqueçam que eu levarei para sempre um pedaço do seu ser dentro do meu próprio
ser....

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho insere-se no contexto de um Projeto de Pesquisa apoiado pelo CTPetro (convênio 64.00.0247.00), tendo sido inteiramente desenvolvido nas dependências do Laboratório de Fluidodinâmica Computacional e do Laboratório de Desenvolvimento de Processos do Departamento de Engenharia Química da Universidade Regional de Blumenau. Durante sua realização, pude contar com a colaboração de várias pessoas e instituições, às quais gostaria de expressar meus sinceros agradecimentos. Mesmo correndo o risco da omissão, desejo agradecer:

- À Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel, pela orientação e pelo apoio e compreensão recebidos, cruciais para o desenvolvimento deste trabalho.
- Ao meu co-orientador, Prof. Dr. António André Chivanga Barros, pelas inúmeras discussões e sugestões e que foram essenciais para a conclusão desta tese.
- Ao meu co-orientador, Prof. Dr. Henry França Meier, pelas valiosas lições e ensinamentos.
- Aos membros da banca examinadora, que aceitaram a incumbência de julgar esta tese.
- Ao corpo docente do Departamento de Engenharia Química da FURB, que me proporcionou uma sólida formação profissional e, principalmente, pessoal. Um agradecimento especial a Profa. Doris Z. Bucci e a Profa. Lorena B. B. Tavares.
- Aos meus alunos de iniciação científica que auxiliaram durante o desenvolvimento das atividades de caráter experimental.
- À Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) e ao Departamento de Engenharia Química da Universidade Regional de Blumenau (FURB).

*O primeiro e último problema
do indivíduo é integrar-se
internamente e ainda assim
ser aceito pela sociedade*

Friedrich Salomon Perls

RESUMO

Grande parte dos estudos envolvendo colunas de destilação está fundamentada por modelos macroscópicos de conservação de massa e de energia. Exemplo disto são os modelos de estágios de equilíbrio e de não-equilíbrio. Nestes, os aspectos fluidodinâmicos do escoamento são restritos e orientados à medição de parâmetros macroscópicos. Porém, graças aos avanços introduzidos pelo emprego das técnicas da fluidodinâmica computacional (CFD), a análise de processos empregando uma abordagem microscópica tornou-se mais sofisticada e precisa. Além disto, há necessidade de trabalho experimental com o propósito de validar modelos e métodos em CFD e medir outros parâmetros ao longo do equipamento. Dentro deste contexto, este trabalho visa o desenvolvimento de uma metodologia de caráter numérico e experimental que possibilite o estudo do escoamento líquido-vapor, em nível microscópico, em um prato perfurado de uma coluna de destilação. Para tanto, objetiva-se a proposição de um modelo microscópico de conservação da quantidade de movimento, em condições de escoamento turbulento, sob a influência da fase vapor, e de uma metodologia para a aquisição de dados experimentais. A metodologia numérica consistiu em iniciar com um estudo aprofundado do escoamento com superfície livre, utilizando um módulo experimental de hidráulica, seguido do estudo do escoamento monofásico na superfície de um prato perfurado. Estudos em uma coluna de bolhas permitiram a obtenção de experiência com modelos e métodos associados ao escoamento multifásico. Finalmente, foram realizados estudos sobre o escoamento líquido-vapor em pratos perfurados com a proposição de um modelo 3-D e homogêneo. Na metodologia de solução, o principal objetivo esteve relacionado às características numéricas, tais como: fatores de relaxação, esquemas de interpolação, integração temporal, acoplamento pressão-velocidade, entre outras. A metodologia experimental consistiu no projeto e construção de uma coluna de destilação para a simulação física do escoamento líquido-vapor em um estágio a frio, sendo as informações microscópicas obtidas por meio do emprego da técnica de anemometria térmica. Técnicas de visualização do escoamento foram empregadas como ferramenta de análise qualitativa na identificação de padrões de escoamento, como mecanismo de apoio à realização de medidas experimentais e, finalmente, como instrumento complementar de análise para facilitar a interpretação dos resultados. A metodologia numérica permitiu a avaliação de estratégias de solução de modelos e métodos em CFD, além do desenvolvimento de um modelo homogêneo capaz de prever o escoamento líquido-vapor, em nível microscópico, em um prato perfurado de uma coluna de destilação. A metodologia experimental permitiu a caracterização do escoamento em um tanque retangular, entretanto, a técnica de anemometria térmica apresentou limitações quando da aplicação no escoamento bifásico. Na análise dos resultados obtidos concluiu-se que há a ocorrência de diferentes padrões de escoamento no interior de uma coluna de destilação, de acordo com a vazão da fase gás e da geometria do prato, sendo o escoamento não uniforme. Além disto, há uma tendência do fluxo de líquido próximo à parede retroceder, o que resulta no fenômeno de circulação. Outra observação importante foi que a fase vapor, em contato com o líquido fluindo horizontalmente, obtém uma energia cinética na direção do fluxo de líquido.

Palavras-chave: Coluna de Destilação; Prato Perfurado; Fluidodinâmica Computacional; Anemometria Térmica.

ABSTRACT

Greater part of researches involving distillation columns is based on macroscopic models of mass and energy conservation. Examples are the equilibrium and non-equilibrium stage models. In these cases, the fluid dynamics characteristics are restricted in measuring macroscopic parameters. However, advances introduced by fluid dynamic techniques made possible a more sophisticated and accurate process analysis using a microscopic approach. Researches in this area are indispensable and more experimental studies is necessary in order to validate models and methods in CFD and measure other parameters along the equipment. Based on these statements, this work takes aim the development of a numerical and experimental methodology that enables the study of liquid-vapour flow, in a microscopic level, on a sieve plate of a distillation column. It is proposed the development, implementation and application of a microscopic model for *momentum* conservation subjected to turbulent flow of the vapour phase, complemented by the development of an experimental methodology for data acquisition in an apparatus in laboratory scale. The numerical methodology consisted to make a deep study of flow with free surface using a hydraulic modulus and a study of a single-phase flow on a sieve plate. Studies in a bubble column allowed building knowledge for modelling *momentum* transfer phenomenon in multiphase flow. Finally, studies about the liquid-vapour flow in sieve plates were carried out with development of a 3-D and homogeneous model. The main objective in the solution methodology was related to numerical characteristics, such as: relaxation factors, interpolation schemes, temporal integration and pressure-velocity coupling. The experimental methodology consisted in the design and building of a distillation column that simulates the liquid-vapour in a sieve plate. The information related to velocity profiles were obtained by means of definition and implementation of the thermal anemometry technique. During the numerical and experimental studies, flow visualization techniques have also been employed in different ways as a tool for qualitative analysis of different flow patterns, as an assistance to the experimental measures, and finally, as a complement to the analysis, supporting the interpretation of results. The numerical methodology allowed the evaluation of models and methods strategies in CFD, and the development of a homogeneous model able to predict the liquid-vapour flow in a sieve plate of a distillation column. On the other hand, the experimental methodology allowed the evaluation of flow inside a rectangular reservoir, but the thermal anemometry technique presented limitations in the multiphase flow. It was concluded that there is the occurrence of different flow patterns inside the distillation column, according to the gas flow and plate geometry, and the flow is not uniform in the plate surface. Besides, there is a tendency of the liquid flow to go back near the wall, resulting in a circulating zone. Other observation was that the vapour phase, contacting with the horizontally flowing liquid, gains a kinetic energy in the direction of liquid flow.

Keywords: **Distillation Column; Sieve Plate; Computational Fluid Dynamics; Thermal Anemometry.**

LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1 – Resumo das condições de contorno para o estudo de caso I.....	80
TABELA 3.2 – Dados experimentais e numéricos para os casos sem e com obstáculo no módulo experimental de hidráulica.....	83
TABELA 3.3 – Parâmetros geométricos e operacionais e propriedades físicas do estudo de caso II.	93
TABELA 3.4 – Resumo das condições de contorno para o estudo de caso II.	97
TABELA 3.5 – Parâmetros geométricos e operacionais do estudo de caso III.....	110
TABELA 3.6 – Forma compacta do modelo 3-D homogêneo.	112
TABELA 3.7 – Resumo das condições de contorno para o estudo de caso III.	113
TABELA 3.8 – Resumo das condições de contorno para o estudo de caso IV.....	122
TABELA 3.9 – Parâmetros geométricos e operacionais para o estudo de caso IV.....	123
TABELA 4.1 – Parâmetros de projeto do aparato experimental.	135
TABELA 4.2 – Comparação entre velocidades experimentais e numéricas ao longo do canal de calibração (I).....	155
TABELA 4.3 – Comparação entre velocidades experimentais e numéricas ao longo do canal de calibração (II).....	155
TABELA A.1 – Propriedades físicas dos fluidos utilizados.....	193

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 – Diagrama esquemático de um estágio de equilíbrio.....	51
Figura 2.2 – Seqüência de n estágios de equilíbrio.....	52
Figura 2.3 – Representação esquemática do estágio de não equilíbrio.....	54
Figura 3.1 – Características geométricas do módulo experimental de hidráulica.	74
Figura 3.2 – Módulo experimental de hidráulica.....	74
Figura 3.3 – Onda reversa gerada pelo obstáculo no interior do módulo.	75
Figura 3.4 – Domínio físico do módulo experimental de hidráulica.	79
Figura 3.5 – Domínio computacional com a malha numérica: (a) próximo à entrada; (b) próximo ao obstáculo; (c) próximo à saída.	82
Figura 3.6 – Perfil longitudinal da superfície livre (sem obstáculo).....	84
Figura 3.7 – Perfil longitudinal da superfície livre (com obstáculo).	85
Figura 3.8 – Onda gerada no aparato experimental em virtude da presença do obstáculo: (a) observação experimental; (b) predição numérica.	86
Figura 3.9 – Mapas do comportamento transiente da fração volumétrica da fase líquida para 30 segundos de tempo real (com obstáculo).	88
Figura 3.10 – Mapas do comportamento transiente da formação da onda próximo ao obstáculo.	89
Figura 3.11 – Dinâmica do escoamento com mapas tridimensionais da fração volumétrica da fase líquida.	90
Figura 3.12 – Dimensões do prato de destilação.	92
Figura 3.13 – Domínio físico do prato de destilação.	97
Figura 3.14 – Malhas numéricas do prato de destilação:	98
(a) 20 x 20 células; (b) 40 x 40 células; (c) 60 x 60 células; (d) 80 x 80 células.....	98
Figura 3.15 – Comparação entre as diferentes malhas numéricas do prato.....	100
Figura 3.16 – Avaliação do Ce (coeficiente de transferência).....	102
Figura 3.17 – Percentual da área de circulação como função do coeficiente de transferência.....	102
Figura 3.18 – Campos de pressão para diferentes valores de Ce	104
(a) $Ce = 5 \times 10^{-3}$; (b) $Ce = 5 \times 10^{-4}$; (c) $Ce = 2,5 \times 10^{-4}$; (d) $Ce = 1 \times 10^{-5}$	104

Figura 3.19 – Velocidade horizontal para diferentes valores de Ce .	105
(a) $Ce = 5 \times 10^{-3}$; (b) $Ce = 5 \times 10^{-4}$; (c) $Ce = 2,5 \times 10^{-4}$; (d) $Ce = 1 \times 10^{-5}$	105
Figura 3.20 – Campo vetorial para diferentes valores de Ce .	106
(a) $Ce = 5 \times 10^{-3}$; (b) $Ce = 5 \times 10^{-4}$; (c) $Ce = 2,5 \times 10^{-4}$; (d) $Ce = 1 \times 10^{-5}$	106
Figura 3.21 – Energia cinética turbulenta para diferentes valores de Ce .	107
(a) $Ce = 5 \times 10^{-3}$; (b) $Ce = 5 \times 10^{-4}$; (c) $Ce = 2,5 \times 10^{-4}$; (d) $Ce = 1 \times 10^{-5}$	107
Figura 3.22 – Dissipação de k para diferentes valores de Ce .	108
(a) $Ce = 5 \times 10^{-3}$; (b) $Ce = 5 \times 10^{-4}$; (c) $Ce = 2,5 \times 10^{-4}$; (d) $Ce = 1 \times 10^{-5}$	108
Figura 3.23 – Coluna de bolhas experimental.	110
Figura 3.24 – Domínio físico da coluna de bolhas.	114
Figura 3.25 – Malha numérica da coluna de bolhas.	114
Figura 3.26 – Imagens da coluna de bolhas em operação em diferentes intervalos de tempo.	117
Figura 3.27 – Comportamento dinâmico da coluna de bolhas obtido com esquema de interpolação de primeira ordem para 10 segundos de tempo real.	118
Figura 3.28 – Comportamento dinâmico da coluna de bolhas obtido com esquema de interpolação de alta ordem para 10 segundos de tempo real.	118
Figura 3.29 – Comportamento dinâmico da coluna de bolhas obtido com esquema de interpolação de alta ordem e usando algoritmos de alisamento de superfície para 10 segundos de tempo real.	120
Figura 3.30 – Domínio físico 3-D do prato perfurado.	122
Figura 3.31 – Planos da malha numérica para o prato perfurado.	123
Figura 3.32 – Malha numérica 2-D do modelo monofásico.	125
Figura 3.33 – Malha numérica 3-D do modelo bifásico homogêneo.	125
Figura 3.34 – Campos de pressão e vetorial para o Caso “a” do modelo 2-D monofásico.	127
Figura 3.35 – Campos de pressão e vetorial para o Caso “a” do modelo 3-D bifásico homogêneo.	127
Figura 3.36 – Dinâmica da fração volumétrica da fase vapor para o Caso “a” em 6 segundos de tempo real.	128

Figura 3.37 – Dinâmica da fração volumétrica da fase vapor para o Caso “b” em 10 segundos de tempo real.	129
Figura 3.38 – Vista superior da dinâmica da fração volumétrica da fase vapor para o Caso “b” em 6 segundos de tempo real.	130
Figura 4.1 – Esquema do aparato experimental.	134
Figura 4.2 – Simulação física do escoamento água-ar na coluna de destilação.	135
Figura 4.3 – Imagens do aparato experimental em operação.	136
Figura 4.4 – Diferentes tipos de sondas anemométricas de fio e de filme quente.	140
Figura 4.5 – Elementos básicos de um anemômetro de temperatura constante.	141
Figura 4.6 – Anemômetro de temperatura constante IFA 300.	142
Figura 4.7 – Componentes e arranjo do anemômetro de fio quente.	144
Figura 4.8 – Método para calibração utilizando o módulo experimental de hidráulica.	149
Figura 4.9 – Método de calibração utilizando escoamento gravitacional.	150
Figura 4.10 – Canal de calibração da sonda tipo X.	153
Figura 4.11 – Vista do canal de calibração associado ao reservatório.	153
Figura 4.12 – Relação entre a velocidade experimental e numérica no canal de calibração (I).	156
Figura 4.13 – Relação entre a velocidade experimental e numérica no canal de calibração (II).	156
Figura 5.1 – Imagem do reservatório retangular e do estabilizador hidrodinâmico acoplado ao reservatório.	160
Figura 5.2 – Esquema ilustrativo do princípio de funcionamento do reservatório retangular.	161
Figura 5.3 – Coordenadas para posicionamento da sonda.	163
Figura 5.4 – Perfil de velocidade no centro do reservatório retangular (I).	164
Figura 5.5 – Perfil de velocidade no centro do reservatório retangular (II).	165
Figura 5.6 – Mapas experimentais de velocidade na direção x (vazão volumétrica de líquido: 300 L/h.	167
Figure 5.7 – Mapas experimentais de velocidade na direção x (vazão volumétrica de líquido: 400 L/h).	168
Figura 5.8 – Malha para o posicionamento da sonda.	169

Figura 5.9 – Posicionamento da sonda no prato teste.	170
Figura 5.10 – Padrões de escoamento: (a) regime borbulhante; (b) regime de espuma I; (c) regime de espuma II; (d) regime “spray”; (e) vista do prato perfurado com escoamento das fases no regime de espuma II.	173
Figura 5.11 – Campo de velocidade para a vazão de líquido de 5 L/min.	175
Figura 5.12 – Campo de velocidade para a vazão de líquido de 10 L/min.	176
Figura 5.13 – Campo de velocidade para a vazão de líquido de 15 L/min.	177
Figura B.1 – Transferência de calor em uma seção elementar de fio quente.	201
Figura C.1 – Tela inicial do IFA 300.	205
Figura C.2 – Tela de diagnóstico.	206
Figura C.3 – Dados referentes a sonda.	207
Figura C.4 – Condições da etapa de calibração.	208
Figura C.5 – Curva de calibração.	209
Figura C.6 – “Probe Table”.	210
Figura C.7 – Tela de acompanhamento da aquisição de velocidades locais em tempo real.	211
Figura C.8 – Análise dos dados.	212
Figura C.9 – “Velocity Analysis Statistics”.	213

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Latinas

A, B, n	constantes empíricas a serem determinadas mediante a calibração da sonda de anemometria térmica (adimensional)
A_B	área de borbulhamento do prato (m^2)
A_{EF}	área efetiva do prato (m^2)
A_{EST}	área de estabilização do prato (m^2)
A_F	área da seção transversal do fio da sonda de anemometria térmica (m^2)
A_H	área total dos furos ativos no prato (m^2)
A_P	área perfurada do prato (m^2)
A_{SV}	área superior dos vertedores (m^2)
A_T	área total do prato (m^2)
A_V	área dos vertedores (m^2)
c	calor específico ($kcal\ kg^{-1}\ ^\circ C^{-1}$)
C_μ , C_1 , C_2	constantes do modelo de turbulência k- ϵ (adimensional)
Ce	coeficiente de transferência (adimensional)
D	diâmetro da tubulação (m)
d	diâmetro do prato / coluna (m)
d_f	diâmetro do fio da sonda de anemometria térmica (m)
d_o	diâmetro do orifício (m)
E	tensão elétrica (V)
f	fração volumétrica (adimensional)
F_o	fator F da fase vapor ($kg^{1/2}\ m^{-1/2}\ s^{-1}$)
F_s	vetor de tensão superficial ($N\ m^{-1}$)
f_x , f_y	forças resistivas do borbulhamento da fase vapor que age sobre a fase líquida ($kg\ m^{-2}\ s^{-2}$)
g	aceleração gravitacional ($m\ s^{-2}$)
g	vetor gravidade ($m\ s^{-2}$)
G_T	geração de turbulência ($kg\ m^{-1}\ s^{-3}$)
G_{T1}	turbulência gerada pelo escoamento da fase líquida ($kg\ m^{-1}\ s^{-3}$)

G_{T2}	ação do borbulhamento da fase vapor ($\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-3}$)
h	altura de líquido (m)
h_c	coeficiente de transferência de calor por convecção ($\text{kcal h}^{-1} \text{m}^{-2} \text{°C}^{-1}$)
h_w	altura do vertedor (m)
I	corrente elétrica (A)
k_c	condutividade térmica ($\text{kcal h}^{-1} \text{m}^{-2} \text{°C}^{-1} \text{m}$)
k	geração de energia cinética turbulenta ($\text{m}^2 \text{s}^{-2}$)
L	taxa de escoamento da fase líquida ($\text{m}^3 \text{s}^{-1} \text{m}^{-1}$)
L_f	comprimento do fio da sonda de anemometria térmica (m)
L_s	escala de comprimento (m)
L_t	espaçamento entre pratos (m)
N_p	número total de fases (adimensional)
Nu	número de Nusselt (adimensional)
p	pressão (N m^{-2})
\dot{Q}_a	taxa de acumulação de calor (kcal h^{-1})
\dot{Q}_e	taxa de geração de calor pelo efeito Joule (kcal h^{-1})
\dot{Q}_c	taxa de transferência de calor por condução (kcal h^{-1})
\dot{Q}_{cf}	taxa de transferência de calor por convecção forçada (kcal h^{-1})
\dot{Q}_r	taxa de transferência de calor por radiação (kcal h^{-1})
Pr	número de Prandtl (adimensional)
R, r	raio (m)
R_{20}	resistência do fio da sonda de anemometria térmica à temperatura de 20°C (Ω)
R_a	resistência do fio da sonda de anemometria térmica à temperatura ambiente (do fluido) (Ω)
Re	número de Reynolds (adimensional)
R_f	resistência do fio da sonda de anemometria térmica (Ω)
t	tempo (s)
T_a	temperatura do fluido ($^\circ\text{C}$)

T_f	temperatura do fio da sonda de anemometria térmica ($^{\circ}\text{C}$)
U	velocidade relativa entre a sonda anemométrica e o fluido (m s^{-1})
u_g	velocidade máxima de escoamento do vapor (m s^{-1})
u_s	velocidade superficial da fase vapor baseada na área de borbulhamento (m s^{-1})
v	velocidade (m s^{-1})
\mathbf{v}	vetor velocidade (m s^{-1})
v_g	vazão mássica da fase vapor (kg s^{-1})
w	largura da represa de saída (m)
x	coordenada cartesiana x (m)
y	coordenada cartesiana y (m)
z	coordenada cartesiana z (m)

Letras Gregas

Γ	coeficiente de difusão
σ	componente da tensão normal (Pa)
ζ	direção ortogonal à parede (adimensional)
η	direção ortogonal à saída (adimensional)
ρ	massa específica (kg m^{-3})
ϕ	propriedade fluidodinâmica (u, v, w, k, ε) (adimensional)
χ	resistividade do fio da sonda de anemometria térmica (Ω)
ε	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta ($\text{m}^2 \text{s}^{-3}$)
μ	viscosidade ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)
α_{20}	coeficiente de temperatura à 20°C (adimensional)
$\sigma^k, \sigma^\varepsilon$	constantes do modelo de turbulência k- ε (adimensional)
σ_{sup}	tensão superficial (N m^{-1})

Sobrescrito

ε	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
eff	efetivo

k	geração de energia cinética turbulenta
T	transposta
t	turbulento

Subscrito

g	fase gás / vapor
i	fase genérica i
k	fase genérica k
l	fase líquida
$máx$	máximo
med	média
$mist$	mistura
ref	referência
x	coordenada cartesiana x
y	coordenada cartesiana y
z	coordenada cartesiana z

Operadores Matemáticos

$-$	média temporal
∂	derivada parcial
∇	operador nabla

SUMÁRIO

RESUMO	xiii
ABSTRACT	xv
LISTA DE TABELAS	xvii
LISTA DE ILUSTRAÇÕES	xix
LISTA DE SÍMBOLOS.....	xxvii
CAPÍTULO 1	43
INTRODUÇÃO E OBJETIVOS	43
CAPÍTULO 2	49
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	49
2.1 INTRODUÇÃO	49
2.2 MODELO DE ESTÁGIOS DE EQUILÍBRIO.....	51
2.3 MODELO DE ESTÁGIOS DE NÃO EQUILÍBRIO	54
2.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.....	57
2.4.1 Principais Características	57
2.4.2 O Código CFX	61
2.4.3 O Método dos Volumes Finitos	63
2.5 FLUIDODINÂMICA DO ESCOAMENTO LÍQUIDO-GÁS	65
CAPÍTULO 3	71
MODELAGEM MATEMÁTICA E ESTUDO DE CASOS EM FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL ENVOLVENDO O ESCOAMENTO LÍQUIDO-GÁS	71
3.1 ESTUDO DE CASO I: SIMULAÇÃO NUMÉRICA 3-D TRANSIENTE DO ESCOAMENTO LÍQUIDO-GÁS EM UM MÓDULO EXPERIMENTAL DE HIDRÁULICA.....	73
3.1.1 Caracterização Física do Módulo Experimental de Hidráulica	73
3.1.2 Modelagem Matemática.....	75

3.1.3 Geometria e Condições de Contorno	79
3.1.4 Malha Numérica.....	80
3.1.5 Método Numérico	81
3.1.6 Principais Resultados e Discussão do Estudo de Caso I.....	81
3.1.6.1 Verificação do método numérico e do código de CFD.....	82
3.1.6.2 Validação do modelo matemático.....	83
3.1.6.2 Visualização científica do escoamento bifásico	86
3.2 ESTUDO DE CASO II: SIMULAÇÃO NUMÉRICA 2-D DO ESCOAMENTO LÍQUIDO EM UM PRATO PERFURADO DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO	91
3.2.1 Idealização da Situação Física e Hipóteses Simplificadoras	91
3.2.2 Caracterização da Situação Física.....	92
3.2.3 Modelagem Matemática.....	93
3.2.4 Geometria e Condições de Contorno	96
3.2.5 Malha Numérica.....	98
3.2.6 Método Numérico	98
3.2.7 Principais Resultados e Discussão do Estudo de Caso II	99
3.2.7.1 Dependência da solução com a malha numérica	99
3.2.7.2 Validação do modelo	100
3.2.7.3 Visualização científica do escoamento	103
3.3 ESTUDO DE CASO III: SIMULAÇÃO NUMÉRICA 3-D DO ESCOAMENTO LÍQUIDO-GÁS EM UMA COLUNA DE BOLHAS	109
3.3.1 Coluna de Bolhas Experimental.....	109
3.3.2 Modelagem Matemática.....	110
3.3.3 Geometria e Condições de Contorno	112
3.3.4 Malha Numérica.....	114
3.3.5 Método Numérico	115
3.3.6 Principais Resultados e Discussão do Estudo de Caso III	116
3.3.6.1 Visualização científica e comparação com dados experimentais	116
3.3.6.2 Esquema de interpolação e representação real do escoamento.....	117
3.3.6.3 Algoritmo de alisamento e representação real do escoamento	119

3.4 ESTUDO DE CASO IV: SIMULAÇÃO NUMÉRICA 3-D DO ESCOAMENTO LÍQUIDO-VAPOR EM UM PRATO PERFURADO	121
3.4.1 Modelagem Matemática.....	121
3.4.2 Geometria e Condições de Contorno	121
3.4.3 Malha Numérica.....	123
3.4.4 Método Numérico	124
3.4.5 Principais Resultados e Discussão do Estudo de Caso IV	124
3.4.5.1 Avaliação da malha numérica e do tempo computacional.....	124
3.4.5.2 Representação do comportamento real do escoamento	126
3.5 CONCLUSÕES PRELIMINARES OBTIDAS NOS ESTUDOS DE CASO I, II, III E IV	131
CAPÍTULO 4	133
DESCRIÇÃO DA INSTALAÇÃO EXPERIMENTAL E DA TÉCNICA DE MEDIDA DE VELOCIDADE	133
4.1 INTRODUÇÃO	133
4.1.1 Estrutura Laboratorial para a Experimentação Física.....	133
4.2 TÉCNICA EXPERIMENTAL DE MEDIDA	137
4.2.1 Anemômetro de Fio Quente.....	139
4.2.2 Princípio Básico de Funcionamento	140
4.2.1.1 Componentes do anemômetro de fio quente.....	143
4.2.1.2 Detalhes técnicos de utilização do anemômetro de fio quente	145
4.2.1.3 Sensores	146
4.2.1.4 Calibração	147
4.3 ANEMÔMETRO DE FIO QUENTE MODELO IFA 300.....	148
4.4 DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA DE CALIBRAÇÃO DA Sonda ANEMOMÉTRICA	149
4.4.1 Calibração da Sonda Tipo X no Canal de Calibração.....	154
CAPÍTULO 5	159
EXECUÇÃO E RESULTADOS DOS EXPERIMENTOS	159

5.1 INTRODUÇÃO	159
5.1.1 Escoamento Monofásico em um Reservatório Retangular	159
5.2 ENSAIOS EXPERIMENTAIS NO PRATO PERFURADO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO	169
5.2.1 Formação de Bolhas no Sensor	170
5.2.2 Influência do Aumento da Temperatura da Água	171
5.3 RESULTADOS OBTIDOS	172
CAPÍTULO 6	179
CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	179
6.1 CONCLUSÕES	179
6.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	183
REFERÊNCIAS	185
APÊNDICE A – MEMORIAL DE CÁLCULO PARA O PROJETO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO	193
APÊNDICE B – LEI DE KING	201
APÊNDICE C – CARACTERÍSTICAS DO SOFTWARE IFA 300	205

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

O desenvolvimento de projetos de processos químicos tem recebido aperfeiçoamento cada vez maior, incorporando modelos matemáticos e equações constitutivas mais consistentes, os quais possibilitam uma maior aproximação do seu comportamento real. Entre as operações unitárias que demandam maior estudo estão aquelas relacionadas com a transferência de massa e de calor, caracterizadas pela condensação e evaporação parciais dos componentes constituintes da mistura, denominados processos de destilação.

Ao longo do seu desenvolvimento, os processos de separação por destilação têm incorporado diversos conceitos de modelagens visando o aprimoramento no que diz respeito à representação fenomenológica. Destacam-se, como principais modelos desenvolvidos e aplicados, o modelo de estágios de equilíbrio e o modelo de estágios de não-equilíbrio. Este último, apesar de apresentar forte característica fenomenológica, ainda apresenta um alto grau de macroscopicidade.

Resumidamente, o conceito de estágios de equilíbrio consiste no estabelecimento do equilíbrio teórico entre as correntes de líquido e de vapor que saem de um determinado estágio. Quando o conceito de equilíbrio é utilizado, os balanços de massa e de energia no estágio estão baseados somente nas correntes de líquido e de vapor que entram e que saem do estágio, e o caráter real é incorporado introduzindo-se o conceito de eficiência.

O conceito de eficiência da destilação para o cálculo do número de estágios reais com base no número de estágios de equilíbrio, introduzido devido ao elevado grau de incertezas na especificação do projeto de uma coluna de destilação, é regido pelos fenômenos de transferência de massa e de calor por estágio e, em sua avaliação, são sugeridas diversas hipóteses simplificadoras, como a suposição de mistura perfeita entre as fases, composição uniforme na superfície do prato e o conceito de equilíbrio entre as correntes que abandonam o estágio em análise.

As limitações do uso do conceito de estágios de equilíbrio e, conseqüentemente, da aplicação de modelos de eficiência, são decorrentes do elevado número de variáveis operacionais, da complexa interação entre as variáveis, da ausência de métodos generalizados para o cálculo da eficiência para sistemas multicomponentes, da extrapolação de escala, entre outras, todas decorrentes do fato de ser o transporte de massa e de calor responsáveis pela eficiência do processo.

Com o intuito de minimizar as limitações decorrentes do uso do modelo de estágios de equilíbrio foi proposto o modelo de estágios de não-equilíbrio, caracterizado pela eliminação do conceito de equilíbrio entre as correntes que deixam o prato e pela solução simultânea das equações de transferência de massa e de calor, escritas independentemente para cada fase, e com grande potencial de representação do real comportamento de operação, uma vez que a solução baseia-se em métodos de grande rigor e que exploram tanto a estrutura geométrica do equipamento, quanto as propriedades físicas e térmicas dos sistemas envolvidos.

Porém, apesar da grande relevância deste modelo macroscópico, o mesmo apresenta ainda suas limitações quando da avaliação dos processos reais, visto que não considera os fenômenos de escoamento na superfície do prato como essenciais no desempenho do processo.

É dentro deste contexto que se propôs e desenvolveu-se a metodologia proposta nesta tese, que visa aperfeiçoar o estudo de colunas de destilação com pratos perfurados

para aplicação industrial e que consiste em uma análise rigorosa dos fenômenos de transferência de quantidade de movimento.

Com base nos aspectos expostos, esta tese tem, então, por objetivo desenvolver uma metodologia que permita a avaliação do escoamento líquido-vapor em um estágio de uma coluna de destilação com o intuito de aperfeiçoar o projeto de colunas de destilação com pratos perfurados. A metodologia consiste no desenvolvimento, na implementação numérica e na aplicação de um modelo microscópico de conservação da quantidade de movimento sob condições de escoamento turbulento capaz de descrever o comportamento fluidodinâmico do líquido na superfície de um prato perfurado sob a influência da fase vapor. Este estudo é complementado pela proposição de um método experimental para a aquisição de dados experimentais em uma unidade em escala de laboratório e que permita a validação da modelagem matemática proposta.

Desta forma, para atingir o objetivo geral proposto, destacam-se os seguintes objetivos específicos:

- Desenvolvimento e aprimoramento de modelos microscópicos para a descrição da fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor em um prato de uma coluna de destilação, com base na conservação de quantidade de movimento sob condições de turbulência. Destaca-se, nesta etapa, o desenvolvimento de 2 modelos distintos: Bidimensional e Monofásico: 2-DSM (“Two Dimensional Single Phase Model”) e Tridimensional e Bifásico com a hipótese da homogeneidade do escoamento: 3-DHomM (“Three Dimensional Two Phase Homogeneous Model”), ambos com o enfoque euleriano-euleriano;
- Construção de uma seção de uma coluna de destilação, em escala de laboratório, constituída por três pratos perfurados que permita a aquisição de dados experimentais para estudos de validação de modelos e métodos em fluidodinâmica computacional (CFD) (ou do inglês “Computational Fluid Dynamics”);

- Definição de uma técnica experimental de medida de parâmetros microscópicos capaz de fornecer dados para os estudos de validação do modelo matemático desenvolvido;
- Desenvolvimento de uma metodologia para a aquisição de dados experimentais na unidade em escala de laboratório.

Dentro deste contexto, esta tese está estruturada em seis capítulos, assim caracterizados:

No *Capítulo 1* é apresentada uma introdução geral referente a colunas de destilação, à necessidade de novos estudos envolvendo os aspectos fluidodinâmicos do escoamento líquido-vapor, bem como a motivação para o desenvolvimento do tema e os objetivos da tese.

No *Capítulo 2* são discutidos os principais aspectos históricos e científicos relacionados ao desenvolvimento de estudos em colunas de destilação. São apresentadas as principais características, vantagens e desvantagens dos modelos de estágios de equilíbrio e de não-equilíbrio e a necessidade de desenvolvimento de pesquisas que avaliem a fluidodinâmica do escoamento em um estágio de uma coluna de destilação. Esta avaliação é seguida de uma análise dos principais conceitos relativos à fluidodinâmica computacional, de uma revisão dos estudos mais recentes envolvendo a fluidodinâmica do escoamento líquido-gás, bem como uma breve caracterização do código comercial de fluidodinâmica computacional empregado no desenvolvimento de estudos de modelos e métodos em CFD.

No *Capítulo 3* é descrito, de forma sistemática, o desenvolvimento dos estudos em fluidodinâmica computacional envolvendo o escoamento líquido-gás e que culminaram na proposição de um modelo matemático capaz de caracterizar o escoamento na superfície de um prato perfurado de uma coluna destilação.

No *Capítulo 4*, são descritos os trabalhos desenvolvidos no projeto e construção do aparato experimental e que possibilitaram a simulação física do escoamento líquido-vapor em um prato perfurado, seguidos da avaliação da técnica experimental de medida.

No *Capítulo 5* é apresentado o planejamento experimental e os resultados obtidos aplicando a metodologia proposta.

Por fim, no *Capítulo 6*, as conclusões e sugestões para trabalhos futuros são apresentadas.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 INTRODUÇÃO

Há muitos anos, os processos de separação por destilação vêm sendo aplicados como técnicas laboratoriais de separação. Sua aplicação industrial, em larga escala, data do início do século XIX, quando se buscava tecnologias para remoção de hidrocarbonetos aromáticos do querosene. Desde então, estes processos tiveram grande desenvolvimento na indústria, abrangendo os mais diversos setores. No entanto, foi na indústria de refino de petróleo que eles obtiveram maior aplicação.

Apesar dos princípios de destilação de sistemas multicomponentes aplicarem-se ao caso de destilação de petróleo, são necessárias considerações especiais, principalmente quando a matéria-prima apresenta composição muito complexa, constituída por diferentes tipos de hidrocarbonetos. O número de compostos, num intervalo de pequenos pontos de ebulição, multiplica-se rapidamente com a elevação do ponto de ebulição.

As escalas das operações de destilação na indústria de petróleo são maiores que qualquer outra indústria, destacando-se a destilação atmosférica que visa separar o petróleo bruto numa unidade de destilação em retorta tubular. De acordo com HENGSTEBECK (1959), esta unidade é, em princípio, uma coluna retificadora, onde são retiradas diversas correntes laterais, além dos produtos do topo e do fundo. Muitas vezes, usam-se colunas retificadoras a vapor para tratar cada condensado parcial e eliminar suas frações leves que retornam à coluna principal.

Independentemente de sua utilização, o processo de separação por destilação é considerado um dos mais importantes na área de pesquisa e desenvolvimento. Com base nesta constatação, diversos métodos e modelos matemáticos para o projeto de colunas de destilação foram propostos e usados para estimar os parâmetros de grande relevância industrial. SOREL (1899) descreveu os cálculos da coluna de destilação supondo o estabelecimento do equilíbrio termodinâmico no estágio. Na década de 20, surgiram os métodos gráficos propostos por PONCHON (1921) e McCABE e THIELE (1925) que deram um novo impulso na interpretação do comportamento de colunas de destilação. O método de Ponchon-Savarit foi extensivamente substituído por métodos computacionais, mas o de McCabe-Thiele ainda é utilizado nos cursos de engenharia química, pelo fato de ilustrar os conceitos dos processos de separação por estágios. Com o advento dos computadores, novos métodos foram desenvolvidos, cujo objetivo é a solução numérica das equações dos modelos matemáticos.

2.2 MODELO DE ESTÁGIOS DE EQUILÍBRIO

O desenvolvimento e a aplicação do modelo de estágios de equilíbrio para destilação convencional foram descritos em vários livros textos: HOLLAND (1963, 1981), HENLEY e SEADER (1981), SEADER e HENLEY (1998), e em revisões: WANG e WANG (1980), SEADER (1985) e TAYLOR e LUCIA (1994).

Um diagrama esquemático de um estágio de equilíbrio é mostrado na Figura 2.1. O vapor do estágio abaixo e o líquido do estágio acima entram em contato no estágio juntamente com qualquer alimentação nova ou reciclada. Neste modelo, assume-se que as correntes de líquido e vapor que deixam o estágio estão em equilíbrio entre si. A Figura 2.2 ilustra um processo de separação completo, modelado como uma sequência de n estágios de equilíbrio.

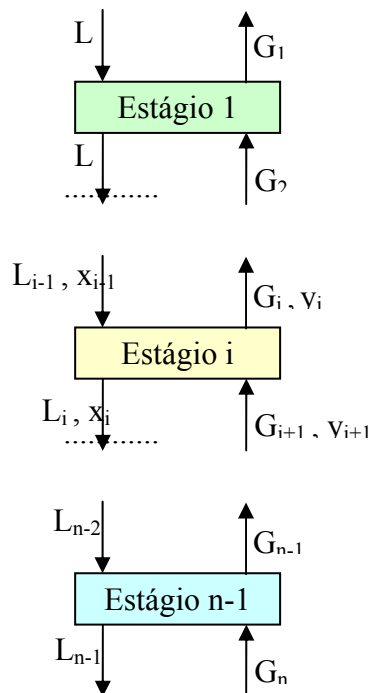


Figura 2.1 – Diagrama esquemático de um estágio de equilíbrio.

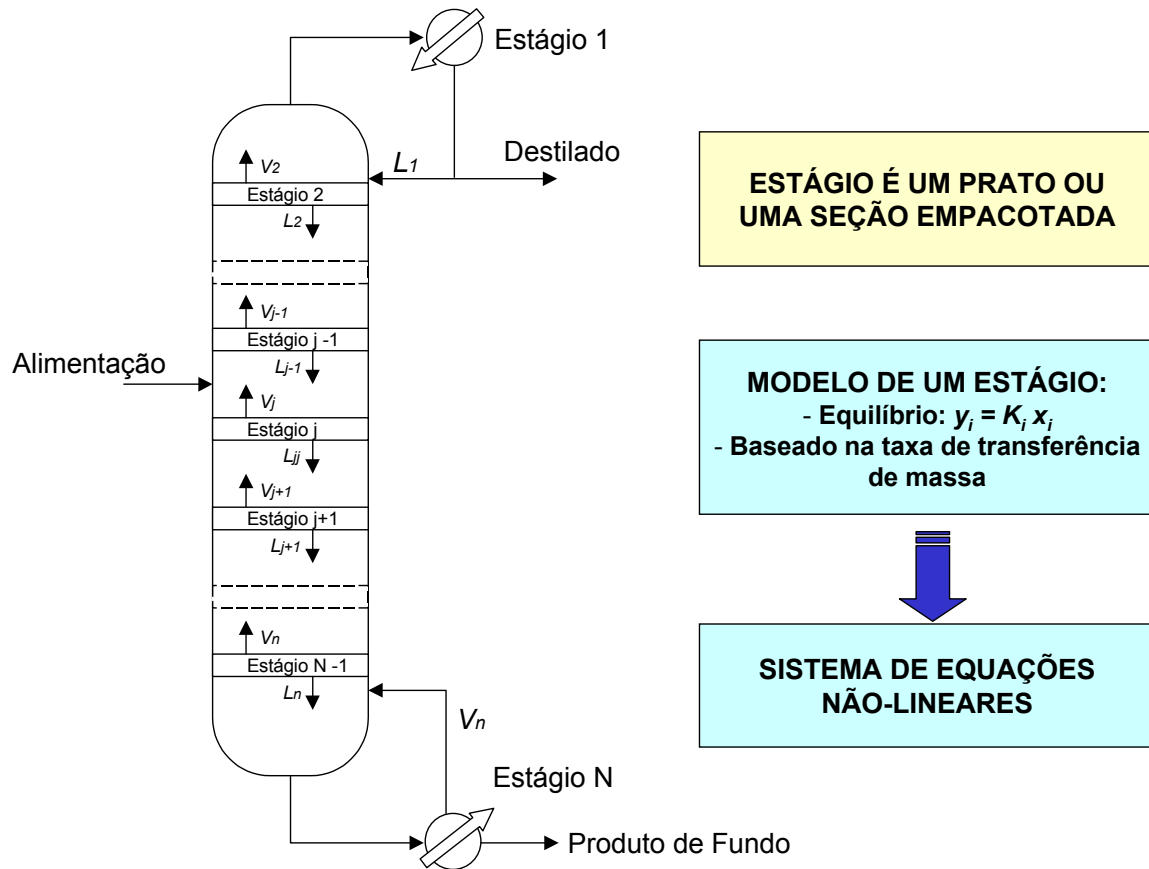


Figura 2.2 – Sequência de n estágios de equilíbrio.

As equações do modelo de estágios de equilíbrio são conhecidas como equações MESH (M = equações do balanço material; E = equações do equilíbrio de fases; S = equações do somatório das frações e H = equações do balanço de energia).

As pesquisas iniciais sobre estágios de equilíbrio estiveram voltadas para o desenvolvimento de métodos para resolver as equações do modelo de estágios de equilíbrio no estado estacionário. Mais recentemente, os estudos relacionados à modelagem de colunas de destilação estão sendo realizados usando simuladores comerciais, como o Aspen Plus, Pro/II, HYSIS e SpeedUp.

O modelo de estágios de equilíbrio assume o equilíbrio termodinâmico em cada estágio. A menos que a temperatura mude significativamente de estágio a estágio, a suposição de que o líquido e o vapor ao saírem do estágio estão na mesma temperatura

(equilíbrio térmico) é, geralmente, válida. Entretanto, na maioria dos casos, o equilíbrio químico não é uma suposição válida. Se todos os componentes possuírem a mesma eficiência de transferência de massa, o número de estágios reais está relacionado com o número de estágios de equilíbrio dividido pela eficiência global da coluna. Para destilação, a eficiência de pratos bem projetados varia de 40 a 80%; o valor mais elevado é atingido em colunas de menor diâmetro devido à perfeita homogeneidade da mistura. Quando o cálculo da eficiência de estágio a estágio se faz necessário, a eficiência de Murphree da fase vapor pode ser usada. Isto é particularmente desejável para operações em multiestágio envolvendo misturas multicomponentes. A eficiência, no modelo de estágios de equilíbrio, pode diminuir devido ao arraste das gotas de líquido pelo vapor ou devido à obstrução da passagem do vapor pelo líquido na área de ascensão do vapor. A primeira condição ocorre devido às altas vazões da fase vapor e a última condição é possível devido às baixas vazões de vapor.

Embora o modelo de estágios de equilíbrio seja adequado para misturas binárias e misturas multicomponentes ideais, as deficiências para misturas multicomponentes não ideais foram reconhecidas. MURPHREE (1925), que formulou o modelo da eficiência que leva o seu nome, apontou as deficiências para misturas multicomponentes. WALTER e SHERWOOD (1941) mostraram que valores de eficiência medidos experimentalmente podem cobrir uma enorme faixa, com alguns valores menores que 10%. KRISHNA et al. (1977) mostraram, teoricamente, que, em sistemas multicomponentes, podem ocorrer fenômenos que condicionam a transferência de um componente na direção contrária ao seu gradiente de concentração, resultando em valores de eficiência de Murphree na faixa de $-\infty$ a $+\infty$.

As restrições apresentadas no modelo levaram ao estudo e desenvolvimento do modelo de estágios reais (não equilíbrio). O primeiro passo para o desenvolvimento de um modelo mais realístico e representativo de colunas de destilação foi iniciado por KRISHNAMURTHY e TAYLOR (1985a,b,c). Recentemente, TAYLOR et al. (1994) estenderam o trabalho inicial adicionando os efeitos de queda de pressão, arraste, entre outros.

2.3 MODELO DE ESTÁGIOS DE NÃO EQUILÍBRIO

No equacionamento do modelo, os balanços de massa e de energia em cada estágio (procedimento convencional) foram substituídos por dois balanços: um para a fase vapor e outro para a fase líquida. Cada balanço material por componente contém um termo de taxa de transferência de massa entre as duas fases. Os balanços de energia contêm o termo da taxa de transferência de calor entre as fases. Assim, os balanços nas fases são acoplados às taxas de transferência de massa e de calor, estimados a partir de equações constitutivas que consideram o transporte na fase propriamente dita, interações entre as espécies e os efeitos de acoplamento. Os coeficientes de transferência de massa e de calor presentes nestas equações são obtidos a partir de correlações empíricas e da analogia de Chilton-Colburn. O equilíbrio entre as duas fases é assumido apenas na interface. Várias configurações do escoamento líquido-vapor são empregadas no modelo, incluindo “plug flow” e mistura perfeita em cada estágio. Uma representação esquemática do estágio de não equilíbrio é mostrada na Figura 2.3.

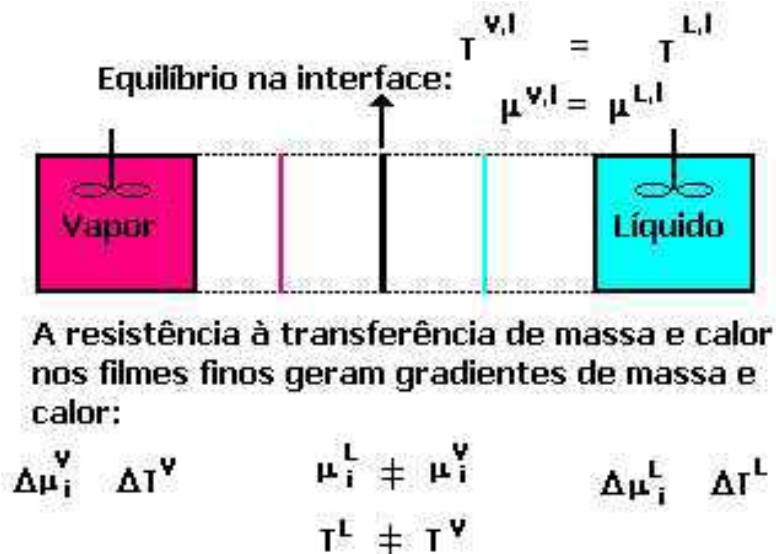


Figura 2.3 – Representação esquemática do estágio de não equilíbrio.

A Figura 2.3 representa um prato ou uma seção de uma coluna de recheios. Os balanços materiais e as expressões para as taxas de transferência de massa contêm termos referentes à transferência de massa dos componentes da fase vapor para a fase líquida. Estas taxas são estimadas a partir de contribuições difusivas, baseadas na área interfacial, frações molares médias e coeficientes de transferência de massa que levam em conta efeitos de interação dos pares binários através de coeficientes binários. As correlações empíricas para a determinação da área interfacial e dos coeficientes de transferência de massa do par binário são válidas para pratos de campânulas, pratos perfurados, pratos valvulados e recheios estruturados. As frações molares médias dependem dos padrões de escoamento assumidos para as fases líquida e vapor.

Este é o modelo mais simples e adequado para colunas de prato de pequeno diâmetro. As equações que contêm termos para as taxas de transferência de calor da fase vapor para a fase líquida são estimadas a partir das contribuições convectivas e do escoamento médio, baseadas na área interfacial, na temperatura média e nos coeficientes de transferência convectiva de calor que são determinados a partir da analogia de Chilton-Colburn para a fase vapor e pela teoria da penetração para a fase líquida.

Os valores da constante de equilíbrio líquido-vapor são estimados a partir das equações de estado ou modelos dos coeficientes de atividade usados no modelo de estágios de equilíbrio. A queda de pressão em pratos ou em seções de colunas de recheios é estimada a partir de correlações apropriadas.

Informações detalhadas de ambas as modelagens podem ser encontradas em PESCARINI (1996), BARROS (1997) e SOARES (2000).

Diante das características das modelagens de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio descritas, percebe-se que os modelos macroscópicos consideram somente os fenômenos de transferência de massa e de calor. A fluidodinâmica nestes modelos é avaliada mediante a utilização de correlações empíricas que fornecem estimativas de

parâmetros globais, como queda de pressão, altura de líquido sobre o prato, vazão de líquido e de vapor, entre outros, relacionados no cálculo de eficiência do processo.

Deste modo, pode-se destacar os seguintes aspectos relacionados à pesquisa e desenvolvimento na área de colunas de destilação:

- Deficiência no entendimento do processo: o nível atual de entendimento da influência da geometria e detalhes do escoamento sobre a eficiência e o desempenho é inadequado;
- Necessidade de melhores simuladores e modelos para o projeto de colunas, com o intuito de se evitar o uso de parâmetros empíricos em projetos;
- Simulação global do processo: importância da fluidodinâmica computacional na simulação de colunas de destilação;
- Tipos de processos/equipamentos e aplicação das análises de fluidodinâmica computacional: pratos perfurados, pratos corrugados e leitos catalíticos (separação reativa).

2.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

2.4.1 Principais Características

Estudos de fluidodinâmica através da solução numérica das equações do movimento acopladas com as equações de conservação da massa e da energia, em um referencial microscópico, são denominados de estudos de fluidodinâmica computacional ou estudos de CFD (“Computational Fluid Dynamics”). Compreende estudos de modelagem matemática, geração de malhas numéricas em geometrias complexas, métodos numéricos e métodos de visualização científica. Aplicações industriais desta técnica de análise e simulação de processos iniciaram a partir de 1995 (HAMILL, 1996) em situações denominadas de “gargalos” de processo, principalmente na indústria petroquímica. Nestes casos, uma parte do processo, um equipamento ou um acessório, é analisado individualmente com a finalidade de se obter informações sobre os padrões de escoamento que possam subsidiar um estudo de incremento de desempenho.

Utilizando a técnica, pode-se construir um modelo computacional que represente um sistema ou um equipamento que se deseja estudar. Aplica-se a física do escoamento a este protótipo virtual e gera-se uma predição da dinâmica do fluido. CFD é uma técnica de análise sofisticada; não somente prediz o comportamento do escoamento, mas também a transferência de calor, massa, mudança de fase, reação química, movimento mecânico e tensão ou deformação de estruturas sólidas relacionadas.

O uso da fluidodinâmica computacional para prever os fluxos internos e externos cresceu enormemente na década passada. Nos anos 80, a solução de problemas envolvendo o escoamento de fluido por meio de CFD era do domínio de acadêmicos, pós-doutores, pesquisadores pós-graduados ou especialistas treinados com muitos anos de conhecimento na área. A disponibilidade de estações de trabalho juntamente com algoritmos de solução eficientes e sofisticados pré e pós-processadores facilitaram o uso

dos códigos de CFD para pesquisa, desenvolvimento e projetos na indústria (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

Apesar dos códigos disponíveis no mercado serem extremamente “poderosos”, sua operação ainda requer um alto nível de conhecimento para que se possa obter resultados significativos para situações complexas. Apesar dos códigos comerciais basearem-se, inicialmente, no método dos elementos finitos, o mercado está dominado por códigos de CFD que resolvem as equações que governam o escoamento de fluido, a transferência de massa e de calor, a radiação e a reação química, baseados no método dos volumes finitos.

O escoamento de fluidos com ou sem transferência de calor está envolvido, praticamente, em todos os processos de produção de energia, nos fenômenos ambientais, nos projetos de equipamentos térmicos, na engenharia aeronáutica e aeroespacial, na engenharia de reatores, na bioengenharia, etc. Em suma, a técnica engloba uma vasta área de aplicações industriais e não industriais. Alguns exemplos são (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995):

- aerodinâmica de espaçonaves e veículos;
- hidrodinâmica de navios;
- combustão em motores e turbinas a gás;
- fluxo dentro de difusores;
- resfriamento de equipamentos, incluindo micro-circuitos;
- engenharia de processos químicos: mistura e separação, modelagem de polímeros;
- engenharia de meio-ambiente: distribuição dos poluentes e efluentes;
- hidrologia e oceanografia: fluxos em rios, estuários e oceanos;
- meteorologia: previsão do tempo;
- engenharia biomédica: fluxo de sangue através de artérias e veias;
- rotores de bombas visando a otimização da geometria;

- reatores tanques agitados como modelo não ideal de reator para a previsão de zonas mortas e de circulação e dos efeitos das chicanas e dos agitadores nas condições de mistura;
- trocadores de calor, com o intuito de se maximizar a troca térmica por análise dos efeitos da utilização de chicanas e aletas e de configurações geométricas alternativas;
- ciclones das unidades de craqueamento catalítico de petróleo (FCC) com a finalidade de se desenvolver projetos com alta eficiência de coleta e reduzida queda de pressão; entre outros.

Ao longo dos anos, a fluidodinâmica computacional é utilizada no aperfeiçoamento de projeto de processos, permitindo a simulação do desempenho de configurações alternativas e a obtenção de soluções para problemas com geometria e condições de contorno complexas. As vantagens da sua utilização são inúmeras, entre elas a de proporcionar a flexibilidade de mudanças de parâmetros, sem a despesa com mudança no processo. Portanto, custa menos que experimentos em laboratório ou em campo, permitindo simular projetos alternativos mais viáveis; o tempo de resposta é mais curto quando comparado ao dos experimentos, proporciona informações sobre o escoamento em regiões onde as medidas são difíceis ou impossíveis de se obter.

Entretanto, a aplicação das técnicas de fluidodinâmica computacional na indústria, em geral, ainda é restrita. A principal limitação existente é a necessidade de computação de alto desempenho para a simulação de fenômenos e geometrias complexos, típicos da indústria de processos, além da necessidade de modelos cada vez mais fidedignos. Além disso, a modelagem de sistemas multifásicos e o fenômeno da turbulência ainda se apresentam como problemas abertos no campo da física. Diante destes aspectos, é necessária a realização de estudos exploratórios que envolvam modelos numéricos complexos em geometrias relativamente simples, para promover a validação da fluidodinâmica computacional para sistemas multifásicos e permitir o avanço da pesquisa nos diversos ramos da Engenharia Química.

A aplicação da fluidodinâmica computacional envolve a divisão da geometria espacial de interesse em um determinado número de células computacionais. As células podem possuir uma variedade de formas. As formas triangular e quadrilateral são, geralmente, utilizadas para problemas bidimensionais (2-D), no qual o escoamento depende somente de duas coordenadas espaciais. Em problemas tridimensionais, onde o escoamento depende de três coordenadas espaciais, formas hexaédricas, tetraédricas, piramidais e prismáticas podem ser usadas.

Uma vez criada a malha numérica, as condições de contorno precisam ser aplicadas. Pressão, velocidade, fluxo mássico, além de escalares, tais como temperatura, podem ser especificados nas entradas; temperatura, taxas de tensão na parede, ou fluxos de calor podem ser definidos nas paredes; e pressão ou fluxos podem ser fixados nas saídas do domínio computacional. As propriedades de transporte, tais como massa específica, viscosidade e calor específico, precisam ser prescritas como constantes ou selecionadas a partir de um banco de dados. Estas propriedades podem ainda ser função da temperatura, da pressão ou de qualquer outra variável de estado. Os fluidos podem ser modelados como compressíveis ou incompressíveis, e newtonianos ou não-newtonianos. Em aplicações que envolvem a transferência de massa ou de calor, as difusividades binárias e térmicas devem ser especificadas.

Com a malha numérica criada e as condições de contorno e as propriedades físicas definidas, o código resolverá, pelo método dos volumes finitos, as equações de conservação em todas as células utilizando procedimento iterativo.

Muitos códigos comerciais de CFD estão disponíveis, cada qual com diferentes capacidades, modelos físicos, métodos numéricos, flexibilidade geométrica e interface com o usuário. Alguns dos pacotes de CFD amplamente empregados são: PHOENICS (“Parabolic Hyperbolic” ou “Elliptical Numerical Integration Code Series”), FLUENT, CFDLIB, MOUSE, FIDAP (“Fluid Dynamics Analysis Package”) e CFX.

Para o desenvolvimento desta pesquisa científica, que envolve o estudo de experimentação numérica de modelos e métodos, o código comercial de fluidodinâmica computacional CFX 4.4 da ANSYS Inc. foi empregado.

2.4.2 O Código CFX

De maneira similar aos demais códigos, o CFX é estruturado de modo a conter os seguintes elementos:

- Pré-processador;
- “Solver”;
- Pós-processador.

Pré-processador: consiste numa unidade do código em que o problema é caracterizado e modelado. Esta etapa envolve:

- definição da geometria e regiões de interesse (domínio computacional);
- geração da malha numérica que contém subdivisões do domínio computacional. Estas subdivisões são, normalmente, chamadas de células, elementos ou volumes de controle;
- seleção dos fenômenos físicos e químicos;
- definição das propriedades dos fluidos envolvidos no problema;
- especificação das condições de contorno.

A resolução do problema (velocidades, temperaturas, pressões, frações volumétricas, etc.) se dá nos nós que compõem a malha numérica. A qualidade da solução é governada pelo número de células. Em geral, quanto maior o número de células, melhor a solução a ser obtida; porém, maior o tempo computacional na solução do problema, o que demanda investimento em computadores de alto desempenho.

“Solver”: os métodos numéricos contidos nessa unidade do código CFX resolvem o problema percorrendo três etapas:

- aproximação das variáveis do problema em funções simples;
- discretização das aproximações que governam o problema e, conseqüentemente, a manipulação matemática;
- solução algébrica das equações.

O método numérico mais usado nos códigos comerciais de fluidodinâmica computacional é o dos volumes finitos, que foi originalmente desenvolvido através de uma formulação especial do método das diferenças finitas. Este método numérico envolve:

- a integração formal das equações que governam o problema, sobre todos os volumes de controle do domínio computacional;
- a discretização, envolvendo uma variedade de aproximações das equações integradas. Posteriormente, converte-se as equações integradas para sistemas de equações algébricas;
- a solução das equações algébricas por método iterativo.

A primeira etapa distingue o método de volumes finitos de todas as outras técnicas de solução. As expressões resultantes dessa etapa mantêm a conservação das propriedades em cada célula. Pelo fato dos fenômenos físicos serem complexos e não-lineares, a solução iterativa e aproximada é necessária.

Pós-processador: esta unidade do código comercial permite a visualização dos resultados através de diferentes posições em relação a geometria. Os gráficos e mapas que podem ser construídos incluem:

- geometrias do domínio computacional;
- plotagens vetoriais de linhas de contorno e de superfícies 2-D e 3-D;

- manipulações gráficas, com rotação e translação;
- animações dinâmicas dos resultados.

2.4.3 O Método dos Volumes Finitos

O método dos volumes finitos foi originalmente desenvolvido como uma formulação especial do método das diferenças finitas. Este método é o foco central dos principais códigos de CFD. Em linhas gerais, o algoritmo numérico consiste nos seguintes passos (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995):

- integração formal das equações de conservação do escoamento do fluido ao longo dos volumes de controle, no domínio da solução;
- discretização envolvendo a substituição de uma variedade de aproximações por termos na equação integrada, representando os mecanismos de transferência por convecção e difusão, além de termos fonte. Nesta etapa, converte-se as equações da forma integral para um sistema de equações algébricas;
- solução das equações algébricas aplicando um método iterativo.

O primeiro passo, a integração no volume de controle, distingue o método dos volumes finitos de todas as outras técnicas. Isto implica na conservação das propriedades relevantes em cada uma das células no domínio da solução. Esta relação entre o algoritmo numérico e as formas fundamentais dos princípios de conservação representa um dos maiores atrativos do método dos volumes finitos, tornando o método de fácil compreensão para engenheiros quando comparado ao método das diferenças finitas e dos métodos espectrais.

Os códigos de CFD contêm técnicas de discretização adequadas para o tratamento dos mecanismos básicos de transferência, convecção e difusão, bem como dos termos fonte, e dos termos de variação temporal. Os fenômenos físicos fundamentais, entretanto, são extremamente complexos e não-lineares, o que sugere um método de

solução iterativo. O procedimento de solução mais utilizado é o linha por linha TDMA para a solução das equações algébricas, e o algoritmo “SIMPLE” para assegurar o acoplamento pressão-velocidade.

Informações detalhadas do método dos volumes finitos podem ser encontradas em VERSTEEG e MALALASEKERA (1995) e MALISKA (2004).

2.5 FLUIDODINÂMICA DO ESCOAMENTO LÍQUIDO-GÁS

Nos últimos anos tem se observado um considerável interesse acadêmico e industrial no uso da fluidodinâmica computacional para modelar o escoamento bifásico em processos químicos. Progressos consideráveis foram obtidos na modelagem fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados e ciclones, e de colunas de bolhas, sendo que os primeiros trabalhos no campo de coluna de bolhas iniciaram com a simulação de plantas nucleares, onde os modelos unidimensionais, mais simples, foram usados. Neste estágio inicial, a mistura líquido-gás era tratada como uma mistura quase homogênea. A velocidade da fase gasosa era calculada através de uma relação algébrica, e um fator de fricção bifásico turbulento foi introduzido. A existência de numerosas e, às vezes, conflitantes correlações para os coeficientes de dispersão axial demonstraram que a capacidade de predição destes modelos era limitada. Na tentativa mais recente de modelar bidimensionalmente colunas de bolhas, o perfil radial do “hold up” da fase gasosa foi obtido a partir de dados experimentais e o perfil de velocidade da fase líquida resultante foi calculado utilizando um balanço de momento simplificado para a fase líquida (GEARY e RICE, 1992).

Desde o início dos anos 80, os avanços obtidos na área de simulação numérica de escoamentos juntamente com o crescimento do desempenho computacional impulsionaram o desenvolvimento de modelos bidimensionais mais detalhados. Para o escoamento bifásico, a formulação euleriana-euleriana é amplamente usada. O gás é tratado como uma fase pseudo-contínua e as equações de balanço são formuladas para ambas as fases. Neste modelo, as seguintes suposições foram adotadas:

- estado estacionário;
- escoamento turbulento;
- condições isotérmicas;
- fase gasosa quase contínua, geralmente incompressível;
- uma única categoria de bolhas.

Método dos volumes finitos e soluções iterativas, baseadas, principalmente, no algoritmo “SIMPLEC” de PANTAKAR (1980) e extensões deste foram aplicados para a solução numérica.

Recentemente foram publicados trabalhos que tratam da simulação baseada em um modelo dinâmico (WEBB et al., 1992; HJERTAGER e MORUD, 1993; BECKER et al., 1994; LAPIN e LÜBBERT, 1994). Na maioria dos casos abordados, um comportamento substancialmente diferente foi observado quando dados experimentais foram comparados com os obtidos a partir da simulação no estado estacionário.

A partir de diferentes modelos fluidodinâmicos encontrados na literatura, os modelos bifásicos multidimensionais com as equações de balanço escritas para ambas as fases permitiram uma descrição mais detalhada do escoamento bifásico. Os modelos bifásicos podem contemplar as aproximações euleriana-euleriana e euleriana-lagrangeana, dependendo do modo como a fase dispersa é tratada. Na aproximação euleriana-euleriana ambas as fases (a fase contínua líquida e a fase dispersa gasosa) são modeladas baseadas na hipótese da interpenetrabilidade das fases. Por outro lado, na aproximação euleriana-lagrangeana as equações médias de Navier-Stokes são usadas para descrever o movimento da fase líquida e cada bolha é rastreada com base em um balanço das forças que agem sobre a bolha e em uma equação do movimento.

Nos últimos anos um grande número de autores (TORVIK e SVENDSEN, 1990; RANADE, 1992; GRIENBERGER e HOFMANN, 1992; HJERTAGER e MORUD, 1995; SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1994; van der AKKER, 1998) publicaram resultados obtidos com a aproximação euleriana-euleriana aplicada no estudo de coluna de bolhas. Os resultados obtidos por SOKOLICHIN e EIGENBERGER (1994) revelam o comportamento de uma coluna desta natureza.

TRAPP e MORTENSEN (1993), LAPIN e LÜBBERT (1994), DEVANATHAN et al. (1995) e DELNOIJ et al. (1997a,b,c) conduziram trabalhos pioneiros empregando a

aproximação euleriana-lagrangeana na modelagem de coluna de bolhas operada no regime homogêneo.

Geralmente, é aceitável que somente modelos fluidodinâmicos tridimensionais sejam capazes de simular, em uma extensão razoável, as características essenciais encontradas em coluna de bolhas (DELNOIJ et al., 1997a,b; PFLEGER et al., 1999; SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1999). Geralmente, as estruturas de escoamento determinadas pelo modelo discreto tridimensional apresentado são mais complexas que as previstas pelo modelo discreto bidimensional apresentado por DELNOIJ et al. (1997a,b,c). Este comportamento é esperado devido à complexa natureza do escoamento bifásico líquido-gás encontrado em uma coluna de bolhas e as características tridimensionais inerentes deste modelo (DELNOIJ et al., 1999). JAKOBSEN et al. (2005) apresentaram os principais progressos, durante a década passada, relacionados à coluna de bolhas. Os autores revisaram os modelos multifásicos baseados na aproximação euleriana e relataram o emprego de técnicas de CFD na modelagem do escoamento vertical das bolhas.

Quanto à fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor em colunas de destilação, objeto deste estudo, muito pouco tem sido publicado. Assim, a modelagem detalhada do escoamento líquido-gás em uma coluna de bolhas foi adotada como um pré-requisito para a modelagem do escoamento líquido-vapor em colunas de destilação, de acordo com a descrição feita nos estudos de casos em fluidodinâmica computacional.

A descrição da fluidodinâmica de pratos perfurados é de grande importância na prática industrial. Para uma série de condições operacionais (cargas de líquido e vapor), de geometrias do prato (diâmetro da coluna, altura da represa, comprimento da represa, diâmetro das perfurações, fração de área perfurada, área ativa de borbulhamento, área de descida do líquido) e de propriedades do sistema, é necessário prever o regime de escoamento que prevalece sobre o prato, o “hold up” do líquido, a altura de líquido claro, a densidade da espuma, a área interfacial, a queda de pressão, o tempo de residência da fase líquida e da fase vapor e os coeficientes de transferência de massa em cada uma das

fases. Há trabalhos publicados na literatura sobre este assunto (KISTER, 1992; LOCKETT, 1986; ZUIDERWEG, 1982).

Há tempo tem se reconhecido que a caracterização da fluidodinâmica de pratos de colunas de destilação é necessária para a correta predição da eficiência e do desempenho global do prato. É de fundamental importância a caracterização das regiões de circulação de líquido e escoamento reverso nas regiões próximas à parede do prato, uma vez que causam redução da eficiência de Murphree no prato. Os trabalhos desenvolvidos por YU et al. (1986) e PORTER et al. (1992) indicaram que o padrão de escoamento da fase líquida é complicado e o tamanho da região de circulação é afetado por muitos parâmetros operacionais. Conseqüentemente, o padrão de escoamento da fase líquida geralmente é obtido através de experimentos.

Entretanto, os experimentos e correlações empíricas conduzem a predições primárias da fluidodinâmica de pratos. Estes métodos produzem resultados aceitáveis em inúmeros casos, mas apresentam suas limitações, principalmente nos casos de ampliação de escala. A incapacidade de se modelar a fluidodinâmica limita a confiabilidade das predições em equipamentos de larga escala empregando dados de eficiência medidos em equipamento de pequena escala.

Recentemente, avanços foram obtidos com a aplicação de técnicas da fluidodinâmica computacional na simulação do escoamento da fase líquida sobre o prato de uma coluna de destilação por meio de vários modelos teóricos, tais como o modelo da função de corrente (YOSHIDA, 1987), o modelo de turbulência $k-\epsilon$ (ZHANG e YU, 1994) e o modelo de turbulência dos dois fluidos (YUAN et al., 1995). Estes modelos apresentam, com precisão, o escoamento da fase líquida para diferentes taxas de líquido, mas não são muito bons na predição da influência da fase vapor. Como o escoamento das fases no prato é cruzado, a fase líquida geralmente é considerada contínua e o vapor a fase dispersa. Experimentalmente foi observado que o movimento das bolhas segue a direção do escoamento do líquido. Dois fatores afetam o padrão do escoamento da fase líquida e devem ser considerados: (i) a força resistiva devido a passagem da fase vapor

através do líquido que está fluindo e, (ii) a turbulência adicional na fase líquida criada pelo borbulhamento. Em trabalhos prévios (ZHANG e YU, 1994; YUAN et al., 1995) somente o primeiro efeito foi levado em conta na modelagem.

A maior parte dos trabalhos experimentais desenvolvidos para validar as predições numéricas foi realizada por meio de medidas indiretas do padrão de escoamento, tais como: injeção de corante, injeção de um traçador (BELL, 1972), queda de temperatura (STICHLMAIR e ULBRICH, 1987; PORTER et al., 1987), entre outras. Evidentemente, para uma avaliação experimental precisa do modelo, uma medida direta da velocidade local se faz necessária. Recentemente, usando a técnica de anemometria de fio quente, LIU (1995) mediu a velocidade do escoamento líquido em um prato de uma coluna de destilação. Embora tais medidas tenham sido limitadas para uma única dimensão, empregando uma sonda com um sensor padrão simples, os resultados mostraram-se satisfatórios.

Relacionados à simulação numérica, três diferentes correntes têm surgido para modelar a fluidodinâmica de pratos de colunas de destilação. MEHTA et al. (1998) analisou os padrões de escoamento da fase líquida em um prato perfurado através da solução das equações da continuidade e de momento médias temporais somente para a fase líquida. As interações com a fase vapor foram consideradas a partir do uso de coeficientes de transferência de momento determinados a partir de correlações empíricas. YU et al. (1998) modelaram o comportamento do escoamento bifásico usando um modelo bidimensional, focando a atenção na descrição da fluidodinâmica ao longo da trajetória do líquido, ignorando variações na direção da trajetória do vapor ao longo da dispersão. LIU et al. (2000) apresentaram um estudo experimental e numérico para avaliar um modelo bidimensional capaz de prever os campos de velocidade e as propriedades turbulentas, descrevendo o escoamento da fase líquida sobre o prato, considerando a resistência e o efeito do borbulhamento criados pela fase vapor. FISCHER e QUARINI (1998) tentaram descrever a fluidodinâmica tridimensional e transiente das fases líquida e vapor. Uma suposição importante nas simulações de Fischer e Quarini diz respeito ao coeficiente de transferência de momento na interface; estes

autores assumiram um coeficiente de arraste constante (0,44), que é apropriado para o escoamento borbulhante uniforme. Este coeficiente de arraste não é adequado para a representação da fluidodinâmica de pratos operando no regime de espuma ou “spray”. van BATEN e KRISHNA (2000) desenvolveram um modelo fluidodinâmico computacional tridimensional e transiente, empregando uma aproximação euleriana, para descrever a fluidodinâmica de um prato perfurado. O coeficiente de transferência de quantidade de momento na interface foi estimado com base na correlação de BENNET et al. (1983) para o “hold up” da fase líquida. Modificações na equação foram propostas, evitando-se, assim, a necessidade de especificação do diâmetro da bolha. Tais trabalhos podem ser considerados como os mais relevantes na área e, portanto, como uma representação fidedigna do estado da arte no assunto.

Com base no objetivo geral apresentado no Capítulo 1, no Capítulo 3 é apresentada, de forma gradual e sistemática, a modelagem matemática dos casos que serviram de base para a proposição de um modelo matemático representativo do escoamento tridimensional em um prato de uma coluna de destilação.

Além disto, este estudo de casos representa o primeiro grande resultado obtido no desenvolvimento da metodologia para a avaliação experimental e numérica do escoamento líquido-vapor em colunas de destilação, e está servindo de base para o desenvolvimento de novos modelos, incorporando os fenômenos de transferência de massa e de calor.

CAPÍTULO 3

MODELAGEM MATEMÁTICA E ESTUDO DE CASOS EM FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL ENVOLVENDO O ESCOAMENTO LÍQUIDO-GÁS

Os escoamentos multifásicos, em especial os escoamentos envolvendo as fases líquida e gasosa, são foco de muitos estudos numéricos e experimentais, visto que são comuns em inúmeros processos na engenharia química. Além disso, observa-se na literatura que os estudos de verificação e validação dos modelos e métodos envolvendo o escoamento líquido-gás ainda são incipientes e necessitam de atenção especial. Neste sentido, neste capítulo é apresentada a metodologia desenvolvida para o estudo do escoamento líquido-gás, partindo de escoamentos considerados simples, até atingir o objetivo principal, isto é, o escoamento em pratos perfurados de colunas de destilação.

A metodologia consistiu em iniciar um estudo utilizando um módulo experimental de hidráulica, com o intuito de se obter experiência com modelos e métodos associados ao escoamento com superfície livre. Nesta etapa foram testados o modelo homogêneo e o algoritmo de alisamento de superfície. Em seguida, desenvolveu-se um estudo referente ao escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de uma coluna de destilação, considerando o escoamento da fase líquida mais importante que o da fase vapor e, assim, o mesmo pôde ser modelado como monofásico. A influência da fase vapor foi representada por forças resistivas e turbulência adicional. Para uma melhor compreensão sobre a modelagem envolvendo os fenômenos de transferência de quantidade de movimento em escoamentos multifásicos, estudos numéricos foram realizados em uma coluna de bolhas em escala de bancada. Somente após adquirida experiência necessária para a modelagem do escoamento multifásico, obtida nos três

casos citados anteriormente, procedeu-se à proposição de um modelo 3-D e homogêneo capaz de representar o escoamento líquido-vapor em pratos perfurados de colunas de destilação. Na metodologia de solução o principal objetivo esteve relacionado às características numéricas, tais como: fatores de relaxação, esquemas de interpolação, integração temporal, acoplamento pressão-velocidade, entre outros.

Assim, os diferentes casos avaliados foram agrupados de acordo com o nível de complexidade da modelagem matemática envolvida, isto é:

- Simulação numérica 3-D transiente do escoamento líquido-gás em um módulo experimental de hidráulica;
- Simulação numérica 2-D do escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de uma coluna de destilação;
- Simulação numérica 3-D do escoamento líquido-gás em uma coluna de bolhas;
- Simulação numérica 3-D do escoamento líquido-vapor em um prato perfurado.

Convém ressaltar que as simulações foram realizadas em computadores do tipo Pentium IV, com processador de 3 GHz e com 1 Gb de memória RAM, com a capacidade de 1.577,97 MFLOPS (“floating point operation per seconds”). Além disto, chama-se atenção ao fato de que, nos estudos de caráter numérico e experimental envolvendo o escoamento em pratos perfurados, empregou-se o termo “vapor” ao invés do termo “gás”, apesar de se ter utilizado ar como fluido de trabalho, que, por definição, é um gás. Esta suposição foi assumida para não descaracterizar o escoamento no interior de colunas de destilação que, em sua operação normal, envolve as fases líquida e vapor.

3.1 ESTUDO DE CASO I: SIMULAÇÃO NUMÉRICA 3-D TRANSIENTE DO ESCOAMENTO LÍQUIDO-GÁS EM UM MÓDULO EXPERIMENTAL DE HIDRÁULICA

O primeiro estudo de caso foi direcionado à avaliação numérica e experimental do escoamento transiente, tridimensional e bifásico em um módulo de hidráulica em escala de bancada. O objetivo foi o de avaliar a capacidade do modelo homogêneo em prever a dinâmica do escoamento em superfície livre e, conseqüentemente, validar o modelo matemático desenvolvido.

3.1.1 Caracterização Física do Módulo Experimental de Hidráulica

Devido à simplicidade de construção e à facilidade de aquisição de dados, tal aparato experimental possibilitou o estudo de um escoamento multifásico de modo simplificado. As principais características geométricas são detalhadas na Figura 3.1.

O módulo de hidráulica consiste, basicamente, em uma caixa retangular de acrílico, com 0,011 m de espessura, sustentada por um suporte metálico, conforme apresentado na Figura 3.2. O fluido (água de abastecimento da rede local) é constantemente bombeado, passando por tubulações e dirigido ao acumulador, presente em uma das extremidades. Atingido um determinado nível no acumulador, o fluido percorre todo o módulo que se encontra completamente preenchido com ar atmosférico, e retorna a um tanque coletor presente na extremidade oposta. No estado estacionário, dados de vazão em relação ao tempo são coletados para diferentes condições de operação. Como pode-se observar na Figura 3.1, este aparato permite a fixação de um obstáculo retangular na parte central da calha, com aproximadamente 10 mm de espessura por 70 mm de comprimento. Este acessório perturba o escoamento e causa um fenômeno de onda reversa, ou seja, parte da água retorna, de forma bem comportada, para o início da calha. A Figura 3.3 apresenta a imagem do escoamento reverso causado pelo obstáculo.

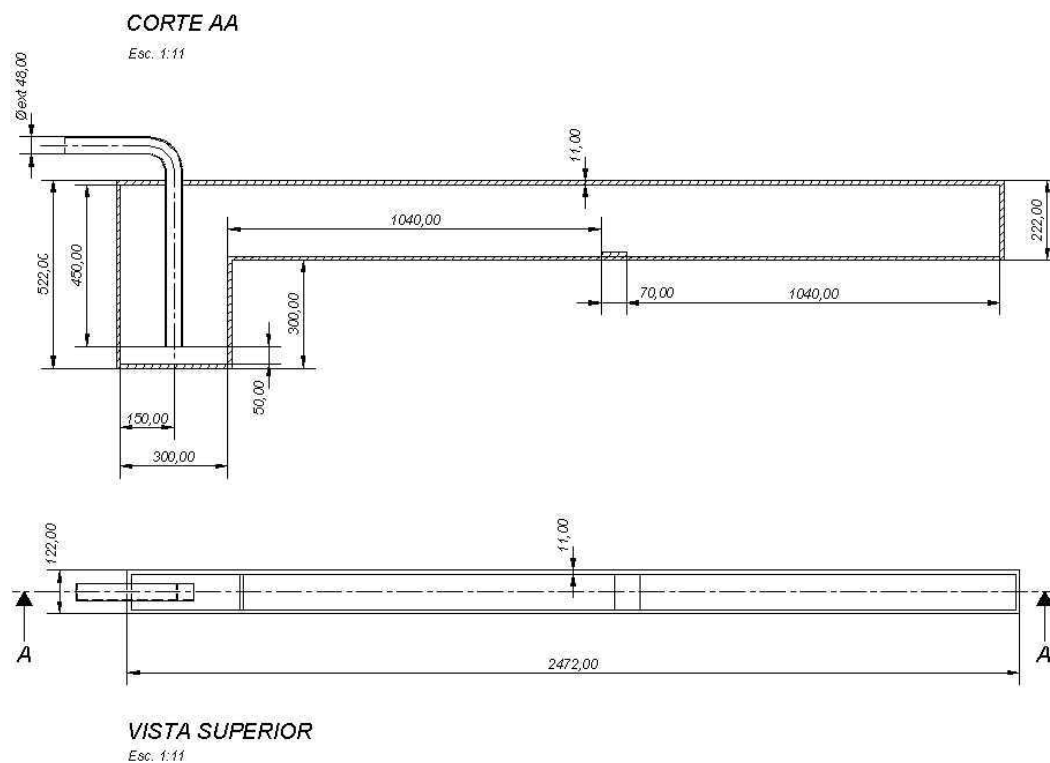


Figura 3.1 – Características geométricas do módulo experimental de hidráulica.



Figura 3.2 – Módulo experimental de hidráulica.



Figura 3.3 – Onda reversa gerada pelo obstáculo no interior do módulo.

Com base no trabalho experimental descrito acima, desenvolveu-se um modelo fluidodinâmico para simulação do escoamento 3-D em regime transiente, empregando o código comercial CFX 4.4.

3.1.2 Modelagem Matemática

- Equações de conservação – modelo homogêneo

O modelo homogêneo é uma simplificação do modelo multifluido e foi empregado para prever o escoamento líquido-gás no módulo de hidráulica. Considerado o modelo mais simples no que tange ao domínio do contínuo, ele assume a mesma velocidade para cada fase (velocidade da mistura) (ARASTOPOUR, 1978; HANSEN et al., 2002), isto é:

$$v_i = v, \quad 1 \leq i \leq N_p \quad (1)$$

onde i e N_p são, respectivamente, a fase i e o número total de fases, e \mathbf{v} o vetor velocidade da mistura.

Apesar de assumir que a velocidade é a mesma para cada fase, as frações volumétricas são distintas. Desta forma, a equação da continuidade da fase individual é resolvida para determinar a fração volumétrica. Observa-se que as correlações de segunda e terceira ordens, que aparecem como consequência da aplicação da média temporal e da decomposição de Reynolds, foram negligenciadas com base em uma análise de ordem de grandeza.

Baseado neste modelo, as equações médias-temporais obtidas pela decomposição de Reynolds para o escoamento líquido-gás, podem ser escritas de acordo com as Equações (2) – (4):

- *Equação de conservação da massa*

- *Fase gás,*

$$\frac{\partial(\rho_g f_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g f_g \mathbf{v}) = 0. \quad (2)$$

- *Fase líquida,*

$$\frac{\partial(\rho_l f_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l f_l \mathbf{v}) = 0. \quad (3)$$

- *Equação de conservação da quantidade de movimento (momentum)*

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} + \overline{\rho \mathbf{v}' \mathbf{v}'}) + \rho \mathbf{g}. \quad (4)$$

Nas equações (2), (3) e (4) ρ representa a densidade efetiva da mistura, t o tempo e \mathbf{v} o vetor velocidade da mistura; ρ_g , ρ_l , f_g e f_l são as massas específicas e as frações volumétricas, para a fase gás e para a fase líquida, respectivamente; \mathbf{g} é o vetor gravidade, p é a pressão termodinâmica, τ é tensor viscoso e $\overline{\rho \mathbf{v}' \mathbf{v}'}$ o tensor de Reynolds. O vetor velocidade (\mathbf{v}), a densidade efetiva (ρ) e a viscosidade efetiva (μ^{eff}), bem como as frações volumétricas são dados pelas Equações (5) – (8):

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_g = \mathbf{v}_l, \quad (5)$$

$$\rho = \sum_{i=1}^{N_p} f_i \rho_i, \quad (6)$$

$$\mu^{eff} = \sum_{i=1}^{N_p} f_i \mu_i, \quad (7)$$

sobre a seguinte restrição da fração volumétrica:

$$\sum_{i=1}^{N_p} f_i = 1. \quad (8)$$

- *Modelo de turbulência*

O modelo de turbulência padrão k- ϵ foi usado neste trabalho por ser um modelo simples e que representa bem o escoamento das fases líquida e gás no módulo de hidráulica. Tal modelo baseia-se na hipótese de Boussinesq, que expressa a tensão de Reynolds por:

$$-\overline{\rho \mathbf{v}' \mathbf{v}'} = -\frac{2}{3} \rho \kappa \delta - \frac{2}{3} \mu' (\nabla \cdot \mathbf{v}) \delta + \mu' [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T], \quad (9)$$

em que κ é a viscosidade “bulk”, μ' é a viscosidade turbulenta e δ é o tensor identidade. Para escoamento incompressível, a Equação (10) mostra que:

$$-\frac{2}{3}\rho\kappa\delta - \frac{2}{3}\mu^t(\nabla \cdot \mathbf{v})\delta = 0. \quad (10)$$

O termo referente à viscosidade turbulenta para a mistura líquido-gás é definido de acordo com a Equação (11):

$$\mu^t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (11)$$

O modelo k-ε apresenta duas equações diferenciais de transporte: uma para a geração de energia cinética turbulenta (k) e outra para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ε), conforme mostram as Equações (12) e (13):

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu^t}{\sigma^k} \right) \nabla k \right] + G_T - \rho \varepsilon \quad (12)$$

e

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \varepsilon \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu^t}{\sigma^\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_1 G_T - C_2 \rho \varepsilon), \quad (13)$$

sendo a geração de energia cinética turbulenta (G_T), bem como as viscosidades turbulenta (μ^t) e efetiva (μ^{eff}), expressas pelas Equações (14), (15) e (16), respectivamente:

$$G_T = \mu^{eff} \nabla \mathbf{v} : [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T], \quad (14)$$

$$\mu^t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (15)$$

$$\mu^{eff} = \mu + \mu^t, \quad (16)$$

onde C_1 , C_2 , C_μ , σ^k e σ^ε são as constantes do modelo k- ε .

3.1.3 Geometria e Condições de Contorno

Devido à característica elíptica das equações diferenciais parciais do modelo, as condições de contorno em todas as fronteiras do domínio físico são necessárias. Neste caso, um campo de velocidade uniforme e normal à superfície foi adotado na região de entrada. Condição de não-deslizamento foi especificada nas paredes e condições de pressão foram definidas na saída e nas regiões expostas ao ambiente. A Figura 3.4 ilustra o domínio físico para o caso em estudo, com as condições de contorno adotadas, e a Tabela 3.1 apresenta a forma matemática detalhada das condições de contorno para cada fase em particular, bem como para a mistura líquido-gás.

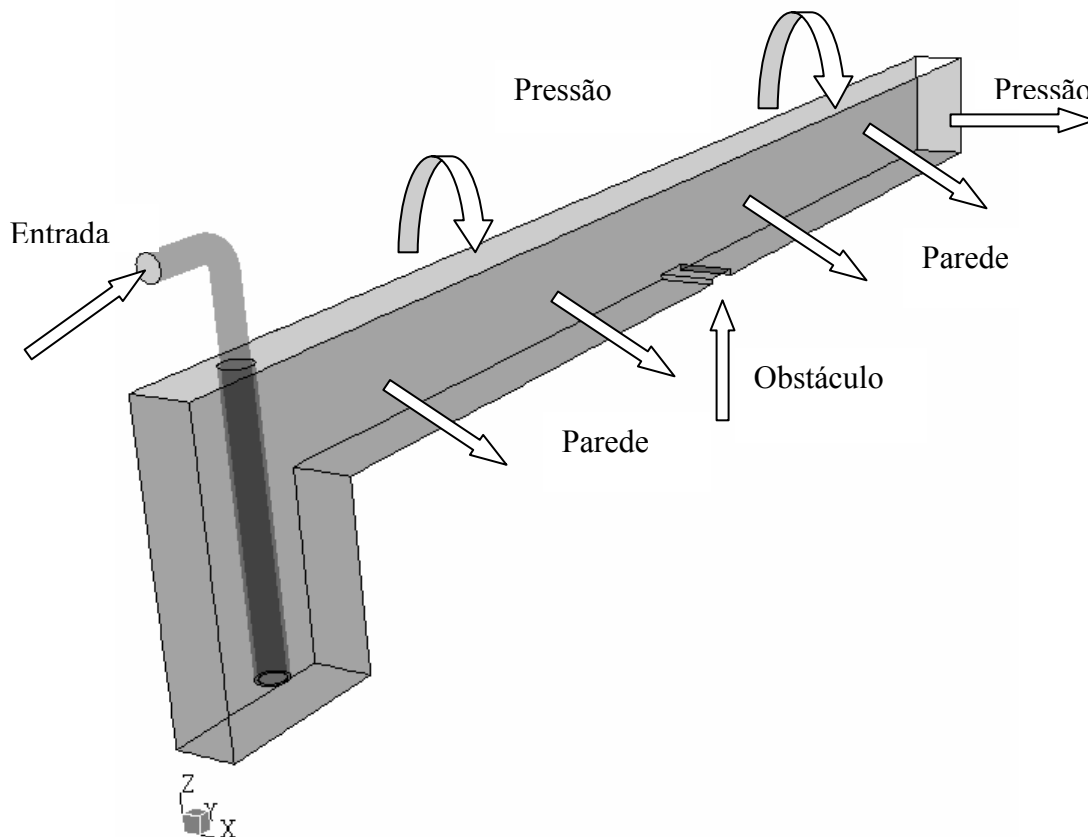


Figura 3.4 – Domínio físico do módulo experimental de hidráulica.

TABELA 3.1 – Resumo das condições de contorno para o estudo de caso I.

Condições de Contorno	Fase		
	Mistura	Líquida	Gás
Entrada	$v_x _{entrada} = \frac{L}{h} \quad v_y _{entrada} = 0 \quad v_z _{entrada} = 0$ $k _{entrada} = 1,5(i \cdot v_x)^2$ $\varepsilon _{entrada} = \frac{(k _{entrada})^{1,5}}{0,3 L_s}$	$f_l = f_{l,entrada} \quad f_g = 1 - f_{l,entrada}$	
Pressão	$\frac{\partial v_x}{\partial \eta} _{saida} = \frac{\partial v_y}{\partial \eta} _{saida} = \frac{\partial k}{\partial \eta} _{saida} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \eta} _{saida} = 0$ $p = p_{ref}$	$\frac{\partial f_l}{\partial \eta} _{saida} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial \eta} _{saida} = 0$
Parede	$v_x _{parede} = v_y _{parede} = k _{parede} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} _{parede} = 0$	$\frac{\partial f_l}{\partial \zeta} _{parede} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial \zeta} _{parede} = 0$
η é a direção ortogonal a saída ζ é a direção ortogonal a parede h altura de líquido (m) L vazão de líquido (m ³ / s m) L_s escala de comprimento (m)			

Água e ar, à temperatura ambiente, foram os fluidos utilizados na simulação numérica e, inicialmente, o sistema foi preenchido com ar.

3.1.4 Malha Numérica

O pré-processador “BUILD” do código de fluidodinâmica computacional CFX 4.4 foi utilizado para gerar a malha numérica com base na geometria no domínio computacional. O número total de células é de 144.079, que apresenta uma independência da solução numérica com a concentração da malha.

3.1.5 Método Numérico

O simulador comercial CFX 4.4 da ANSYS Inc. foi utilizado para a resolução das equações da continuidade e do momento para a mistura líquido-gás. Assim, o método dos volumes finitos com esquemas de interpolação “UPWIND” de primeira ordem e acoplamento pressão-velocidade do tipo “SIMPLEC” foram usados para discretizar as equações diferenciais parciais do modelo. Todas as variáveis escalares são discretizadas e avaliadas no centro da célula e as velocidades necessárias na face das células são avaliadas aplicando um algoritmo de interpolação do tipo “RHIE-CHOW”. Com o código CFX, obtém-se a solução do modelo por intermédio do método dos volumes finitos, sendo o domínio de cálculo dividido em volumes finitos sobre os quais as equações de conservação são integradas gerando o sistema discreto a ser resolvido numericamente. Um detalhamento maior desse método se encontra em PATANKAR (1980) e MALISKA (1995). O estado estacionário foi obtido após 15 dias de simulação em um computador do tipo Pentium IV, com processador de 3 GHz e com 1 Gb de memória RAM, com a capacidade de 1.577,97 MFLOPS (“floating point operation per seconds”).

3.1.6 Principais Resultados e Discussão do Estudo de Caso I

O propósito das simulações numéricas foi a verificação e a validação do modelo matemático através de comparação com dados experimentais. Soma-se a isto, a análise da dinâmica do escoamento das duas fases, buscando um melhor entendimento dos principais fenômenos fluidodinâmicos, responsáveis pela transferência de calor, de massa e de quantidade de movimento entre as fases. Nesta direção, apresentam-se, a seguir, os principais resultados obtidos.

3.1.6.1 Verificação do método numérico e do código de CFD

O estudo de verificação do método numérico e do código de CFD foi realizado buscando o melhor desempenho dos experimentos numéricos em termos de convergência e estabilidade da solução numérica. Observou-se a independência da solução com a malha numérica, bem como com a concentração da malha próximo das regiões de entrada e saída, e próximo à entrada, conforme mostrado na Figura 3.5.

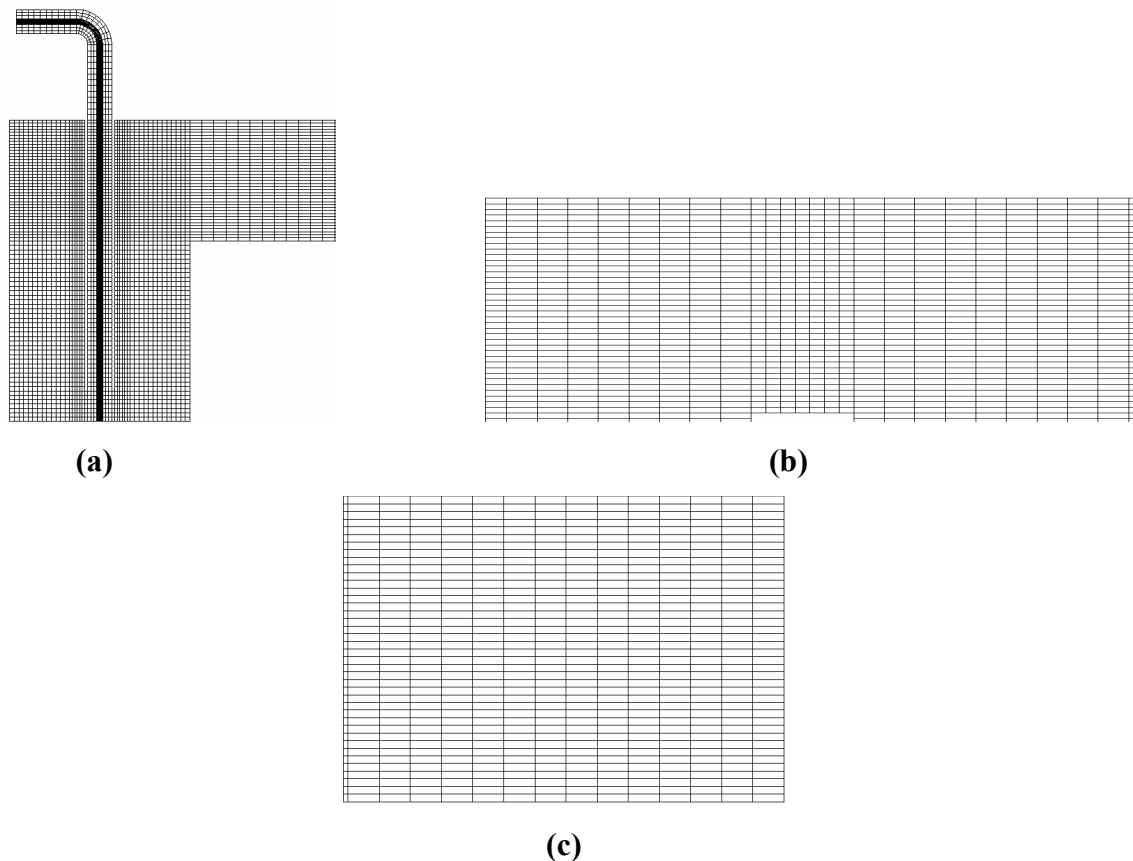


Figura 3.5 – Domínio computacional com a malha numérica: (a) próximo à entrada; (b) próximo ao obstáculo; (c) próximo à saída.

Foi utilizado o esquema de interpolação de ordem superior (“HIGHER UPWIND”) acoplado com algoritmo “RHIE-CHOW” com o intuito de se evitar problemas de difusão e instabilidades numéricas, obtendo-se altas taxas de convergência em todos os experimentos numéricos.

3.1.6.2 Validação do modelo matemático

O modelo foi validado com base em dados experimentais obtidos no aparato experimental detalhado no item 3.1.1. Medidas de altura de líquido, tempo de operação e um filme da dinâmica do escoamento foram informações experimentais obtidas com o intuito de caracterizar e validar o modelo numérico do escoamento água-ar no aparato experimental. Duas diferentes configurações foram utilizadas neste estudo: no primeiro caso, perfis referentes a altura de líquido foram obtidos, com auxílio de escalas dispostas em diferentes posições ao longo da calha e, no segundo caso, os perfis foram obtidos na presença de um obstáculo localizado no centro da calha. Os perfis foram obtidos em intervalos de 10, 20 e 30 mm ao longo do aparato experimental e as vazões mássicas variaram de 0 a 2,123 kg/s. A Tabela 3.2 mostra os dados oriundos dos experimentos físico e numérico, e os erros absoluto e relativo para cada caso: sem e com obstáculo, respectivamente.

TABELA 3.2 – Dados experimentais e numéricos para os casos sem e com obstáculo no módulo experimental de hidráulica.

Coordenada Longitudinal (y) (mm)	Coordenada da Superfície Livre (z) (mm)				Erro			
	Dado Experimental		Predição Numérica		Absoluto		Relativo (%)	
	Sem obstáculo	Com obstáculo	Sem obstáculo	Com obstáculo	Sem obstáculo	Com obstáculo	Sem obstáculo	Com obstáculo
0	71,0	77,0	64,2	69,7	6,8	7,3	9,6	9,5
90	69,0	75,0	63,3	68,9	5,7	6,1	8,3	8,1
180	68,0	72,0	61,9	67,5	6,1	4,5	9,0	6,3
360	53,0	62,0	49,0	57,9	4,0	4,1	7,6	6,6
540	56,0	63,0	48,3	57,5	7,7	5,5	13,8	8,7
730	54,0	62,0	47,2	57,1	6,8	4,9	12,6	7,9
910	53,0	61,0	46,8	56,7	6,2	4,3	11,7	7,1
1.090	51,0	61,0	46,0	56,2	5,0	4,8	9,8	7,9
1.270	50,0	59,0	45,0	55,6	5,0	3,4	10,0	5,8
1.450	49,0	32,0	43,7	35,0	5,3	-3,0	10,8	-9,4
1.660	46,0	28,0	42,1	33,4	3,9	-5,4	8,5	-19,3
1.810	45,0	38,0	41,6	34,9	3,4	3,1	7,6	8,2
1.990	43,0	41,0	40,2	36,2	1,4	4,8	6,5	11,7
2.160	41,0	41,0	37,7	36,8	3,3	4,2	8,1	10,2
2.340	36,0	35,0	33,9	33,1	2,1	1,9	5,8	5,4
2.440	25,0	24,0	26,3	25,2	-1,3	-1,2	-5,2	-5,0

As Figuras 3.6 e 3.7 ilustram os perfis longitudinais da superfície livre, medidos e preditos, e a similaridade entre os resultados experimentais e numéricos. Na Figura 3.6 é possível observar que o refinamento da malha na região de entrada do líquido na calha e na região próxima a saída (representado pelos detalhes (a) e (b)), contribuiu significativamente para uma melhor concordância entre os dados numéricos e experimentais. As mesmas observações são válidas para a segunda situação (detalhes (a), (b) e (c) na Figura 3,7), onde o refinamento da malha na entrada do líquido na calha, no obstáculo e próximo da saída garantiram uma boa representação dos dados experimentais.

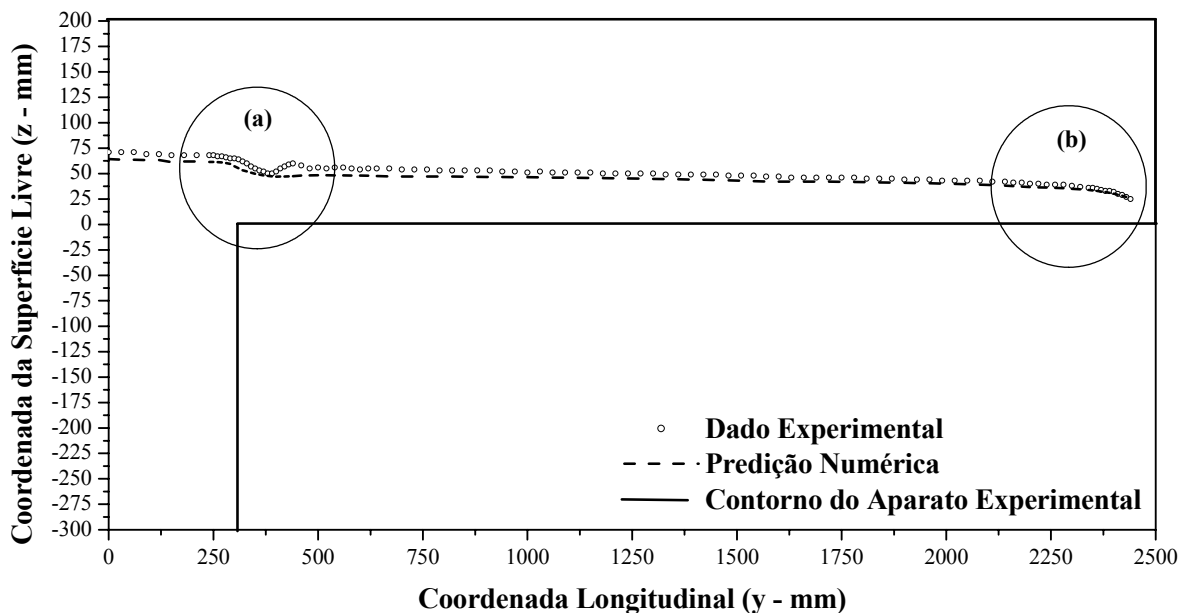


Figura 3.6 – Perfil longitudinal da superfície livre (sem obstáculo).

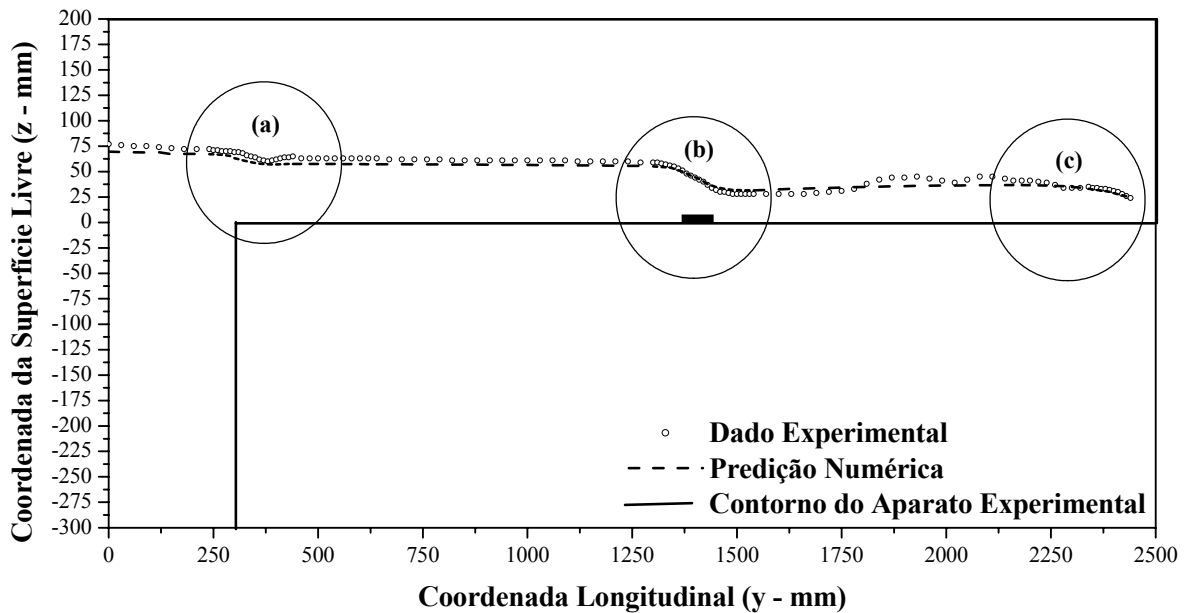


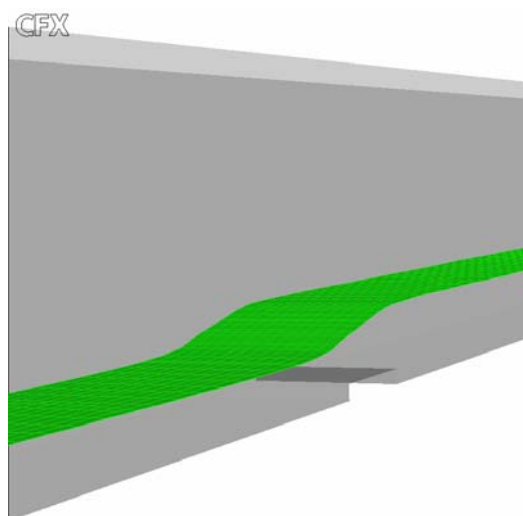
Figura 3.7 – Perfil longitudinal da superfície livre (com obstáculo).

Para ambas as situações, pode-se observar a capacidade do modelo homogêneo em reproduzir o comportamento real do escoamento no aparato experimental, principalmente nas regiões (a) e (b) e (a), (b) e (c) destacadas nas Figuras 3.6 e 3.7, respectivamente.

Uma boa concordância qualitativa entre os dados experimentais e as previsões numéricas pode também ser observada na Figura 3.8, que apresenta a comparação entre a imagem da onda gerada no aparato experimental devido à presença do obstáculo e a iso-curva obtida numericamente para a mesma situação física.



(a)



(b)

Figura 3.8 – Onda gerada no aparato experimental em virtude da presença do obstáculo: (a) observação experimental; (b) predição numérica.

Baseado nos resultados obtidos, é possível afirmar que o modelo matemático está claramente validado, uma vez que é capaz de representar a dinâmica real do escoamento e, conseqüentemente, pode ser utilizado na predição da fluidodinâmica em situações envolvendo superfícies livres devido à formulação geral empregada no desenvolvimento do modelo matemático.

3.1.6.2 Visualização científica do escoamento bifásico

A visualização científica do escoamento, obtida através de um pós-processador, é uma ferramenta muito comum em estudos de fluidodinâmica computacional, uma vez que ela permite a inspeção, em detalhes, dos fenômenos fluidodinâmicos, o que, do ponto de vista macroscópico, não é possível. Foram realizados testes com o algoritmo de alisamento de superfície livre e bons efeitos foram produzidos no desenvolvimento do escoamento líquido-gás. O emprego deste algoritmo justifica-se uma vez que, quando do

emprego do modelo homogêneo, é possível que a interface seja de difícil identificação, devido a problemas de difusão numérica. Para superar este problema, em escoamento bifásico, deve ser utilizado o algoritmo de alisamento de superfície. Neste caso, o algoritmo realiza uma modificação nas frações volumétricas dos dois fluidos ao final de cada intervalo de tempo. A interface é definida como sendo a superfície onde as frações volumétricas dos dois fluidos (f_1 e f_2) são iguais a 0,5. Para tanto, o código de CFD verifica os volumes de controle na interface, determinando se $f_1 - 0,5$, para aquela célula, é diferente, em sinal, de qualquer outra célula vizinha. O código, então, identifica o fluido no lado “errado” da interface, movendo-o para o lado “correto”, garantindo a conservação do volume. A Figura 3.9 ilustra a dinâmica do comportamento obtido através da solução do modelo.

A Figura 3.9 mostra que 7 segundos após o início do escoamento, uma onda emerge próximo ao obstáculo e a formação de uma onda reversa inicia-se próximo a superfície líquida, o que promove o retorno do líquido em direção a entrada do canal até tornar-se novamente normal o nível do líquido. Este comportamento pode ser observado nas Figuras 3.9 e 3.10 entre 9 e 12 segundos. Esta observação confirma a conclusão sobre a capacidade do modelo homogêneo em predizer a dinâmica real do escoamento, bem como valida o modelo.

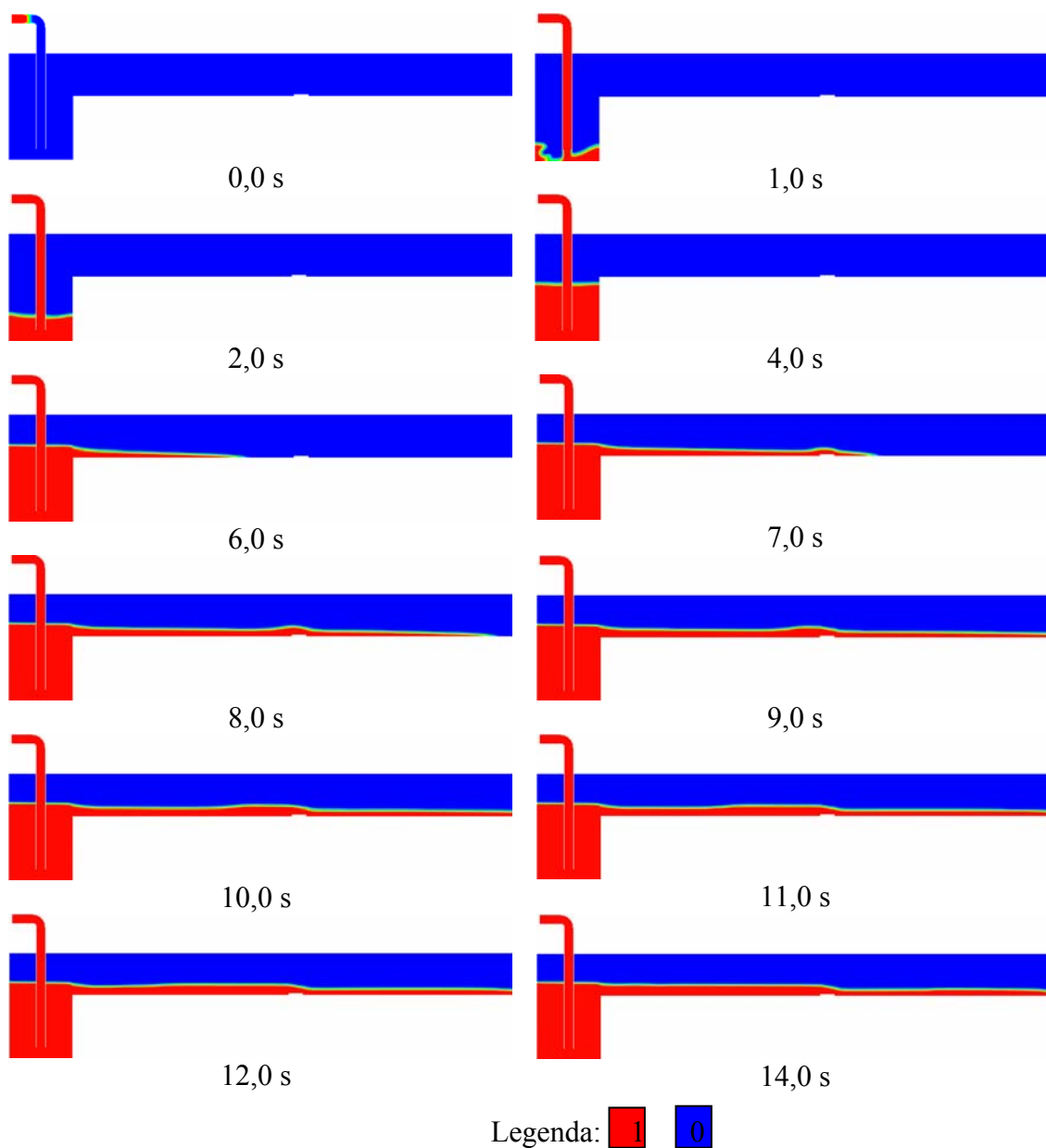


Figura 3.9 – Mapas do comportamento transiente da fração volumétrica da fase líquida para 30 segundos de tempo real (com obstáculo).

A Figura 3.11 apresenta a dinâmica de enchimento do aparato, similar às observações experimentais, comprovando, novamente, a capacidade do modelo homogêneo em representar o escoamento líquido-gás no interior do aparato experimental.

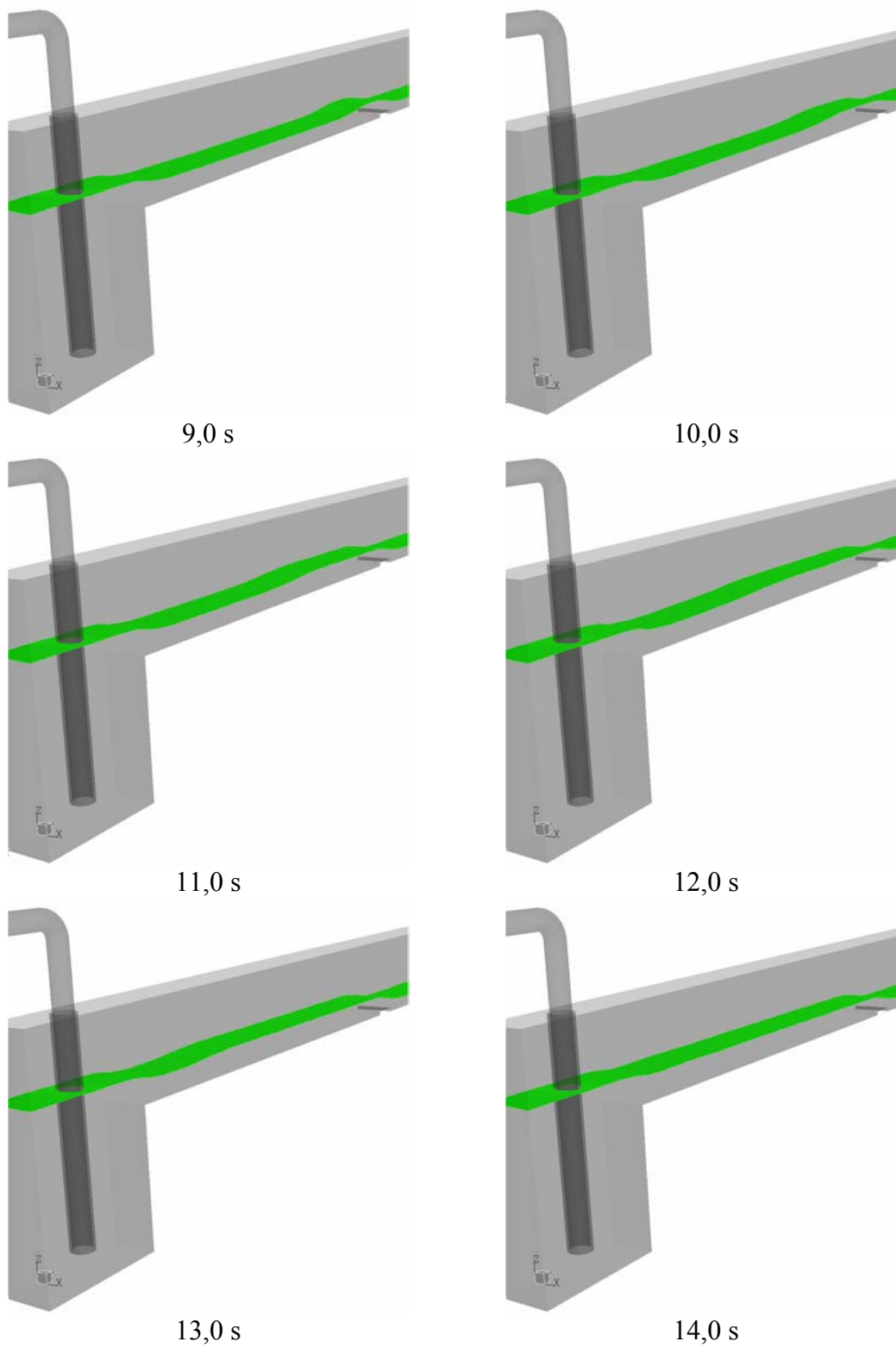


Figura 3.10 – Mapas do comportamento transiente da formação da onda próximo ao obstáculo.

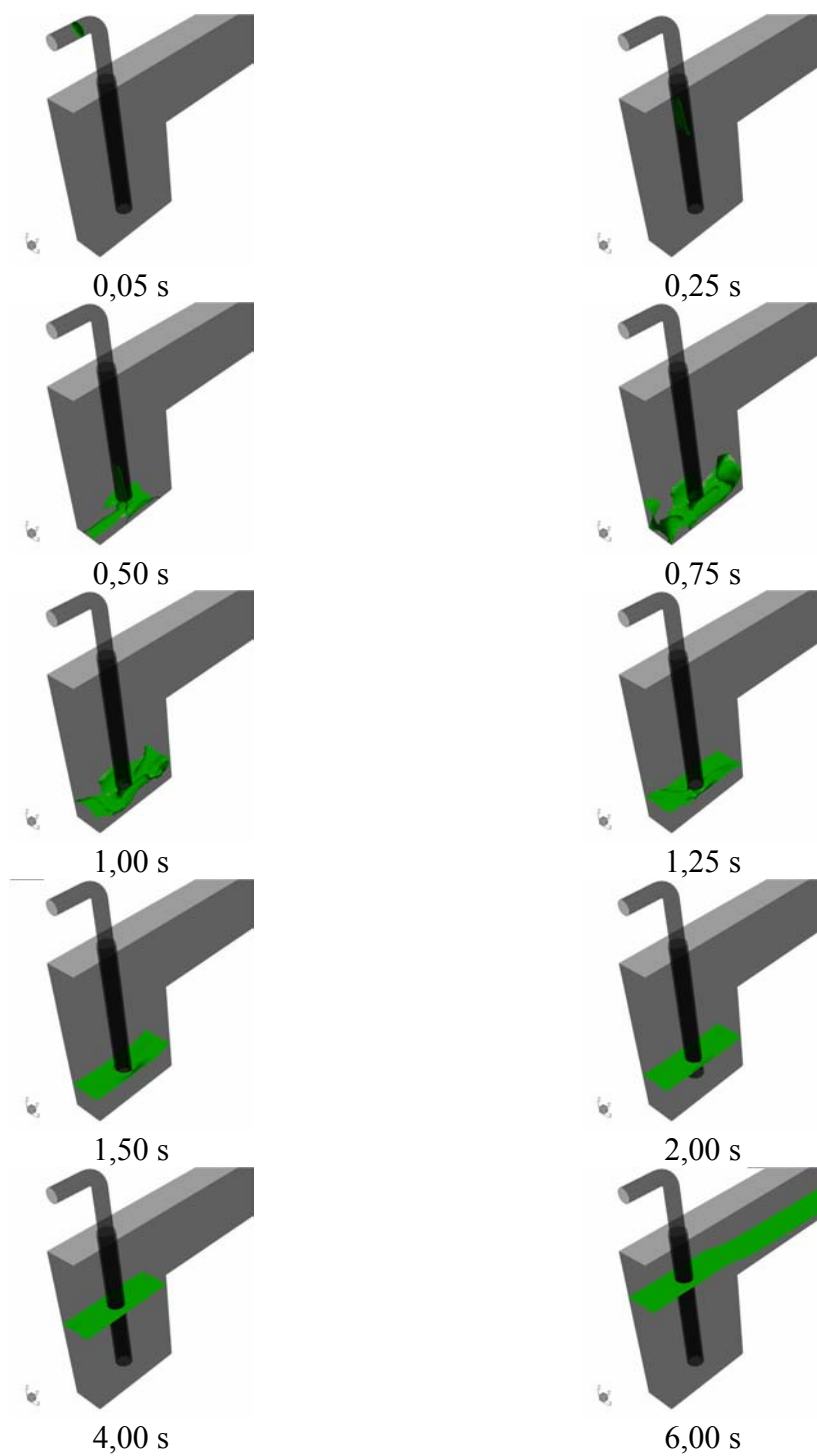


Figura 3.11 – Dinâmica do escoamento com mapas tridimensionais da fração volumétrica da fase líquida.

3.2 ESTUDO DE CASO II: SIMULAÇÃO NUMÉRICA 2-D DO ESCOAMENTO LÍQUIDO EM UM PRATO PERFURADO DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO

Conforme discutido nos capítulos anteriores, apesar de sua importância nos processos químicos, as colunas de destilação ainda são projetadas e avaliadas através das equações de conservação da massa e da energia em uma escala macroscópica. Esta aproximação negligencia todos os fenômenos fluidodinâmicos através da suposição de mistura perfeita e da hipótese do equilíbrio termodinâmico. LIU et al. (2000) apresentaram estudos de caráter numérico e experimental com o intuito de avaliar a capacidade do modelo bidimensional em prever os campos de velocidade e as propriedades turbulentas em um prato perfurado típico de uma coluna de destilação. O modelo monofásico tornou possível a avaliação da força resistiva da fase vapor com relação à fase líquida e também a ação das características turbulentas do escoamento através da introdução de duas equações constitutivas: uma para a força resistiva entre as fases e outra para a geração de energia cinética turbulenta devido a ação do borbulhamento da fase vapor. Tal estudo serviu de base para o desenvolvimento deste estudo. Desta forma, sustentado pelo conhecimento adquirido com o estudo de caso referente ao módulo de hidráulica e tendo por base o trabalho de Liu, apresenta-se a modelagem matemática bidimensional do escoamento turbulento em um prato de uma coluna de destilação e a solução numérica através do método dos volumes finitos, empregando-se um código comercial de fluidodinâmica computacional.

3.2.1 Idealização da Situação Física e Hipóteses Simplificadoras

O escoamento turbulento em um prato de destilação envolve duas fases (líquida e vapor) perfazendo uma dinâmica complexa com alta intensidade de turbulência, estados oscilatórios, complicada geometria e transferência simultânea de massa, de calor e de quantidade de movimento. Para o caso em questão, somente os aspectos relativos à transferência de quantidade de movimento foram explorados. As principais hipóteses

assumidas idealizam uma situação física e descrevem matematicamente a fluidodinâmica do escoamento sobre um prato de destilação, onde:

- o escoamento da fase líquida é mais importante que o da fase vapor e, assim, o escoamento médio pode ser modelado como monofásico (somente a fase líquida), onde a influência do borbulhamento proporcionado pela fase vapor é representada por forças resistivas e turbulência adicional fornecida pelas bolhas;
- condições de simetria são assumidas;
- a velocidade axial é desprezada;
- os efeitos térmicos não têm influência sobre o escoamento líquido;
- o escoamento apresenta-se num estado estacionário estável.

3.2.2 Caracterização da Situação Física

As principais dimensões para o estudo numérico 2-D do prato de destilação, de acordo com LIU et al. (2000), são apresentadas na Figura 3.12.

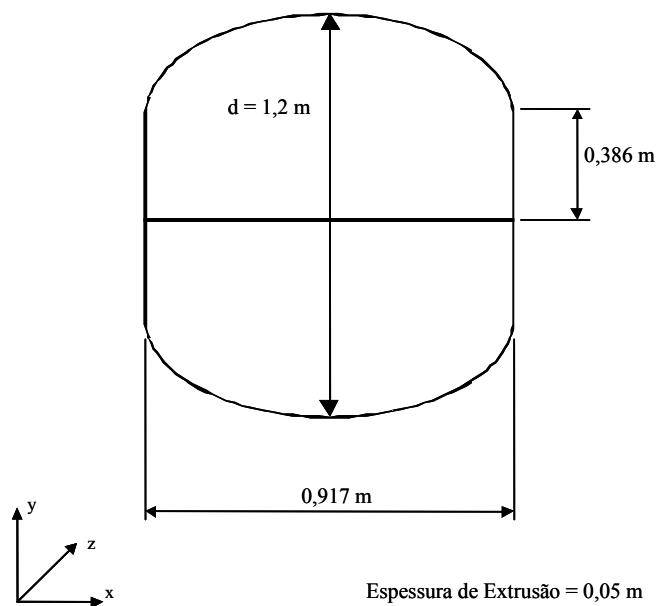


Figura 3.12 – Dimensões do prato de destilação.

Nas simulações, utilizou-se o sistema água e ar para representar as fases líquida e vapor, respectivamente, sobre o prato de destilação. De acordo com as hipóteses assumidas anteriormente, o escoamento do líquido é mais importante do que o do vapor e, conseqüentemente, o sistema pode ser modelado como uma única fase. De acordo com LIU et al. (2000), foram estabelecidos parâmetros geométricos e operacionais para as simulações, os quais são apresentados na Tabela 3.3.

TABELA 3.3 – Parâmetros geométricos e operacionais e propriedades físicas do estudo de caso II.

Geométricos	Operacionais	Propriedades Físicas
$d = 1,20 \text{ m}$	$L = 0,009 \text{ m}^3 / \text{m.s}$	$\rho_g = 1,0 \text{ kg} / \text{m}^3$
$w / d = 0,645$	$u_s = 1,3 \text{ m} / \text{s}$	$\rho = 1.000 \text{ kg} / \text{m}^3$
$h_w = 0,025 \text{ m}$		$\mu = 0,001 \text{ cP}$

3.2.3 Modelagem Matemática

- Equações de conservação
- *Conservação da massa*

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0. \quad (17)$$

- *Conservação da quantidade de movimento (componente x)*

$$\frac{\partial(\rho v_x v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y v_x)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) + f_x. \quad (18)$$

- *Conservação da quantidade de movimento (componente y)*

$$\frac{\partial(\rho v_x v_y)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y v_y)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + 2\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial x}\right) + f_y, \quad (19)$$

sendo que f_x e f_y representam as forças resistivas do borbulhamento do vapor que age sobre o líquido. De acordo com ZHANG e YU (1994) estes termos são expressos como:

$$f_x = -\rho_g \frac{u_s}{h_w} v_x; \quad (20a)$$

e

$$f_y = -\rho_g \frac{u_s}{h_w} v_y. \quad (20b)$$

- *Modelo de turbulência*

O modelo de turbulência k- ε padrão foi utilizado neste trabalho com uma modificação para incluir os efeitos do borbulhamento. As Equações (21) e (22) mostram as equações diferenciais para k (geração de energia cinética turbulenta) e para ε (taxa de dissipação da energia cinética turbulenta), respectivamente:

$$\frac{\partial(\rho v_x k)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y k)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\mu + \frac{\mu^t}{\sigma^k}\right)\frac{\partial k}{\partial x}\right] - \frac{\partial}{\partial y}\left[\left(\mu + \frac{\mu^t}{\sigma^k}\right)\frac{\partial k}{\partial y}\right] = G_T + \rho\varepsilon \quad (21)$$

e

$$\frac{\partial(\rho v_x \varepsilon)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y \varepsilon)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\mu + \frac{\mu^t}{\sigma^\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x}\right] - \frac{\partial}{\partial y}\left[\left(\mu + \frac{\mu^t}{\sigma^\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\right] = \frac{\varepsilon}{k}(C_1 \cdot G_T - C_2 \cdot \rho\varepsilon). \quad (22)$$

De acordo com a aproximação de Boussinesq (LAUNDER e SPALDING, 1974), para uma turbulência isotrópica, a viscosidade turbulenta relaciona-se com as propriedades k e ε , e é definida por:

$$\mu^t = C_\mu \cdot \frac{k^2}{\varepsilon} . \quad (23)$$

Conseqüentemente, a viscosidade efetiva pode ser expressa por:

$$\mu^{eff} = \mu + \mu^t . \quad (24)$$

O termo que representa a geração de energia cinética turbulenta (G_T) é composto por uma combinação entre a fonte padrão de turbulência e um termo adicional de geração de turbulência. Assim, este termo pode ser escrito como:

$$G_T = G_{T1} + G_{T2} . \quad (25)$$

O primeiro termo (G_{T1}) corresponde à turbulência gerada pelo escoamento da própria fase líquida; e, o segundo (G_{T2}), está relacionado à ação do borbulhamento da fase vapor. Este segundo termo está relacionado com a perda de energia da fase vapor que está fluindo. Para um prato perfurado, a queda de pressão da fase vapor que passa através da camada de líquido é dada por:

$$\Delta p = \rho gh + \frac{4\sigma}{d_o} . \quad (26)$$

Segundo WANG (1989), h é dado pela seguinte correlação:

$$h = h_w + 8,04 \cdot 10^{-3} + 0,308L + 2,523h_w^{0,5} - 3,612 \cdot 10^{-3} F_o^2 , \quad (27)$$

onde F_o é definido como (van WINKLE, 1967):

$$F_o = u_s \sqrt{\rho g} . \quad (28)$$

Se a variação de energia é ignorada, a perda de energia da fase vapor pode ser expressa por:

$$\Delta E = \Delta P u_s dx dy = \left(\rho g h + \frac{4\sigma}{d_o} \right) u_s dx dy . \quad (29)$$

Uma vez que a maior parte da perda de energia é gasta para superar a queda hidrostática, assume-se que o restante, representado por $C_e \Delta E$, onde $0 < C_e < 1$, contribui para o aumento da energia turbulenta da fase líquida. Consequentemente, para uma unidade de volume de líquido claro equivalente, a seguinte equação é obtida:

$$G_{T2} = \frac{C_e \Delta e}{h dx dy} = \frac{C_e \Delta e \Delta_s}{h} . \quad (30)$$

Assim, a Equação (25) torna-se:

$$G_T = \mu^{eff} \left[2 \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 \right] + \frac{C_e \Delta e \Delta_s}{h} . \quad (31)$$

3.2.4 Geometria e Condições de Contorno

Apresenta-se na Figura 3.13 as principais características da geometria construída e a localização das condições de contorno adotadas e, na Tabela 3.4, as condições de contorno para a fase líquida.

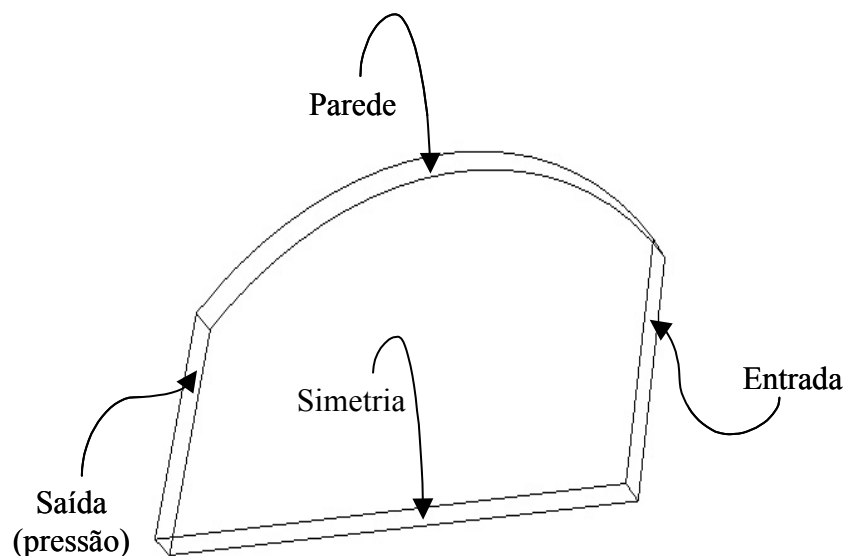


Figura 3.13 – Domínio físico do prato de destilação.

TABELA 3.4 – Resumo das condições de contorno para o estudo de caso II.

Condições de Contorno	Fase	
	Líquido	Vapor
Entrada	$v_x _{x=0} = \frac{L}{h}$	$v_y _{x=0} = 0$
	$k _{x=0} = 0,003(v_x _{x=0})^2$	-
	$\varepsilon _{x=0} = \frac{0,09(k _{x=0})^{3/2}}{0,03 w/2}$	-
Saída (pressão)	$\frac{\partial v_x}{\partial y}\bigg _{saída} = \frac{\partial v_y}{\partial y}\bigg _{saída} = \frac{\partial k}{\partial y}\bigg _{saída} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\bigg _{saída} = 0$	-
Parede	$v_x _{parede} = v_y _{parede} = k _{parede} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\bigg _{parede} = 0$	-
(condição de não-deslizamento)		
Simetria	$\frac{\partial v_x}{\partial y}\bigg _{y=0} = \frac{\partial k}{\partial y}\bigg _{y=0} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\bigg _{y=0} = v_y = 0$	-

3.2.5 Malha Numérica

A Figura 3.14 mostra as malhas numéricas das geometrias construídas e estudadas, todas contendo diferentes concentrações no número de células.

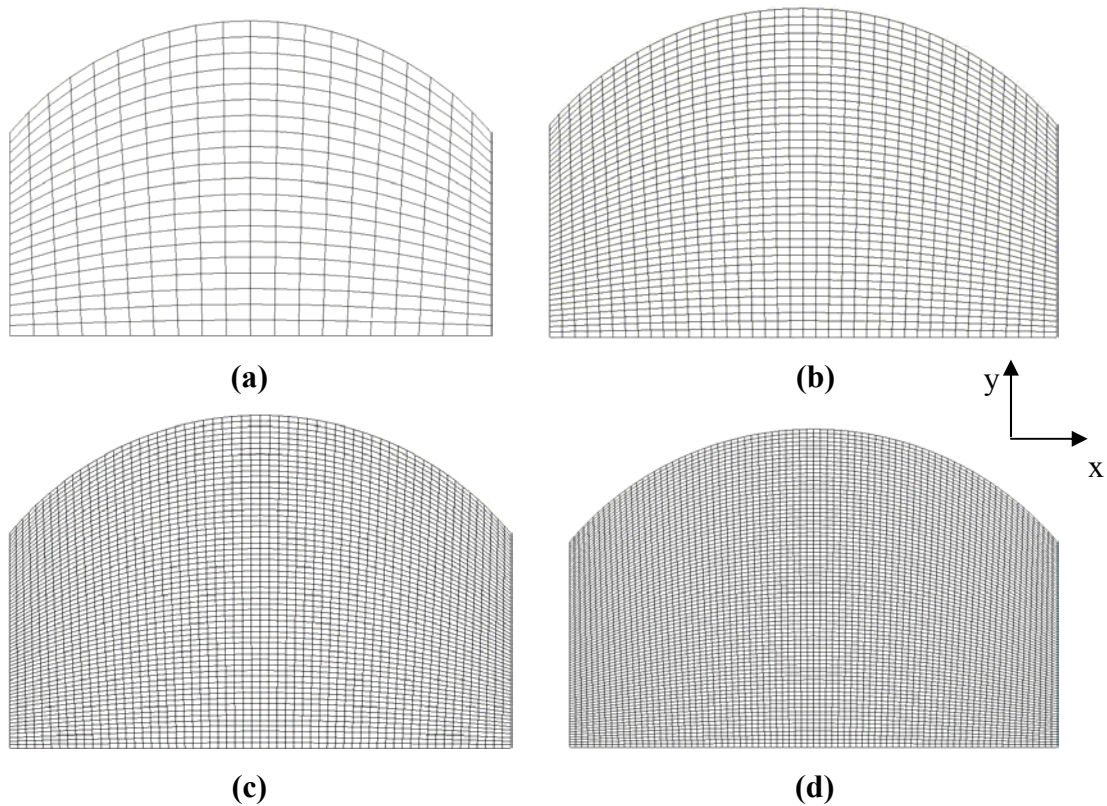


Figura 3.14 – Malhas numéricas do prato de destilação:

(a) 20 x 20 células; (b) 40 x 40 células; (c) 60 x 60 células; (d) 80 x 80 células.

3.2.6 Método Numérico

O método de volumes finitos com esquemas de interpolação de primeira ordem, “UPWIND” e acoplamento pressão-velocidade, como o método “SIMPLEC” foram utilizados para discretizar a modelagem matemática. Todas as variáveis escalares foram discretizadas no centro de cada célula, e as velocidades requeridas no centro das faces

foram calculadas pela aplicação do algoritmo de interpolação “RHIE-CHOW”. “Under-relation factor” e “false time step” foram estratégias aplicadas para garantir estabilidade e convergência numérica à solução do problema.

3.2.7 Principais Resultados e Discussão do Estudo de Caso II

Os seguintes aspectos foram explorados no estudo numérico do escoamento bidimensional em um prato perfurado:

- dependência da solução com a malha numérica;
- análise do parâmetro empírico C_e (coeficiente de transferência);
- avaliação dos campos de pressão, de velocidade horizontal, de energia cinética turbulenta e de dissipação de energia cinética turbulenta.

3.2.7.1 Dependência da solução com a malha numérica

Simulações foram realizadas para cada uma das quatro malhas numéricas visualizadas na Figura 3.14. A partir dos resultados obtidos, os perfis radiais da velocidade horizontal na região central da geometria do prato foram avaliados. Na Figura 3.15 nota-se que não há variações significativas na solução para malhas numéricas com um número de células maior que 3.600 elementos.

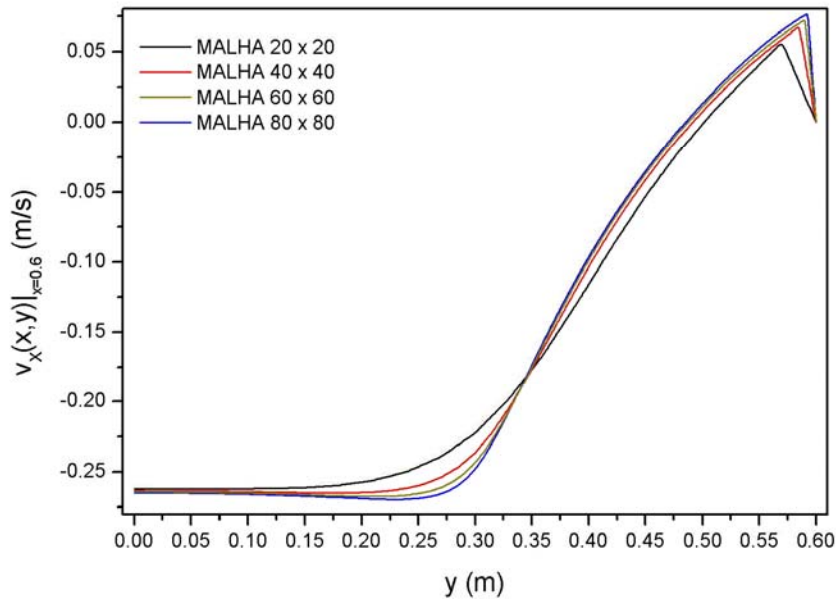


Figura 3.15 – Comparação entre as diferentes malhas numéricas do prato.

Foram avaliadas também alterações na solução do problema devido à difusão numérica. Para tanto, esquemas de interpolação dissipativos (esquemas de primeira ordem) foram empregados. Pelo fato de nenhuma influência ter sido observada, uma malha com 6.400 elementos (80 x 80 células) e com esquema de interpolação “UPWIND” foram fixados para as análises numéricas subseqüentes.

3.2.7.2 Validação do modelo

Uma vez avaliada a influência da malha na solução numérica, o passo seguinte consistia na validação do modelo. A avaliação do modelo foi realizada, primeiramente, a partir da análise de um parâmetro empírico (Ce). Em trabalho prévio de LIU et al. (2000), os autores obtiveram um valor para Ce próximo a 0,0033. Entretanto, no modelo definido por Liu, os termos cruzados relativos à difusão nas equações de momento, foram desconsiderados. Esta aproximação deveu-se, provavelmente, a consideração das

equações de Navier-Stokes padrão, ao invés da equação geral da conservação de momento.

A partir da Figura 3.16 é possível identificar o melhor valor para Ce (0,0001) quando os perfis de velocidade obtidos numericamente são comparados com o dado experimental de Liu. O fenômeno de circulação de líquido próximo à parede do prato perfurado (fenômeno este que traz efeitos negativos sobre a eficiência do prato) é fortemente dependente do parâmetro Ce . Isto pode ser observado em detalhes na Figura 3.17, que mostra alguns dos resultados calculados sob várias condições de operação o percentual da área de circulação com relação à área do prato como uma função do coeficiente de transferência. Por definição, o percentual de área de circulação com relação à área do prato ($T\%$) é definido como uma relação entre o número de pontos na malha onde a velocidade horizontal apresenta valores negativos e o número total de pontos na malha.

O aumento no valor de Ce tende a diminuir o percentual de circulação. Isto se deve ao fato do coeficiente de transferência estar diretamente relacionado com G_{T2} (ação do borbulhamento da fase vapor) que contribui para o aumento na geração da energia cinética turbulenta, que por sua vez tem como efeito a homogeneização do escoamento, reduzindo, desta forma, as regiões de circulação.

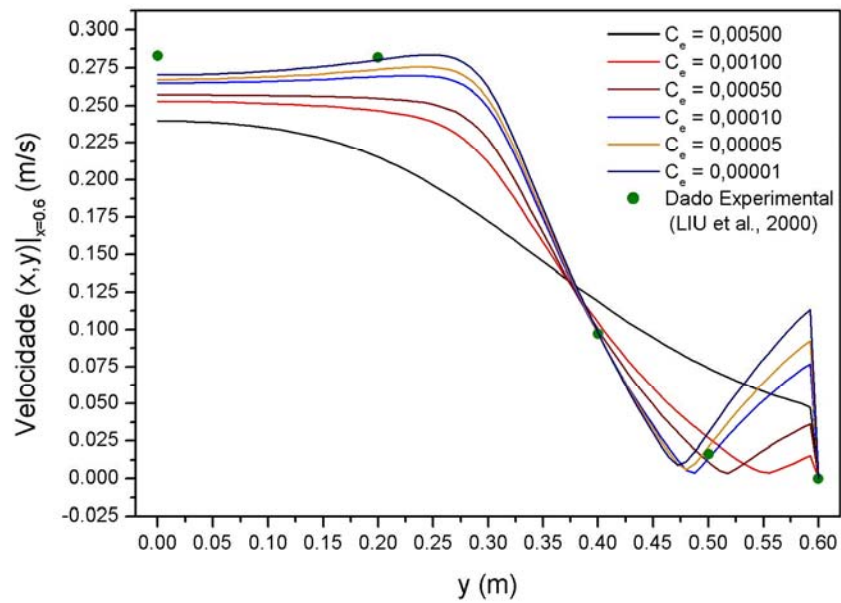


Figura 3.16 – Avaliação do C_e (coeficiente de transferência).

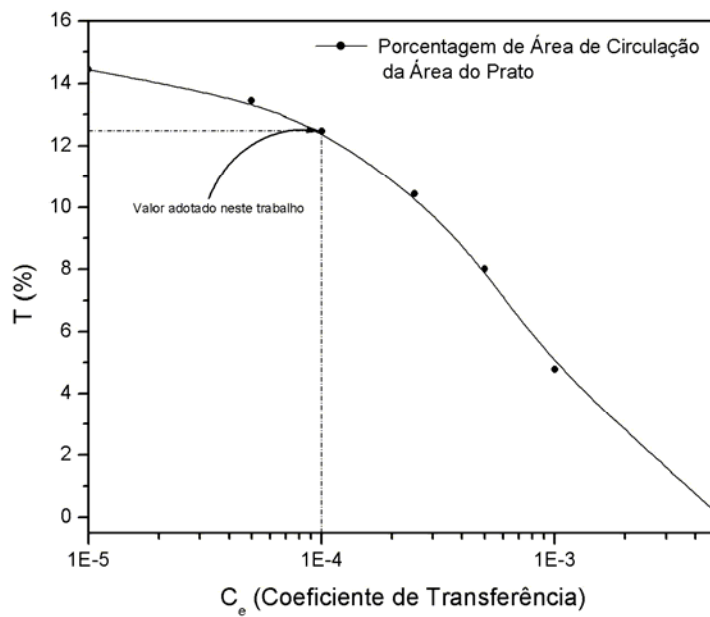


Figura 3.17 – Percentual da área de circulação como função do coeficiente de transferência.

3.2.7.3 Visualização científica do escoamento

Na Figura 3.18, observa-se os campos de pressão para vários valores de Ce . Pode-se concluir que a força motriz gerada pela diferença de pressão não é suficiente para garantir que o escoamento se dê da região de maior pressão para a de menor pressão. Uma das possíveis explicações se deve ao fato de que os mecanismos de convecção e difusão contribuam mais significativamente para a orientação do escoamento em comparação com a diferença de pressão. A Figura 3.19 mostra os mapas do componente de velocidade horizontal para diferentes valores de Ce . A cor rosa representa, qualitativamente, a localização da zona de circulação. Para valores máximos de Ce , a região de circulação encontra-se próxima à entrada de líquido no prato. A redução nos valores de Ce promove um aumento no fenômeno de circulação, além de movê-la para a região de saída de líquido do prato. Para o valor de Ce adotado (da ordem de 10^{-4}), a região de circulação encontra-se no centro do prato, o que está de acordo com os dados experimentais.

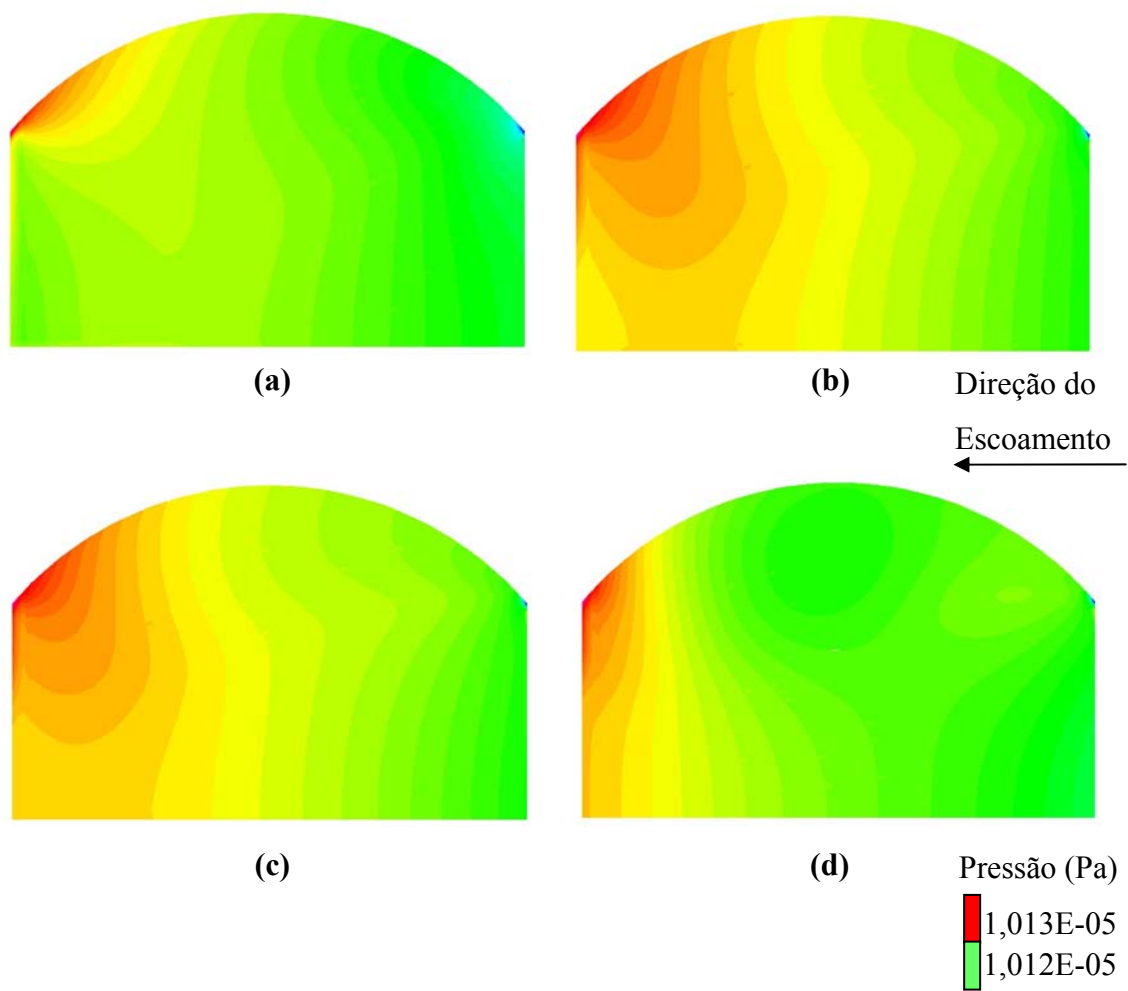


Figura 3.18 – Campos de pressão para diferentes valores de Ce .

(a) $Ce = 5 \times 10^{-3}$; (b) $Ce = 5 \times 10^{-4}$; (c) $Ce = 2,5 \times 10^{-4}$; (d) $Ce = 1 \times 10^{-5}$.

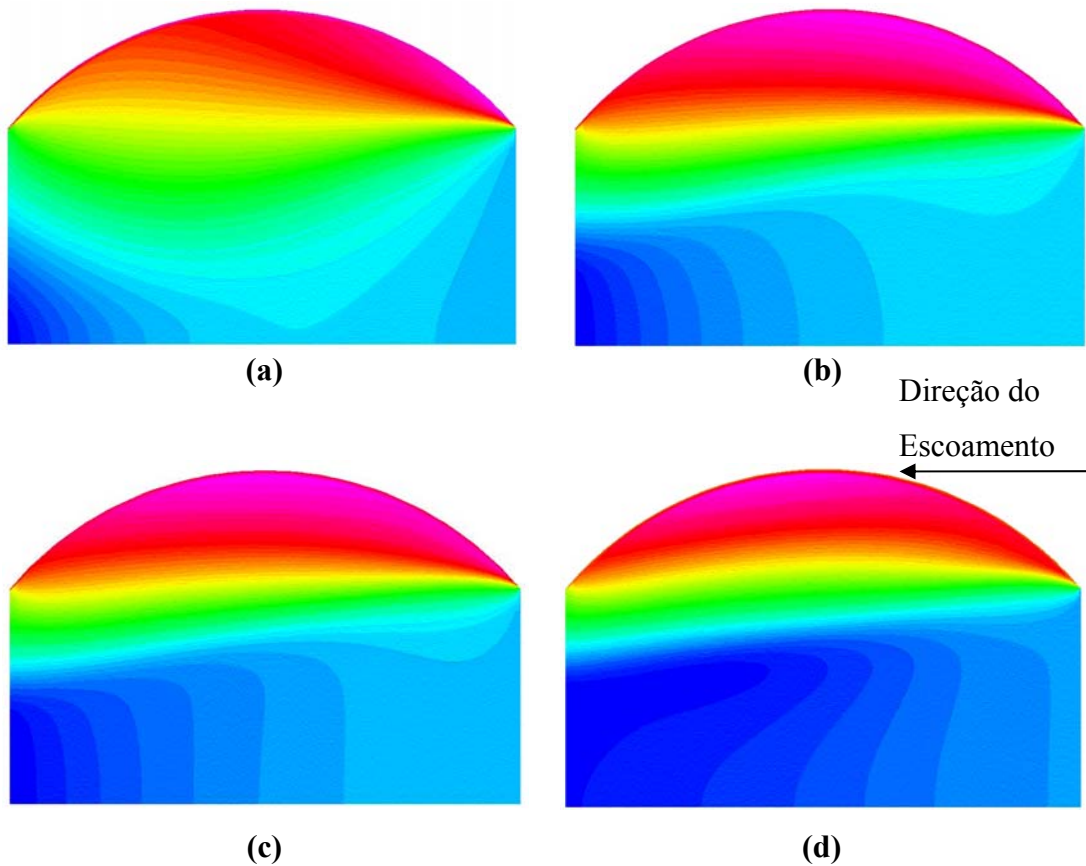


Figura 3.19 – Velocidade horizontal para diferentes valores de Ce .

(a) $Ce = 5 \times 10^{-3}$; (b) $Ce = 5 \times 10^{-4}$; (c) $Ce = 2,5 \times 10^{-4}$; (d) $Ce = 1 \times 10^{-5}$.

Os gráficos de vetores ilustrados na Figura 3.20 permitem validar as conclusões obtidas a partir da análise das Figuras 3.18 e 3.19.

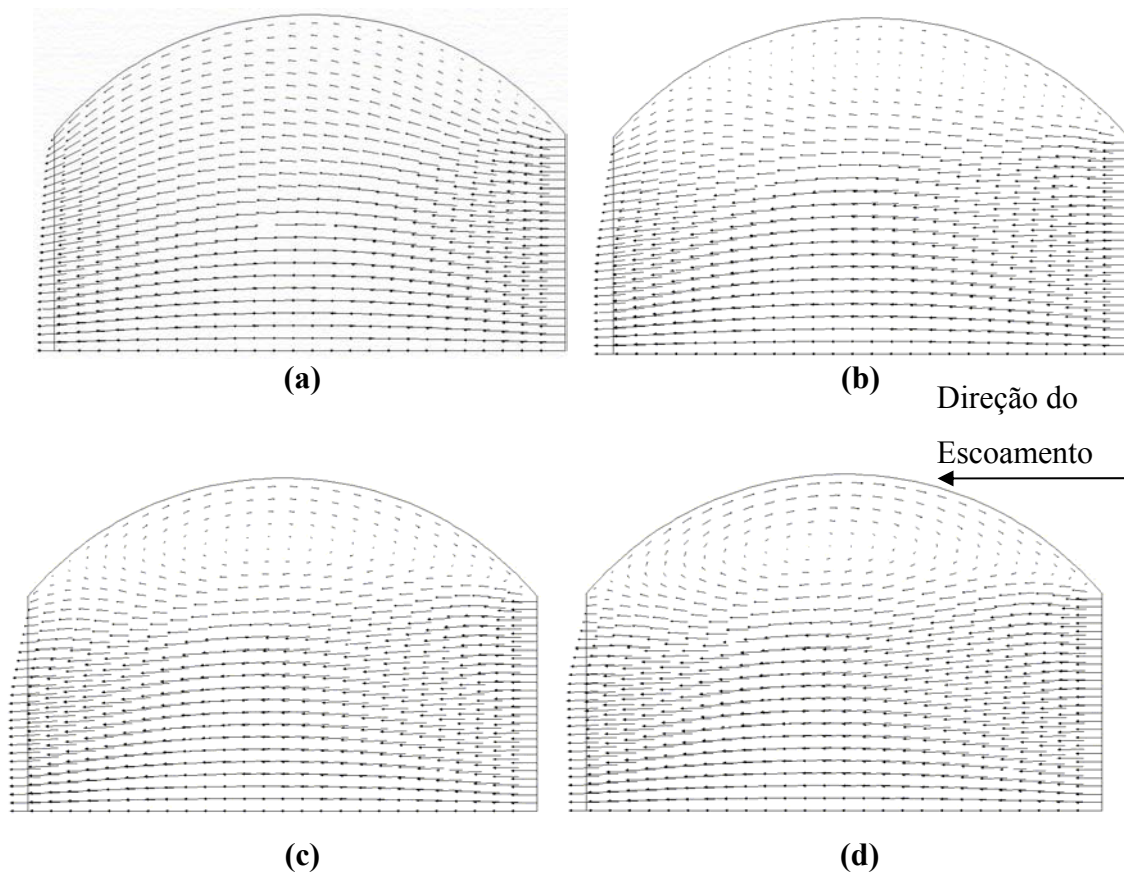


Figura 3.20 – Campo vetorial para diferentes valores de Ce .

(a) $Ce = 5 \times 10^{-3}$; (b) $Ce = 5 \times 10^{-4}$; (c) $Ce = 2,5 \times 10^{-4}$; (d) $Ce = 1 \times 10^{-5}$.

Os mapas de duas importantes propriedades do escoamento turbulento, a energia cinética turbulenta (k) e sua taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε), podem ser visualizados nas Figuras 3.21 e 3.22. Nota-se que há uma maior distribuição espacial do fenômeno da turbulência à medida que os valores de Ce aumentam. Conseqüentemente, a viscosidade turbulenta aumenta com a energia cinética turbulenta (k) e uma condição de mistura ideal é obtida.

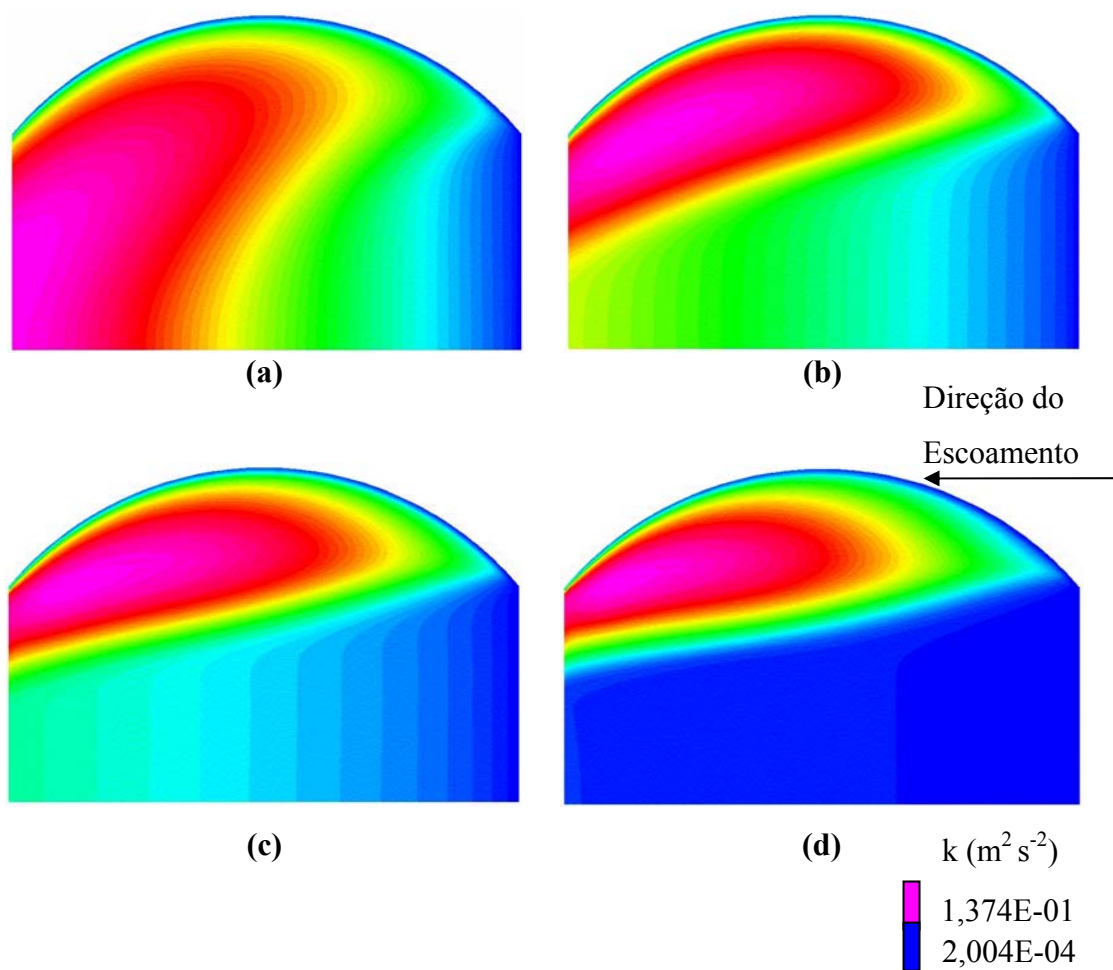


Figura 3.21 – Energia cinética turbulenta para diferentes valores de C_e .

(a) $C_e = 5 \times 10^{-3}$; (b) $C_e = 5 \times 10^{-4}$; (c) $C_e = 2,5 \times 10^{-4}$; (d) $C_e = 1 \times 10^{-5}$.

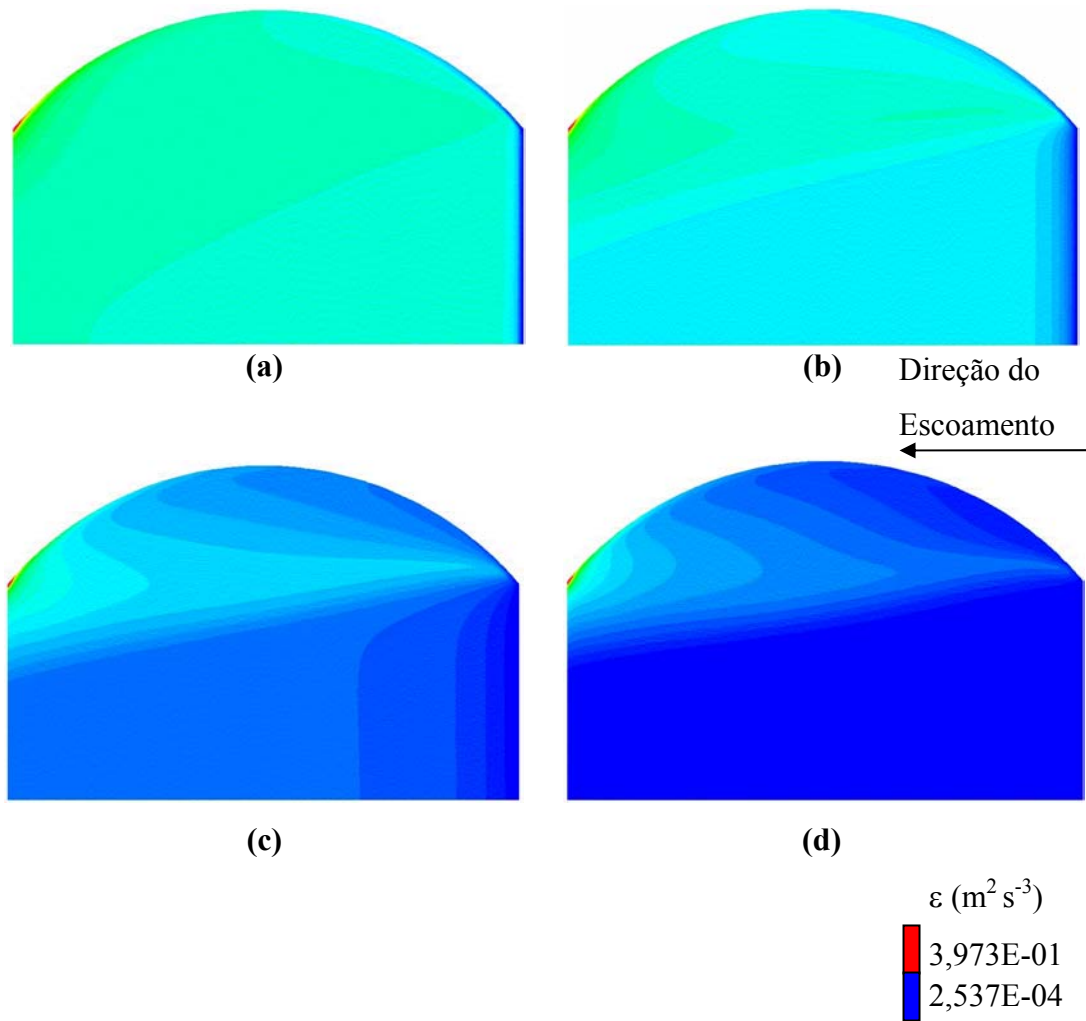


Figura 3.22 – Dissipação de k para diferentes valores de Ce .

(a) $Ce = 5 \times 10^{-3}$; (b) $Ce = 5 \times 10^{-4}$; (c) $Ce = 2,5 \times 10^{-4}$; (d) $Ce = 1 \times 10^{-5}$.

3.3 ESTUDO DE CASO III: SIMULAÇÃO NUMÉRICA 3-D DO ESCOAMENTO LÍQUIDO-GÁS EM UMA COLUNA DE BOLHAS

A simulação numérica do escoamento líquido em um prato perfurado de uma coluna de destilação foi estudada levando-se em consideração o fato de que o escoamento da fase líquida é mais importante que o da fase vapor. O escoamento foi modelado como monofásico e sua influência representada por forças resistivas e turbulência adicional. Entretanto, o modelo é largamente dependente de um parâmetro empírico, que necessita ser melhor ajustado. A necessidade de um modelo mais realístico, que represente de modo mais fidedigno a fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de uma coluna de destilação, levou ao desenvolvimento do modelo 3-D. Apesar dos esforços na tentativa de representar o escoamento, a falta de experiência na modelagem da formação de bolhas, sugeriu o estudo de uma coluna de bolhas simples.

Com o intuito de validar o modelo, experimentos foram realizados em uma coluna de bolhas em escala de bancada.

3.3.1 Coluna de Bolhas Experimental

Consiste em uma coluna em acrílico com 0,38 m de altura e diâmetro interno de 0,05 m. Com o objetivo de alimentar a coluna com gás (ar), foi introduzido um bico injetor na base da coluna. Uma imagem real da coluna de bolhas experimental é mostrada na Figura 3.23.

Inicialmente, preencheu-se a coluna com água até a altura de 0,25 m. Injetou-se ar, medindo-se a vazão por meio de um fluxômetro instalado na linha de ar comprimido. Detalhes quanto às condições de operação e quanto às características geométricas do aparato experimental encontram-se resumidos na Tabela 3.5.



Figura 3.23 – Coluna de bolhas experimental.

TABELA 3.5 – Parâmetros geométricos e operacionais do estudo de caso III.

Parâmetros	Coluna de bolhas
Geométricos	Altura = 0,38 m
	Diâmetro interno = 0,05 m
	Diâmetro do orifício de injeção = 0,001 m
Operacionais	Vazão volumétrica do gás = 1,00 L / min
	Altura de líquido = 0,25 m
	Temperatura ambiente = 25°C

3.3.2 Modelagem Matemática

- Equações governantes

Um modelo tridimensional, transiente, turbulento e multifásico em um sistema de coordenadas cartesianas para qualquer propriedade em uma fase genérica k , ϕ_k , pode ser generalizado pela seguinte equação:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\rho_k f_k \phi_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k f_k v_x \phi_k) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_k f_k v_y \phi_k) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_k f_k v_z \phi_k) = & - \frac{\partial}{\partial x} \left[f_k \Gamma_k \frac{\partial(\rho_k \phi_k)}{\partial x} \right] \\
& - \frac{\partial}{\partial y} \left[f_k \Gamma_k \frac{\partial(\rho_k \phi_k)}{\partial y} \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[f_k \Gamma_k \frac{\partial(\rho_k \phi_k)}{\partial z} \right], \\
& + S_\phi
\end{aligned} \tag{32}$$

onde ϕ_k são as propriedades fluidodinâmicas (u, v, w, k e ε) na fase k e Γ e S são o coeficiente de difusão e o termo fonte para cada propriedade ϕ_k , respectivamente.

O lado esquerdo da equação contém o fluxo convectivo global e o termo transiente, e o lado direito apresenta o termo que representa o fluxo difusivo global e os termos de geração ou destruição da propriedade ϕ_k .

Baseado na Equação (32) generalizada, o modelo homogêneo bifásico tridimensional foi desenvolvido.

- *Modelo homogêneo bifásico tridimensional*

O modelo homogêneo é uma simplificação do modelo multifluido. Assume-se que as propriedades transportadas são as mesmas para todas as fases, isto é:

$$\phi_k = \phi \quad 1 \leq k \leq N_k, \tag{33}$$

entretanto, as frações volumétricas são distintas. Portanto, as equações da continuidade para cada fase podem ser resolvidas para se determinar as frações volumétricas e as equações de transporte podem ser calculadas sobre todas as fases, gerando uma única equação de transporte para ϕ_k . Na Tabela 3.6, é possível identificar cada termo que caracteriza o modelo homogêneo tridimensional para este caso específico.

TABELA 3.6 – Forma compacta do modelo 3-D homogêneo.

Conservação	f_k	ϕ_k	Γ_k	S_ϕ
Massa Fase Líquida	f_l	1	0	0
Massa Fase Vapor	f_g	1	0	0
Momentum Direção x	1	v_x	$\frac{\mu_{mist} + \mu^t}{\rho_{mist}}$	$-\frac{\partial p}{\partial x} + \rho_{mist} g_x + Fs_x$
Momentum Direção y	1	v_y	$\frac{\mu_{mist} + \mu^t}{\rho_{mist}}$	$-\frac{\partial p}{\partial y} + \rho_{mist} g_y + Fs_y$
Momentum Direção z	1	v_z	$\frac{\mu_{mist} + \mu^t}{\rho_{mist}}$	$-\frac{\partial p}{\partial z} + \rho_{mist} g_z + Fs_z$
Energia Cinética Turbulenta	1	k	$\frac{\mu_{mist} + \frac{\mu^t}{\sigma^k}}{\rho_{mist}}$	$G_T - \rho_{mist} \varepsilon$
Taxa de Dissipação de Energia Cinética Turbulenta	1	ε	$\frac{\mu_{mist} + \frac{\mu^t}{\sigma^\varepsilon}}{\rho_{mist}}$	$\frac{\varepsilon}{k} (C_1 G_T - C_2 \rho_{mist} \varepsilon)$
Equações Constitutivas				
$\mu_{mist} = f_g \mu_g + f_l \mu_l$			$\rho_{mist} = f_g \rho_g + f_l \rho_l$	
$G_T = \mu^t \left[2 \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 \right]$			$\mu^t = C_\mu \cdot \frac{k^2}{\varepsilon}$	
C_1, C_2, C_μ constantes do modelo			C_e coeficiente de transferência	
$Fs_x = \sigma \kappa \frac{\partial f_l}{\partial x}$			$Fs_y = \sigma \kappa \frac{\partial f_l}{\partial y}$	
			$Fs_z = \sigma \kappa \frac{\partial f_l}{\partial z}$	

3.3.3 Geometria e Condições de Contorno

Para a simulação numérica da coluna de bolhas, a geometria foi construída com o auxílio do código comercial CFX 4.4 “BUILD”. Convencionou-se que a entrada de ar ocorre através de um furo presente na base da coluna, e que a velocidade é constante e

normal à entrada. Condições de pressão e de não-deslizamento na região superior e nas paredes da coluna foram adotadas, respectivamente.

As condições de contorno adotadas para cada região, para as fases e para a mistura são resumidas na Tabela 3.7, e o domínio físico que representa o caso em estudo é detalhado na Figura 3.24.

TABELA 3.7 – Resumo das condições de contorno para o estudo de caso III.

Condições de Contorno	Fase		
	Mistura	Líquido	Gás
Entrada	$v_x _{entrada} = \frac{L}{h} \quad v_y _{entrada} = 0 \quad v_z _{entrada} = 0$ $k _{entrada} = 1,5(i \cdot v_x)^2$ $\varepsilon _{entrada} = \frac{(k _{x=0})^{1,5}}{0,3 Ls}$	$f_l = f_{l,entrada}$	$f_g = 1 - f_{l,entrada}$
Saída I (Pressão)	$\frac{\partial v_x}{\partial z}\bigg _{saída I} = \frac{\partial v_y}{\partial z}\bigg _{saída I} = \frac{\partial k}{\partial z}\bigg _{saída I} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z}\bigg _{saída I} = p_{ref}$	$\frac{\partial f_l}{\partial z}\bigg _{saída I} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial z}\bigg _{saída I} = 0$
Parede	$v_x _{parede} = v_y _{parede} = k _{parede} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\bigg _{parede} = 0$	$\frac{\partial f_l}{\partial \zeta}\bigg _{parede} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial \zeta}\bigg _{parede} = 0$
ζ é a direção ortogonal à parede			

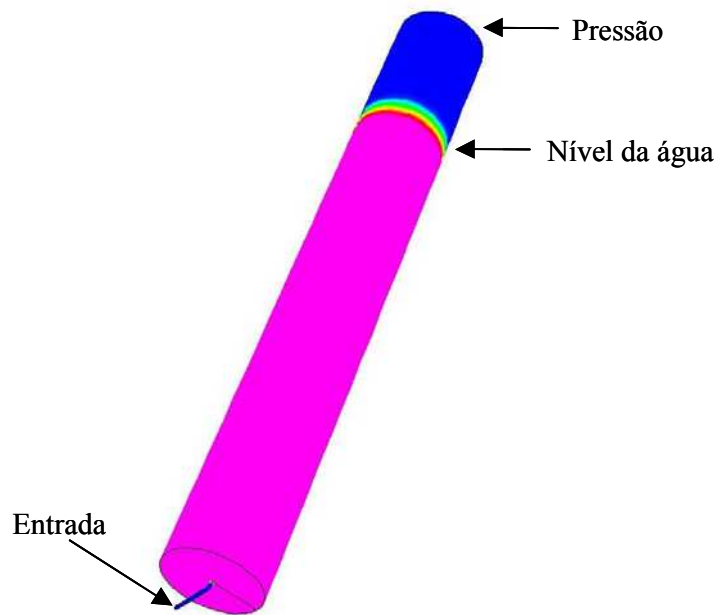


Figura 3.24 – Domínio físico da coluna de bolhas.

3.3.4 Malha Numérica

Com o auxílio do código comercial CFX 4.4 “BUILD” da ANSYS Inc. foi construída a malha numérica para o caso da coluna de bolhas, a qual pode ser vista em detalhes na Figura 3.25.

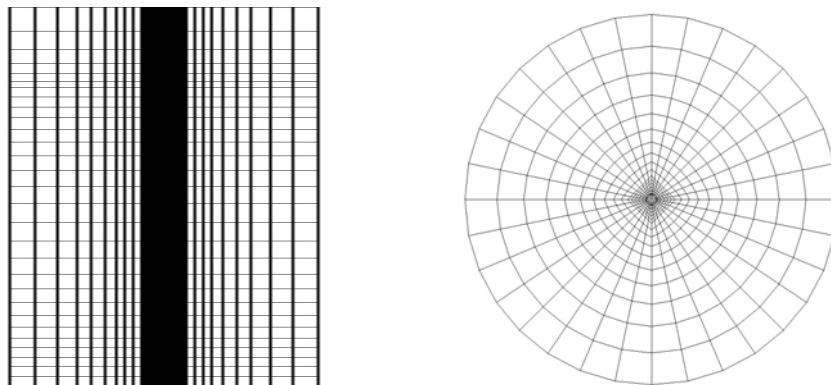


Figura 3.25 – Malha numérica da coluna de bolhas.

Nota-se que a distribuição dos pontos na geometria não é uniforme: uma maior concentração próximo ao eixo de simetria da coluna de bolhas (direção radial), bem como na direção axial garante uma boa convergência durante a solução numérica. A geometria totaliza 16.416 células.

3.3.5 Método Numérico

As simulações do escoamento turbulento líquido-gás foram realizadas usando diferentes estratégias numéricas para garantir estabilidade e convergência na solução numérica. A melhor forma de minimizar erros numéricos, como difusão numérica e retardo na solução numérica, típicos em cálculos com CFD, é resolver as equações do modelo de acordo com a seguinte metodologia:

- não empregar fatores de relaxação;
- usar um método de integração no tempo, composto por um esquema de aproximação quadrática e “difference backward”;
- tratar o problema da difusão numérica com um esquema de interpolação de alta ordem (“HIGHER UPWIND”) ao invés de um esquema de primeira ordem.

Esquemas de interpolação de primeira ordem (“UPWIND”) e de alta ordem (“HIGHER UPWIND”) foram empregados com o objetivo de comparar os resultados obtidos e analisar problemas de difusão numérica e acoplamento pressão-velocidade do tipo “SIMPLEC”. O algoritmo de interpolação “RHIE-CHOW” com o procedimento de solução AMG foi usado para melhorar a solução e evitar erros numéricos devido a não ortogonalidade das células geradas durante a construção da malha estruturada. Fatores de relaxação não foram empregados para evitar problemas de retardo na solução numérica. O algoritmo de alisamento de superfície, disponível no código, foi usado na simulação numérica da coluna de bolhas.

3.3.6 Principais Resultados e Discussão do Estudo de Caso III

Os seguintes aspectos foram explorados no estudo numérico da coluna de bolhas:

- comparação entre a visualização científica do escoamento e as imagens obtidas experimentalmente;
- avaliação da influência do esquema de interpolação sobre o comportamento das fases;
- capacidade do modelo em representar o escoamento real;
- análise da aplicação do algoritmo de alisamento de superfície em escoamentos com borbulhamento.

3.3.6.1 Visualização científica e comparação com dados experimentais

Nas simulações, o estudo experimental realizado em uma coluna de bolhas foi desenvolvido com o intuito de possibilitar uma comparação entre a visualização científica do escoamento gerado a partir de simulações e imagens obtidas por meio de uma câmera digital.

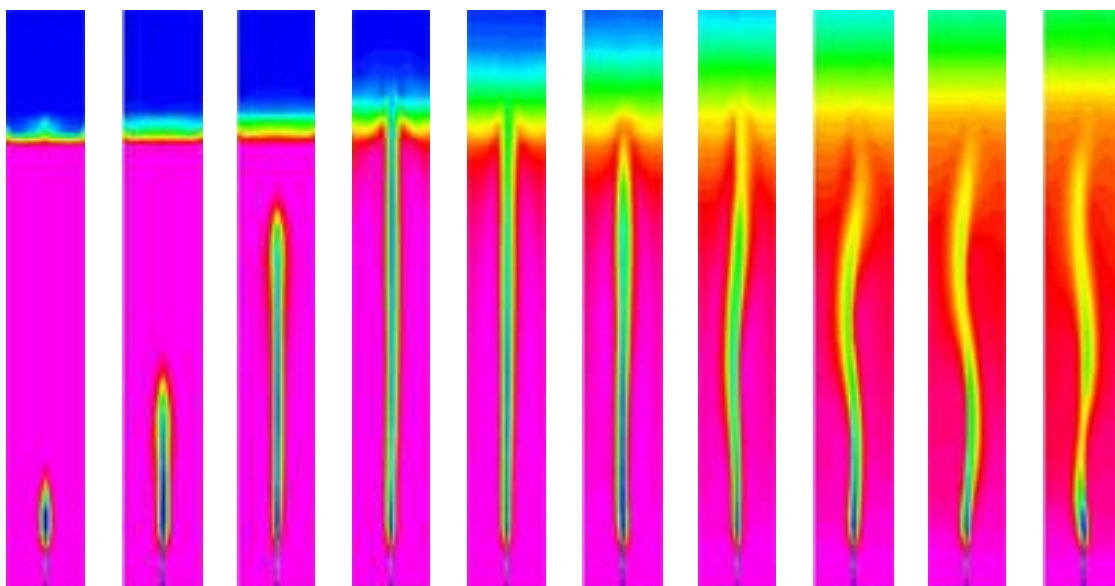
A Figura 3.26 apresenta uma série de quadros em diferentes tempos, onde é possível identificar o desenvolvimento de um escoamento bifásico turbulento.



Figura 3.26 – Imagens da coluna de bolhas em operação em diferentes intervalos de tempo.

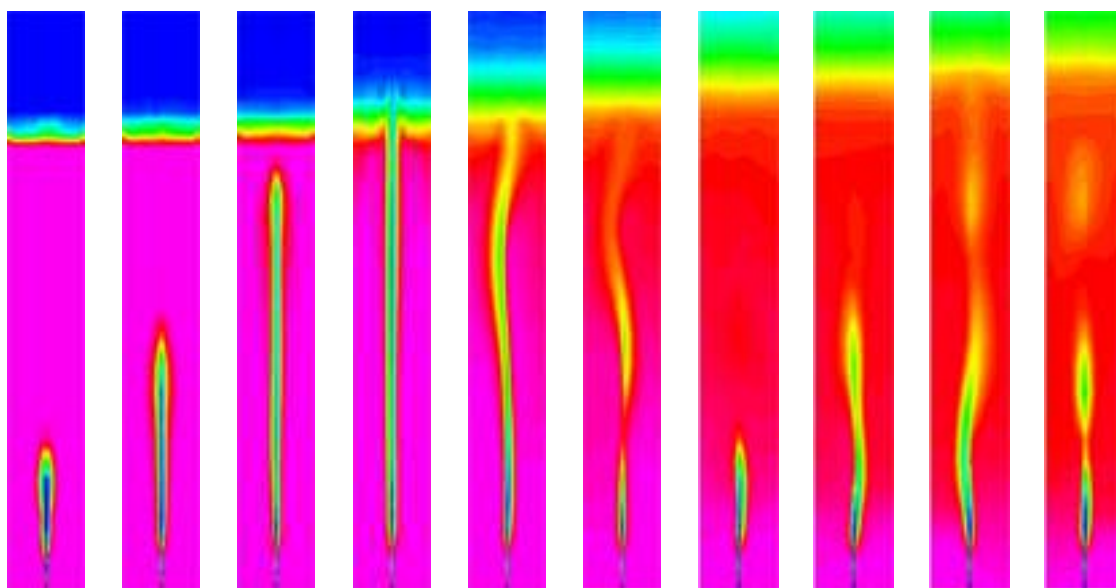
3.3.6.2 Esquema de interpolação e representação real do escoamento

Com o auxílio do pós-processador “ANALYSE”, presente no Código CFX 4.4, foi possível visualizar os resultados obtidos empregando diferentes esquemas de interpolação. As Figuras 3.27 e 3.28 ilustram o comportamento dinâmico da coluna de bolhas obtido através da solução do modelo, empregando esquemas de interpolação de primeira ordem (“UPWIND”) e de alta ordem (“HIGHER UPWIND”), respectivamente.



Legenda: 0 1

Figura 3.27 – Comportamento dinâmico da coluna de bolhas obtido com esquema de interpolação de primeira ordem para 10 segundos de tempo real.



Legenda: 0 1

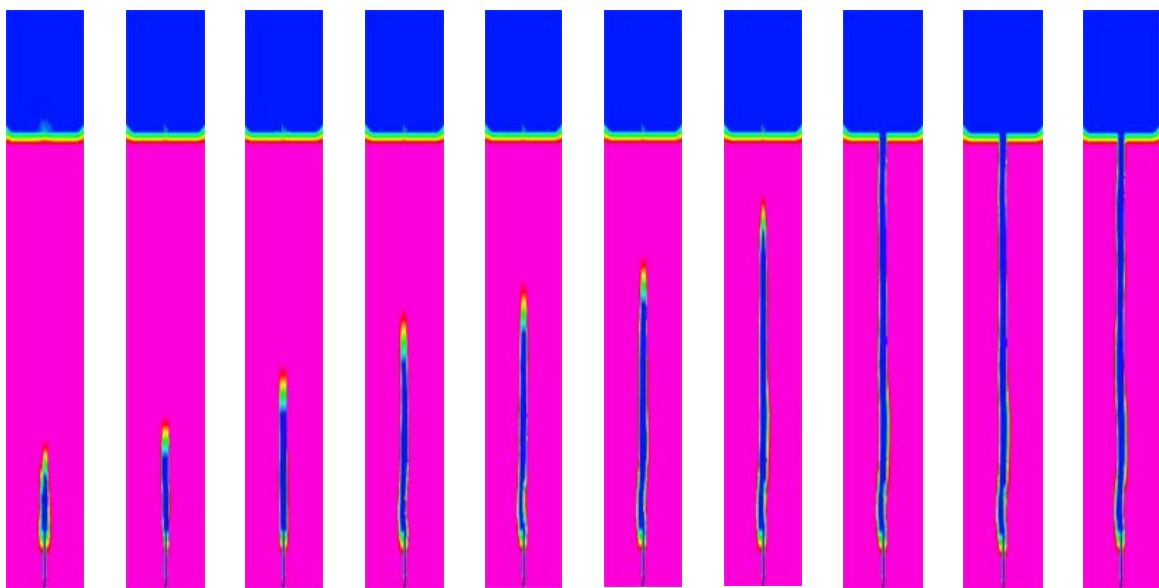
Figura 3.28 – Comportamento dinâmico da coluna de bolhas obtido com esquema de interpolação de alta ordem para 10 segundos de tempo real.

Através destas figuras, são observadas pequenas diferenças na representação da fração volumétrica da fase gás durante o desenvolvimento do escoamento. Provavelmente isto se deve aos problemas de difusão numérica provocados pelo esquema de interpolação de primeira ordem (“UPWIND”) que reduz a velocidade radial e, conseqüentemente, a transferência de momento na mesma direção.

A comparação das Figuras 3.27 e 3.28 mostra que o comportamento fluidodinâmico obtido com o modelo numérico é similar aos obtidos com os dados experimentais. A observação demonstra uma capacidade satisfatória do modelo homogêneo em representar o escoamento líquido-gás turbulento em uma coluna de bolhas, apesar das suposições assumidas.

3.3.6.3 Algoritmo de alisamento e representação real do escoamento

Testes com um algoritmo de alisamento de superfície (“SURFACE SHARPENING ALGORITHM”) disponível no código comercial de CFD, CFX 4.4, para o alisamento de superfícies livres, foram realizados. Entretanto, efeitos negativos produzidos no desenvolvimento do escoamento, como a redução da velocidade radial, além de outros facilmente identificados quando as Figuras 3.29 e 3.28 são comparadas. Os mapas do comportamento transiente das frações volumétricas da fase gás estão ilustrados na Figura 3.29.



Legenda: ■ 0 ■ 1

Figura 3.29 – Comportamento dinâmico da coluna de bolhas obtido com esquema de interpolação de alta ordem e usando algoritmos de alisamento de superfície para 10 segundos de tempo real.

3.4 ESTUDO DE CASO IV: SIMULAÇÃO NUMÉRICA 3-D DO ESCOAMENTO LÍQUIDO-VAPOR EM UM PRATO PERFURADO

A experiência adquirida com a modelagem de uma coluna de bolhas permitiu o desenvolvimento de um modelo matemático capaz de descrever a dinâmica do escoamento líquido-vapor 3-D em um prato de uma coluna de destilação.

Na formulação da modelagem matemática, o modelo homogêneo foi assumido com o objetivo de analisar a capacidade de prever o comportamento fluidodinâmico 3-D de um prato perfurado. Para este caso, um prato constituído de 24 perfurações foi adotado.

3.4.1 Modelagem Matemática

Seguiu-se a metodologia apresentada no item 3.3.2 para compor a modelagem matemática usada para a simulação numérica 3-D do escoamento líquido-vapor em um prato perfurado.

3.4.2 Geometria e Condições de Contorno

A Figura 3.30 apresenta o esquema da geometria exibindo as condições de contorno do domínio 3-D. Nas condições de entrada de líquido e de gás, as velocidades são consideradas constantes e normais nas fronteiras. A pressão de 101,325 kPa foi adotada nas duas condições de pressão.

As condições de contorno para este caso são similares às condições do modelo bidimensional, exceto a condição de simetria. A Tabela 3.8 apresenta matematicamente todas as condições de contorno adotadas.

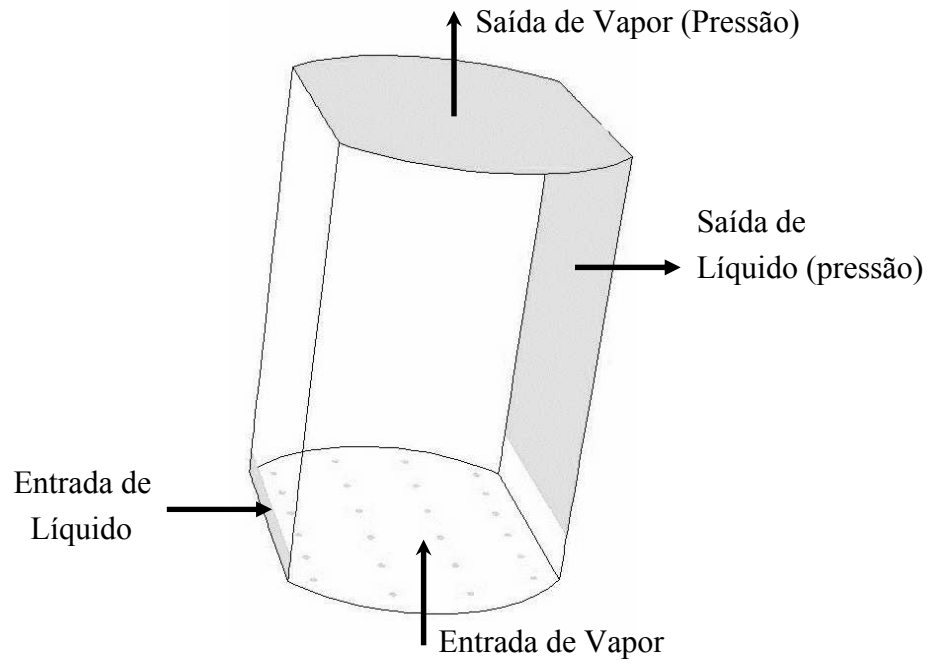


Figura 3.30 – Domínio físico 3-D do prato perfurado.

TABELA 3.8 – Resumo das condições de contorno para o estudo de caso IV.

Condição de Contorno	Fase		
	Mistura	Líquido	Vapor
Entrada	$v_x _{entrada} = \frac{L}{h} \quad v_y _{entrada} = 0 \quad v_z _{entrada} = 0$ $k _{entrada} = 1,5(i \cdot v_x)^2$ $\varepsilon _{entrada} = \frac{(k _{x=0})^{1,5}}{0,3 \text{ } Ls}$	$f_l = f_{l,entrada}$	$f_g = 1 - f_{l,entrada}$
Saída I (Pressão)	$\frac{\partial v_x}{\partial z}\bigg _{saída I} = \frac{\partial v_y}{\partial z}\bigg _{saída I} = \frac{\partial k}{\partial z}\bigg _{saída I} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z}\bigg _{saída I} = p_{ref}$	$\frac{\partial f_l}{\partial z}\bigg _{saída I} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial z}\bigg _{saída I} = 0$
Saída II (Pressão)	$\frac{\partial v_x}{\partial x}\bigg _{saída II} = \frac{\partial v_y}{\partial x}\bigg _{saída II} = \frac{\partial k}{\partial x}\bigg _{saída II} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}\bigg _{saída II} = p_{ref}$	$\frac{\partial f_l}{\partial x}\bigg _{saída II} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial x}\bigg _{saída II} = 0$
Parede	$v_x _{parede} = v_y _{parede} = k _{parede} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\bigg _{parede} = 0$	$\frac{\partial f_l}{\partial \zeta}\bigg _{parede} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial \zeta}\bigg _{parede} = 0$
ζ é a direção ortogonal à parede			

3.4.3 Malha Numérica

Características da malha numérica construída, bem como das condições geométricas e operacionais podem ser visualizadas na Figura 3.31 e na Tabela 3.9, respectivamente.

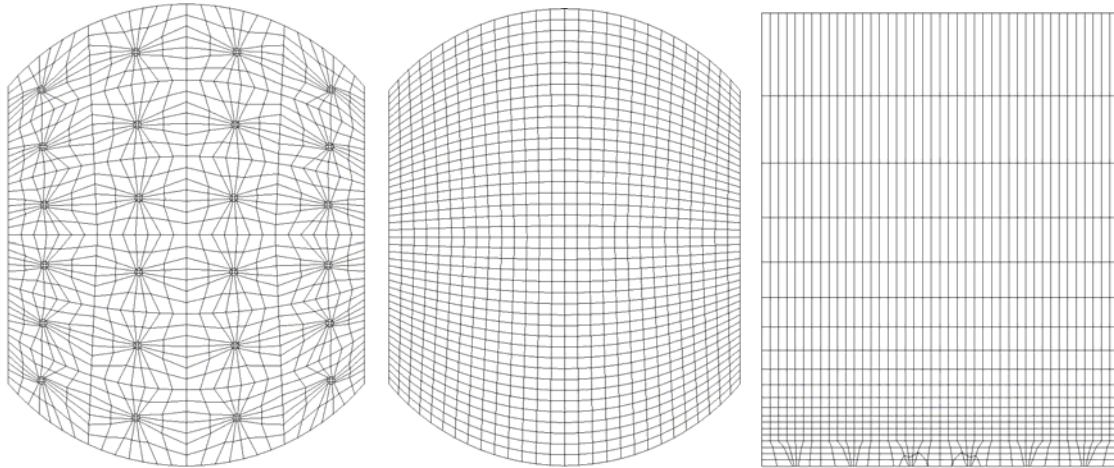


Figura 3.31 – Planos da malha numérica para o prato perfurado.

TABELA 3.9 – Parâmetros geométricos e operacionais para o estudo de caso IV.

Parâmetros		Caso a	Caso b
Geométricos	Altura do estágio, m	0,0630	0,0630
	Diâmetro da coluna, m	0,0510	0,0510
	Diâmetro do furo, m	0,0008	0,0008
	Número de furos	24,0000	24,0000
Operacionais	Fluxo volumétrico da fase vapor ($\times 10^6$), m^3/s	8,4444	0,7389
	Fluxo volumétrico de líquido ($\times 10^6$), m^3/s	9,1420	1,4844
	Altura de líquido, m	0,0070	0,0070
	Temperatura, $^{\circ}\text{C}$	25,0000	25,0000
Malha Numérica	N_{cell} (número de células)	23.520	23.520
	N_{block} (número de blocos)	1	1

3.4.4 Método Numérico

As equações do modelo foram resolvidas empregando o código comercial CFX 4.4 baseado no método de volumes finitos. Acoplamento de pressão-velocidade do tipo “SIMPLEC” e esquema de interpolação de alta ordem (“HIGHER UPWIND”) sem a inclusão do algoritmo de alisamento (“SURFACE SHARPENING ALGORITHM”) foram adotados. O algoritmo “RHIE-CHOW” com o procedimento AMG foi usado para aperfeiçoar a solução e evitar erros numéricos; fatores de relaxação não foram empregados. Para a simulação numérica do prato 3-D considerou-se, inicialmente, o prato preenchido com água até a altura da represa. As hipóteses de água isenta de ar e ar isento de água nas condições de entrada também foram adotadas.

3.4.5 Principais Resultados e Discussão do Estudo de Caso IV

Neste caso, os resultados obtidos com o modelo tridimensional foram comparados com os obtidos com o modelo bidimensional do prato perfurado proposto por LIU et al. (2000). Os principais objetivos foram:

- comparar o número de elementos em cada modelo;
- avaliar o tempo computacional necessário;
- analisar a capacidade de cada modelo em representar o comportamento real do escoamento em um prato perfurado.

3.4.5.1 Avaliação da malha numérica e do tempo computacional

O caso do prato perfurado foi empregado neste trabalho para comparar o modelo apresentado por LIU et al. (2000) e o modelo 3-D proposto, além de analisar a capacidade do modelo homogêneo em descrever o comportamento fluidodinâmico do prato perfurado tridimensional.

Primeiramente, uma comparação dos dois modelos foi feita usando os dados do Caso “a” da Tabela 3.9. As Figuras 3.32 e 3.33 mostram a malha numérica para ambos os modelos.

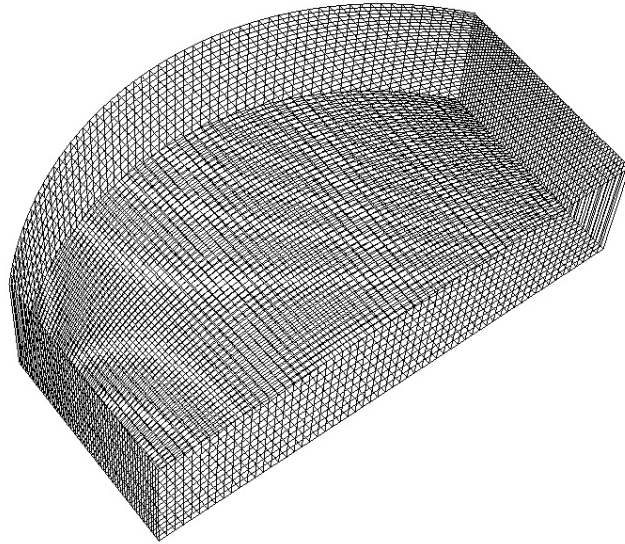


Figura 3.32 – Malha numérica 2-D do modelo monofásico.

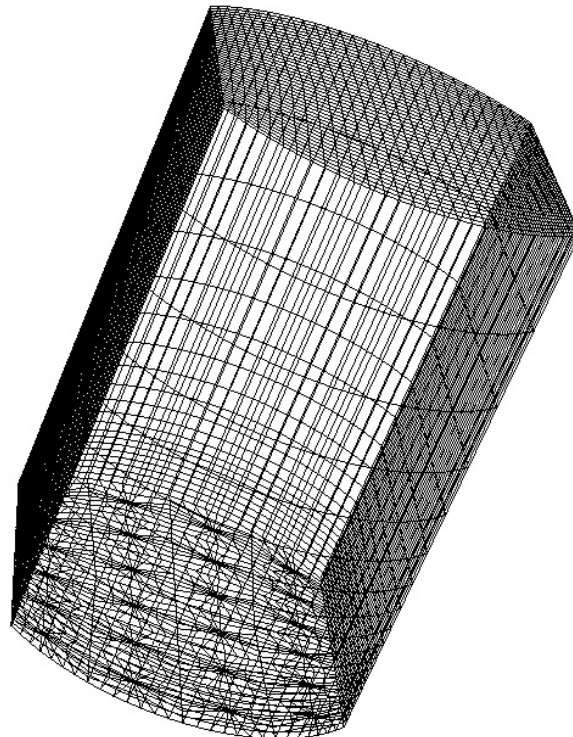


Figura 3.33 – Malha numérica 3-D do modelo bifásico homogêneo.

O número de elementos presentes na malha numérica para o modelo bidimensional é de 6.400 células, o que exigiu um tempo computacional de 15 minutos para a solução das equações do modelo. Para o modelo 3-D, o número de elementos é da ordem de 24.000 células, totalizando um tempo computacional de 120 minutos. Mesmo considerando o número de células, a diferença no tempo computacional entre os dois modelos não é significativamente grande conforme se esperava. Além disto, a taxa de convergência para um escoamento turbulento no estado estacionário é menor em comparação com o escoamento turbulento transiente.

3.4.5.2 Representação do comportamento real do escoamento

As Figuras 3.34 e 3.35 mostram mapas de pressão e vetores de velocidade em um plano dos pratos perfurados. Apesar dos efeitos da fase vapor no escoamento do líquido estarem incorporados no modelo bidimensional, este não é capaz de prever as pequenas zonas de circulação que aparecem nos pratos perfurados reais, além de apresentar uma grande dependência com um parâmetro empírico (C_e). Por outro lado, o modelo 3-D prediz as zonas de circulação de modo mais realístico.

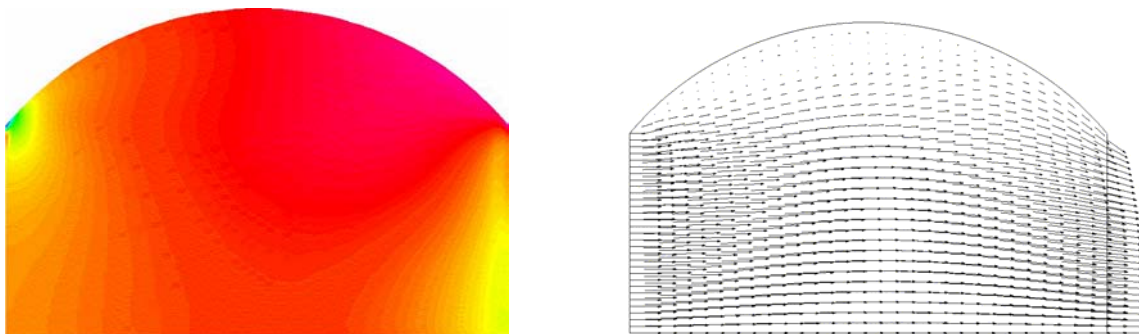


Figura 3.34 – Campos de pressão e vetorial para o Caso “a” do modelo 2-D monofásico.

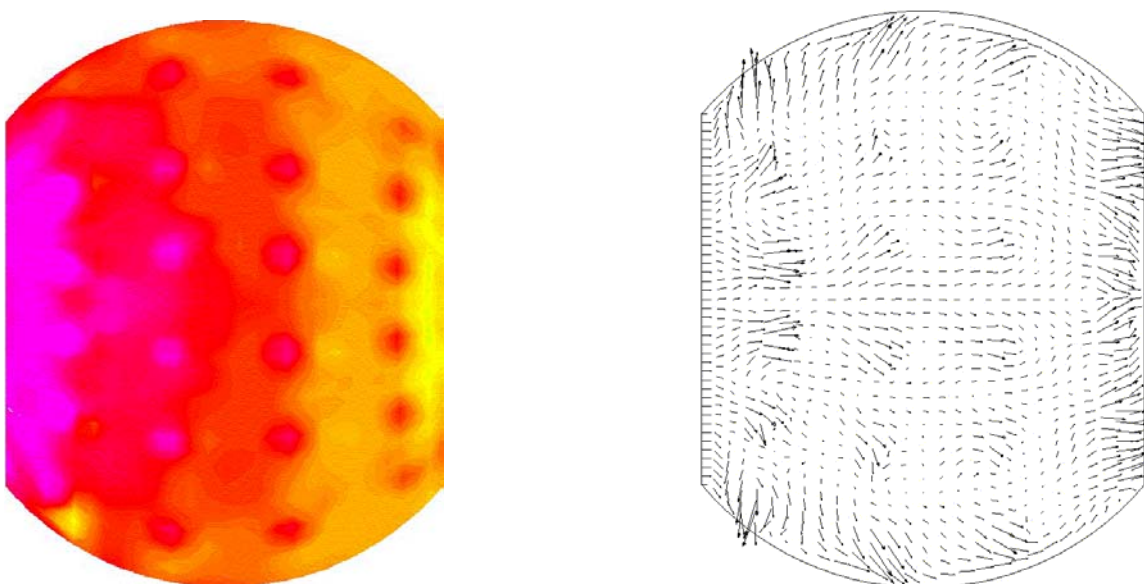


Figura 3.35 – Campos de pressão e vetorial para o Caso “a” do modelo 3-D bifásico homogêneo.

Com o propósito de analisar a capacidade do modelo homogêneo em prever o comportamento fluidodinâmico do prato perfurado tridimensional, as Figuras 3.36, 3.37 e 3.38 mostram a dinâmica da fração volumétrica da fase vapor a partir da condição inicial (prato perfurado preenchido com água) para uma condição de estado estacionário para os Casos “a” e “b”, caracterizados na Tabela 3.9.

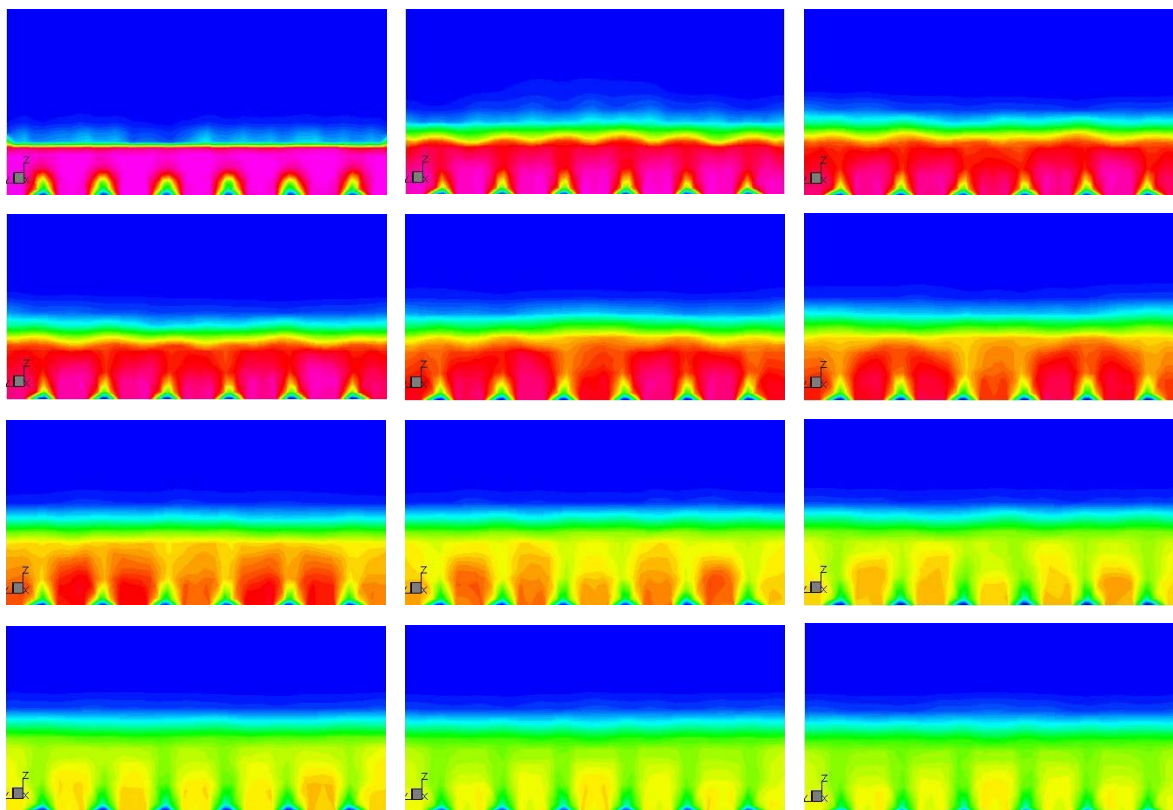


Figura 3.36 – Dinâmica da fração volumétrica da fase vapor para o Caso “a” em 6 segundos de tempo real.

É possível observar o desenvolvimento da altura de líquido claro, em aproximadamente 5 segundos de tempo real para o Caso “a” e em aproximadamente 8 segundos de tempo real para o Caso “b”.

A diferença entre as Figuras 3.36 e 3.37 está relacionada com a mudança nas vazões volumétricas das fases líquida e vapor. Uma vista superior da dinâmica da Figura 3.36 é mostrada na Figura 3.38.

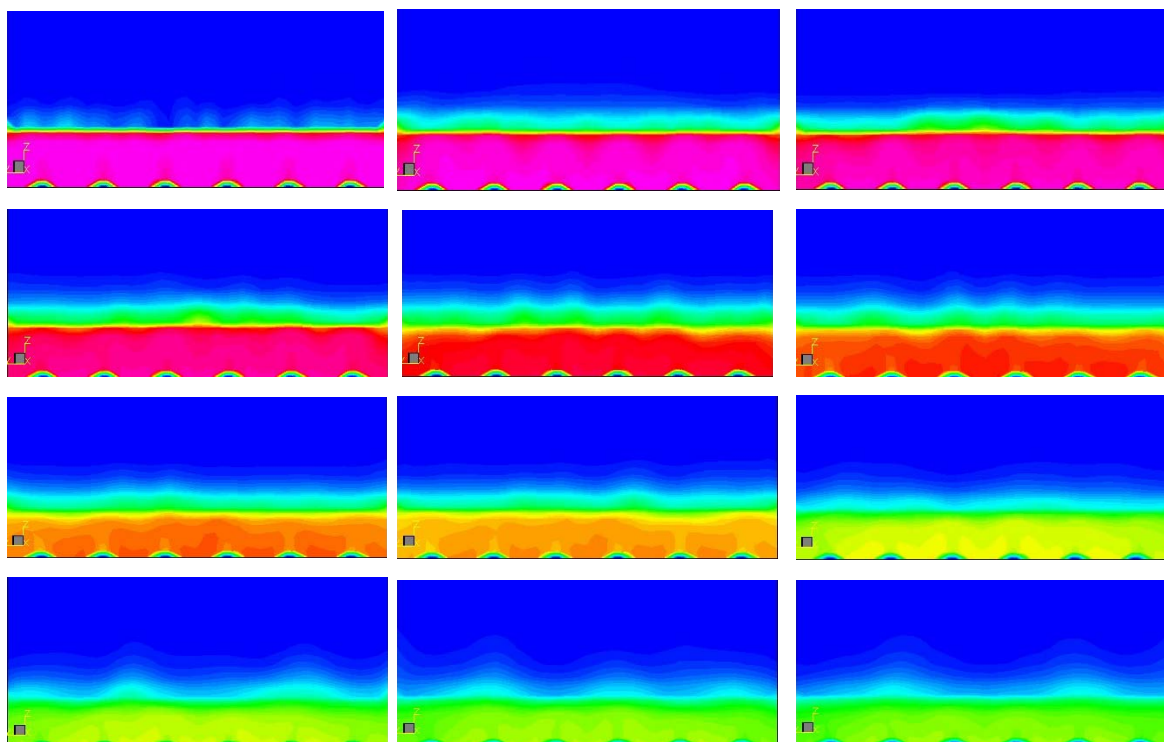


Figura 3.37 – Dinâmica da fração volumétrica da fase vapor para o Caso “b” em 10 segundos de tempo real.

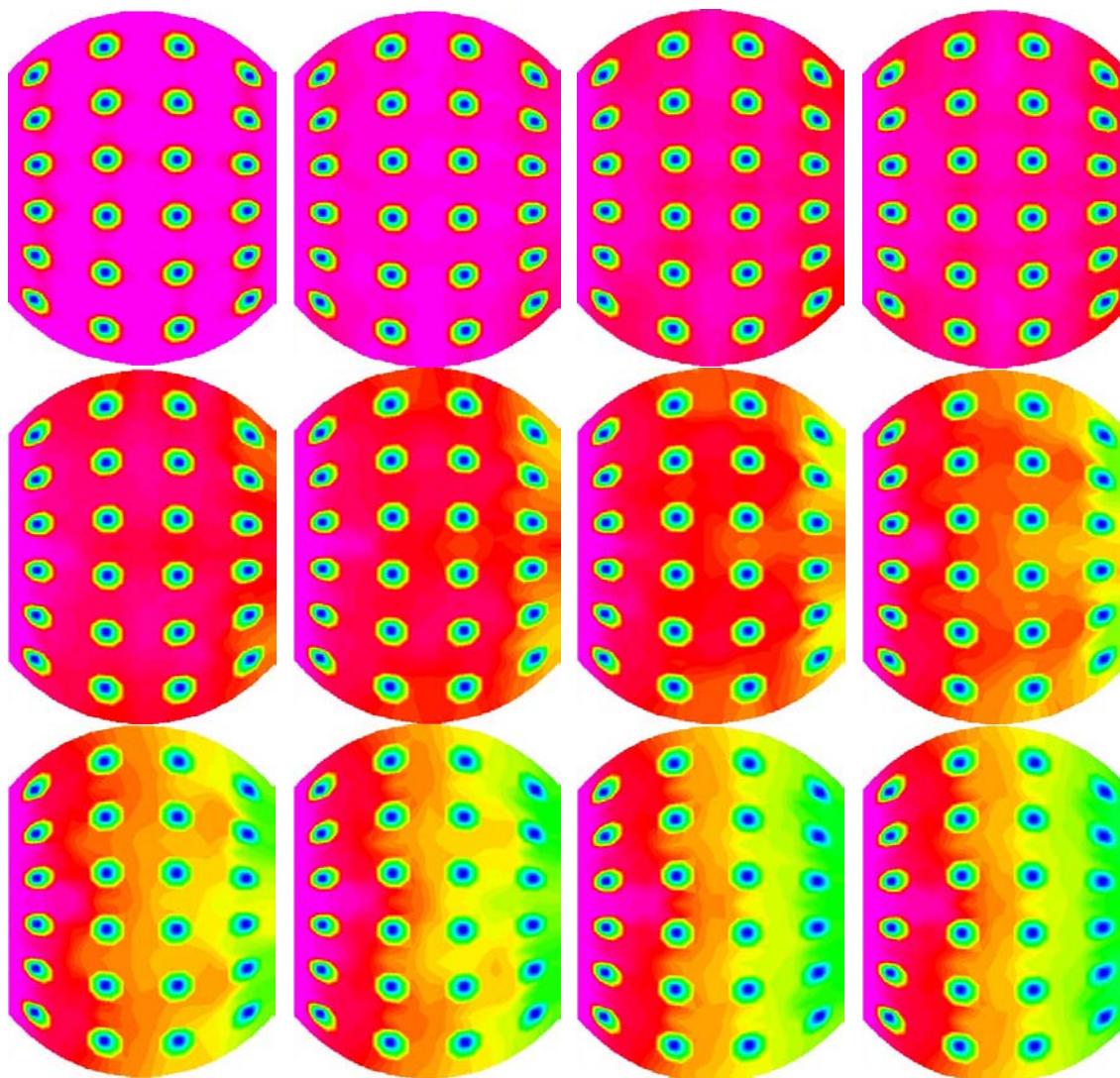


Figura 3.38 – Vista superior da dinâmica da fração volumétrica da fase vapor para o Caso “b” em 6 segundos de tempo real.

Conforme se observa na Figura 3.38, a fase vapor assume a direção do escoamento da fase líquida. Esta observação está de acordo com a formulação de ZHANG e YU (1994) que formularam este comportamento adicionando um termo associado a uma força de corpo em cada equação de *momentum* em seu modelo bidimensional.

3.5 CONCLUSÕES PRELIMINARES OBTIDAS NOS ESTUDOS DE CASO I, II, III E IV

Baseado nos resultados obtidos nos estudos de casos, conclui-se que:

1. A metodologia adotada no módulo de hidráulica, que consistiu na comparação entre os dados experimentais e os dados numéricos, permitiu a validação do modelo, proporcionando uma base de dados adequada para a modelagem em CFD, e revelando-se como uma ferramenta útil para o desenvolvimento de modelos e métodos em fluidodinâmica computacional;
2. A validação do modelo matemático mostra a aplicação e a simplicidade do modelo homogêneo em modelar e representar a dinâmica do escoamento em superfícies livres. A vantagem deste modelo é que este reduz o número de equações algébricas não-lineares no domínio computacional e continua representando, adequadamente, o comportamento do escoamento líquido-vapor quando comparado com o modelo heterogêneo, que é muito mais robusto e demanda um grande número de equações constitutivas;
3. A modelagem matemática baseada no modelo homogêneo foi capaz de representar a situação física, mostrando uma boa concordância entre os perfis das frações volumétricas da fase líquida, obtidos experimentalmente e por simulação numérica, bem como a capacidade de representar adequadamente a dinâmica do escoamento e suas principais características fenomenológicas. Além disto, o modelo proposto prediz satisfatoriamente o comportamento da onda gerada quando um obstáculo é incluído, o que é uma característica significativa;
4. O estudo da coluna de bolhas serviu de base para o desenvolvimento de um modelo tridimensional que representasse o comportamento mais realístico do prato perfurado;

5. O algoritmo de alisamento (“SURFACE SHARPENING ALGORITHM”) mostra-se eficaz em escoamentos com superfícies livres, entretanto, produz efeitos negativos em escoamentos com borbulhamento;
6. Os efeitos do borbulhamento promovem um aumento da energia cinética turbulenta e parece ser um dos efeitos mais importantes no estudo do escoamento líquido em um prato de uma coluna de destilação;
7. Apesar da simplicidade do modelo empírico para prever a geração da turbulência devido ao escoamento cruzado das bolhas na fase líquida, apresentado por LIU et al. (2000), ele mostra uma relação linear entre a geração de turbulência e queda de pressão. O modelo é muito dependente de um parâmetro empírico C_e e necessita ser melhor ajustado;
8. O modelo homogêneo tridimensional é mais realístico que o modelo bidimensional na representação da dinâmica do escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de uma coluna de destilação;
9. Há necessidade do desenvolvimento de um modelo heterogêneo tridimensional para verificar o modelo homogêneo desenvolvido;
10. As técnicas de CFD apresentadas e discutidas possibilitam um melhor entendimento do escoamento turbulento líquido-vapor em um prato perfurado de uma coluna de destilação, e podem ser usadas para otimizar o projeto e as condições de operação de colunas de destilação.

SOARES et al. (2001, 2002) apresentaram estudos iniciais em verificação de modelos e métodos, com ênfase na aplicação do modelo homogêneo a estudos de escoamento líquido-gás para problemas com superfícies livres e para colunas de bolhas. Os autores obtiveram bons resultados com a aplicação do modelo homogêneo.

CAPÍTULO 4

DESCRIÇÃO DA INSTALAÇÃO EXPERIMENTAL E DA TÉCNICA DE MEDIDA DE VELOCIDADE

4.1 INTRODUÇÃO

Para o desenvolvimento da metodologia experimental que visa a validação das predições numéricas oriundas do modelo matemático que representa o escoamento líquido-vapor em um prato perfurado, uma seção de uma coluna de destilação constituída por três pratos perfurados foi projetada e construída.

Desta forma, neste capítulo é apresentada a metodologia experimental adotada para o projeto e construção do aparato experimental, bem como a técnica de medida adotada para a determinação das velocidades locais.

4.1.1 Estrutura Laboratorial para a Experimentação Física

A Figura 4.1 mostra o esboço do aparato proposto para o desenvolvimento das atividades experimentais, cujo mecanismo básico de funcionamento consiste no seguinte: a água entra no prato superior pelo vertedor de entrada, percorre a superfície do prato e a área de borbulhamento, e desce para o prato seguinte através do vertedor de saída, repetindo o trajeto prato-a-prato, até a saída pela tubulação situada no último prato; em contracorrente, o ar é soprado na região central do prato inferior da coluna, percorre os pratos, passando pelas perfurações da área de borbulhamento, e sai livremente pela parte superior da coluna. A medida da vazão de ar e de água é realizada por meio de medidores

de vazão tipo turbina. Toda a estrutura foi projetada e construída em acrílico para permitir a visualização do escoamento e da turbulência oriunda da forte interação entre as fases na superfície do prato.

Com base no exposto, projetou-se o aparato experimental utilizado no desenvolvimento desta tese, cujo memorial de cálculo é apresentado em detalhes no Apêndice A. Valores calculados dos parâmetros do projeto estão presentes na Tabela 4.1.

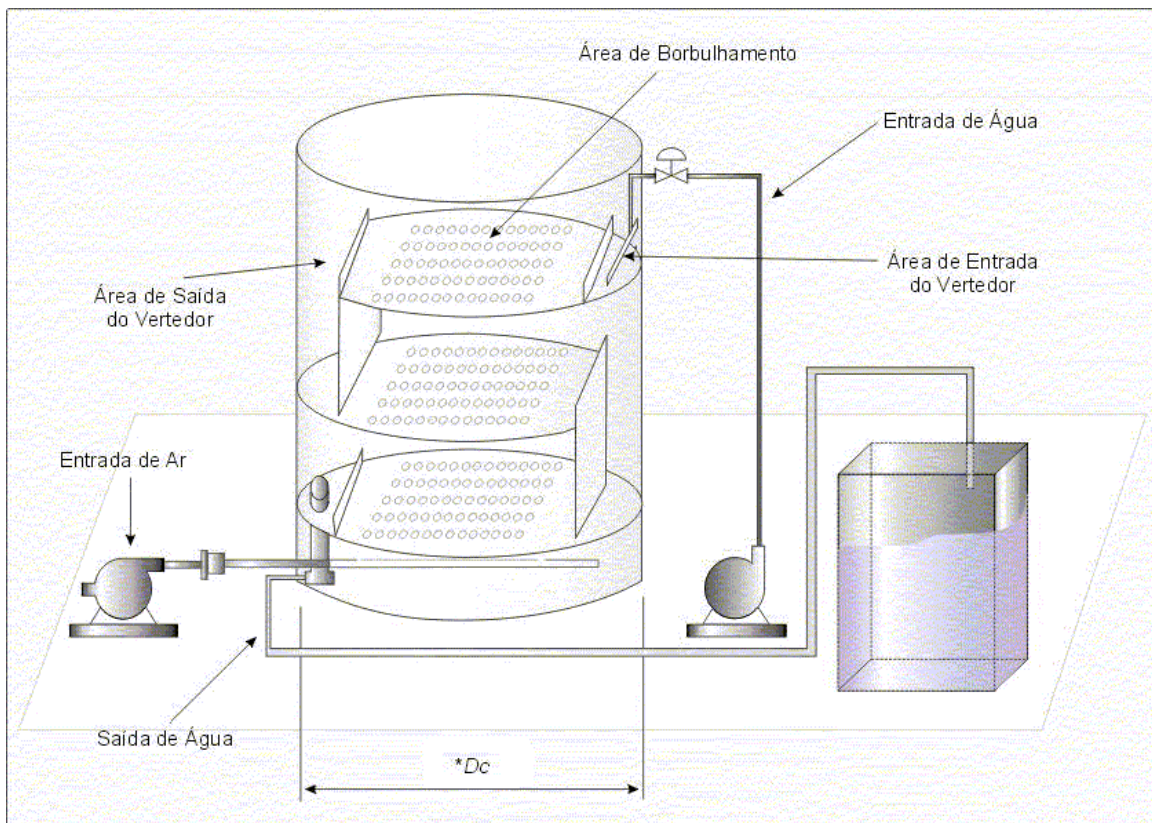


Figura 4.1 – Esquema do aparato experimental.

TABELA 4.1 – Parâmetros de projeto do aparato experimental.

Parâmetro	Valor Obtido	Unidade de Medida
Diâmetro interno do prato / coluna (d)	0,360000	m
Velocidade máxima de escoamento da fase vapor (u_g)	1,200000	m/s
Vazão mássica da fase vapor (v_g)	517,700000	kg/h
Espaçamento entre pratos (L_t)	0,470000	m
Área total (A_T)	0,101785	m ²
Área dos vertedores (A_V)	0,012820	m ²
Área efetiva (A_{EF})	0,086619	m ²
Área de estabilização (A_{EST})	0,035298	m ²
Área de borbulhamento (A_B)	0,051321	m ²
Área superior dos vertedores (A_{SV})	0,002346	m ²
Altura do vertedor (h_w)	0,060000	m

Com os dados da Tabela 4.1 e empregando o software gráfico AutoCad, projetou-se a coluna de destilação em acrílico, cuja estrutura montada encontra-se nas dependências do Laboratório de Desenvolvimento de Processos do Departamento de Engenharia Química da FURB. Nas Figuras 4.2 e 4.3 é possível visualizar o aparato experimental em fase de operação.



Figura 4.2 – Simulação física do escoamento água-ar na coluna de destilação.



Figura 4.3 – Imagens do aparato experimental em operação.

Definidos e caracterizados os parâmetros de projeto do aparato experimental, em seguida foi selecionada a técnica de medida da velocidade do escoamento líquido-vapor na superfície do prato perfurado, com capacidade de determinar o comportamento real do processo com elevada precisão.

Com base no exposto, apresenta-se a seguir a descrição da técnica de anemometria térmica, bem como o princípio de funcionamento do anemômetro de fio quente da TSI Incorporated, especialmente adquirido para o desenvolvimento das atividades de pesquisa.

4.2 TÉCNICA EXPERIMENTAL DE MEDIDA

Nas investigações sobre o escoamento de fluidos, um grande número de métodos, técnicas e instrumentos foram desenvolvidos para a medida de velocidade em escoamento não turbulento, e dividem-se em dois grandes grupos. O primeiro consiste no uso de um traçador ou de um indicador introduzido no fluido para tornar o padrão de escoamento visível através de um aparelho de detecção adequado, localizado fora do campo de escoamento. No segundo grupo, um elemento detectante é introduzido no escoamento e os perfis de velocidade e a intensidade de turbulência são medidos por meio de mudanças na natureza mecânica, física ou química que ocorre no elemento.

Quando os métodos do primeiro grupo são aplicados para medida da intensidade de turbulência, confronta-se com dificuldades relacionadas com mudanças muito rápidas dos parâmetros de operação. Assim, registros instantâneos são necessários em intervalos de tempo muito curtos. Além disso, a tridimensionalidade dos movimentos turbulentos dificulta a interpretação dos dados.

Quanto ao segundo grupo, há um número de exigências que deve ser satisfeito pelo elemento detectante e pelo aparato de medida antes da determinação da velocidade do escoamento:

- o elemento detectante introduzido no escoamento deve ser suficientemente pequeno de modo que cause distúrbios mínimos admissíveis no padrão do escoamento;
- a distribuição da velocidade instantânea deve ser uniforme na região ocupada pelo elemento. Isto significa que o elemento detectante deve ser menor que as dimensões do menor turbilhão;
- a inércia do instrumento deve ser baixa, de modo que a resposta para as flutuações mais rápidas seja praticamente instantânea;
- o instrumento deve ser suficientemente sensível para registrar pequenas diferenças nas flutuações;

- o instrumento deve ser estável de modo que nenhuma mudança notável ocorra nos parâmetros de calibração, pelo menos durante um teste;
- o instrumento deve ser suficientemente forte e rígido para evitar vibrações ou movimentos causados pelo escoamento turbulento.

De acordo com informações da literatura, as bolhas suspensas no líquido proporcionam fenômenos muito complexos, difíceis de serem formulados matematicamente. Fenômenos de quebra e de coalescência entre bolhas adjacentes, interações entre as bolhas e a parede do aparato e a transfiguração das bolhas afetam as condições do campo local do escoamento. Estas interações causam flutuações na pressão estática e na velocidade e afetam a estrutura turbulenta do escoamento.

Os parâmetros mais significativos associados ao padrão de escoamento são a distribuição das fases líquida e gás, a velocidade do líquido e suas flutuações, a frequência de trânsito das bolhas e a difusão turbulenta de massa, de momento e de energia. Dados referentes a estes parâmetros são essenciais para descrever as condições de escoamento borbulhante no estado estacionário e no regime transiente, tanto qualitativa quanto quantitativamente. Desde o trabalho desenvolvido por SERIZAWA et al. (1975a,b), grandes progressos foram obtidos no estudo de estruturas interfaciais locais e/ou campos de escoamento líquido-gás. Destacam-se, assim, os trabalhos de OHBA e ITOH (1978), LANCE e BATAILLE (1991), KOCAMUSTAFAGULLARI e WANG (1991), KOCAMUSTAFAGULLARI et al. (1994), LIU e BANKOFF (1993a,b), HIBIKI et al. (1997) e SUZANNE et al. (1998).

HSU et al. (1963) foram os primeiros a proporem a aplicação da técnica de anemometria de fio quente no sistema água-ar para identificar o padrão de escoamento e medir a fração local de vazios. DELHAYE (1969) estudou a resposta das sondas de fio quente em escoamento líquido-gás e descreveu o comportamento dos padrões de escoamento. Depois do tratamento de dados, observou-se que medidas locais da fração de vazios, velocidade da fase líquida e intensidade de turbulência na fase líquida podem ser atingidas por meio do uso da técnica de anemometria de fio quente nos escoamentos

água-ar. A partir daí, esta técnica foi usada por SERIZAWA et al. (1975a), ABEL e RESCH (1978), WANG et al. (1987), LANCE e BATAILLE (1991), LIU e BANKOFF (1993a,b) e HIBIKI et al. (1997) que descreveram os fenômenos da turbulência e a distribuição das fases em padrões de escoamento borbulhante vertical.

Os estudos desenvolvidos por SERIZAWA et al. (1975a) possibilitaram determinar as velocidades do líquido e a intensidade de turbulência em escoamentos em tubos, empregando como equipamento de medida o anemômetro de fio quente e o anemômetro de laser “doppler” (LDA), respectivamente. Numerosos estudos de escoamentos turbulentos, que visam a determinação da velocidade, da temperatura, da concentração e do atrito junto à superfície, demonstraram a importância da técnica de anemometria térmica no estudo de fenômenos de escoamento nos equipamentos industriais.

4.2.1 Anemômetro de Fio Quente

Adequados para aplicação em laboratórios, este tipo de equipamento realiza medidas com alta resolução espacial e temporal, e pode ser utilizado no escoamento de líquidos e gases com níveis de turbulência baixo e moderado. Seu princípio de funcionamento está baseado na transferência de calor por convecção entre um pequeno elemento metálico aquecido eletricamente e o fluido circundante. Assim, além da velocidade local instantânea do escoamento, o anemômetro de fio quente pode medir qualquer propriedade que seja capaz de alterar as condições de transferência de calor entre o elemento sensor e o fluido. A técnica de anemometria de fio quente tem sido empregada, também, para detectar mudanças na temperatura do fluido ou na concentração de misturas de gases, bem como na determinação da fração de vazio em escoamentos bifásicos (BRUNN, 1995).

Neste trabalho, o termo anemometria de fio quente está sendo empregado de maneira bastante genérica para designar a técnica em questão. Para aplicação em meio

líquido, entretanto, as sondas utilizadas são constituídas por filmes – e não fios – metálicos protegidos por uma fina camada de quartzo, o que lhes confere maior robustez e durabilidade. Na discussão que se segue, são apresentados alguns detalhes do equipamento utilizado e são abordados os aspectos básicos relativos à aplicação da técnica.

4.2.2 Princípio Básico de Funcionamento

De maneira geral, todos os anemômetros de fio quente são compostos por: uma sonda, com seu respectivo suporte e cabo de ligação, e um circuito eletrônico, que incorpora uma ponte de resistores. A sonda é constituída por um elemento sensor – em geral um fio ou filme de tungstênio, níquel ou platina, com cerca de 1 mm de comprimento e alguns poucos microns de diâmetro ou espessura - montado sobre uma haste de dimensões reduzidas, confeccionada em resina epóxi ou material cerâmico, como mostrado na Figura 4.4. A escolha entre os vários tipos de sonda existentes depende fortemente da aplicação a que se destinam.

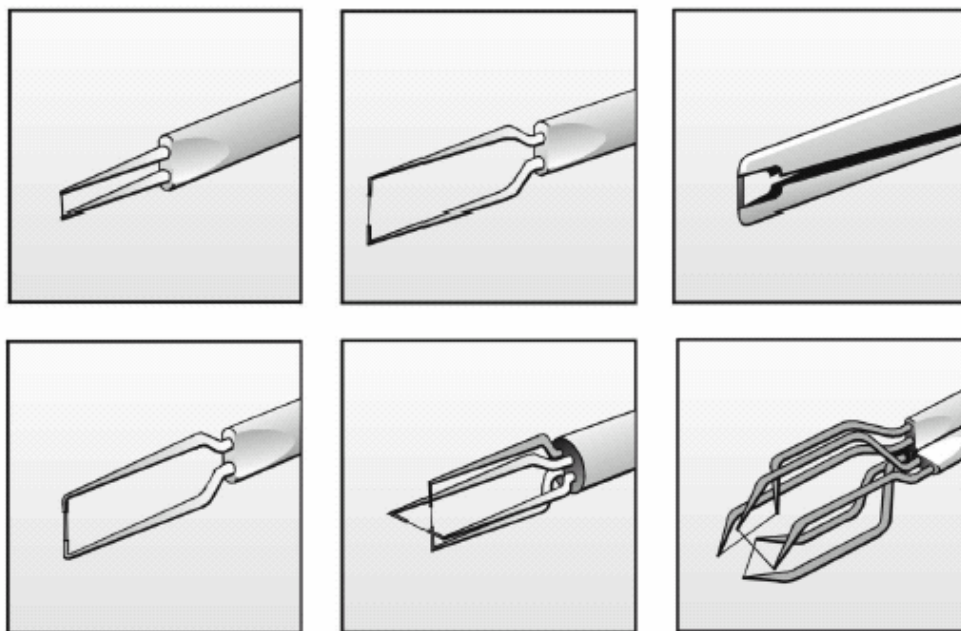


Figura 4.4 – Diferentes tipos de sondas anemométricas de fio e de filme quente.

Na sua versão mais usual, conhecida como Anemômetro de Temperatura Constante, o elemento sensor representa um dos resistores da ponte, tal como ilustra a Figura 4.5. Quando exposto ao movimento do fluido, este elemento tende a se resfriar, provocando alterações na resistência elétrica. Nestas condições, o controlador do circuito é acionado, ajustando automaticamente a corrente elétrica para restabelecer a temperatura do sensor e, conseqüentemente, o equilíbrio térmico da ponte. Assim, a velocidade local instantânea do escoamento pode ser determinada, medindo-se a diferença de tensão na saída do circuito que alimenta a sonda e realizando-se, em seguida, a conversão deste sinal elétrico em velocidade, com o auxílio de uma correlação conhecida como Lei de King, dada pela Equação (34), cuja dedução encontra-se no Apêndice B:

$$E^2 = A + BU^n. \quad (34)$$

Nessa expressão, E representa a tensão elétrica, U a velocidade relativa entre a sonda e o fluido, e A , B e n são constantes empíricas a serem determinadas mediante a calibração da sonda.

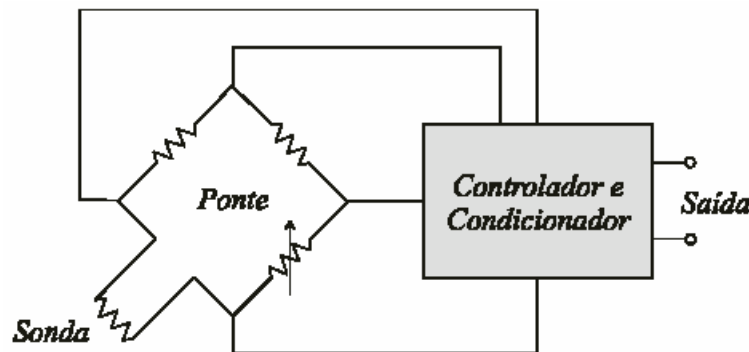


Figura 4.5 – Elementos básicos de um anemômetro de temperatura constante.

A Figura 4.6 mostra especificamente o anemômetro utilizado no presente trabalho, produzido pela TSI Incorporated. Este anemômetro possui três módulos que

permitem a medição simultânea de até três componentes da velocidade local e instantânea.

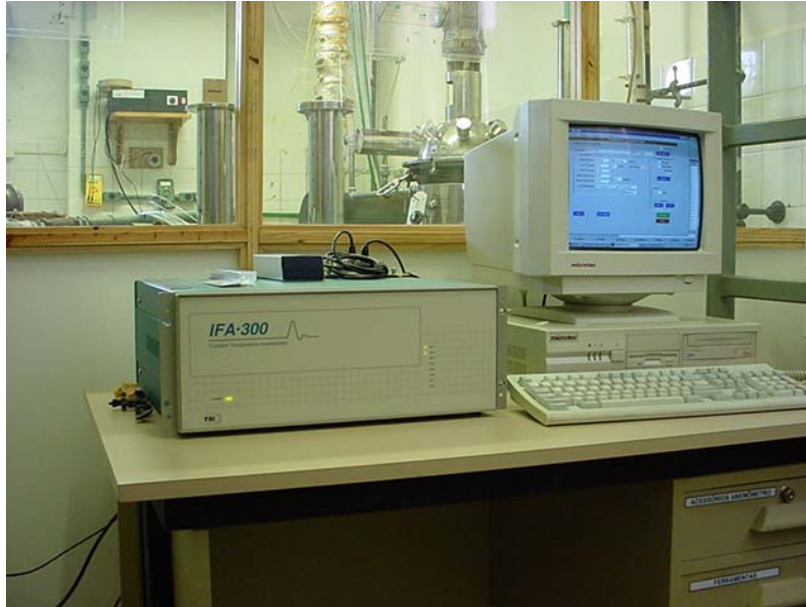


Figura 4.6 – Anemômetro de temperatura constante IFA 300.

Destaca-se que, com a passagem do fluido pela sonda do anemômetro de fio quente, esta perde calor para o fluido, promovendo a queda na temperatura da sonda, a qual é captada pelo anemômetro. Este, por sua vez, envia uma corrente com o objetivo de mantê-lo com a temperatura inicial. A magnitude do aumento da corrente é proporcional à transferência de calor entre a sonda e o fluido, e diretamente relacionada com a velocidade do escoamento. Assim, a voltagem da ponte é sensível à temperatura, assim como a velocidade do escoamento.

O fio quente pode ser de várias dimensões e responde muito rapidamente às variações nas condições do escoamento. Mesmo para escoamentos turbulentos e de geometria tridimensional, o fio quente pode detectar as frequências mais altas presentes na estrutura do escoamento. Assim sendo, o anemômetro de fio quente é o principal instrumento de pesquisa para o estudo de escoamentos turbulentos. Em equipamentos

com nível de intensidade turbulenta inferior a 25-30%, a anemometria de fio quente apresenta as seguintes vantagens:

- **Tempo de resposta:** a temperatura constante, é comum atingir frequência de amostragem de até 50 kHz.
- **Sinal contínuo:** por ser contínuo, o sinal analógico permite a análise de frequência.
- **Dimensões do sensor:** os sensores de anemometria de fio quente são menores do que os sensores utilizados em outras técnicas.
- **Medição de velocidade:** a anemometria de fio quente permite a aquisição de uma vasta faixa de velocidades, além de permitir a aquisição dos três componentes de velocidade instantânea.
- **Medição de temperatura:** esta pode ser determinada de duas formas: (a) utilizando um sensor de fio-frio, que permite a aquisição da velocidade e da temperatura simultaneamente, ou (b) através de um termopar conectado ao sistema.

4.2.1.1 Componentes do anemômetro de fio quente

O anemômetro de fio quente empregado neste projeto de pesquisa (IFA 300 CTA da TSI Incorporated) tem como principais componentes (Figura 4.7):

- anemômetro (1 a 8 canais);
- sondas com sensores;
- software para aquisição e análise de dados;
- termopar para medida da temperatura;
- placa A/D.

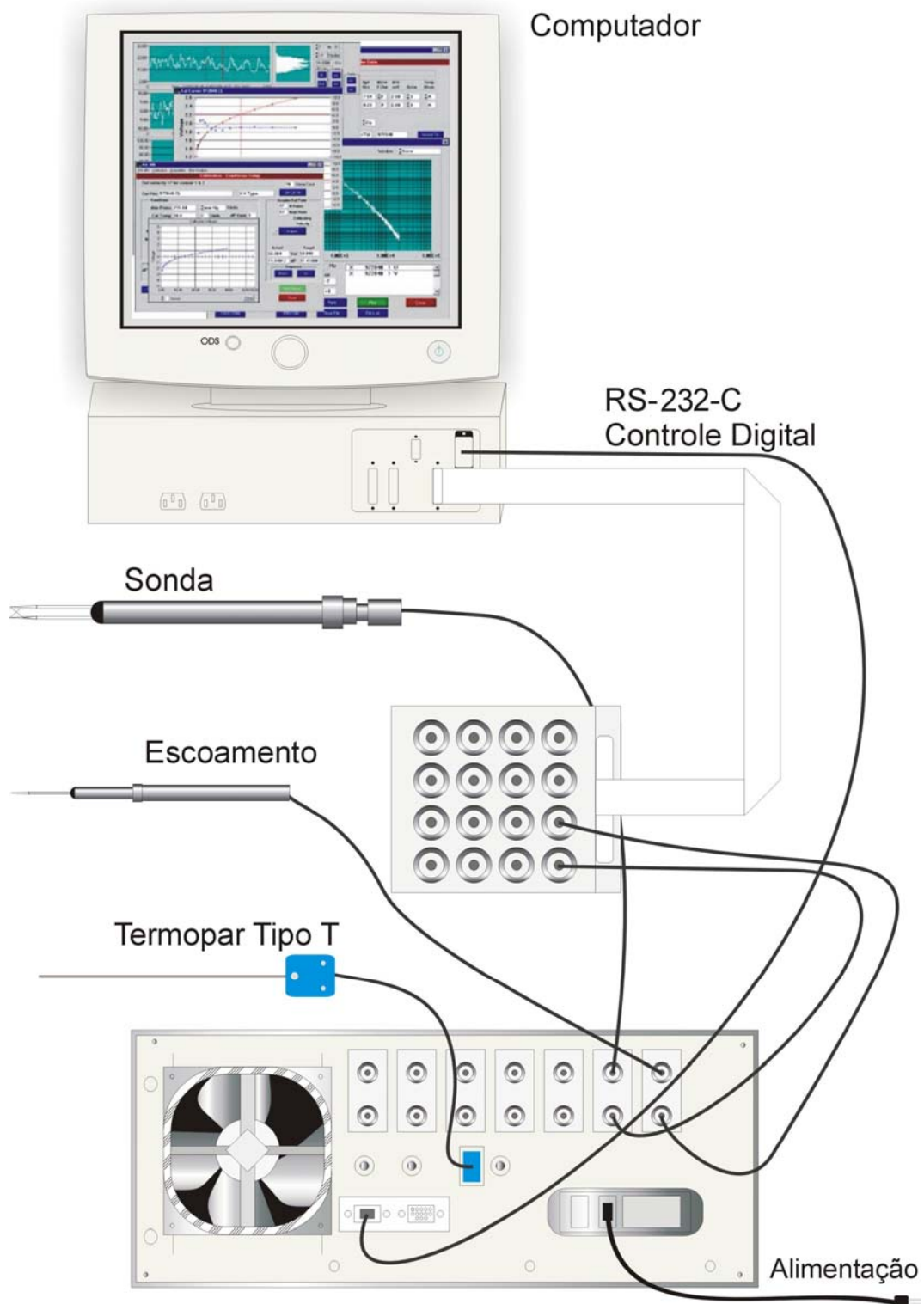


Figura 4.7 – Componentes e arranjo do anemômetro de fio quente.

4.2.1.2 Detalhes técnicos de utilização do anemômetro de fio quente

Definição da medição requerida: Conhecendo-se o tipo de escoamento e os componentes de velocidade de interesse, pode-se definir o sistema para a aquisição de dados.

Seleção do tipo de anemômetro: O anemômetro de fio quente funciona de duas formas: a primeira é com corrente constante CCA (“Constant Current Anemometer”) e a segunda com a temperatura constante CTA (“Constant Temperature Anemometer”). Em ambas existe uma alta taxa da relação sinal/ruído. No anemômetro de fio quente, o ruído eletrônico tem sua origem no sensor, nas resistências da ponte e no amplificador do circuito. É possível otimizar a relação sinal/ruído, conforme menciona FINGERSON e FREYMUTH (1983), quando se observam as seguintes condições:

- operação com alta taxa de superaquecimento;
- utilização de um material com alto coeficiente de temperatura;
- opção por um fio fino cuja capacidade térmica é muito baixa.

No caso de um anemômetro a corrente constante, a temperatura do sensor depende da velocidade do escoamento, ou seja, se a velocidade varia, a temperatura também varia. O anemômetro a corrente constante é sensível a variações na velocidade. Porém, se a temperatura do sensor e do escoamento são próximas, o anemômetro a corrente constante é sensível à temperatura.

Para o anemômetro a temperatura constante, o amplificador de saída alimenta a ponte, ou seja, a inércia térmica do elemento sensível é automaticamente ajustada se as condições do escoamento sofrerem alguma alteração. Quando a velocidade do escoamento muda, a temperatura e a resistência do elemento sensível também mudam. O amplificador, então, envia uma corrente que restaura o valor inicial da resistência. Os amplificadores modernos possuem uma constante de tempo muito pequena. Desta forma,

a temperatura permanece praticamente constante no elemento sensível, salvo exceções para frequências muito altas.

4.2.1.3 Sensores

No fio quente o elemento sensível do anemômetro pode ser um fio metálico muito fino esticado entre duas agulhas de aço inoxidável ou níquel. No caso do filme quente, pode ser uma fina camada de metal depositada em um suporte de quartzo. Para o estudo da turbulência, o anemômetro de fio quente é especialmente apropriado, pois o sistema, neste caso, deve garantir uma resposta com frequência muito alta e precisa. O tamanho do sensor não deve ser maior do que a escala de comprimento característica de Kolmogorov. No caso da medição de velocidade média ou dos componentes do tensor de Reynolds, usa-se um sensor de $5\mu\text{m}$ de diâmetro e de 1,25 mm de comprimento.

Os sensores de fio quente possuem um, dois ou três elementos sensíveis, sendo que cada fio mede um componente da velocidade em um plano cuja posição é perpendicular ao fio, e possuem também várias configurações geométricas, adaptadas a diversidade de aplicações: sensores na forma de cilindros circulares, de cones, de ângulos agudos ou de sensores fixos na parede. Eles são construídos pela deposição de uma camada fina de platina ou de níquel sobre um substrato isolado de quartzo.

Tratando-se de resistência mecânica, o filme quente é preferido ao fio quente nos meios líquidos, sendo também utilizado nos casos susceptíveis a contaminações nos escoamentos gasosos. Os sensores são diferenciados de acordo com o número de componentes de velocidade medidos, com a geometria do espaço de medição, com a influência da temperatura, com o limite superior de sensibilidade na frequência requerida (em função do diâmetro do sensor) e se os experimentos são realizados em um gás ou em um líquido.

No presente trabalho, selecionou-se um sensor do tipo X por possibilitar a aquisição de dois componentes de velocidade (U e V). Estes, por sua vez, encontram-se a 45° em relação a cada sensor. Este sensor deve ser alinhado de modo que o escoamento principal esteja na direção U e perpendicular a V .

4.2.1.4 Calibração

Através da determinação da velocidade de referência e da tensão fornecida pelo anemômetro, obtém-se uma curva de calibração para o anemômetro de fio quente. Para a determinação da curva de calibração válida, são necessárias as seguintes precauções:

- considerar uma amostra com 20 a 30 pontos para validar a calibração, reduzindo assim as incertezas;
- calibrar o anemômetro de fio quente apenas para faixas de velocidades a serem utilizadas, já que as mesmas são aproximações do verdadeiro comportamento térmico do fio;
- realizar a calibração a cada uso do anemômetro de fio quente, devido às variações nos componentes do anemômetro e as variações de temperatura do fluido.

4.3 ANEMÔMETRO DE FIO QUENTE MODELO IFA 300

Para a obtenção dos perfis de velocidade nos aparatos experimentais apresentados neste projeto de tese, foi empregado o anemômetro de fio quente, marca IFA 300 da TSI Incorporated. Conforme especificado, um dos componentes do anemômetro é o software para a aquisição e análise de dados. O software IFA 300, constituinte do sistema, permite a calibração, a aquisição, o tratamento de dados, entre outras opções de trabalho.

Visando melhor compreender o funcionamento da técnica de anemometria térmica, mais especificamente das etapas de aquisição e análise de dados, no Apêndice B é apresentada uma descrição detalhada de funcionamento do software IFA 300 que acompanha o anemômetro de fio quente.

4.4 DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA DE CALIBRAÇÃO DA SONDA ANEMOMÉTRICA

Deve-se dar ênfase ao fato do anemômetro de fio quente ser um instrumento não absoluto, isto é, para cada novo experimento uma nova calibração deve ser realizada. Durante a calibração da sonda, o sensor é ajustado perpendicularmente ao escoamento. O escoamento pode ser paralelo ou perpendicular ao suporte das agulhas no sensor. Sondas com sensor do tipo X (empregado neste estudo) devem ser calibradas com o escoamento a 45° em relação a cada sensor e paralelo ao suporte das agulhas no sensor.

Inicialmente, foram realizados ensaios para calibrar a sonda usando o módulo experimental de hidráulica. A primeira etapa consistiu na montagem de um sistema específico para a medição da velocidade de escoamento em um duto, conforme ilustra a Figura 4.8.

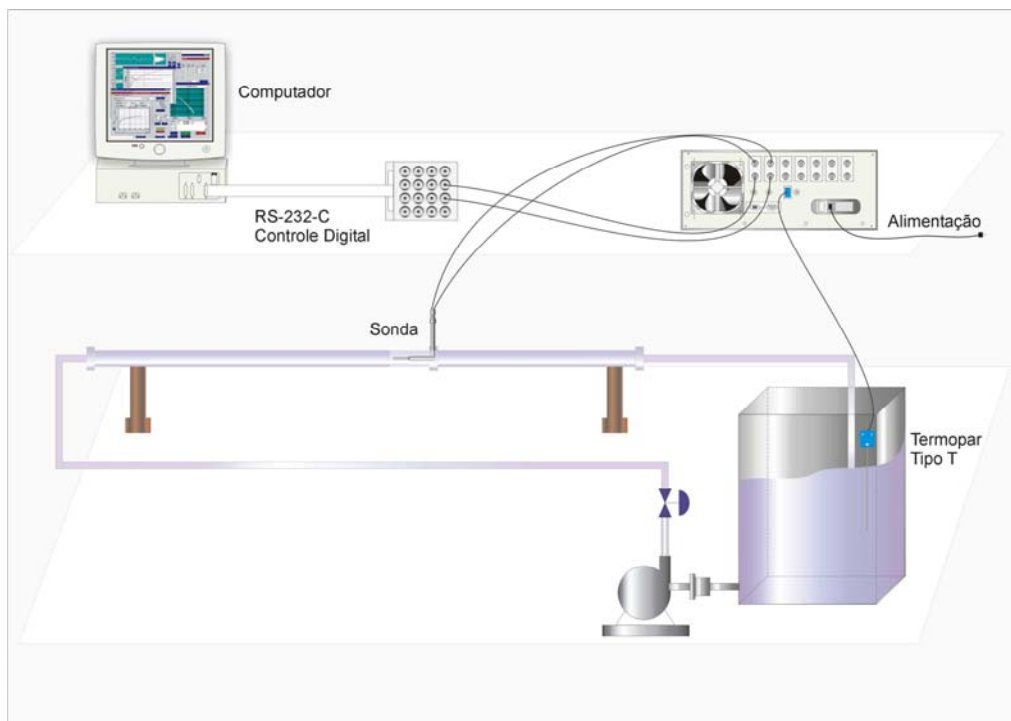


Figura 4.8 – Método para calibração utilizando o módulo experimental de hidráulica.

De acordo com o esquema ilustrado na Figura 4.8, a água presente no tanque de armazenamento é bombeada para uma tubulação que contém a sonda devidamente posicionada para a medida de velocidade do escoamento. Entretanto, observou-se que devido às oscilações do sistema (provocadas pela instabilidade da bomba) a velocidade não permanecia constante, inviabilizando a técnica. Por outro lado, a tubulação para o escoamento da água não permanecia completamente preenchida pelo líquido (água), o que exigiu uma nova estrutura, conforme ilustrada na Figura 4.9.

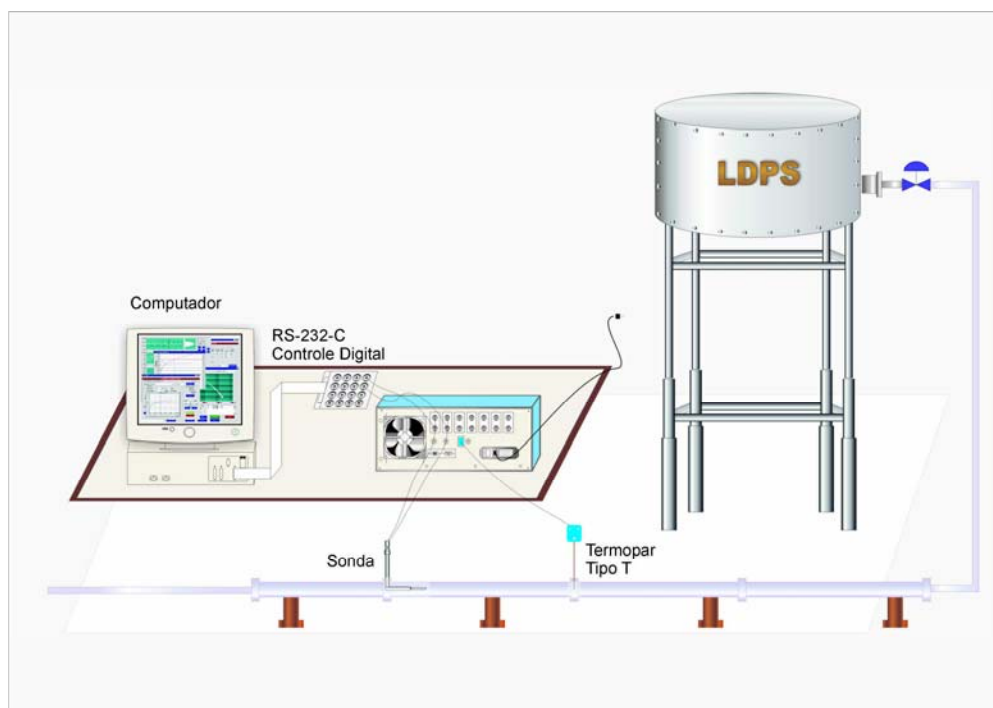


Figura 4.9 – Método de calibração utilizando escoamento gravitacional.

Contrariamente ao sistema anterior, cujo escoamento foi mantido pela ação de bombeamento, a ação da gravidade proposta neste experimento (Figura 4.9) diminuiu os efeitos de oscilação observados anteriormente, possibilitando, desta forma, um escoamento com velocidade constante. Entretanto, o não preenchimento do duto e o desperdício de água impediram a continuidade dos ensaios utilizando-se esta metodologia.

A seguir são apresentadas as etapas envolvidas no cálculo da velocidade máxima utilizada no IFA 300 no processo de calibração com o uso das metodologias anteriormente descritas:

- Aquisição de medidas experimentais de vazão, obtidas através de dados de massa x tempo;
- Cálculo da vazão volumétrica com base nos dados de vazão mássica;
- Determinação da velocidade média do escoamento;
- Cálculo do número de Reynolds com base na velocidade média do escoamento através da seguinte expressão:

$$Re = \frac{D \cdot \rho \cdot v}{\mu}, \quad (35)$$

onde:

D	diâmetro da tubulação, m
ρ	massa específica do fluido, kg/m ³
v	velocidade média de escoamento, m/s
μ	viscosidade, cP

Para escoamento completamente desenvolvido no regime laminar em um tubo circular de raio R, a distribuição da velocidade e a velocidade média são dadas por:

$$\frac{v_z}{v_{z,máx}} = 1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2, \quad (36)$$

$$\frac{\langle v_z \rangle}{v_{z,máx}} = \frac{1}{2} \quad (Re < 2100). \quad (37)$$

Por outro lado, para escoamento turbulento, a velocidade é flutuante e caótica em cada ponto no tubo. Pode-se determinar a velocidade em cada ponto empregando um tubo pitot. Este tipo de instrumento não é sensível a rápidas flutuações na velocidade, mas é sensível à velocidade média. A velocidade medida em função do tempo tem um componente z representado por \bar{v}_z , e sua forma e valor médio são dados pelas seguintes expressões:

$$\frac{\bar{v}_z}{v_{z,máx}} \approx \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{1/7} \quad (38)$$

e

$$\frac{\langle \bar{v}_z \rangle}{v_{z,máx}} \approx \frac{4}{5} \quad (10^4 < Re < 10^5) . \quad (39)$$

Desta forma, determina-se a velocidade máxima a ser utilizada pelo IFA 300 durante a calibração.

Outro método utilizado para calibração da sonda consistiu no uso de um canal, (Figuras 4.10 e 4.11) totalmente confeccionado em acrílico, que possibilitou o desenvolvimento do método de calibração, bem como a avaliação preliminar com base no princípio de funcionamento do anemômetro de fio quente.

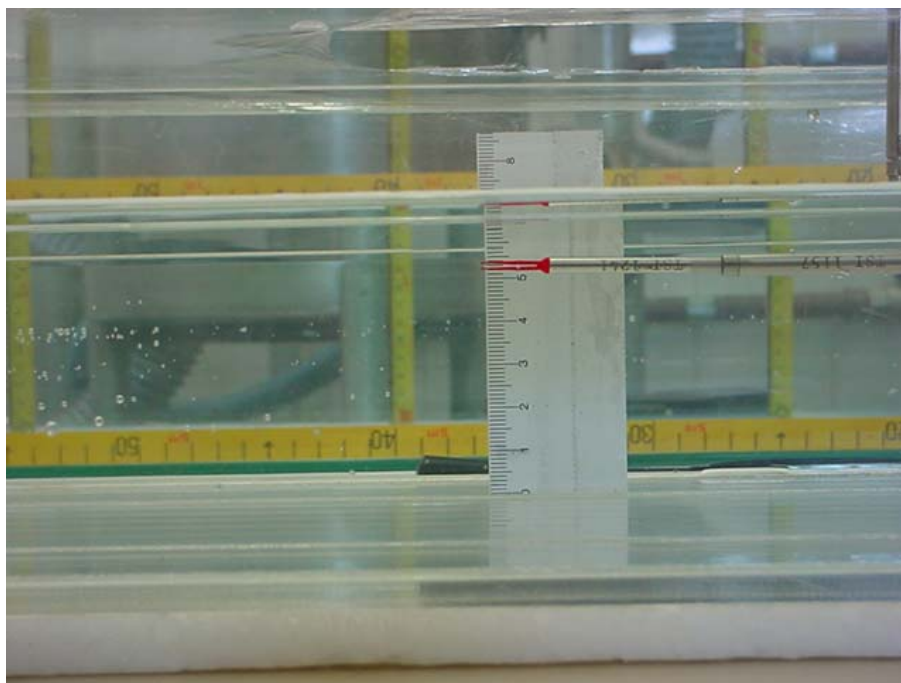


Figura 4.10 – Canal de calibração da sonda tipo X.

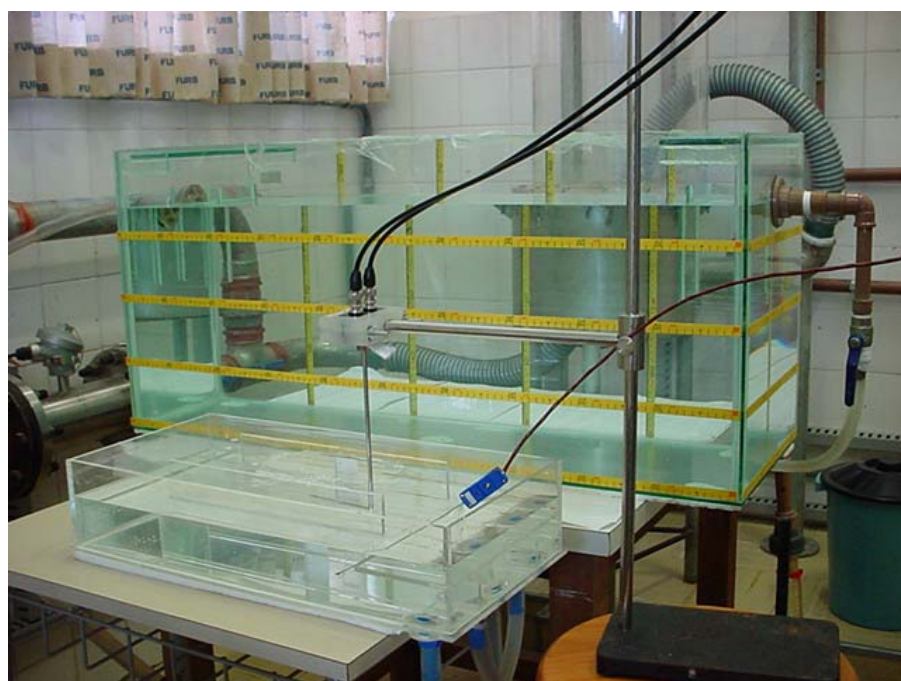


Figura 4.11 – Vista do canal de calibração associado ao reservatório.

4.4.1 Calibração da Sonda Tipo X no Canal de Calibração

Na etapa de calibração foi necessário determinar as coordenadas para o posicionamento da sonda durante a aquisição de velocidades locais. Com o intuito de auxiliar no trabalho, um programa, em linguagem Fortran, foi desenvolvido baseado no modelo matemático para a predição do perfil de velocidade em um canal aberto. Na execução do programa, as informações necessárias são: o comprimento do canal, a altura e a vazão de líquido. Com estas informações o programa é executado, fornecendo a estimativa das velocidades em cada altura do fluido no canal.

Concluída a etapa de aquisição das estimativas de velocidades, prossegue-se utilizando o programa IFA 300 para adquirir as velocidades para a calibração. Antes do entendimento dos princípios para a obtenção de uma curva de calibração é necessário entender o princípio de funcionamento desta técnica.

A sonda, que no caso em estudo é do tipo X (utilizada para a medição de dois componentes de velocidade: U e V), é introduzida no escoamento. Esta é conectada a um suporte contendo saídas para dois cabos coaxiais, um para cada componente de velocidade, conectados ao anemômetro. Do mesmo modo, outros dois cabos coaxiais são conectados a uma placa. Em seguida, um único cabo é conectado da placa para o computador, que contém uma placa A/D. O sinal é interpretado pelo software na forma gráfica que pode ser visualizado na tela do computador. Posiciona-se a sonda no ponto de interesse e faz-se a leitura do dado. Como a sonda está em contato com o líquido e a mesma opera a 67°C, tende a trocar calor com o meio. Isto gera um desequilíbrio, captado pelo sensor localizado na parte frontal da sonda. Este sinal, por sua vez, é enviado para a placa A/D. Para restaurar o equilíbrio na sonda, a placa A/D envia uma determinada voltagem relacionada com a troca de calor entre o fluido e a sonda. Assim, para cada ponto do fluido estabelece-se uma relação entre a voltagem e a velocidade do escoamento, o que torna possível a determinação da curva de calibração, que relaciona voltagem e velocidade.

Para a calibração da sonda empregada nos aparatos experimentais, o canal de calibração foi utilizado. Porém, destaca-se que para cada ensaio uma nova calibração é realizada, em virtude das diferenças de faixas de velocidade (mínima e máxima), bem como da temperatura do fluido.

Consolidada a metodologia de calibração, alguns ensaios experimentais foram realizados no aparato para a validação do método. Os primeiros dados experimentais são apresentados nas Tabelas 4.2 e 4.3 e nas Figuras 4.12 e 4.13, nos quais observa-se boa concordância entre os dados numéricos (obtidos do programa desenvolvido em linguagem Fortran) e os obtidos experimentalmente (empregando o anemômetro de fio quente). Estes resultados mostram a validade da metodologia desenvolvida para a calibração da sonda.

TABELA 4.2 – Comparação entre velocidades experimentais e numéricas ao longo do canal de calibração (I).

(Altura da Sonda = 15 mm da base do aparato)

Vazão (L/h)	Velocidade (m/s) (Experimental)	Velocidade (m/s) (Numérico)	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)
40	0,0101	0,0086	0,0015	14,85
100	0,0250	0,0212	0,0038	15,20
200	0,0494	0,0423	0,0071	14,37
300	0,0670	0,0633	0,0037	5,52

TABELA 4.3 – Comparação entre velocidades experimentais e numéricas ao longo do canal de calibração (II).

(Altura da Sonda = 15 mm da base do aparato)

Vazão (L/h)	Velocidade (m/s) (Numérico)	Velocidade (m/s) (Experimental)	Erro Absoluto	Erro Relativo (%)
40	0,00956	0,00865	0,00091	9,51
100	0,02230	0,02150	0,00080	3,59
200	0,04573	0,04276	0,00297	6,49
300	0,06464	0,06340	0,00124	1,92

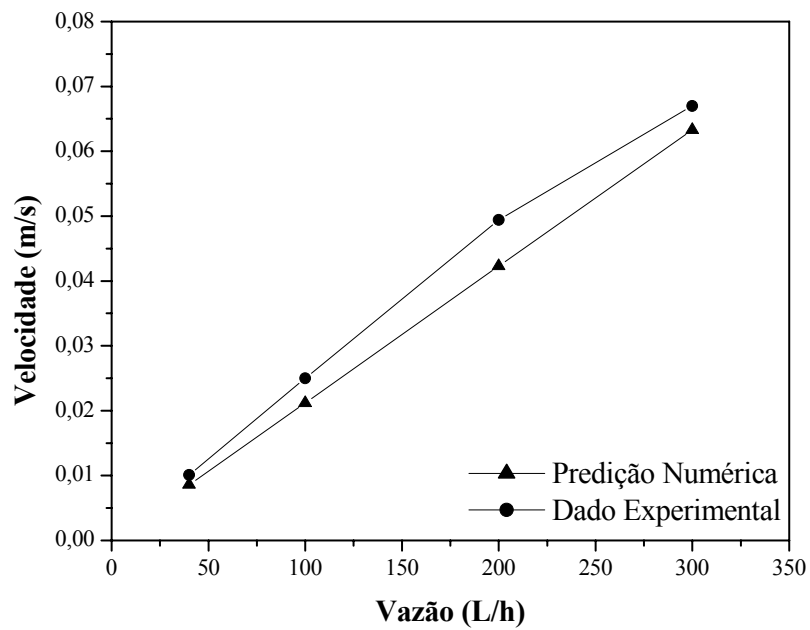


Figura 4.12 – Relação entre a velocidade experimental e numérica no canal de calibração (I).

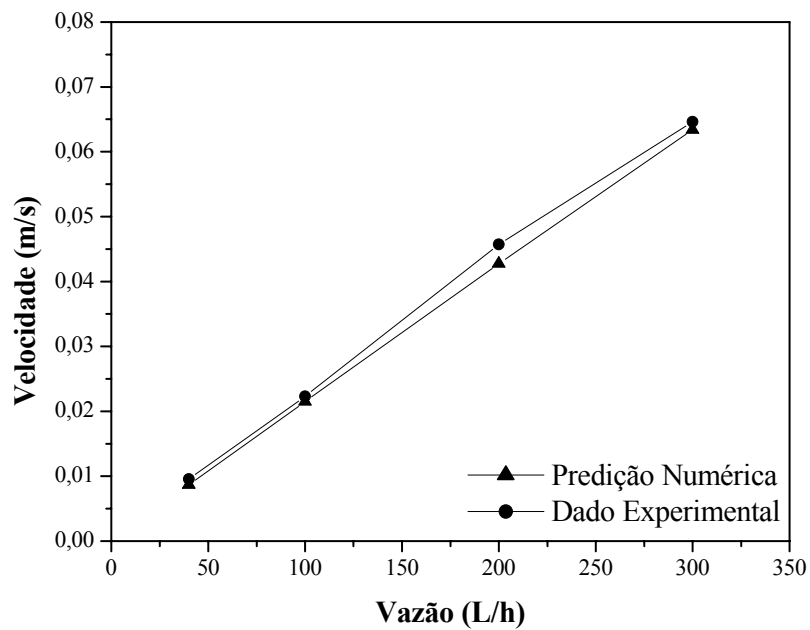


Figura 4.13 – Relação entre a velocidade experimental e numérica no canal de calibração (II).

Definida e validada a metodologia para a calibração da sonda anemométrica, prosseguiu-se com as atividades de caráter experimental visando a aquisição de dados no prato perfurado. Nesta direção, no Capítulo 5 são apresentados com detalhes os ensaios experimentais realizados, bem como os principais resultados obtidos.

CAPÍTULO 5

EXECUÇÃO E RESULTADOS DOS EXPERIMENTOS

5.1 INTRODUÇÃO

Com base nos estudos teóricos apresentados no Capítulo 4, deu-se início aos ensaios experimentais no Laboratório de Desenvolvimento de Processos da Universidade Regional de Blumenau. Assim, neste capítulo, são descritos os aparatos experimentais utilizados nos estudos do escoamento monofásico e bifásico com o anemômetro de fio quente empregando o sistema água e água-ar, respectivamente, bem como os principais resultados obtidos e que culminaram na consolidação da metodologia experimental para a validação dos resultados numéricos.

5.1.1 Escoamento Monofásico em um Reservatório Retangular

De forma a propor uma metodologia para o estudo do escoamento água-ar num estágio a frio de uma coluna de destilação, inicialmente foi realizada, de forma gradual e sistemática, a análise do escoamento a baixas velocidades em um reservatório retangular. Além da avaliação envolvendo o escoamento com superfície livre, os ensaios no reservatório retangular permitiram o aperfeiçoamento e a consolidação da metodologia de calibração e de obtenção de dados empregando o anemômetro de fio quente.

O reservatório consiste em um tanque totalmente construído em vidro e em cujo interior simula-se o escoamento monofásico empregando água como fluido de trabalho (Figura 5.1).

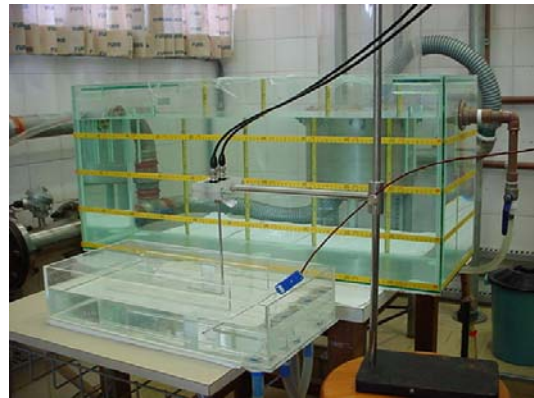


Figura 5.1 – Imagem do reservatório retangular e do estabilizador hidrodinâmico acoplado ao reservatório.

Neste aparato, a água flui do estabilizador hidrodinâmico acoplado ao reservatório para o interior do tanque através de uma chicana de entrada (“inlet”), e é direcionada para baixo e para as laterais do tanque. Em seguida, percorre o interior do tanque em direção a chicana de saída (“outlet”) retornando ao estabilizador hidrodinâmico, repetindo, desta forma, o trajeto. A medida da vazão de líquido (água) é feita por meio de um rotâmetro acoplado ao sistema.

Um esquema ilustrativo do princípio de funcionamento do aparato experimental é apresentado na Figura 5.2, que também apresenta as principais características do escoamento no interior do reservatório e que auxiliará na interpretação dos resultados obtidos experimentalmente.

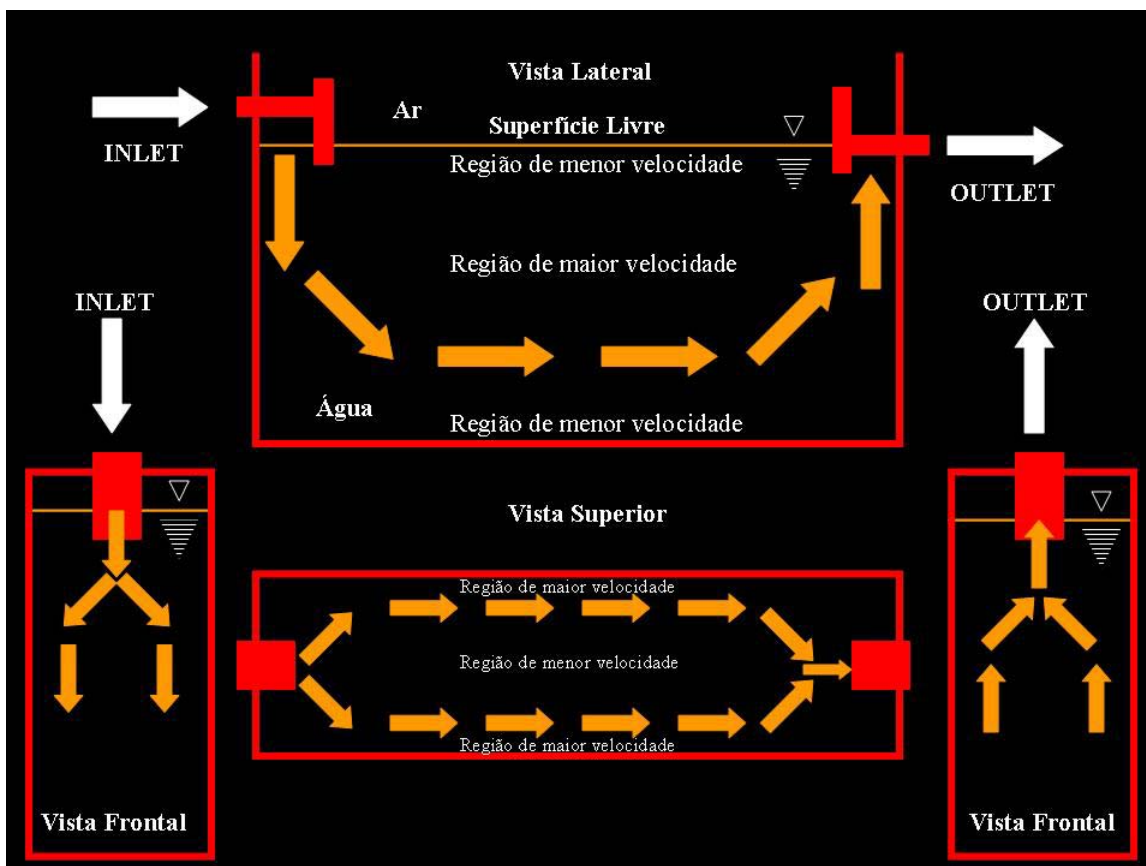


Figura 5.2 – Esquema ilustrativo do princípio de funcionamento do reservatório retangular.

As etapas envolvidas na realização dos experimentos no reservatório retangular incluíram:

- definição das vazões de líquido no interior do tanque;
- determinação das velocidades mínimas e máximas para cada vazão;
- calibração da sonda, no canal de calibração;
- aquisição de dados usando o software IFA 300;
- tratamento dos dados obtidos utilizando o IFA 300.

O primeiro ensaio no reservatório envolveu a aquisição de dados de velocidade média para um único plano localizado na região central do mesmo. Para tanto, definiu-se a vazão de líquido no interior do tanque e ajustou-se o valor no rotâmetro. A velocidade

média do escoamento é obtida dividindo-se a vazão pela área do escoamento. Para escoamento no regime laminar completamente desenvolvido, sabe-se que:

$$v_{m\acute{a}x} = 2 \cdot v_{med} . \quad (40)$$

Para a calibração, no mínimo 20 a 30 valores de velocidade são necessários para reduzir as incertezas. Assim, o programa em linguagem Fortran que simula o escoamento no interior de um canal (similar ao utilizado na calibração) foi empregado. A partir deste, as estimativas das velocidades na faixa de operação (0 a 3,901948E-3 m/s) foram obtidas. De posse das informações necessárias, deu-se início a etapa de calibração utilizando o canal de calibração acoplado ao reservatório. Inicialmente, foram medidas as resistências dos cabos e as resistências da sonda para os dois sensores e efetuada a calibração. A calibração foi realizada posicionando a sonda nos respectivos níveis pré-fixados através das velocidades teóricas obtidas no programa em linguagem Fortran, para cada vazão selecionada. Para cada nível de posicionamento da sonda, uma velocidade teórica foi fornecida ao programa IFA 300, o que ao final da calibração gera a curva de calibração (voltagem versus velocidade do escoamento). Concluída a fase de calibração, seguiu-se para a etapa de aquisição de dados. Para a aquisição de dados no reservatório, uma malha similar à mostrada na Figura 5.3 foi construída e fixada na parte frontal do reator anaeróbio, cujos pontos centrais em cada célula são a referência para o posicionamento manual da sonda. As informações em parênteses representam as distâncias, em centímetros, para as coordenadas x e y no reservatório.

• 24 (30,9;33,3)	• 23 (24,1;33,3)		• 22 (10,5;33,3)	• 21 (3,6;33,3)
• 20 (30,9;25,8)	• 19 (24,1;25,8)	• 18 (17,4;25,8)	• 17 (10,4;25,8)	• 16 (3,7;25,8)
• 15 (30,9;18,5)	• 14 (24,1;18,5)	• 13 (17,3;18,5)	• 12 (10,4;18,5)	• 11 (3,6;18,5)
• 10 (30,9;11,1)	• 09 (24,1;11,1)	• 08 (17,4;11,1)	• 07 (10,4;11,1)	• 06 (3,5;11,1)
• 05 (30,9;3,7)	• 04 (24,1;3,7)	• 03 (17,4;3,7)	• 02 (10,4;3,7)	• 01 (3,5;3,7)

Figura 5.3 – Coordenadas para posicionamento da sonda.

Com base na malha fixada na região frontal do reservatório retangular, a sonda anemométrica foi posicionada em 24 diferentes pontos. Para cada coordenada, cerca de 60 dados de velocidade foram coletados, analisados e tratados estatisticamente.

As Figuras 5.4 e 5.5 apresentam o perfil de velocidade na direção x para baixas vazões de líquido (40 L/h) e que caracteriza o escoamento no centro do reservatório. O comportamento obtido mostra-se compatível com as observações experimentais ilustradas na Figura 5.2, isto é, o aumento da velocidade do fluido a uma altura considerável da base do tanque e uma redução significativa na velocidade da superfície livre. Na região próxima à base do tanque, observa-se, também, uma redução na velocidade do fluido, porém não tão acentuada quanto àquela observada na superfície livre.

Este comportamento, observado no perfil de velocidade da fase líquida, reflete as reais características de funcionamento do aparato no que diz respeito ao escoamento da fase líquida, esquematizado na Figura 5.2, e mostra a validade da metodologia desenvolvida e adotada para a obtenção dos dados de velocidade através da técnica de anemometria térmica.

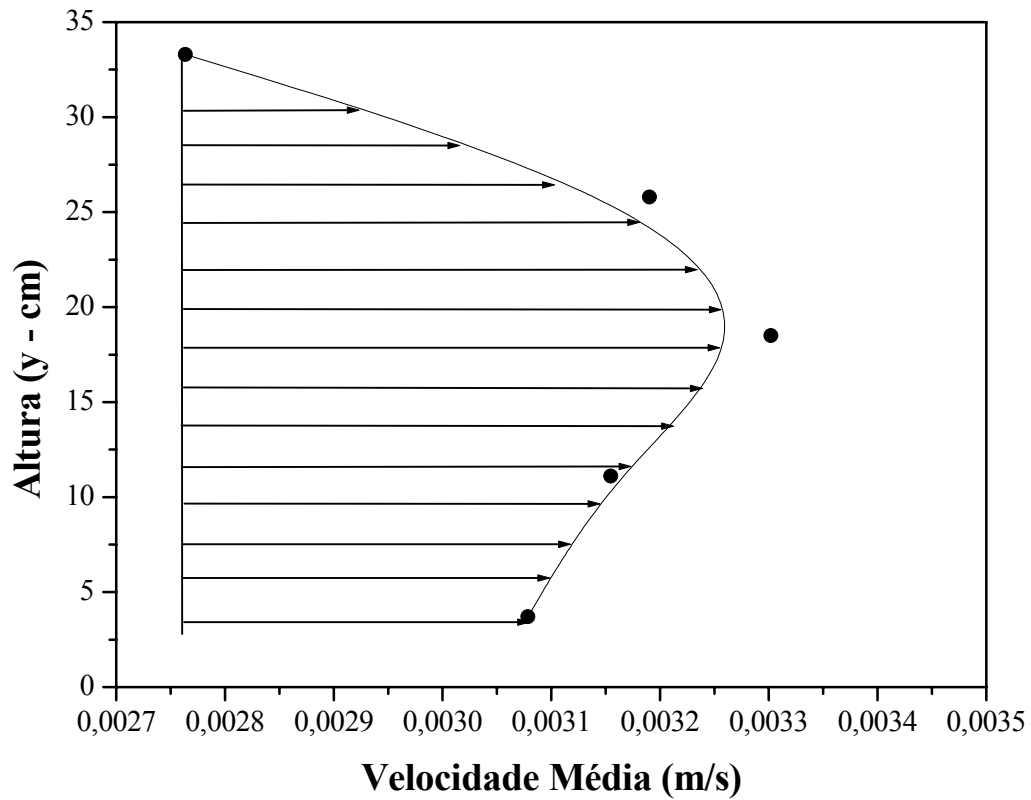


Figura 5.4 – Perfil de velocidade no centro do reservatório retangular (I).

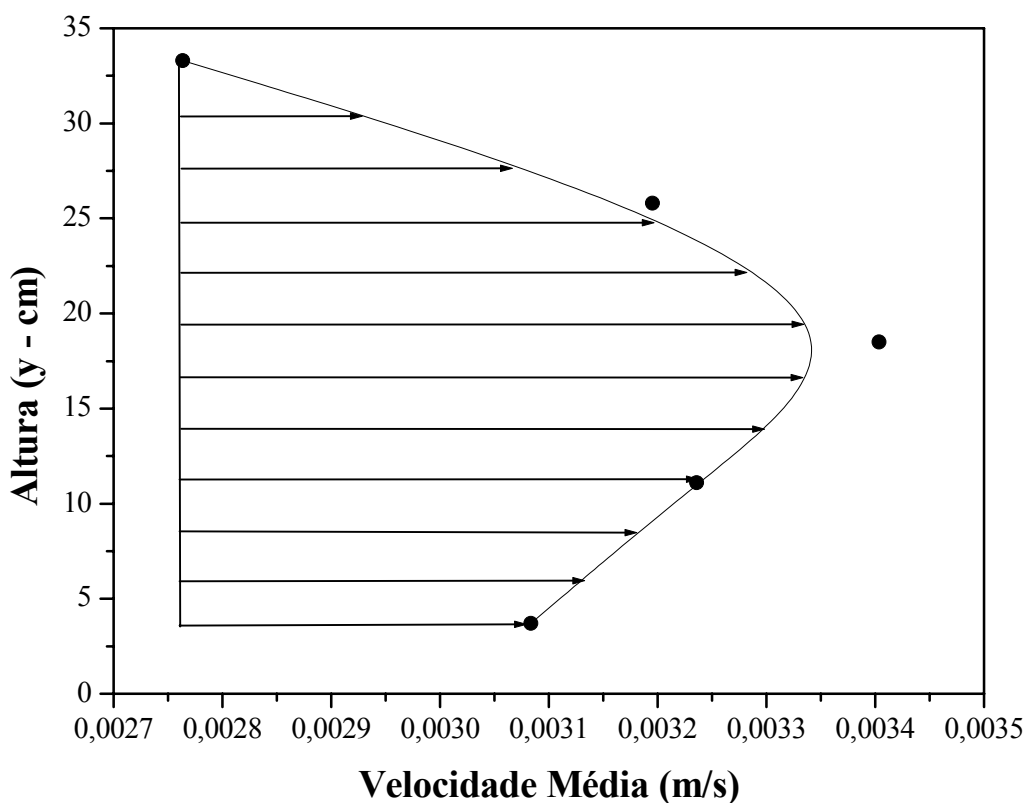


Figura 5.5 – Perfil de velocidade no centro do reservatório retangular (II).

Dando continuidade ao estudo do escoamento monofásico no interior do reservatório retangular, outros ensaios foram realizados com diferentes vazões de líquido. Para os resultados presentes nas Figuras 5.6 e 5.7, as vazões de água foram 300 L/h e 400 L/h, respectivamente, e seus efeitos são significativos. Ressalta-se que os resultados experimentais foram tratados estatisticamente e transformados nos mapas de velocidade apresentados nas figuras a seguir.

Uma análise detalhada dos mapas de velocidade demonstra similaridade de comportamento entre os resultados obtidos para as diferentes vazões de líquido em cada plano. Verifica-se um aumento da velocidade próximo às paredes do reservatório na região de entrada, que torna-se significativo para a vazão de 400 L/h, de acordo com as indicações presentes nas Figuras 5.6 e 5.7.

No plano central, observa-se uma redução mais significativa na velocidade, principalmente na região próxima à base do tanque retangular, em conformidade com o comportamento demonstrado nas Figuras 5.4 e 5.5.

Finalmente, no plano próximo à saída verifica-se uma similaridade no comportamento da velocidade em ambas as vazões, isto é, velocidades reduzidas na base do tanque e elevadas na região próxima ao topo do tanque (região de saída do líquido), conforme ilustra a Figura 5.2.

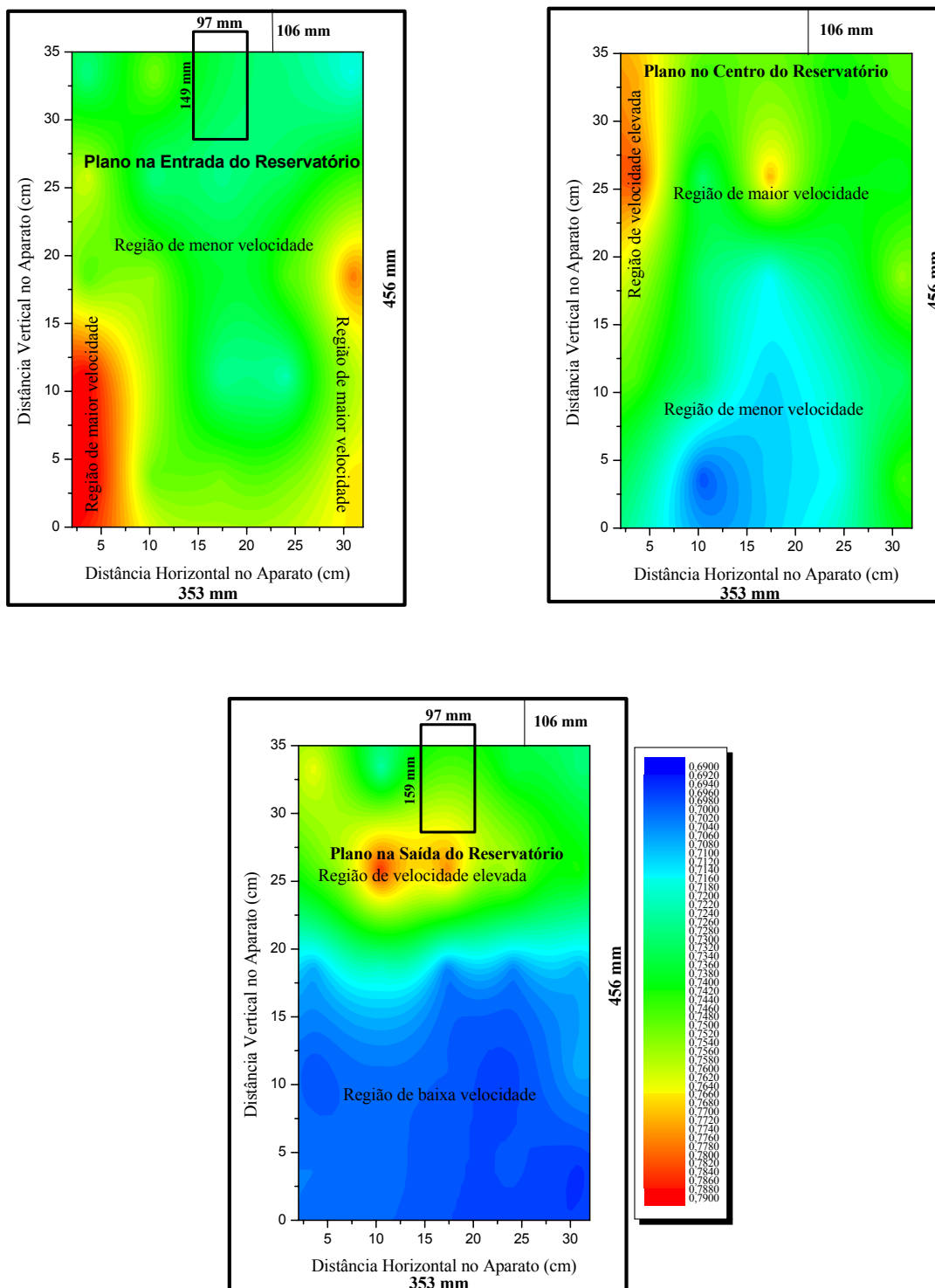


Figura 5.6 – Mapas experimentais de velocidade na direção x (vazão volumétrica de líquido: 300 L/h.

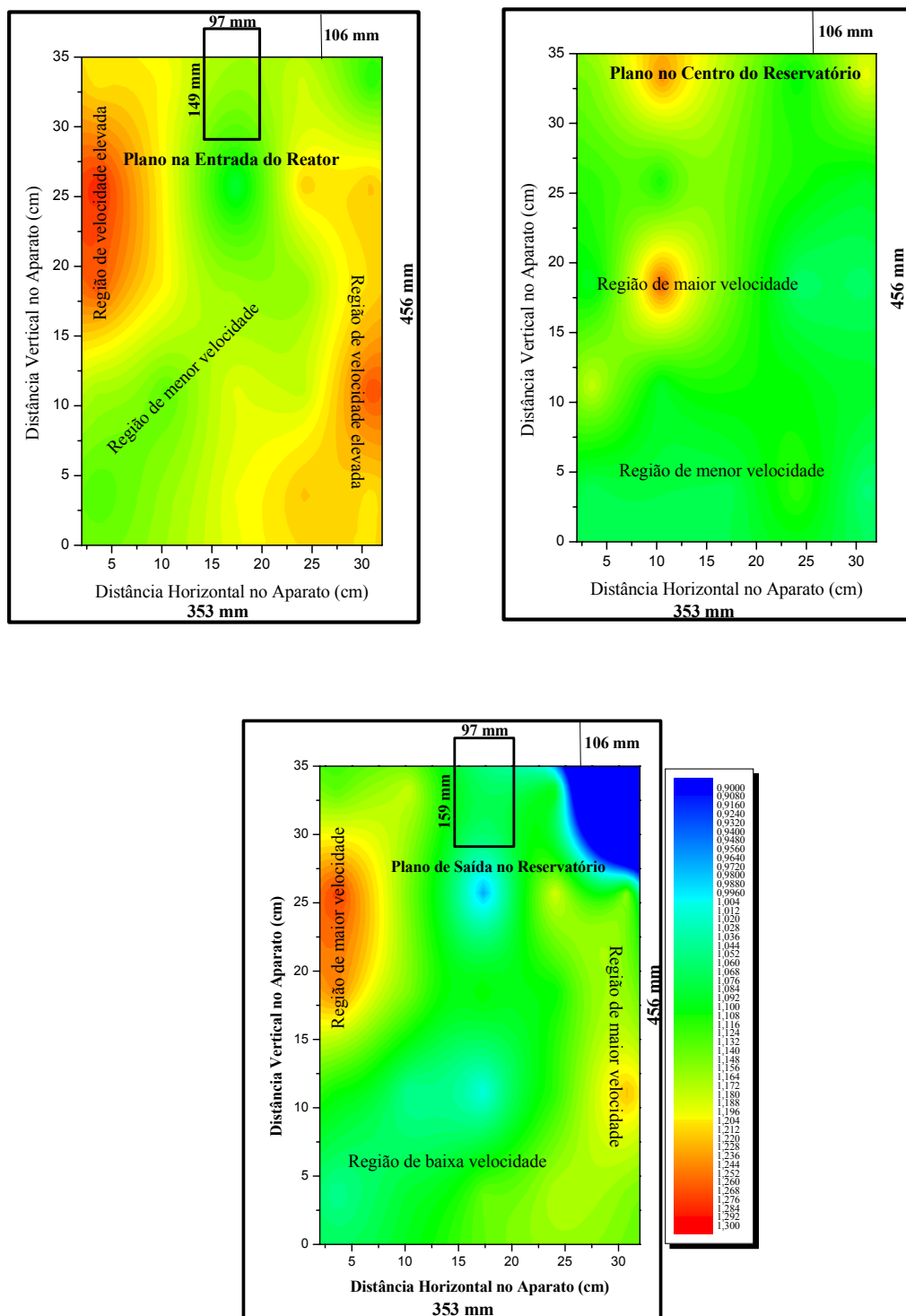


Figure 5.7 – Mapas experimentais de velocidade na direção x (vazão volumétrica de líquido: 400 L/h).

5.2 ENSAIOS EXPERIMENTAIS NO PRATO PERFURADO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO

Com base nos conhecimentos construídos nos estudos experimentais, que possibilitaram também o desenvolvimento e a aplicação da metodologia de calibração de sondas de anemometria térmica para o escoamento da fase líquida, procedeu-se aos estudos do escoamento bifásico água-ar num estágio a frio de uma coluna de destilação.

De forma a posicionar a sonda em pontos conhecidos, desenvolveu-se uma malha (Figura 5.8), implementada posteriormente na superfície do prato. Em cada ensaio a sonda foi posicionada nos pontos pré-definidos sobre o prato a uma altura de 10 mm em relação à superfície do prato (Figura 5.9). Desta forma, foi possível realizar ensaios experimentais que visaram a determinação das velocidades pontuais da fase líquida em 25 pontos localizados sobre o prato no interior da coluna de destilação.

Após a coleta dos dados de velocidade, os mesmos foram analisados e tratados estatisticamente empregando o software que acompanha o anemômetro de fio quente.

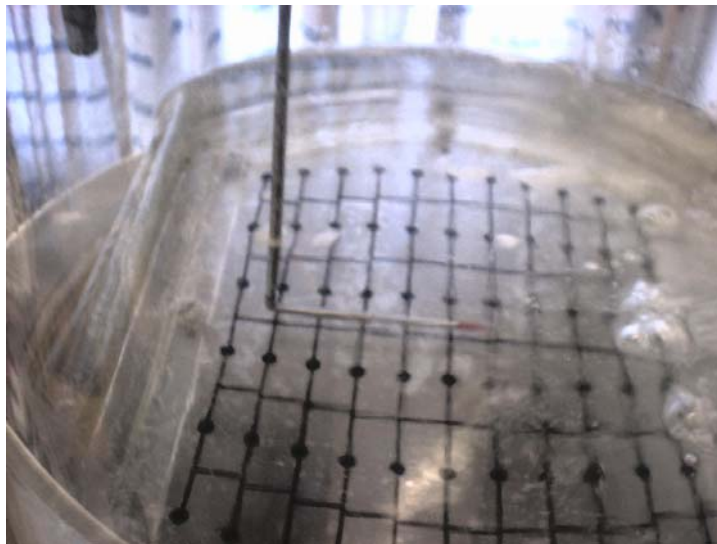


Figura 5.8 – Malha para o posicionamento da sonda.

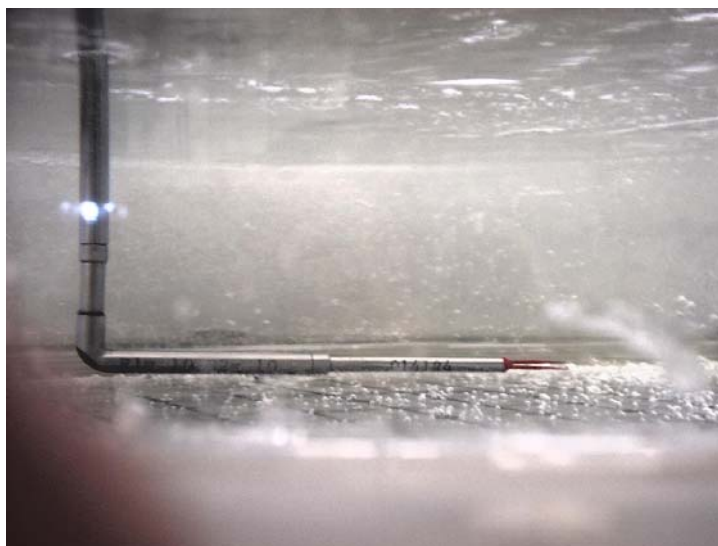
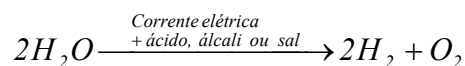


Figura 5.9 – Posicionamento da sonda no prato teste.

A avaliação do princípio de funcionamento do anemômetro de fio quente, neste aparato experimental, possibilitou a identificação de parâmetros que afetam a aquisição dos dados experimentais, e que demandou a avaliação cuidadosa da metodologia de forma a garantir a aquisição de dados confiáveis. Tais interferências estão relacionadas à formação de bolhas junto ao elemento sensível (sensor), e a variação da temperatura do fluido. Os aspectos que contribuíram para a adequada implementação da metodologia estão descritos a seguir.

5.2.1 Formação de Bolhas no Sensor

Um dos principais problemas identificados para a aquisição de dados sobre um prato de destilação foi o surgimento de pequenas bolhas de ar na parte frontal da sonda. A busca por soluções levou a seguinte conclusão: se a água utilizada contiver uma pequena porção de um ácido, álcali ou sal, a mesma pode ser facilmente decomposta por uma corrente elétrica contínua, formando hidrogênio e oxigênio gasosos. A este fenômeno dá-se o nome de eletrólise:



Assim, a eletrólise da água foi a causa da freqüente formação de bolhas sobre o elemento sensível da sonda, uma vez que a água utilizada nos ensaios era proveniente do sistema de abastecimento público, a qual contém uma quantidade de íons dissolvidos, que facilitam a ocorrência do fenômeno da eletrólise. Constatou-se, também, que a formação de bolhas era facilitada se certa quantidade de ar encontrasse dissolvida na água. Tal fenômeno resulta na redução de calor transferido e no desvio decrescente da calibração (BRUUN, 1995), o que ocasiona desvios significativos nos dados obtidos. Como alternativa, nos ensaios subseqüentes, empregou-se água destilada/deionizada seguindo, desta forma, as informações presentes na literatura corrente.

5.2.2 Influência do Aumento da Temperatura da Água

Durante a realização dos ensaios constatou-se, também, o aumento significativo da temperatura do fluido na ordem de 6°C. De acordo com a literatura, o aumento da temperatura do fluido acarreta grandes erros na velocidade medida. Por exemplo, em 3 m/s o erro relativo introduzido na velocidade medida é de aproximadamente 1,5% por grau Celsius (LEMIEUX e OOSTHUIZEN, 1984). Um dos métodos para contornar o problema consiste em calibrar as sondas separadamente em todas as faixas de temperatura em investigação. Entretanto, quando um grande número de medidas é necessário, o processo de recalibração torna-se inviável. Um método prático adotado foi a construção e a implementação de um sistema de troca térmica no interior do tanque de armazenamento de água proveniente da coluna de destilação. Tal sistema consiste em uma serpentina conectada a um banho termostático que mantém a temperatura do fluido constante e na faixa de operação desejável.

Os problemas identificados foram solucionados e deu-se continuidade a coleta de dados experimentais na coluna de destilação, os quais são apresentados e discutidos a seguir.

5.3 RESULTADOS OBTIDOS

As atividades experimentais no prato da coluna de destilação foram realizadas num período de aproximadamente 7 meses e consistiram na análise qualitativa do escoamento bifásico no interior da coluna de destilação e na obtenção dos perfis de velocidade na superfície do prato.

No que tange as observações visuais do escoamento na superfície do prato, estas permitiram a identificação de quatro padrões de escoamento, assim denominados:

- regime borbulhante;
- regime de espuma I;
- regime de espuma II;
- regime “spray”.

Estes regimes de escoamento foram observados e caracterizados à medida que a vazão da fase gás (ar) era gradualmente incrementada. Partindo de zero e aumentando-se a vazão da fase gás, observou-se a formação de uma dispersão caracterizada por um aglomerado de bolhas, com uma faixa limitada de tamanho, a qual foi denominada de regime borbulhante. O limite do regime borbulhante é a vazão da fase gás, sendo que a altas vazões, as bolhas começaram a se deformar, formando estruturas poliédricas, caracterizando o regime de espuma I. O topo da espuma, embora um pouco móvel, permanecia bem definido e sua altura podia ser facilmente medida. Aumentando-se ainda mais a vazão da fase gás, ocorria a quebra destas estruturas bem definidas, com a formação de pequenas bolhas, com uma maior distribuição de tamanhos. Nesta situação, o topo da dispersão apresentava-se bastante móvel e a sua altura era dificilmente quantificada. Até este ponto, a fase gás encontrava-se dispersa, em várias formas, na fase líquida, considerada a fase contínua. Entretanto, em vazões maiores da fase gás, o regime predominante foi a da fase líquida dispersa na fase gás, considerada agora a fase contínua. Este último padrão de escoamento foi caracterizado como regime “spray”.

De acordo com BAKOWSKI (1967), as taxas de transferência de massa e a eficiência de separação estão estritamente relacionadas com os regimes de escoamento do fluido sobre o prato. Por exemplo, a baixas taxas da fase vapor, apenas acima da velocidade mínima para que não ocorra a drenagem do líquido pelos orifícios, o vapor passa através da fase líquida na forma de bolhas separadas. Infelizmente baixas taxas da fase vapor não são interessantes do ponto de vista econômico, uma vez que para atingir a capacidade de separação requerida, uma coluna com maior diâmetro é necessária.

A Figura 5.10 mostra a representação dos diferentes padrões de escoamento observados visualmente durante a operação da coluna de destilação.

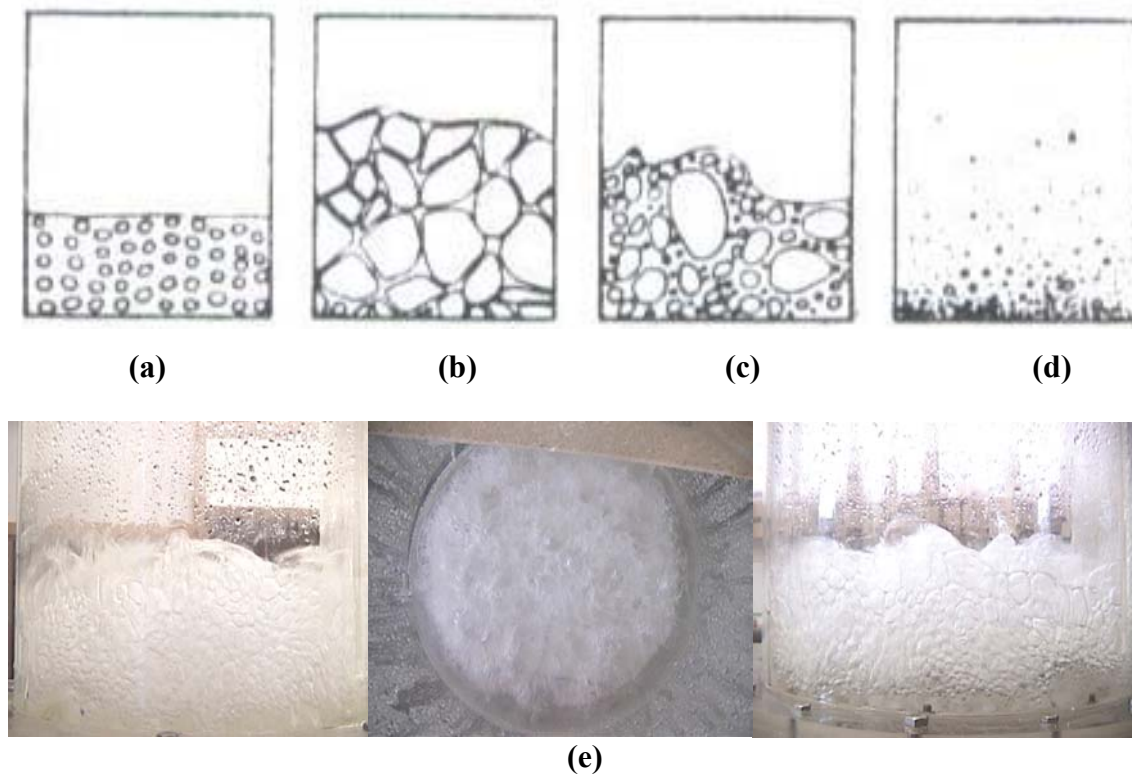


Figura 5.10 – Padrões de escoamento: (a) regime borbulhante; (b) regime de espuma I; (c) regime de espuma II; (d) regime “spray”; (e) vista do prato perfurado com escoamento das fases no regime de espuma II.

Identificados e caracterizados os diferentes padrões de escoamento sobre a superfície do prato, a próxima etapa consistiu na análise dos perfis de velocidade empregando a técnica de anemometria térmica.

Nos ensaios preliminares, concluiu-se que o emprego da técnica de anemometria térmica com a sonda tipo X utilizada, está limitado à aquisição de dados para uma única fase. A presença das bolhas interfere na obtenção dos sinais e, conseqüentemente, na aquisição de dados realísticos, conforme discutido anteriormente.

Entretanto, com o objetivo de validar a metodologia desenvolvida, foram realizadas adaptações no aparato experimental, visando tornar o escoamento monofásico (somente o escoamento da fase líquida). Para tanto, procedeu-se a troca de um dos pratos perfurados, por outro não perfurado, sobre o qual foram realizados os experimentos.

Com base neste arranjo experimental foram realizados ensaios empregando vazões da fase líquida de 5, 10 e 15 L/min, lidos através do medidor de vazão tipo turbina, devidamente calibrado, com a sonda posicionada a 10 mm da superfície do prato. Salienta-se que devido às dificuldades oriundas do posicionamento da sonda em toda a área do prato, somente uma região do prato foi mapeada.

Nesta direção, a seguir são apresentados os principais resultados obtidos nos ensaios no prato da coluna de destilação.

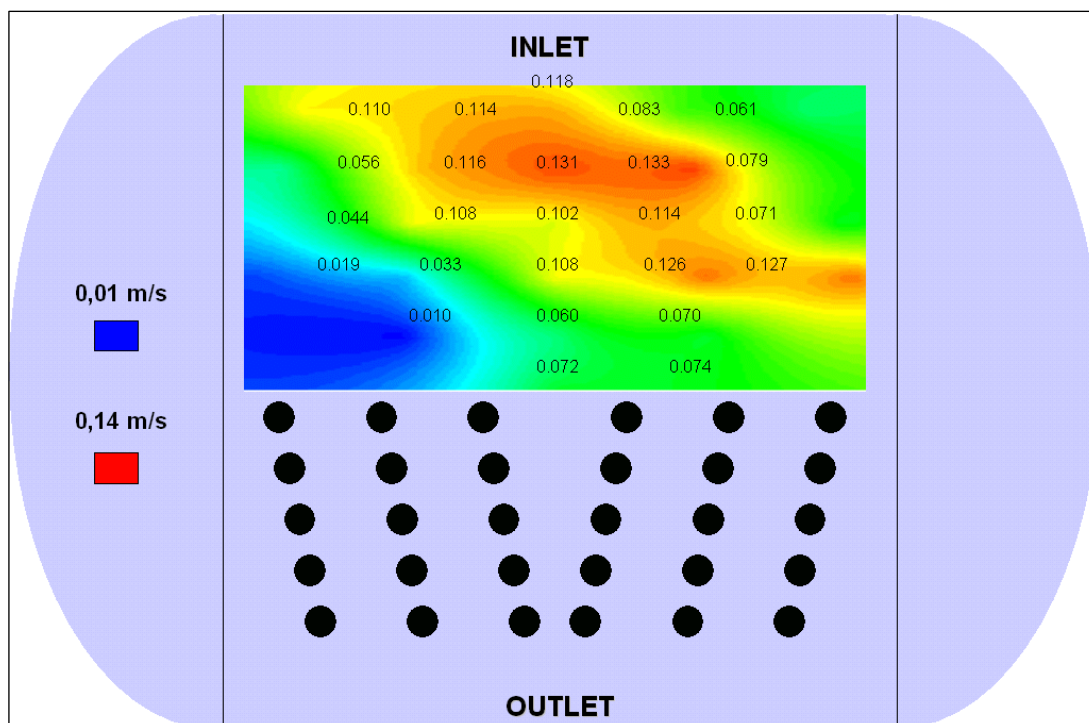


Figura 5.11 – Campo de velocidade para a vazão de líquido de 5 L/min.

Na Figura 5.11 observa-se a existência de maiores velocidades de escoamento da fase líquida na região central do prato. Soma-se a isto o fato de não haver uma uniformidade nas velocidades na região de entrada. Nota-se que a interação da fase líquida com a superfície do prato proporciona variações significativas na velocidade do escoamento. Velocidades menores são observadas nas regiões laterais do prato decorrentes, principalmente, dos fenômenos de circulação, também identificados na avaliação numérica.

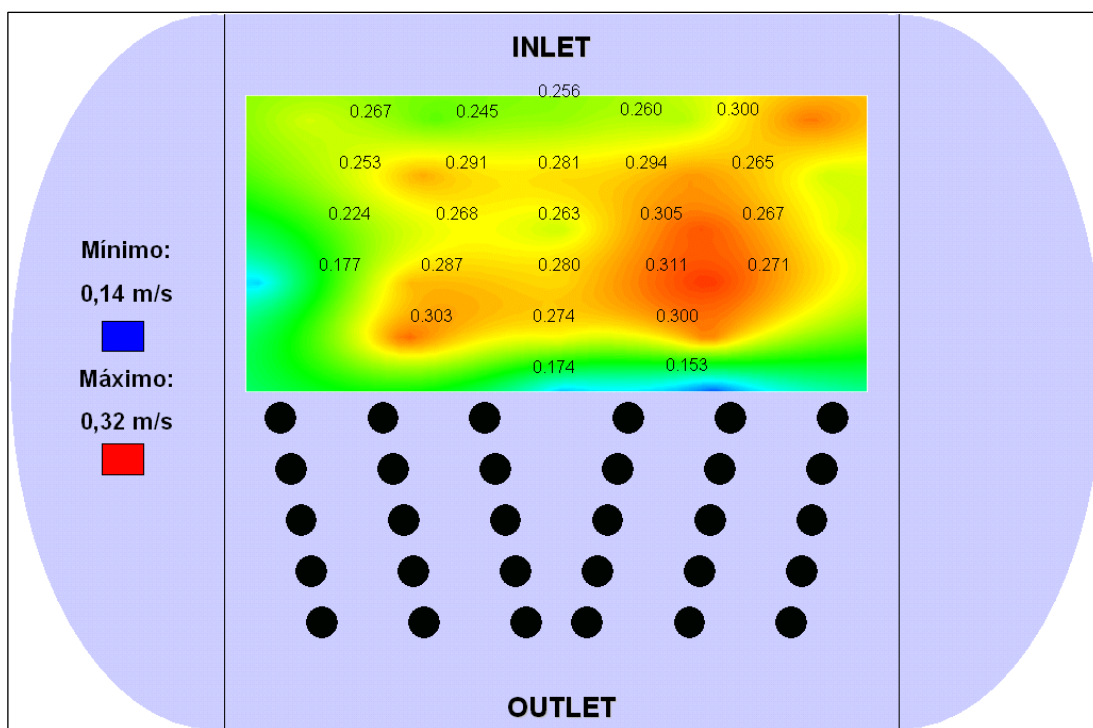


Figura 5.12 – Campo de velocidade para a vazão de líquido de 10 L/min.

Ao contrário da Figura 5.11, na Figura 5.12 identifica-se uma homogeneidade das velocidades na entrada do prato decorrentes do aumento na vazão de líquido. Novamente observa-se um aumento da velocidade na região central do prato, afastada das laterais, e uma região de baixas velocidades devido ao fenômeno da circulação, desta vez, mais afastada da região de entrada.

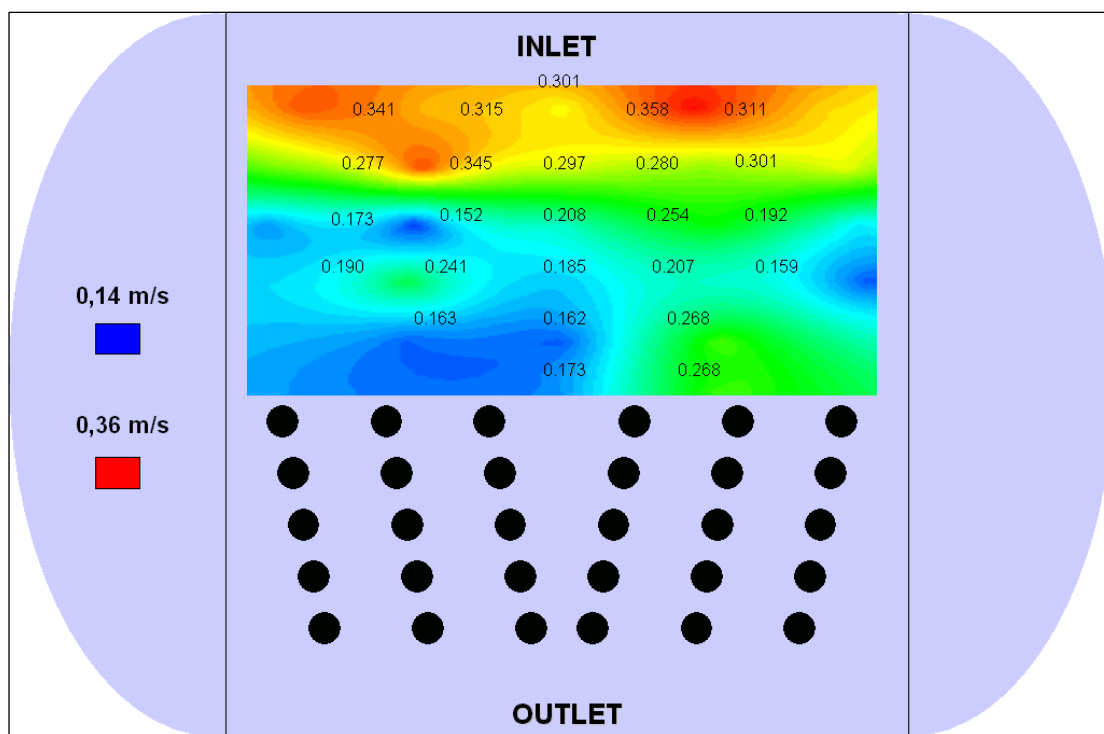


Figura 5.13 – Campo de velocidade para a vazão de líquido de 15 L/min.

Na análise da Figura 5.13, a região de circulação se desloca para as laterais do prato, porém com menor intensidade, e afastada da entrada, em virtude do aumento na vazão de líquido e, conseqüentemente, do aumento na intensidade de turbulência que, conforme identificado na avaliação numérica, reduz o fenômeno da circulação e garante uma homogeneidade do escoamento.

O resultado dos perfis experimentais de velocidade mostra que as velocidades da fase líquida no prato não são uniformes, o que limita a aplicação do conceito de mistura perfeita proposto nos modelos de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio. As vazões de entrada do líquido, a configuração do prato e os padrões de escoamento são parâmetros que devem estar diretamente associados na análise da medida do desempenho das colunas de destilação, uma vez que, quando as taxas de escoamento da fase líquida são pequenas, a área de borbulhamento do prato não é apreciavelmente diferente da do prato seco, conforme descrito por BARROS (1992), e a perda de carga passa a ser função da vazão de vapor pelas perfurações distribuídas ao longo do prato. Segundo o autor, em altas

taxas de escoamento da fase líquida, a área de transferência de massa aumenta em função do aumento da crista do líquido, parâmetros que impulsionam o aumento das taxas de transferência de massa e de calor.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

6.1 CONCLUSÕES

Com base nos resultados numéricos e experimentais obtidos, e considerando as diversas análises realizadas, conclui-se que:

1. A metodologia numérica, desenvolvida e baseada em um estudo gradual e sistemático do escoamento líquido-gás em diferentes situações físicas, permitiu a análise de estratégias de solução de modelos e métodos em CFD, além do desenvolvimento de um modelo homogêneo capaz de prever o escoamento líquido-vapor, em nível microscópico, em um prato perfurado de uma coluna de destilação;
2. O modelo homogêneo, utilizado na modelagem matemática do escoamento em um módulo experimental de hidráulica, foi capaz de representar a dinâmica do escoamento em superfícies livres. A vantagem deste modelo é que este reduz o número de equações algébricas não-lineares no domínio computacional e continua representando, adequadamente, o comportamento do escoamento líquido-gás quando comparado ao modelo heterogêneo, que é muito mais robusto e demanda um grande número de equações constitutivas;
3. Para baixas vazões da fase vapor, a região de circulação encontra-se próxima à entrada de líquida no prato;

4. Apesar dos efeitos da fase vapor, no escoamento da fase líquida estarem incorporados no modelo bidimensional, este não é capaz de prever as pequenas zonas de circulação que aparecem nos pratos perfurados. Soma-se a isto o fato de que a turbulência é um fenômeno essencialmente tridimensional, o que limita a proposição de um modelo bidimensional. Por outro lado, o modelo 3-D prevê as zonas de circulação de modo mais realístico;
5. O algoritmo de alisamento de superfície mostra eficácia em escoamentos com superfície livre, entretanto, produz efeitos negativos em escoamentos com borbulhamento, conforme observado na avaliação do escoamento líquido-gás em uma coluna de bolhas;
6. Os efeitos do borbulhamento promovem um aumento da energia cinética turbulenta e parece ser um dos efeitos mais importantes no estudo do escoamento líquido-vapor em um prato de uma coluna de destilação;
7. A metodologia experimental desenvolvida, e que consistiu no projeto e construção de um aparato experimental que simula fisicamente o escoamento líquido-vapor em um prato de uma coluna de destilação, e na definição e implementação da técnica de anemometria térmica para a aquisição de informações microscópicas, mostrou-se válida, visto que permitiu a caracterização realística do escoamento tanto em um tanque retangular. Entretanto, a técnica apresentou limitação quando da aplicação em escoamento bifásico;
8. Há a ocorrência de diferentes padrões de escoamento no interior de uma coluna de destilação, de acordo com a vazão da fase vapor e da geometria do prato;
9. Não é possível fazer uma descrição de operação do prato a partir de um único modelo matemático. É necessário primeiro determinar qual padrão de escoamento está ocorrendo e, então, descrever apropriadamente as características fluidodinâmicas;

10. O comportamento do escoamento na superfície do prato é regular e previsível a taxas muito baixas da fase vapor, tornando-se menos regular à medida que a velocidade da fase vapor é aumentada, tornando-se o regime altamente turbulento;

11. O padrão de escoamento denominado “spray” mostra-se dominado pela energia cinética da fase vapor resultante de sua passagem pelos orifícios do prato, e nos regimes borbulhante, espuma I e espuma II, o escoamento é dominado pela energia cinética da fase líquida que cruza o prato;

12. O escoamento não é uniforme na superfície do prato perfurado. Existem regiões com maiores valores e com baixos valores deste parâmetro. A diferença destes valores é decorrente dos fenômenos de circulação presentes no escoamento, principalmente quando considera-se a existência da represa de entrada e do vertedor de saída como obstáculos que afetam, diretamente, o comportamento do fluido;

13. Para o fluxo cruzado das duas fases sobre um prato de destilação, a fase vapor, em contato com a fase líquida fluindo horizontalmente, ganha uma energia cinética na direção do fluxo de líquido. Isto está consistente com o fato de que o caminho do movimento da bolha se curva, em alguma extensão, na direção do fluxo de líquido. Consequentemente, o vapor exerce uma força resistiva sobre a fase líquida.

As principais publicações decorrentes das atividades conjuntas de experimentação física e de experimentação numérica são listadas a seguir:

1. SOARES, C.; NORILER, D.; WOLF-MACIEL, M. R.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F. Verification and validation in CFD for a three-dimensional transient gas-liquid flow (a ser publicado)

2. NORILER, D.; SOARES, C.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; WOLF-MACIEL, M. R. Computational fluid dynamic applied to diffusional separation process. In: 16th International Congress of Chemical and Process Engineering. Prague – Czech Republic, 2004.
3. SOARES, C.; NORILER, D.; WOLF-MACIEL, M. R.; VOSS, M. L.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F. Verification and validation in CFD: three-dimensional and transient model for multiphase flow. In: 16th International Congress of Chemical and Process Engineering, Prague – Czech Republic, 2004.
4. SOARES, C.; NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; WOLF-MACIEL, M. R. Computational fluid dynamics for simulation of gas-liquid flow on a sieve plate: model comparisons. In: Distillation & Absorption 2002 – 634th Event of the European Federation of Chemical Engineering. Baden-Baden – Alemanha, 2002.
5. SOARES, C.; NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; WOLF-MACIEL, M. R. Numerical simulation of liquid flow on a distillation tray. In: Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering and Brazilian Congress on Computational Mechanics. Campinas – São Paulo, 2001.

6.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Devido à complexidade do escoamento em um prato de destilação, dificilmente um único estudo experimental sobre o assunto poderia abordar a totalidade de suas múltiplas características. Dessa forma, o presente trabalho concentrou-se no desenvolvimento de uma metodologia para a avaliação numérica e experimental do escoamento líquido-vapor em colunas de destilação. No decorrer deste trabalho, inúmeros questionamentos surgiram, os quais poderiam ser investigados como uma extensão do estudo desenvolvido. Os mais pertinentes são apresentados a seguir:

1. Continuação dos experimentos no aparato experimental empregando a técnica de anemometria térmica associada a outra técnica de medida de parâmetros microscópicos para a avaliação do escoamento bifásico água-ar e a obtenção dos campos de velocidade da fase líquida e da fase gás em diferentes alturas com relação à superfície do prato;
2. Implementação da unidade a frio para a aquisição de parâmetros macroscópicos do escoamento água-ar no prato de destilação, como a altura de líquido claro e perda de carga;
3. Execução de experimentos para a obtenção de outros parâmetros microscópicos por anemometria térmica e por sensores e transdutores de pressão, além de campos de velocidade para a avaliação de desempenho de colunas de destilação, como campos de frações volumétricas das fases e de pressão;
4. Estudo da influência dos modelos de turbulência para diversos tipos de sistemas, visto que em sistemas líquido-gás a influência dos modelos de turbulência não é bem conhecida e pode ser importante, pois o fenômeno da turbulência é, por essência, tridimensional e anisotrópico. Na mesma linha da turbulência, estão os modelos empíricos para a força de arraste e para o coeficiente de arraste, apresentados na literatura, mas sem uma análise comparativa rigorosa para se determinar o modelo que melhor representa o arraste entre o líquido e o vapor em pratos de destilação;

5. Desenvolvimento de estudos de experimentação numérica de validação qualitativa e de verificação de modelos e métodos para o escoamento líquido-vapor não-isotérmico e com transferência de massa, ampliando as fronteiras da modelagem multifásica.

REFERÊNCIAS

ABEL, R.; RESCH, F. J. A method for the analysis of hot film anemometer signals in two-phase flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 4, p. 523-533, 1978.

ARASTOOPOUR, H. Hydrodynamic analysis of solids transport. PhD thesis, Illinois Institute of Technology, Illinois, Chicago, 1978.

BARROS, Antônio André Chivanga. **Desenvolvimento de modelo de estágios de não equilíbrio e proposição de correlações de eficiência para os processos de destilação convencional e extrativa**. Campinas, SP, 1997. 246p. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP.

BARROS, Antônio André Chivanga. **Avaliação da hidrodinâmica de um prato misto (perfurado e valvulado)**. Campina Grande, Pb, 1992. 159p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química, UFPb.

BAKOWSKI, Stanislaw. Efficiency of sieve-tray columns. **British Chemical Engineering**, v. 14, n. 7, p. 945-949, 1967.

BECKER, S.; SOKOLICHIN, A.; EIGENBERGER, G. Gas-liquid flow in bubble columns and loop reactors. Part II. Comparison of detailed experiments and flow simulations. **Chemical Engineering Science**, v. 49, p. 5747-5762, 1994.

BELL, R. L. Residence and fluid mixing on commercial-scale sieve trays. **A.I.Ch.E. Journal**, n. 18, p. 498-502, 1972.

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

BRUUN, H. H. **Hot-Wire anemometry: principles and signal analysis**. New York: Oxford: University Press, 1995. 507p.

COULSON, J. M.; RICHARDSON, J. F. Colunas de separação (destilação e absorção). In: COULSON, J. M.; RICHARDSON, J. F. **Tecnologia química: uma introdução ao projecto em tecnologia química**. 1.ed. [s.l.]: Fundação Calouste Gulbenkian, 1983. Cap.11. Tradução de R. K. Sinnott.

DELHAYE, J. M. Hot-film anemometry in two-phase flow. In: ASME, Nova York, 1969. p. 58 – 69.

DELNOIJ, E.; KUIPERS, J. A. M.; van SWAAIJ, W. P. M. A three-dimensional CFD model for gas-liquid bubble columns. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 2217-2261, 1999.

DELNOIJ, E.; LAMMERS, F. A.; KUIPERS, J. A. M.; van SWAAIJ, W. P. M. Dynamic simulation of dispersed gas-liquid flow using a discrete bubble model. **Chemical Engineering Science**, v. 52 n. 9, p. 1428-1429, 1997a.

DELNOIJ, E.; KUIPERS, J. A. M.; van SWAAIJ, W. P. M. Computational fluid dynamics applied to gas-liquid contactors. **Chemical Engineering Science**, v. 52, n. 21/22, p. 3623-3638, 1997b.

DELNOIJ, E.; KUIPERS, J. A. M.; van SWAAIJ, W. P. M. Dynamic simulation of gas-liquid two-phase flow: Effect of column aspect ratio on the flow structure. **Chemical Engineering Science**, v. 52, n. 21/22, p. 3759-3772, 1997c.

DEVANATHAN, N.; DUDUKOVIC, M. P.; LAPIN, A.; LÜBBERT, A. Chaotic flow in bubble column reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 50, p. 2661-2667, 1995.

EDULJEE, H. E. Design of bubble-cap distillation plates – Part II – Plate efficiencies. **British Chemical Engineering**, v. 10, n. 2, p. 103-108, 1965.

FAIR, J. R. Design of equilibrium stage process. In FAIR, J. R. **Tray hydraulics: perforated trays**. New York: McGraw-Hill, 1963. Cap.15.

FAIR, J. R.; MATHEWS, R. L. Better estimate of entrainment from bubble-caps trays. **Petrol Refiner**, v. 37, n. 4, p. 153-158, 1958.

FINGERSON, L. M.; FREYMUTH, P. Thermal anemometers. In Fluid Mechanics Measurements (ed. R. J. Goldstein), p. 99-154, Hemisphere, Washington, 1983.

FISCHER, C. H.; QUARINI, G. L. Three-dimensional heterogeneous modelling of distillation tray hydraulics. Paper presented at the AIChE annual meeting, 15-20 November 1998, Miami Beach, USA.

GEARY, N. W.; RICE, R. G. Circulation and scale-up in bubble columns. **A.I.Ch.E. Journal**, v. 38, p. 76-82, 1992.

GRIENBERGER, J.; HOFMAN, H. Investigations and modeling of bubble columns. **Chemical Engineering Science**, v. 47, n. 9-11, p. 2215-2220, 1992.

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

HANSEN, K. G.; MADSEN, J.; TRINH, C. M.; IBSEN, C. H.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B. H. A computational and experimental study of the internal flow in a scaled pressure-swirl atomizer. In: ILASS-Europe 2002, Zaragoza, 2002.

HENGSTEBECK. **Petroleum processing**. New York: McGraw-Hill, 1959.

HENLEY, E. J.; SEADER, J. D. **Equilibrium-stage separation operations in chemical engineering**. New York: Wiley, 1981.

HIBIKI, T.; HOGSETT, S.; ISHII, M. Local measurements of interfacial area, interfacial velocity and liquid turbulence in two – phase flow. In: OECD Meeting on Instrumentation, Santa Barbara, 1997.

HJERTAGER, B. H.; MORUD, K. Computational fluid dynamics of bioreactors. **Mod. Indent. Control**, v. 16, p. 177, 1995.

HJERTAGER, B. H.; MORUD, K. Computational fluid dynamics simulation of bioreactors. **Proceedings of Bioreactor Performance Symposium**, 15-17 March, Helsingor, Danmark, p. 47-61, 1993.

HOLLAND, C. D. **Multicomponent distillation**. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1963.

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

HSU, Y. Y.; SIMON, F. F.; GRAHAM, R. W. Application of hot – wire anemometry for two – phase flow measurements such as void fraction and slip velocity. In: ASME Winter Meeting, 1963, Filadélfia. **Proceedings of the ASME Winter Meeting**, Filadélfia, 1963.

JAKOBSEN, H. A.; LINDBORG, H.; DORAO, C. A. Modeling of bubble column reactors: progress and limitations. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 44, n. 14, p. 5107-5151, 2005.

KING, L. V. On the convection of heat from small cylinders in a stream of fluid: determination of the convective constants of small platinum wires with applications to hot-wire anemometry. **Philosophical Transactions of the Royal Society**, A214, p. 373-432, 1914.

KISTER, H. **Distillation design**. New York: McGraw-Hill, 1992.

KOCAMUSTAFAGULLARI, G.; HUANG, W. K.; RAZI, J. Measurement and modeling of average void fractions, bubble size and interfacial area. **Nuclear Engineering and Design**, v. 148, p. 437-453, 1994.

KOCAMUSTAFAGULLARI, G.; WANG, Z. An experimental study on local interfacial parameters in a horizontal bubbly two-phase flow. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 17, p. 553-572, 1991.

KRAMERS, H. Heat transfer from spheres o flowing media. **Physica**, v. 12, p. 61-80, 1946.

KRISHNA, R. H. F.; MARTINEZ, R. S.; STANDART, G. L. Murphree point efficiencies in multicomponent systems. **Transactions of the Institution of Chemical Engineers and the Chemical Engineer**, v. 55, p. 178-183, 1977.

KRISHNAMURTHY, R.; TAYLOR, R. A nonequilibrium stage model of multicomponent separation processes. Part I: Model description and method of solution. **A.I.Ch.E Journal**, v. 31, n. 3, p. 449-456, 1985a.

KRISHNAMURTHY, R.; TAYLOR, R. A nonequilibrium stage model of multicomponent separation processes. Part II: Comparison with experiment. **A.I.Ch.E Journal**, v. 31, n. 3, p. 456-465, 1985b.

KRISHNAMURTHY, R.; TAYLOR, R. A nonequilibrium stage model of multicomponent separation processes. Part III: The influence of unequal component efficiencies in process design problems. **A.I.Ch.E Journal**, v. 31, p. 1973-1985, 1985c.

LANCE, M.; BATAILLE, J. M. Turbulence in the liquid phase in a uniform bubbly air – water flow. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 222, p. 95-118, 1991.

LAPIN, A.; LÜBBERT, A. Numerical simulation of the dynamics of two phase gas-liquid flows in bubble columns. **Chemical Engineering Science**, v. 49, p. 3661-3674, 1994.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, p. 269-289, 1974.

LEMIEUX, G. P.; OOSTHUIZEN, P. H. A simple approach to the compensation of constant temperature hot-wire anemometers for fluid temperature fluctuations. In: 30th INTERNATIONAL INSTRUMENTATION SYMPOSIUM, Denver, 1984.

LIU, F. S. Dissertation in chemical engineering, Tianjin University, 1995.

LIU, C. J.; YUAN, X. G.; YU, K. T.; ZHU, X. J. A fluid-dynamic model for flow pattern on a distillation tray. **Chemical Engineering Science**, v. 55, p. 2287-2294, 2000.

LIU, T. J.; BANKOFF, S. G. Structure of air – water bubbly flow in a vertical pipe – I. Liquid mean velocity and turbulence measurements. **International Journal of Heat Transfer**, v. 36, p. 1049-1060, 1993a.

LIU, T. J.; BANKOFF, S. G. Structure of air – water bubbly flow in a vertical pipe – II. Void fraction, bubble velocity and bubble sign distribution. **International Journal of Heat Transfer**, v. 36, p. 1061-1072, 1993b.

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

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

MALISKA, C. R. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: fundamentos e coordenadas generalizadas. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1995.

McCABE, W. L.; THIELE, E. W. Graphical design of fractionating columns. **Ind. Eng. Chem.**, v. 17, p. 605, 1925.

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

MURPHREE, E. V. Rectifying column calculations with particular reference to N component mixtures. **Ind. Eng. Chem.**, v. 17, n. 7, p. 747-750, 1925.

NORILER, D.; SOARES, C.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; WOLF-MACIEL, M. R. Computational fluid dynamic applied to diffusional separation process. In: 16th International Congress of Chemical and Process Engineering. Prague – Czech Republic, 2004.

OHBA, K.; ITOH, T. Light attenuation technique for void fraction measurement in two-phase bubbly flow – II. Experiment. **Technol. Rep. Osaka Univ.**, v. 28, n. 1.449, p. 495-506, 1978.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York: Hemisphere Pub., 1980.

PESCARINI, Maria Helena. **Desenvolvimento do algoritmo para a simulação de colunas de destilação multicomponente em estado estacionário utilizando a modelagem de estágios de não equilíbrio**. Campinas, SP, 1996. 220p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP.

PFLEGER, D.; GOMES, S.; WAGNER, H. G.; GILBERT, N. Hydrodynamics simulations of laboratory scale bubble columns: fundamental studies on the Eulerian-Eulerian modelling approach. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 5091-5099, 1999.

PONCHON, M. Application of graphs to the study of commercial fractional distillation. **Tech Moderne**, v. 13, p. 55, 1921.

PORTER, K.E.; YU, K. T.; CHAMBERS, S.; ZHANG, M. Q. Flow patterns and temperature profiles on a 2.44 m diameter sieve tray. **IChE Symposium Series**, 128, A257-A273, 1992.

PORTER, K. E.; DAVIES, B.; ENJUGU, B. A.; ANI, C. C. Investigating the effect of the liquid flow pattern on sieve tray performance by means of the water cooling technique. **IChE Symposium Series**, A5 (104), p. 69-81, 1987.

RANADE, V. V. Flow in bubble column: some numerical experiments. **Chemical Engineering Science**, v. 47, n. 8, p. 1857-1869, 1992.

SEADER, J. D. The B.C. (Before Computers) and A.D. of equilibrium-stage operations. **Chemical Engineering Education**, v. 19, p. 88-103, 1985.

SEADER, J. D.; HENLEY, E. J. **Separation process principles**. New York: Wiley, 1998.

SERIZAWA, A.; KATAOKA, I.; MICHYSHI, I. Turbulence structure of air – water bubbly flow – I: measuring techniques. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 2, p. 221-233, 1975a.

SERIZAWA, A.; KATAOKA, I.; MICHYSHI, I. Turbulence structure of air – water bubbly flow – II: Local properties. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 2, p. 235-246, 1975b.

SOARES, C.; NORILER, D.; WOLF-MACIEL, M. R.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F. Verification and validation in CFD for a three-dimensional transient gas-liquid flow (a ser publicado).

SOARES, C.; NORILER, D.; WOLF-MACIEL, M. R.; VOSS, M. L.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F. Verification and validation in CFD: three-dimensional and transient model for multiphase flow. In: 16th International Congress of Chemical and Process Engineering, Prague – Czech Republic, 2004.

SOARES, C.; NORILER, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.; WOLF-MACIEL, M. R. Computational fluid dynamics for simulation of gas-liquid flow on a sieve plate: model comparisons. In: Distillation & Absorption 2002 – 634th Event of the European Federation of Chemical Engineering. Baden-Baden – Alemanha, 2002.

SOARES, C.; NORILER, D.; WOLF-MACIEL, M. R.; SANTOS, D.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F. Numerical simulation of liquid flow on a distillation tray. 2nd Brazilian Congress on Computational Mechanics, Campinas – SP, Brazil, november 7-9, 2001.

SOARES, Cíntia. **Avaliação experimental dos coeficientes de transferência de massa e calor em uma coluna com pratos perfurados**. Campinas, SP, 2000. 262p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP.

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

SOKOLICHIN, A.; EIGENBERGER, G. Gas-liquid flow in bubble columns and loop reactors – Part I. Detailed modelling and numerical simulation. **Chemical Engineering Science**, v. 49, n. 24b, p.5735-5746, 1994.

SOREL, E. Distillation et rectification industrielle. Paris: Carre and Naud, 1899.

STICHLMAIR, J.; ULBRICH, S. Liquid channeling on trays and its effect on plate efficiency. **Chemical Engineering Technology**, v. 10, p. 33-39, 1987.

SUZANNE, C.; ELLINGSEN, K.; RISSO, F.; ROIG, V. Local measurement in turbulent bubbly flows. **Nuclear Engineering and Design**, v. 184, p. 319-327, 1998.

TAYLOR, R.; KOOIJMAN, H. A.; HUNG, J. S. A 2nd. Generation nonequilibrium model for computer-simulation of multicomponent separation process. **Computers and Chemical Engineering**, v. 18, p. 205-217, 1994.

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

TORVIK, R.; SVENDSEN, H. F. Modelling of slurry reactors. A fundamental approach. **Chemical Engineering Science**, v. 45, n. 8, p. 2325-2332, 1990.

TRAPP, J. A.; MORTENSEN, G. A. A discrete particle model for bubble slug two phase flow. **Journal of Computational Physics**, v. 107, p. 367, 1993.

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

van der AKKER, H. The Euler-Euler approach to dispersed two-phase flows in the turbulent regime. **ERCOFTAC Bull.**, v. 36, p. 30, 1998.

van WINKLE, M. **Distillation**. New York: McGraw-Hill, 1967.

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

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

WANG, Z. C. Dissertation in chemical engineering, Tianjin University, 1989.

WANG, S. K.; LEE, S. J.; JONES, O. C.; LAHEY, R. T., Jr. Three-dimensional turbulence structure and phase distribution measurements in bubbly two-phase flow. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 13, p. 327-340, 1987.

WANG, J. C.; WANG, Y. L. A review on the modeling and simulation of multi-stage separation process. In W. D. SEIDER; R. S. H. MAH, **Foundations of Computer Aided Chemical Process Design**, v. II, p. 121-170), 1980.

WEBB, C., QUE, F.; SENIOR, P.R. Dynamic simulation of gas-liquid dispersion behaviour in a 2-D bubble column using a graphics mini-supercomputer. **Chemical Engineering Science**, v. 47, p. 3305-3312, 1992.

YOSHIDA, H. Liquid flow over distillation column plates. **Chemical Engineering Communication**, v. 51, p. 261-275, 1987.

YU, K. T.; HUANG, J.; ZHANG, Z. T. Residence time profile and plate efficiency for a large tray with single-pass or two-pass liquid flow. **Journal of Chemical and Industrial Engineering (China)**, v. 37, p. 151-156, 1986.

YU, K. T.; YAN, X. G.; YOU, X. Y.; LIU, F. S.; LIU, C. J. Computational fluid-dynamics and experimental verification of two-phase two-dimensional flow on a sieve column tray. Paper presented at the Working Meeting Party Meeting on Distillation, Absorption and Extraction, European Federation of Chemical Engineering, Cagliari, 5-7 October, 1998.

YUAN, X. G.; YU, K. T.; YOU, X. Y. Velocity field simulation of gas-liquid two-phase flow on sieve tray. **Journal of Chemical and Industrial Engineering (China)**, v. 46, p. 511-515, 1995.

ZHANG, M. Q.; YU, K. T. Simulation of two dimensional liquid phase flow on a distillation tray. **Journal of Chemical Engineering**, v. 2, p. 63-71, 1994.

ZUIDERWEG, F. J. Sieve trays – a view on the state of the art. **Chemical Engineering Science**, v. 37, n. 10, p. 1441-1464, 1982.

APÊNDICE A – MEMORIAL DE CÁLCULO PARA O PROJETO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO

Nesta seção, faz-se a descrição da metodologia para o desenvolvimento do projeto da coluna de destilação utilizada nos ensaios para avaliação da fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor.

- *Diâmetro da coluna*

Para melhor manipulação do aparato experimental e, devido à ausência de tubos de acrílico com diâmetros maiores para proceder às diversas medidas instrumentais, estabeleceu-se, para este projeto, um diâmetro interno da coluna (d) de 0,36 metros (360 mm). Com base nesta medida, equações empíricas foram utilizadas para a determinação dos demais parâmetros associados ao projeto da coluna de destilação.

- *Definição do fluido de trabalho e suas propriedades*

Para o desenvolvimento deste projeto foram utilizados, como fluidos operantes, ar atmosférico, oriundo de um sistema apropriado de ventilação, e água destilada/deionizada. Considerando-se a operação nas condições normais de temperatura e pressão (CNTP), as propriedades físicas dos fluidos estão apresentadas na Tabela A.1.

TABELA A.1 – Propriedades físicas dos fluidos utilizados.

Componentes	Massa Específica (kg/m ³)	Viscosidade kg/(m.s)	Condutividade Térmica (W/m°C)
Água (líquida)	994,5900	$0,658 \times 10^{-6}$	0,62800
Ar (gás)	1,1774	$1,983 \times 10^{-5}$	0,02624

- *Determinação da velocidade máxima da fase vapor*

A capacidade de operação do aparato experimental é limitada pela tendência ao arraste de líquido para o prato superior ou pela ocorrência do fenômeno de gotejamento, além de outros fatores adicionais, como a perda de carga da fase dispersa ao atravessar as perfurações do prato. Na operação do sistema pode ocorrer o fenômeno da inundação, provocado pela formação de uma emulsão estável dentro da coluna. A inundação ocorre quando a vazão da fase contínua é alta. A literatura recomenda que o dimensionamento do prato perfurado seja feito considerando os seguintes aspectos:

- a velocidade do líquido disperso no orifício deverá ser aquela que acarreta a maior área interfacial das gotas;
- o diâmetro médio da gota e a velocidade terminal da dispersão;
- a espessura da camada de líquido coalescente sobre o prato;
- o espaçamento entre pratos.

Assim, a capacidade de transferência de massa dependerá de fatores de grande influência sobre a fluidodinâmica do processo e das características do projeto do equipamento a ser projetado, destacando-se:

- o “hold up” da fase dispersa;
- a área interfacial das gotas;
- o coeficientes de transferência de massa da fase dispersa e da fase contínua.

Para a determinação da velocidade da fase vapor (u_g) adotou-se a equação proposta por SOUDERS, BROWN e LOWENSTEIN (1961), citado por COULSON e RICHARDSON (1983), representada pela Equação (A.1), de forma a se obter a estimativa da velocidade superficial máxima permissível da fase vapor:

$$u_g = (-0,171L_t^2 + 0,27L_t - 0,047) \left[\frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_g} \right]^{1/2} \quad (\text{A.1})$$

onde:

L_t é o espaçamento entre pratos (m);

ρ_l é a massa específica do líquido (kg/m^3);

ρ_g é a massa específica do vapor (kg/m^3);

u_g é a velocidade máxima permissível do vapor em cada orifício do prato (m/s) baseada na área total da seção transversal do prato.

Na correlação de FAIR (1963), a distância entre os pratos é considerada como parâmetro de cálculo e deve ser previamente fixada. Em seguida, os cálculos da velocidade de arraste de gotículas, feitos através do método de FAIR e MATHEWS (1958), permitem definir a adequação do espaçamento admitido inicialmente. Caso não seja adequada, uma nova distância entre pratos deve ser definida e, conseqüentemente, o cálculo de um novo diâmetro. Com base na Equação (A.1) e no espaçamento entre pratos, determina-se a velocidade de escoamento do vapor nos orifícios (u_g).

Assim, como a inundação representa o limite superior para a operação, a baixa velocidade da fase vapor provoca a drenagem do líquido através das perfurações existentes no prato, originando o fenômeno de gotejamento. Este ponto, que define a velocidade mínima da fase vapor através dos orifícios, é calculada através da correlação de EDULJEE (1965). Para projeto, usa-se uma velocidade 10% maior que a velocidade mínima, ou 85% da velocidade máxima de inundação. A área total dos orifícios é obtida a partir da velocidade mínima de projeto.

Na determinação da velocidade mínima da fase vapor através dos orifícios são usados, como parâmetros de cálculo, a altura do vertedor e a altura do líquido sobre o prato. A altura do vertedor deve ser fixada, e a altura do líquido sobre o prato é calculada através da correlação de Francis (FAIR, 1963). A área total dos orifícios deve estar

compreendida entre 10 e 20% da área do prato, descontadas as áreas ocupadas pelo vertedor de entrada e de saída do prato.

- *Determinação do espaçamento entre pratos*

O espaçamento entre pratos (L_t) tem como valor mínimo necessário duas vezes a altura da represa (vertedor). Entretanto, normalmente, é usado um valor 5 a 6 vezes maior nas unidades industriais, pois, com este valor, permite-se maior flexibilidade operacional da torre, possibilitando também a instalação de bocais de visualização para limpeza eventual dos pratos. Para este projeto, considerando o diâmetro de 0,36 m, o espaçamento recomendado deve situar-se entre 0,3 e 0,6 m. Com base na Equação (A.1), determinou-se o espaçamento necessário para o experimento proposto.

- *Determinação da vazão mássica máxima da fase vapor*

SOUDERS, BROWN e LOWENSTEIN (1961), citado por COULSON e RICHARDSON (1983), propuseram uma equação comumente utilizada para estimar o diâmetro de colunas de destilação, que relaciona a vazão mássica máxima da fase vapor (v_g), a velocidade máxima nos orifícios e a massa específica do vapor no processo. Esta equação é utilizada para estimar a vazão mássica máxima do vapor, uma vez conhecido o diâmetro, conforme a Equação (A.2).

$$d = \sqrt{\frac{4 v_g}{\pi \rho_g u_g}} . \quad (A.2)$$

Utilizando-se a Equação (A.2) determinou-se a vazão mássica máxima da fase vapor (u_g) em kg/s.

- *Determinação da área total do prato*

A área total do prato (A_T) é calculada através da Equação (A.3), que a relaciona diretamente com o diâmetro da coluna. A área total do prato é análoga a área da seção reta transversal interna da coluna de destilação, ou:

$$A_T = \frac{\pi d^2}{4} . \quad (A.3)$$

- *Determinação da área dos vertedores*

A literatura recomenda que o cálculo deste parâmetro deve ser feito relacionando-o com o percentual da área total do prato. Para COULSON e RICHARDSON (1983), este parâmetro deve situar-se entre 10 e 15% da área total do prato.

Com base nesta avaliação, a área dos vertedores (A_V) é calculada através da Equação (A.4):

$$A_V = 0,12 A_T . \quad (A.4)$$

- *Determinação da área efetiva*

A área efetiva do prato (A_{EF}) é a área total do prato menos a área dos vertedores, como indicado na Equação (A.5):

$$A_{EF} = A_T - A_V . \quad (A.5)$$

- *Determinação da área de estabilização*

Esta área é caracterizada pela estabilização (A_{EST}) do líquido após a saída do vertedor de entrada e antes do vertedor da saída de um prato de destilação. Geralmente, a área referenciada é igual a área dos vertedores, calculada através da Equação (A.5).

Calcula-se a área de estabilização através da Equação (A.6):

$$A_{EST} = A_{EF} - A_B . \quad (A.6)$$

- *Determinação da área de borbulhamento ou área ativa*

A área de borbulhamento ou área ativa (A_B) é aquela região do prato com perfurações, caracterizada pela forte interação entre o líquido e o vapor na superfície do prato. Depende da área total do prato, da área dos vertedores e da área de estabilização, como indicado na Equação (A.7):

$$A_B = A_T - 2 A_V . \quad (A.7)$$

- *Determinação do tamanho e características do orifício*

Para se calcular o número de orifícios é necessário determinar, inicialmente, seu diâmetro. Quando a mistura líquida a ser destilada não apresenta problemas de incrustação, é recomendável que o diâmetro dos orifícios seja o menor possível, em geral, em torno de 3/16 polegadas (4,7625 mm). A relação entre a área total dos orifícios e a área de cada orifício, dada pelo diâmetro escolhido, fornece o número total de orifícios no prato.

Geralmente, dependendo das características de projeto de colunas de destilação e da tensão superficial, empregam-se orifícios de 1/8 a 5/16 polegadas (3,175 a 7,9375 mm). Orifícios menores são preferidos quando o sistema apresenta tensão superficial superior a 20 dinas/cm. A literatura recomenda utilizar velocidades, no orifício, superiores a 0,0762 m/s e próximas a 0,3048 m/s, de forma a permitir um jato de líquido suficientemente longo no orifício. O tamanho do jato está relacionado com o tamanho do orifício. Para obtenção de jatos de líquido que acarretam a apropriada distribuição de tamanhos de gotas, os seguintes limites devem ser observados e, dentro destes, deve-se escolher o tamanho do orifício, conforme a Equação (A.8):

$$\frac{1}{2} \left[\frac{\sigma_{sup}}{\Delta \rho g} \right]^{1/2} < d_0 < \pi \left[\frac{\sigma_{sup}}{\Delta \rho g} \right]^{1/2} . \quad (A.8)$$

Quando a tensão superficial é elevada, deve-se preferir o menor diâmetro. Quando a tensão superficial for pequena, o diâmetro mais próximo do limite superior deve ser preferido. Para este projeto, usando os dados da Tabela A.1, determinou-se o diâmetro do orifício que atende a especificação da Equação (A.8).

- *Espaçamento entre os orifícios no prato*

É importante considerar a distância entre os orifícios adjacentes e o arranjo dos orifícios no prato. Quando a vazão é baixa e, se os orifícios forem colocados a menos de 3 vezes o diâmetro, pode ocorrer coalescência das gotas no prato e um comportamento imprevisível. Uma excessiva área livre disponível acarreta a redução da capacidade da coluna e conseqüente perda da eficiência. Um distanciamento de 2,5 a 4 vezes o diâmetro de orifício deve ser usado para se obter boa interação das fases líquida e vapor no prato.

A configuração da distribuição de orifícios no prato atende padrões em quadrado ou em triângulo equilátero. O padrão triangular é preferível, uma vez que evita a formação de caminhos preferenciais na superfície do prato. A área total de orifícios,

como fração da área perfurada (A_P), é dada pela Equação (A.9) para o modelo da distribuição feita para este projeto estrutural, que relaciona a área total dos furos ativos com a área perfurada:

$$\frac{A_H}{A_P} = 0,9 \left[\frac{d_o}{L_t} \right]^2. \quad (\text{A.9})$$

- *Altura do vertedor*

A altura da represa determina o volume do líquido sobre o prato. Uma altura grande aumenta o rendimento, mas a custa de uma maior queda de pressão no prato. Para colunas operadas com pressões maiores que a atmosférica, a altura do vertedor deve situar-se entre 40 e 90 mm. No caso de funcionamento sob vácuo usam-se alturas menores de represa, para reduzir a queda de pressão (geralmente de 6 a 12 mm).

No caso de vertedores circulares, o comprimento da represa (vertedor) determina a área da seção do vertedor descendente. O comprimento situa-se, normalmente, entre 0,60 e 0,85 do diâmetro do vertedor. É recomendável utilizar um comprimento inicial de 77% do diâmetro da conduta, ou 12% do diâmetro do prato. Para assegurar um fluxo regular do líquido ao longo da represa, a crista, que é a camada de líquido sobre o vertedor, deve ter pelo menos 10 mm de altura.

APÊNDICE B – LEI DE KING

A lei que rege o comportamento térmico do fio quente imerso no escoamento de um fluido pode ser determinada avaliando-se a taxa de transferência de calor através de uma seção elementar do fio, como ilustra a Figura B.1.

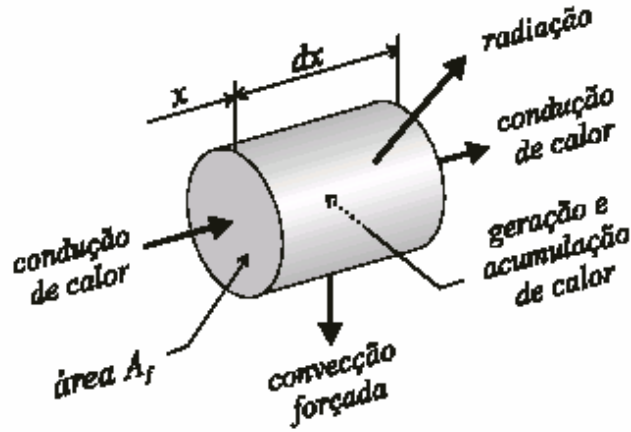


Figura B.1 – Transferência de calor em uma seção elementar de fio quente.

O balanço térmico num elemento do fio pode ser descrito pela seguinte equação:

$$d\dot{Q}_e = d\dot{Q}_{cf} + d\dot{Q}_c + d\dot{Q}_r + d\dot{Q}_a, \quad (\text{B.1})$$

onde:

$$d\dot{Q}_e = \frac{I^2 \chi}{A_f} dx \quad \text{taxa de geração de calor pelo efeito Joule}$$

$$d\dot{Q}_{cf} = \pi d_f h_c (T_f - T_a) dx \quad \text{taxa de transferência de calor por convecção forçada}$$

$$d\dot{Q}_c = -k_c A_f \frac{\partial^2 T_f}{\partial x^2} dx \quad \text{taxa de transferência de calor por condução}$$

$$d\dot{Q}_r = \pi \sigma_{SB} \epsilon_f (T_f^4 - T_a^4) dx \quad \text{taxa de transferência de calor por radiação}$$

$$d\dot{Q}_a = \rho c A_f \frac{\partial T_f}{\partial t} dx \quad \text{taxa de acúmulo de calor}$$

Nestas expressões, I representa a corrente elétrica que percorre o fio, χ a resistividade do fio, A_f a área da seção transversal do fio, d_f o diâmetro do fio, T_f a temperatura do fio, T_a a temperatura do fluido, k_c a condutividade térmica do fio à temperatura T_f , σ_{SB} a constante de Stefan-Boltzmann, ε_f a emissividade do fio e ρ sua massa específica.

Em aplicações onde o fluido de trabalho apresenta temperatura relativamente baixa, o termo relativo à transferência de calor por radiação é muito pequeno e pode ser desprezado, sem que se incorra em erros significativos. Nestas condições, o equilíbrio térmico do fio pode ser representado como:

$$\frac{I^2 \chi}{A_f} dx - \pi d_f h_c (T_f - T_a) dx + k_c A_f \frac{\partial^2 T_f}{\partial x^2} dx - \rho c A_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = 0. \quad (\text{B.2})$$

A partir da Equação (B.2), em regime permanente ($\partial T / \partial t = 0$), BRUUN (1995) mostra que é possível determinar a distribuição de temperatura ao longo do comprimento do fio. A partir da solução obtida, conclui-se que o comprimento do fio deve ser o mais longo possível e que a sua condutividade térmica deve ser baixa.

A resistência R_f de um fio de comprimento L_f à temperatura uniforme é dada por:

$$R_f = \frac{\chi L_f}{A_f}. \quad (\text{B.3})$$

Como o material do fio é termo-resistivo, a sua resistência segue a seguinte expressão:

$$R_f = R_a + R_{20} \alpha_{20} (T_f - T_a), \quad (\text{B.4})$$

onde R_a e R_{20} representam o valor da resistência do fio à temperatura ambiente (do fluido) e a 20°C, respectivamente, e α_{20} o coeficiente de temperatura do material à 20°C.

Para um fio infinitamente longo e em regime permanente, a Equação (B.2) reduz-se a:

$$I^2 R_f = \pi d_f L_f h_c (T_f - T_a). \quad (\text{B.5})$$

A transferência de calor convectiva de um fio infinitamente longo pode ser expressa de forma adimensional, em função dos números de Nusselt e de Reynolds, através de uma correlação do tipo:

$$Nu = A + B Re^{1/2}, \quad (\text{B.6})$$

onde A e B são constantes empíricas (KING, 1914). Segundo KRAMERS (1946), uma expressão válida para uma larga faixa de números de Reynolds e de Prandtl ($10^{-1} < Re < 10^4$ e $0,71 < Pr < 10^3$) pode ser escrita como:

$$Nu = 0,42 Pr^{0,2} + 0,57 Pr^{0,33} Re^{0,5}. \quad (\text{B.7})$$

Reescrevendo a Equação (B.5) e utilizando a definição do número de Nusselt ($Nu = h_c d_c / k_c$), tem-se:

$$I^2 R_f = k_c \pi L_f (T_f - T_a) Nu, \quad (\text{B.8})$$

ou, utilizando as Equações (B.4) e (B.7),

$$I^2 R_{20} = \pi L_f k_c \frac{T_f - T_a}{1 - \alpha_{20} (T_f - T_{20})} (0,42 Pr^{0,2} + 0,57 Pr^{0,33} Re^{0,5}). \quad (\text{B.9})$$

Multiplicando ambos os lados da Equação (B.9) por R_{20} , obtém-se, finalmente:

$$E^2 = A + BU^{0,5}, \quad (\text{B.10})$$

onde:

$$A = 0,42\pi k_c L_f \frac{R_{20}(T_f - T_a)}{1 - \alpha_{20}(T_f - T_{20})} Pr^{0,2}$$

e

$$B = 0,57\pi k_c L_f \frac{R_{20}(T_f - T_a)}{1 - \alpha_{20}(T_f - T_{20})} Pr^{0,33} (\rho d_f / \mu)^{0,5},$$

que fornecem a relação entre a diferença de potencial elétrico nas extremidades de um fio infinitamente longo e a velocidade do escoamento incidente.

Para um fio de dimensões finitas, entretanto, as perdas por condução de calor em suas extremidades devem ser levadas em consideração. Na prática, utiliza-se um expoente n na Equação (B.10), que é rescrita na forma da Equação (B.11):

$$E^2 = A + BU^n. \quad (\text{B.11})$$

Na Equação (B.11), conhecida como Lei de King, as constantes A , B e n devem ser determinadas experimentalmente, através da calibração da sonda. Ainda que a Equação (B.11) tenha sido deduzida para um elemento infinitesimal de um fio quente, uma relação similar pode ser obtida para sondas de filme quente, modificando-se as correlações utilizadas para avaliar os mecanismos de troca de calor entre a sonda e o meio fluido, em função da geometria apresentada pelo elemento sensor.

APÊNDICE C – CARACTERÍSTICAS DO SOFTWARE IFA 300

Para a obtenção dos perfis de velocidade nos aparatos experimentais foi empregado o anemômetro de fio quente, marca IFA 300 da TSI Incorporated. Conforme especificado, um dos componentes do anemômetro é o software para a aquisição e análise de dados. O software IFA 300, constituinte do sistema, permite a calibração, a aquisição, o tratamento de dados, entre outras opções de trabalho. Quando da execução do programa, uma imagem similar à apresentada na Figura C.1 aparece na tela principal. Nesta tela, o número de canais utilizados, relacionado com o número de componentes de velocidade, aparece no menu principal. No presente trabalho foram empregados dois canais, pois são medidos dois componentes de velocidade.

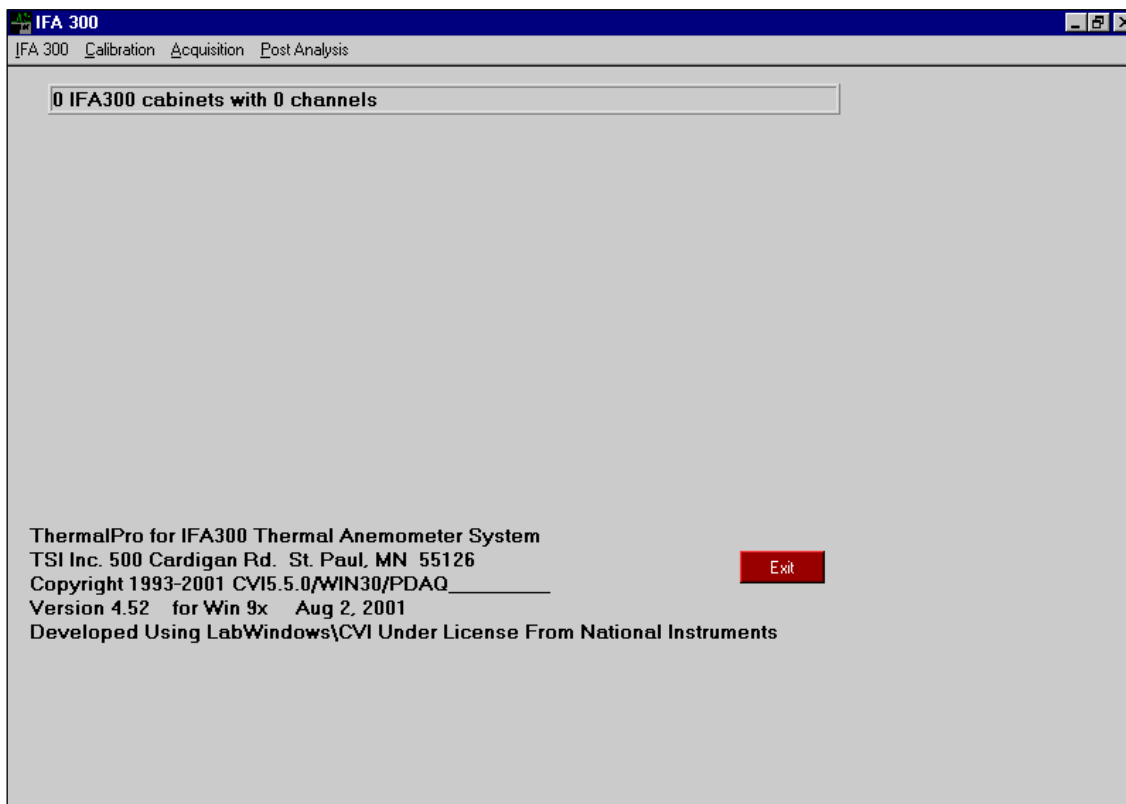


Figura C.1 – Tela inicial do IFA 300.

- Comunicação (“Communications Screen”)

A tela de diagnóstico (Figura C.2), acessada a partir do menu principal, é utilizada com o propósito de diagnóstico, ou para configuração e execução manual de um ou mais canais. Deve-se ajustar os parâmetros de acordo com o experimento executado. Na opção “Channel” especifica-se o número de canais utilizados; o “Offset” e o “Gain” são selecionados de forma que o sinal transmitido permaneça entre $+5V$ e $-5V$; em “Probe” informa-se o tipo de sonda a ser usada no experimento: filme quente ou fio quente.

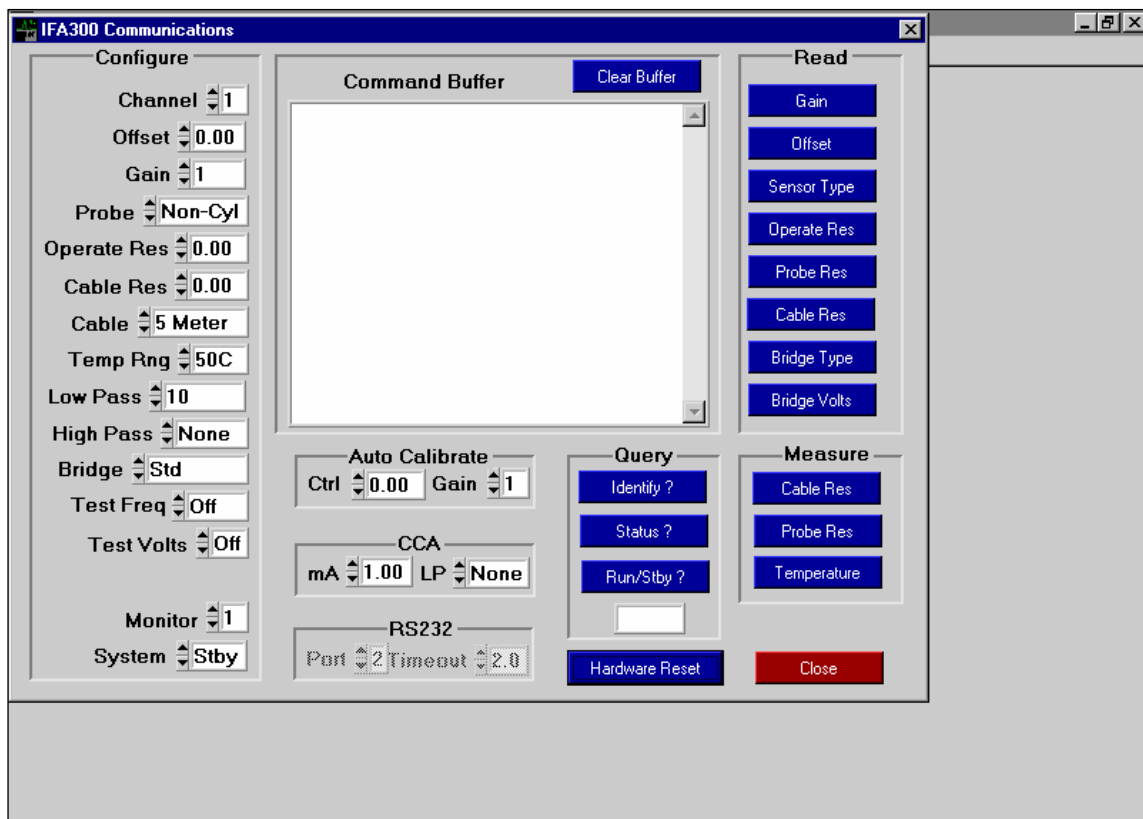


Figura C.2 – Tela de diagnóstico.

- **Calibração (“Calibration Screen”)**

Para todo o experimento realizado necessita-se de uma nova calibração. Para tanto, deve-se acessar a janela “Calibration” e escolher o ícone “Probe Data”. Aqui são informadas as condições de realização do experimento. Para a calibração é necessário informar vários parâmetros, os quais podem ser observados na Figura C.3. Alguns parâmetros de operação são pré-fixados, como é o caso da temperatura de operação da sonda. Neste caso específico, fixam-se, ainda, parâmetros como número da sonda, os canais de uso tanto no IFA, como na placa A/D, entre outros. Mas dentre estes parâmetros, encontram-se aqueles que devem ser medidos a cada nova calibração, isto é, a resistência do cabo e a resistência da sonda.

A/D Chan	IFA Chan	Probe Type	Serial Number	Cbl Res	Read	Opr Res	Wire Film	Off set	Gain	Temp Chan
3	1	X	014125	0.39	Read	6.38	F	5.00	1	A
4	2	X	014125	0.81	Read	6.36	F	5.00	1	A

Cal Method: 3. Acquire E & Type Velocity Manual

IFA300: Bridge: Std, Cable: 5 Meter, Temp: 50C

Slant Angle: 1 45.000, 2 45.000

Angle Setup: Yaw Angles: 11, Yaw Vels: 1, Angle Incr: 6.0, Velocity:

Buttons: Autocal Tbl, Save As, Save, Open Cal File, Gain & Offset, Calibrate, Close

Figura C.3 – Dados referentes a sonda.

Com todas as informações fornecidas, prossegue-se para a tela “Conditions Setup”. Nesta etapa, as informações necessárias para a calibração, tais como: pressão ambiente, velocidade mínima e máxima do experimento, número de pontos para a calibração, entre outros que podem ser observados na Figura C.4, devem ser especificadas.

Antes de se fornecer o número de pontos para a calibração, deve-se realizar um planejamento baseado nos resultados obtidos no programa Fortran, desenvolvido para atender as demandas do projeto. O programa Fortran, que utiliza o modelo matemático característico do escoamento em um canal aberto, exige informações tais como: a largura do meio onde é realizada a calibração, a altura de líquido e a vazão.

IFA 300

IFA 300 Calibration Acquisition Post Analysis

Calibration - Conditions Setup

0 Master Count

Cal File 014125.CL XX Type Get Cal File

Conditions

Atm Press 760.00 mm Hg Units

Cal Temp 20.0 C Units dP Gain 10

Opr Temp 67.00 C

Min Velocity 0.00 Ft/min Units

Max Velocity 1.00 Ft/min Units

Cal Method 3. Acquire E & Type Velocity Manual

Acquire Cal Point

Points 19

Next Point 1

YP Vel 1 Calibrating Velocity

Acquire

Actual 0.000 Vel

Sequence

Down Up

Test Show Graph Next Screen Close

Figura C.4 – Condições da etapa de calibração.

A calibração é então realizada através da medição da velocidade local, posicionando-se a sonda, sucessivamente, nos pontos de interesse. Ou seja, para cada ponto de posicionamento da sonda, é fornecida uma estimativa da velocidade local ou da velocidade teórica naquele ponto. Com os dados de velocidade obtidos, o programa IFA ajusta a curva de calibração similar a observada na Figura C.5, que consiste em uma curva que relaciona a voltagem e a velocidade. Os erros, que consistem na diferença entre a velocidade real (a velocidade real é medida pela sonda) e a teórica (a velocidade teórica consiste em uma estimativa da velocidade informada ao programa IFA), também são calculados e são representados pelos pontos azuis na Figura C.5.

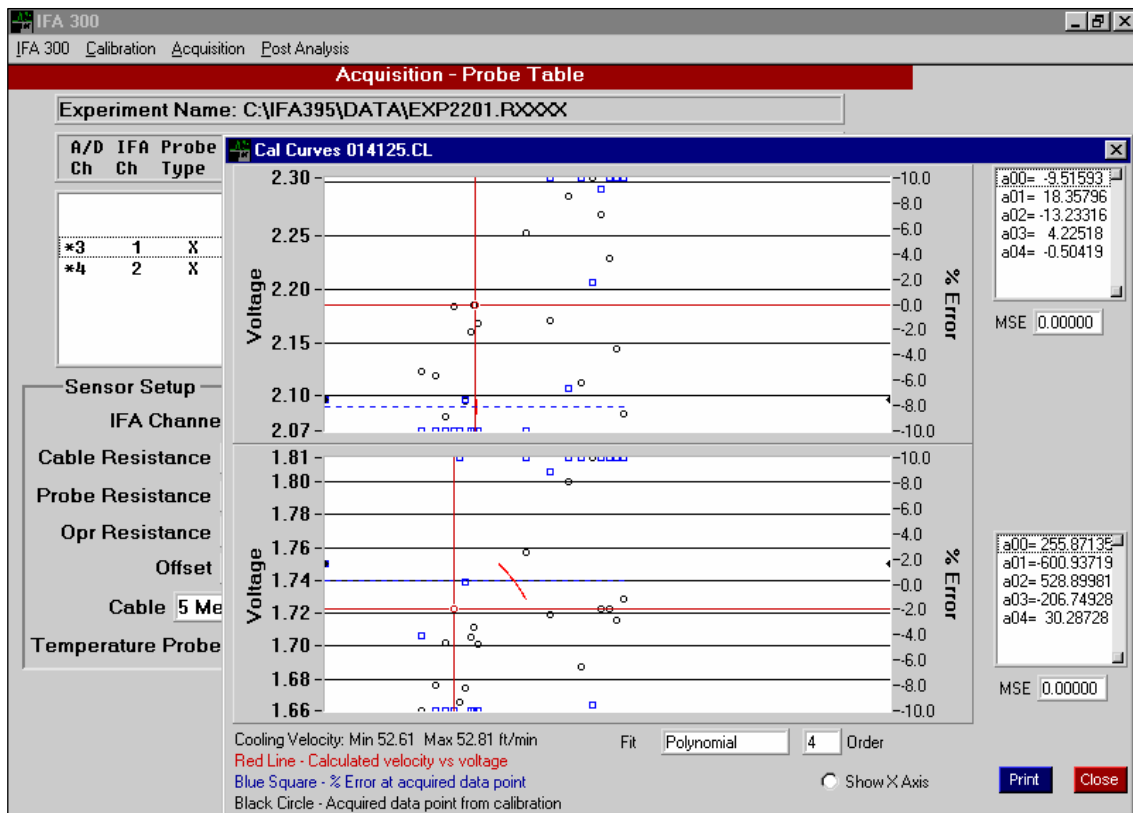


Figura C.5 – Curva de calibração.

- **Aquisição (“Acquisition Screen”)**

Uma vez realizada a calibração, pode-se dar início à obtenção dos dados experimentais, seguindo-se, para tanto, para a tela “Acquisition” (Figura C.6). Neste estágio, uma tela denominada “Probe Data” é apresentada e é verificada a precisão dos parâmetros para a aquisição de dados. Ou seja, comparam-se os parâmetros com aqueles informados na etapa de calibração.

IFA 300
IFA 300 Calibration Acquisition Post Analysis

Acquisition - Probe Table

Experiment Name: C:\IFA395\DATA\EXP2201.RXXXX

A/D Ch	IFA Ch	Probe Type	Serial Number	Cbl Res	Opr Res	Off set	Wire Film	Gain	Temp Pr	Probe Number
*3	1	X	014125	0.39	6.38	5.00	F	1	A	1
*4	2	X	014125	0.81	6.36	5.00	F	1	A	1

Sensor Setup

IFA Channel: 1 [Tag A/D Ch]
 Cable Resistance: 0.39 [Read Cable]
 Probe Resistance: [Read Probe]
 Opr Resistance: 6.38
 Offset: 5.00 [Gain]
 Cable: 5 Meter [Std] Bridge
 Temperature Probe: A

Serial #: 014125
 XX Type
 [Curves] [Add Probe]
 [Clear Probe]
 [Edit Line]
 [Save Line]

Experiment

[Get File]
 [Rename]
 [Next Screen]
 [Close]

Figura C.6 – “Probe Table”.

Clicando em “Next Screen”, abre-se uma nova tela na qual pode-se observar os dois componentes de velocidade (U e V) e a velocidade média, na forma gráfica e em tempo real (Figura C.7); isto é, durante o experimento obtém-se os pontos de maior e de menor velocidade. Isto permite compreender, em parte, o comportamento do escoamento

no meio fluido. A escala gráfica pode ser alterada e as medições dos resultados podem ser feitas de duas maneiras: manual ou automática.

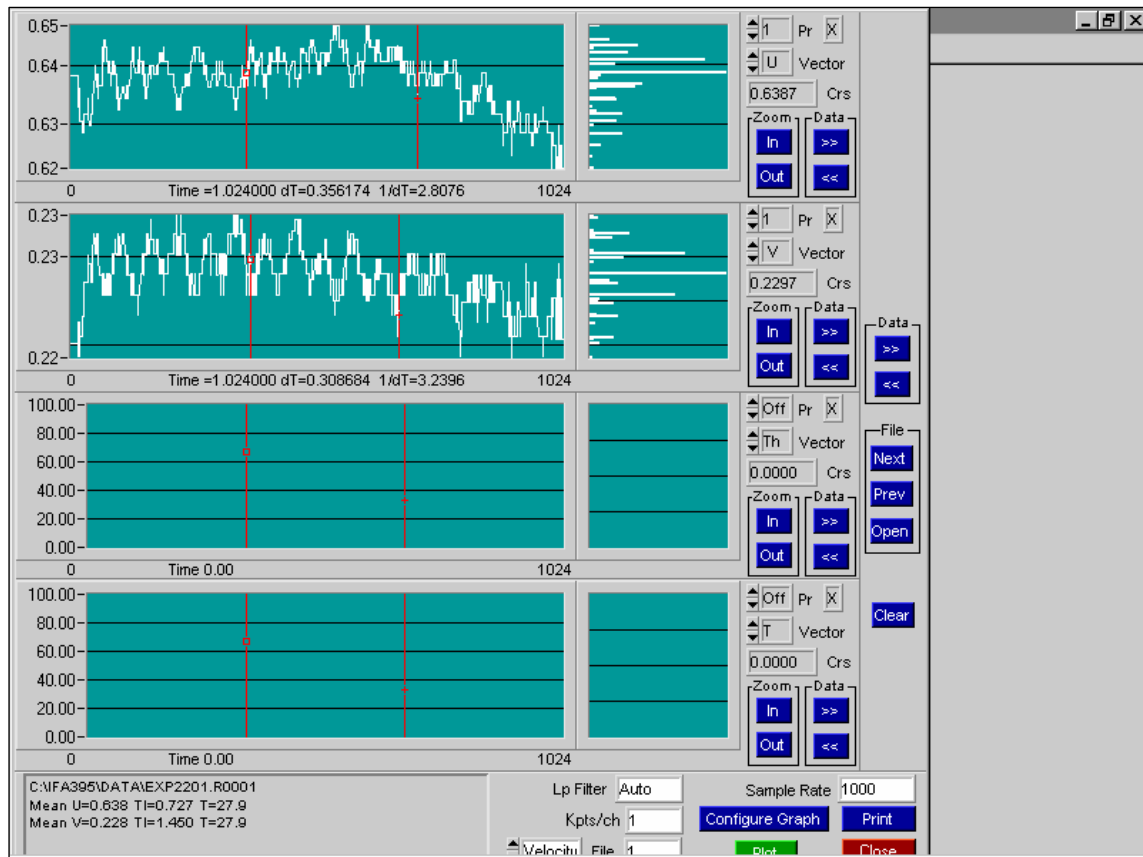


Figura C.7 – Tela de acompanhamento da aquisição de velocidades locais em tempo real.

- **Pós-Análise (“Post-Analysis”)**

Após a aquisição, os dados obtidos são analisados através da janela de trabalho “Analysis”, opção “Velocity” e em seguida em “Analyze File” (Figura C.8) para que o programa processe os dados. Estes são convertidos da extensão (.R) para arquivos na forma de texto com a extensão (.S). Além da velocidade, outros parâmetros de interesse

para a compreensão do escoamento, tais como a intensidade de turbulência, a magnitude da velocidade, entre outros, podem ser observados (Figura C.9).

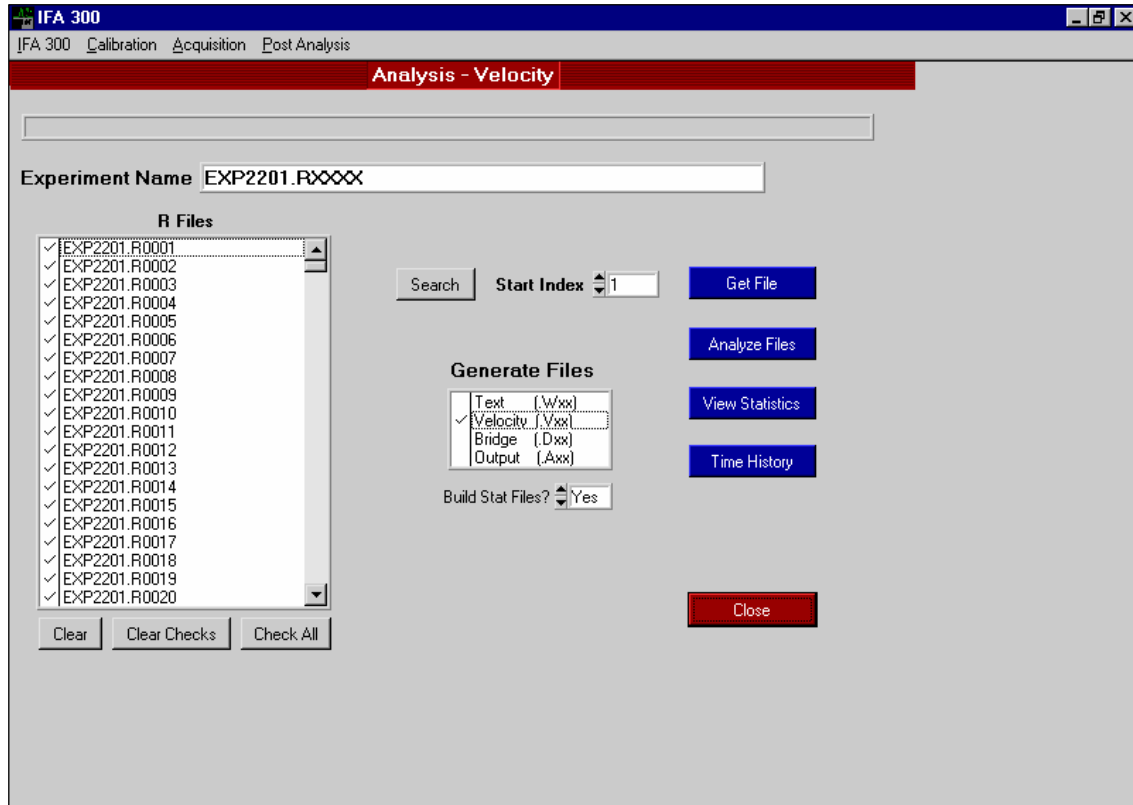


Figura C.8 – Análise dos dados.

Para a visualização de todos os parâmetros adquiridos, deve-se clicar sobre o ícone “View Statistics” (Figura C.9). Uma nova janela é aberta com informações sobre o escoamento medido através da técnica de anemometria de fio quente. Resumindo: neste ícone verifica-se o resultado do trabalho experimental (Figura C.9).

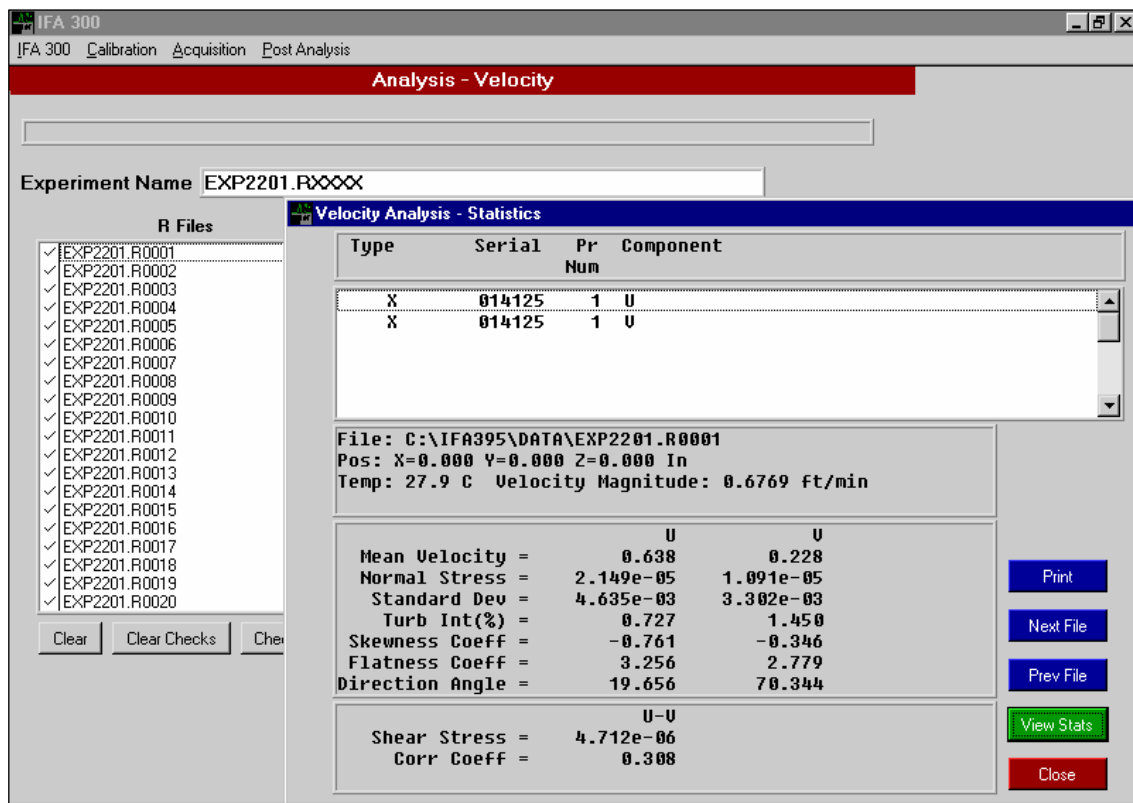


Figura C.9 – “Velocity Analysis Statistics”.