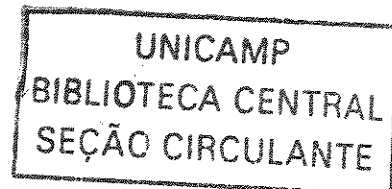


UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS



**MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO
NUMÉRICA DO ESCOAMENTO LÍQUIDO-VAPOR
NUM PRATO DE DESTILAÇÃO**

AUTOR: Dirceu Noriler
ORIENTADORA: Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel
CO-ORIENTADORES: Prof. Dr. Henry França Meier
Prof. Dr. Antonio André Chivanga Barros

Dissertação de Mestrado apresentada à
Faculdade de Engenharia Química como
parte dos requisitos exigidos para a obtenção
do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas, Abril de 2003

UNIDADE	BB
Nº CHAMADA	T/UNICAMP
	N774m
V	EX
TOMBO BCI	55138
PROC.	16-12410.3
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00.
DATA	07/08/03
Nº CPD	

BIBID. 297449

CM00187271-9

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

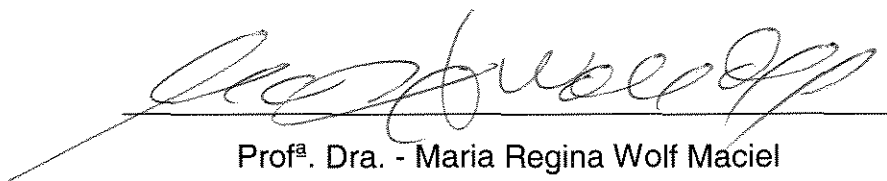
N774m Noriler, Dirceu
Modelagem matemática e simulação numérica do
escoamento líquido-vapor num prato de destilação / Dirceu
Noriler.--Campinas, SP: [s.n.], 2003.

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

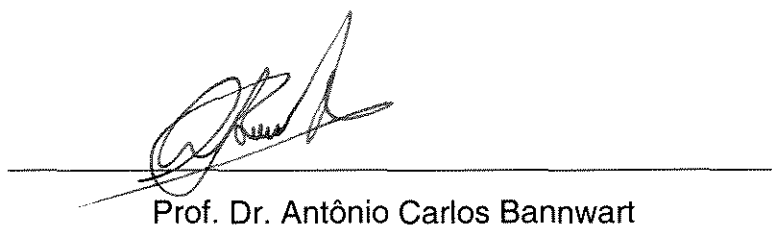
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação. 2. Método dos volumes finitos. 3.
Dinâmica dos fluidos. I. Maciel, Maria Regina Wolf. II
Meier, Henry França. III. Barros, Antonio André Chivanga.
IV. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. V. Título.

Dissertação de Mestrado defendida por Dirceu Noriler e aprovada em 01 de abril de 2003 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof^a. Dra. - Maria Regina Wolf Maciel



Prof. Dr. Antônio Carlos Bannwart



Prof^a. Dra. Marisa Masumi Beppu

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química.

A handwritten signature in black ink, written over a horizontal line. The signature is cursive and stylized, appearing to read 'M. Regina Wolf Maciel'.

Profª. Dra. Maria Regina Wolf Maciel

Dedicatória

Dedico este trabalho a minha mãe
Anaide a meus irmãos Carlos e Roberto
e em especial a minha noiva Ida.

Agradecimentos

A Prof^ª Maria Regina Wolf Maciel por acreditar em meu potencial e por sua orientação serena e sincera no transcorrer deste trabalho.

Aos professores Antônio André Chivanga Barros e Henry França Meier pela co-orientação e pela paciência quando dos meus momentos de devaneio.

Aos colegas Urso, Nagel, Wilton, Luiz, Rubens, Miria, Caliane, Edwin, Cristiano, Basilio, Igor, Marcos do LOPCA/FEQ/UNICAMP pelo apoio e pelos vários momentos alegres que tivemos juntos.

Aos colegas Vinicyus e Rodrigo do LFC/DEQ/FURB pelo companheirismo e apoio nos momentos difíceis.

Aos professores Laercio, Atilano, Pablo e Edelberto pelas discussões e ensinamentos.

Ao Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação da UNICAMP e ao Laboratório de Fluidodinâmica Computacional da FURB pela infra estrutura disponibilizada para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos integrantes do departamento de engenharia química da FURB pela receptividade e pela completa integração.

A minha família pela compreensão e por estar sempre ao meu lado.

A minha noiva Ida por sua paciência, apoio e eterno companheirismo, incondicionais.

A FAPESP pelo apoio financeiro (processo nº 01/01987-6) e pelo reconhecimento da importância do trabalho aqui desenvolvido.

Epígrafe

“Nada é tão ruim que não possa ficar pior e a recíproca é verdadeira”

Anônimo

“Se fosse fácil os americanos já tinham feito”

Anônimo

Abstract

The current models for predicting distillation column behavior are based on equilibrium and non-equilibrium stage concepts, but both use the hydro dynamical equilibrium in a macroscopic point of view. The objectives of this work are: developing the microscopic model to describe the gas–liquid flow on a distillation sieve tray, based on *momentum* equations under turbulence conditions, inter-phase *momentum* transfer and other modeling features; and applying the mathematical modeling in a commercial CFD code, for numerical experiments in order to verify the software and to validate the models. Three models were proposed: the first model named Two Dimension Single Model (2-DSM model), with two dimension and single phase assumptions; the second one, named Three Dimension Homogeneous Model (3-DHomM model), with two phases and three dimension with homogeneous flow, i. e., the liquid and the gas velocities are the same; and the last model is a model with two phases and three dimension assumptions, named Three Dimension Heterogeneous Model (3-DHetM model). These three models were applied in CFX 4.4 CFD commercial code from AEA Technology, by using the finite-volume methods with co-located variable in a generalized coordinate system, to obtain numerical solutions. The pre-processor BUILD were used to build up the numerical grid with the multi-block technique. The main results show that the 3-DHomM model, despite of its simplicity when compared with 3-DhetM, describes the fluid dynamics on a sieve distillation tray satisfactorily. The methodology proposed in this work also showed to be adequate, and with capability to describe the gas–liquid flow on a sieve distillation tray.

Resumo

Os modelos para representação de colunas de destilação atuais baseiam-se no conceito de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio, ambos considerando o equilíbrio hidrodinâmico em uma abordagem macroscópica. No entanto, em meados da década de 90, iniciou-se a aplicação de modelos microscópicos para subsidiar e incrementar a análise e otimização dos processos de refino, dando-se início à era dos códigos comerciais de Fluidodinâmica Computacional. O principal objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo microscópico para descrever a fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de uma coluna de destilação, com base na conservação de quantidade de movimento sob condições de turbulência e aplicar e implementar o modelo matemático no código comercial de fluidodinâmica computacional CFX, da AEA Technology, para a realização de um estudo de experimentação numérica de modelos e métodos. Foram propostos três modelos distintos para representação do escoamento em um prato perfurado de destilação: um modelo bidimensional e monofásico, 2-DSM (Liu *et al.* (1999)) , um modelo tridimensional bifásico e homogêneo, 3-DHomM, e por fim um modelo tridimensional bifásico e heterogêneo, 3-DHetM. Desta forma, os três modelos foram implementados no código comercial CFX 4.4 da AEA technology, o qual utiliza o método dos volumes finitos com variáveis co-localizadas resolvendo o sistema em coordenadas generalizadas. As malhas numéricas foram construídas por intermédio da técnica dos multi-blocos, utilizando o pré-processador “BUILD” presente no código. Os principais resultados mostram que o modelo 3-DTHomM representa, qualitativamente, de forma satisfatória a hidrodinâmica de um prato perfurado de destilação. A metodologia proposta neste trabalho se mostrou adequada e apta a reproduzir tal comportamento fluidodinâmico.

Índice

<i>Dedicatória</i>	<i>vii</i>
<i>Agradecimentos</i>	<i>ix</i>
<i>Epígrafe</i>	<i>xi</i>
<i>Abstract</i>	<i>xiii</i>
<i>Resumo</i>	<i>xv</i>
<i>Índice</i>	<i>xvii</i>
<i>Índice de Figuras</i>	<i>xxi</i>
<i>Índice de Tabelas</i>	<i>xxiii</i>
<i>Nomenclatura</i>	<i>xxv</i>
1 Introdução	1
1.1 Motivação pelo Tema	1
1.2 Objetivos Específicos	2
1.3 Temática da Dissertação	3
2 Revisão Bibliográfica	5
2.1 Modelagem de Estágios de Equilíbrio e de Não Equilíbrio	5
2.2 Fluidodinâmica Computacional	7
2.2.1 O que é CFD?	8
2.2.2 Como CFD funciona?	8
2.3 Método Numérico	10
2.4 Literatura atual	12
2.4.1 Colunas de Bolhas	13
2.4.2 Colunas de Destilação	14
2.5 Aspectos de investigação	16

3	<i>Modelagem Matemática</i>	19
3.1	Equação geral da conservação	20
3.1.1	Modelo 2-D monofásico (2-DSM)	21
3.1.2	Modelo 3-D bifásico homogêneo (3-DHomM)	26
3.1.3	Modelo 3-D bifásico heterogêneo (3-DHetM)	29
3.2	Condições de contorno	33
4	<i>Metodologia Numérica</i>	35
4.1	Integração Formal	35
4.2	Formulação Totalmente Implícita no Tempo	38
4.3	Linearização do Termo Fonte	39
4.4	Interpolação	40
4.5	Esquemas de Interpolação	43
4.6	Acoplamento Pressão-Velocidade	45
4.7	Solução do Sistema de Equações	50
4.8	Relaxações	52
4.9	Malha Numérica	53
4.10	Discretização dos Contornos	53
4.10.1	Balances de Conservação nos Volumes de Fronteira	54
4.10.2	Uso do Volumes Fictícios	57
5	<i>Resultados e Discussões</i>	59
5.1	Caso 1-Escoamento em um Módulo Experimental de Hidráulica	59
5.1.1	Aspectos geométricos	60
5.1.2	Metodologia de solução	62
5.1.3	Algoritmo de alisamento	63
5.1.4	Corroboração do modelo	66
5.1.5	Algumas conclusões	67
5.2	Caso 2-Prato Bidimensional	68
5.2.1	Condições geométricas	68
5.2.2	Metodologia de solução	70
5.2.3	Dependência da solução com a malha	71
5.2.4	Corroboração do modelo	72
5.2.5	Algumas conclusões	76

5.3	Caso 3-Coluna de Bolhas	77
5.3.1	Geometria e condições de contorno	78
5.3.2	Método numérico	79
5.3.3	Visualização científica	80
5.3.4	Algumas conclusões	84
5.4	Caso 4-Estágio com prato de 24 Furos	84
5.4.1	Condições operacionais e geométricas	85
5.4.2	Metodologia de solução	87
5.4.3	Análise dos resultados	87
5.4.4	Algumas conclusões	91
5.5	Caso 5-Comparação entre os Modelos 3-DHomM e 3-DHetM para um estágio com prato de 66 furos	92
5.5.1	Unidade experimental	92
5.5.2	Dinâmica do processo	95
5.5.3	Altura de líquido claro sobre o prato	96
5.5.4	Distribuição das frações volumétricas ao longo da altura do estágio	98
5.5.5	Campo vetorial e frações volumétricas	100
6	Conclusões e sugestões	105
6.1	Conclusões	105
6.2	Sugestões	107
7	Bibliografia	109

Índice de Figuras

<i>Figura 3.1. Representação da situação física a ser modelada.....</i>	<i>19</i>
<i>Figura 4.1. Representação de um volume de controle genérico</i>	<i>37</i>
<i>Figura 4.2. Representação esquemática dos pontos em um sistema bidimensional</i>	<i>51</i>
<i>Figura 4.3. Volumes de controle em uma fronteira hipotética.....</i>	<i>54</i>
<i>Figura 5.1. Módulo de hidráulica.</i>	<i>60</i>
<i>Figura 5.2. Dimensões do módulo de hidráulica (em milímetros).....</i>	<i>61</i>
<i>Figura 5.3 Domínio físico para o caso 1.</i>	<i>61</i>
<i>Figura 5.4. Malha numérica gerada para o caso 1.</i>	<i>63</i>
<i>Figura 5.5. Avaliação do algoritmo de Alisamento (fração volumétrica de líquido).</i>	<i>64</i>
<i>Figura 5.6. Dinâmica do escoamento em um módulo de hidráulica (fração de líquido).....</i>	<i>65</i>
<i>Figura 5.7. Campo de pressão.</i>	<i>66</i>
<i>Figura 5.8. Campo de velocidade.</i>	<i>66</i>
<i>Figura 5.9. Comparação com dados experimentais.....</i>	<i>67</i>
<i>Figura 5.10. Domínio físico e condições de contorno para o caso 2.....</i>	<i>69</i>
<i>Figura 5.11. Malha numérica: (a) 20 x 20; (b) 40 x 40; (c) 60 x 60; (d) 80 x 80 células.....</i>	<i>71</i>
<i>Figura 5.12. Análise das diferentes malhas numéricas.....</i>	<i>72</i>
<i>Figura 5.13. Avaliação de C_e (Coeficiente de Transferência).....</i>	<i>73</i>
<i>Figura 5.14. Percentual de recirculação no prato.....</i>	<i>74</i>
<i>Figura 5.15. Campo de pressão.</i>	<i>74</i>
<i>Figura 5.16. Campo de velocidade.</i>	<i>75</i>
<i>Figura 5.17. Mapa de energia cinética turbulenta (k).....</i>	<i>75</i>
<i>Figura 5.18. Mapa da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ).....</i>	<i>76</i>
<i>Figura 5.19. Coluna de bolha experimental.</i>	<i>77</i>
<i>Figura 5.20. Domínio físico e condições de contorno para o caso 3.....</i>	<i>78</i>
<i>Figura 5.21. Malha numérico para o caso 3 com 16416 células.....</i>	<i>80</i>
<i>Figura 5.22. Fotografias da coluna de bolhas experimental em 10 segundos de tempo real.</i>	<i>81</i>
<i>Figura 5.23. Mapas de fração volumétrica de líquido obtidos com esquema de interpolação de ordem superior e algoritmo de alisamento (SSA) para 10 segundos de tempo real.....</i>	<i>82</i>
<i>Figura 5.24. Mapas de fração volumétrica de líquido obtidos com esquema de interpolação de primeira ordem para 10 segundos de tempo real.</i>	<i>82</i>
<i>Figura 5.25. Mapas de fração volumétrica de líquido obtidos com esquema de interpolação de ordem superior para 10 segundos de tempo real.</i>	<i>83</i>
<i>Figura 5.26. Mapas de pressão e velocidades em regime estacionário.....</i>	<i>83</i>

<i>Figura 5.27. Domínio físico para o Caso 4.....</i>	<i>85</i>
<i>Figura 5.28. Malha numérica gerada para o caso 4.....</i>	<i>87</i>
<i>Figura 5.29. Mapas de fração volumétrica de líquido para o caso 4-a, em 12 segundos de tempo real (plano central e ortogonal à entrada).</i>	<i>88</i>
<i>Figura 5.30. Mapas de fração volumétrica de líquido para o caso 4-b, em 12 segundos de tempo real (plano central e ortogonal à entrada).</i>	<i>89</i>
<i>Figura 5.31. Mapas de fração volumétrica de líquido para o caso 4-a, em 12 segundos de tempo real (visão de topo na superfície do prato).</i>	<i>90</i>
<i>Figura 5.32. Mapas de pressão e velocidade para o modelo 3-DHomM no caso 4-a.</i>	<i>91</i>
<i>Figura 5.33. Esquema do aparato experimental.....</i>	<i>93</i>
<i>Figura 5.34. Esquema do aparato experimental (a).</i>	<i>94</i>
<i>Figura 5.35. Esquema do aparato experimental (b).</i>	<i>94</i>
<i>Figura 5.36. Acompanhamento da taxa de acúmulo.....</i>	<i>96</i>
<i>Figura 5.37. Comparação entre os modelos 3-DHomM e 3-DHetM com a correlação de Bennett et al. (1983) para altura de líquido claro.</i>	<i>98</i>
<i>Figura 5.38. Comparação entre os modelos 3-DHomM e 3-DHetM para dispersão ao longo da dispersão... 99</i>	
<i>Figura 5.39. Variação da velocidade superficial do gás para fração de líquido ao longo da dispersão..... 99</i>	
<i>Figura 5.40. Campo vetorial em um plano central x-z para $Q_L/W=2,134 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $u_g=0,9 \text{ m/s}$: (a) 3-DHetM, (b) 3-DHomM.....</i>	<i>100</i>
<i>Figura 5.41. Campo vetorial a 0,05 m acima do prato para $Q_L/W=2,134 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $u_g=0,9 \text{ m/s}$: (a) 3-DHetM, (b) 3-DHomM.....</i>	<i>101</i>
<i>Figura 5.42. Mapa de frações volumétricas em um plano central x-z para $Q_L/W=2,134 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $u_g=0,9 \text{ m/s}$: (a) 3-DHetM, (b) 3-DHomM.....</i>	<i>102</i>
<i>Figura 5.43. Mapa de frações volumétricas a 0,05 m acima do prato para $Q_L/W=2,134 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $u_g=0,9 \text{ m/s}$: (a) 3-DHetM, (b) 3-DHomM.....</i>	<i>103</i>
<i>Figura 5.44. Dispersão gás-líquido em um estágio real de destilação para $Q_L/W=L=2,134 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $u_g=0,9 \text{ m/s}$.....</i>	<i>103</i>

Índice de Tabelas

<i>Tabela 3.1. Constantes do modelo $k-\varepsilon$ padrão</i>	24
<i>Tabela 3.2. Forma compacta do modelo 2-D monofásico (2-DSM).</i>	25
<i>Tabela 3.3. Forma compacta do modelo 3-D homogêneo. (3-DhomM)</i>	28
<i>Tabela 3.4. Forma compacta do modelo 3-D heterogêneo (3-DhetM).</i>	31
<i>Tabela 3.4. Continuação</i>	32
<i>Tabela 5.1. Condições de contorno para o caso 1 (modelo 3-DTHomM).</i>	62
<i>Tabela 5.2. Características do caso analisado.</i>	69
<i>Tabela 5.3. Condições de contorno para o caso 2 (modelo 2-DSM).</i>	70
<i>Tabela 5.4. Características do caso analisado.</i>	78
<i>Tabela 5.5. Condições de contorno para o caso 3 (modelo 3-DTHM).</i>	79
<i>Tabela 5.6. Parâmetros geométricos e operacionais do caso 4.</i>	86
<i>Tabela 5.7. Condições de contorno para o caso 4 (modelo 3-DTHM).</i>	86
<i>Tabela 5.8. Parâmetros geométricos e operacionais do caso 5.</i>	92

Nomenclatura

Letras Latinas

A	área, [m ²]
a, b	coeficiente
C	parâmetro utilizado na correlação de Bennett <i>et al.</i> (1983)
C _μ , C ₁ , C ₂	constantes do Modelo de turbulência
C _D	coeficiente de arraste
C _e	coeficiente de Transferência
D	diâmetro da coluna, [m]
d	diâmetro dos furos, [m]
d _o	diâmetro médio das bolhas, [m]
f	fração volumétrica
F	parcela difusiva, força resistiva
F _o	fator definido por van Winkle
F _R	força de arraste
F _s	força gerada pela tensão superficial
G, G _T , G _{T2}	geração de turbulência
g	vetor aceleração da gravidade, [m/s ²]
h	altura de líquido no prato, [m]
H	altura da coluna, [m]
h _w	altura da represa, [m]
I	intensidade de turbulência
k	energia cinética turbulenta, [m ² /s ²]
L	taxa de vazão de líquido, [m ³ /s m]
L _s	escala de comprimento
M	vazão mássica, [kg/s]
N	número
n	vetor normal
P	pressão, Pa

Pe	número de Peclet
Q	fluxo difusivo de ϕ
Q_L	vazão volumétrico de líquido, [m ³ /s]
R	resíduo , (ou raio, [m])
Re	número de Reynolds
R_f	fator de redução
S	termo fonte
T	temperatura , [°C]
t	tempo, [s]
Tol_1	tolerância
u	componente de velocidade na direção x, [m/s]
u_s	velocidade de gás no furo, [m/s]
v	componente de velocidade na direção y, [m/s]
\mathbf{v}	vetor velocidade, [m/s]
V	volume, [m ³]
VF	volume finito
w	componente de velocidade na direção z, [m/s]
W	comprimento da represa, [m]
x	coordenada, [m]
y	coordenada, [m]
z	coordenada, [m]

Letras Gregas

α, β	parâmetros dos esquemas de interpolação
ϵ	taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, [m ² /s ³]
ϕ	propriedades fluidodinâmicas (u, v, w, k e ϵ)
Γ	coeficiente de difusão
κ	raio de curvatura
λ	fator de relaxação
μ	viscosidade, [kg/m s]
ρ	massa específica, [kg/m ³]

σ	tensão superficial, [N/m]
$\sigma^\varepsilon, \sigma^k$	constantes do modelo de turbulência
τ	tempo, [s]
ξ	direção ortogonal à parede

Subscrito

0	valor inicial
b	face base
B	ponto base
e	face leste
E	ponto leste
Eucl	norma euclidiana
g	fase gasosa
in	referindo-se a região de entrada
k	referente fase
l	fase líquida
MAX	valor máximo
mix	propriedades de mistura
n	face norte
N	ponto norte
nb	faces
out I, out II	referindo-se a região de saída
out,	
P	ponto
s	face sul
S	ponto sul
t	face topo
T	ponto topo
VolFic	volume fictício
w	face oeste
W	ponto oeste

x	coordenada x
y	coordenada y
z	coordenada z
ϕ	propriedade fluidodinâmica
Superscript	
B	da correlação de Bennett <i>et al.</i> (1983)
OLD	tempo anterior
*	estimativa
'	correção
u	velocidade U
v	velocidade v
w	velocidade w
t	Turbulência

CAPÍTULO 1

1 Introdução

1.1 Motivação pelo Tema

A indústria de petróleo é umas das grandes propulsoras do avanço tecnológico no mundo. Isto se deve ao alto grau de competitividade existente em torno do petróleo, gerando, assim, uma busca incessante de novas tecnologias que possibilitem uma melhor eficiência em seus processos. Além disso, o maior entendimento, em nível microscópico, dos mecanismos que ocorrem em processos de grande escala é cada vez mais relevante, principalmente quando a sofisticação dos equipamentos e processo. Como a indústria do petróleo é fornecedora de matéria prima e energia para todos os demais setores industriais, seus processos estão em constante evolução. Em vários momentos da história, tem servido como berço para o desenvolvimento de tecnologias. Dentro desta linha, surge uma operação unitária fundamental para obtenção de tais produtos: a destilação.

Esta operação unitária é responsável por grande parte do consumo de energia em refinarias de petróleo, visto que seu principal agente de separação é o calor. Nas indústrias químicas e petroquímicas, 40-50% dos equipamentos utilizados são relacionados à separação, e 70% do consumo de energia é creditada à separação, sendo 95% desta devido ao consumo em colunas de destilação (Soares, 2000). Por outro lado, o uso da destilação proporciona um considerável aumento do valor agregado dos produtos, além de possibilitar o cumprimento das exigências cada vez mais restritas do mercado, quer seja em termos econômicos quer seja na minimização da geração de poluentes. Isto fomenta a busca por novas tecnologias mais eficientes e flexíveis.

Apesar da destilação ser uma operação amplamente utilizada, seu considerável desenvolvimento ocorreu a partir da segunda grande guerra mundial. Naquela época, a

demanda por combustíveis fósseis para a aviação e dos demais derivados do petróleo proporcionou grandes investimentos na área.

Dentro desta expectativa, esta investigação científica procura acoplar duas linhas de pesquisa, *Desenvolvimento de Processos de Separação e Fluidodinâmica Computacional*, na tentativa de associar um estudo de fluidodinâmica computacional aos estudos tradicionais de transferência de calor e massa em colunas de destilação, em especial àquelas utilizadas nos processos de refino de petróleo. Pretende-se desenvolver um modelo matemático baseado na conservação de quantidade de movimento, num referencial euleriano-euleriano¹, sob condições de turbulência, que possibilite a predição dos perfis de velocidade do líquido num prato perfurado de uma coluna de destilação com vertedor, considerando-se os efeitos do escoamento cruzado da fase vapor sobre a quantidade de movimento e sobre as condições de turbulência da fase líquida. Este estudo permite identificar padrões de escoamento do líquido e as regiões de maior transferência de calor e massa, úteis para o desenvolvimento de projetos de pratos perfurados com maior eficiência, haja visto que estes equipamentos industriais são considerados como os que induzem maior consumo de energia nas indústrias químicas e petroquímicas.

Desenvolver uma metodologia para o aperfeiçoamento do projeto de colunas de destilação com pratos perfurados para aplicação na indústria do refino de petróleo que considere uma análise rigorosa dos fenômenos de transferência de quantidade de movimento sobre a eficiência da transferência de calor e massa é imprescindível. A metodologia pressupõe o desenvolvimento, a implementação numérica e a aplicação de um modelo microscópico de conservação de quantidade de movimento sob condições de turbulência, que descreva o comportamento fluidodinâmico do líquido na superfície de um prato perfurado sob influência do vapor.

1.2 Objetivos Específicos

¹ Diz-se euleriano-euleriano porque ambas as fases, líquido e gás, são tratadas pelo enfoque euleriano, o seja, ambas as fases são consideradas como fluidos contínuos.

- Desenvolvimento de um modelo microscópico para descrever a fluidodinâmica do escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de uma coluna de destilação, com base na conservação de quantidade de movimento sob condições de turbulência.
- Aplicação e implementação do modelo matemático em um código comercial de fluidodinâmica computacional, para a realização de um estudo de experimentação numérica de modelos e métodos.

1.3 Temática da Dissertação

Os principais temas constituintes desta dissertação são:

Uma breve revisão bibliográfica relativa às colunas de destilação, às técnicas de CFD e as suas aplicações para simulação da fluidodinâmica em colunas de destilação, é apresentada no **Capítulo 2**.

A modelagem matemática é apresentada no **Capítulo 3**. Foram desenvolvidos três modelos distintos para a simulação de colunas de destilação: um bidimensional e monofásico (2-DSM – Modelo Bidimensional Monofásico), e dois tridimensionais e bifásicos com e sem hipótese da homogeneidade do escoamento, 3-DhomM – Modelo Homogêneo Tridimensional Bifásico - e 3-DhetM – Modelo Heterogêneo Tridimensional Bifásico -, respectivamente, ambos com enfoque euleriano-euleriano.

A metodologia numérica é apresentada no **Capítulo 4**. A obtenção da equação geral de discretização do método dos volumes finitos, assim como seus algoritmos de solução, discretização dos contornos, método de solução do sistema linear, etc, são apresentados em detalhes.

O **Capítulo 5** discute a metodologia, propõe estudos de casos, apresenta e analisa os resultados obtidos neste trabalho.

O **Capítulo 6** traz à tona as principais conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

2 Revisão Bibliográfica

O objetivo deste capítulo é situar o leitor nos assuntos destilação e fluidodinâmica computacional (CFD – “Computational Fluid Dynamics”), além de situar o estado da arte em CFD aplicado à colunas de destilação.

2.1 Modelagem de Estágios de Equilíbrio e de Não Equilíbrio

A destilação consiste na separação de misturas líquidas de substâncias voláteis em seus componentes puros, ou em grupos de componentes (Barros,1997).

Os conceitos de transferência de massa no interior de colunas de destilação permitem um conhecimento adequado da eficiência do processo, pois o número de unidades de transferência de massa é a base para o desenvolvimento dos projetos de colunas de recheio, caracterizadas pelo contato contínuo entre as fases no interior do equipamento (Coulson *et al.*,1991). Em colunas de pratos, o líquido entra em contato com o vapor em cada prato onde deve haver forte interação entre as fases, fenômeno que condiciona o enriquecimento dos compostos mais voláteis na corrente do vapor ascendente e o seu esgotamento no líquido descendente. Neste processo, o líquido desce pela ação da gravidade, enquanto que o vapor sobe devido a uma pequena diferença de pressão existente de estágio a estágio ao longo da coluna de destilação (King, 1980)

Na atualidade, existem dois conceitos que descrevem a modelagem macroscópica de colunas. A primeira é caracterizada pelo equilíbrio entre as correntes que abandonam o prato, o qual é corrigido pela eficiência do prato (modelagem de estágios de equilíbrio). A

segunda é caracterizada pela não existência de equilíbrio entre as correntes que abandonam o prato (modelagem de estágios de não equilíbrio), que apresenta explicitamente os fluxos de transferência de massa e calor entre as fases no modelo matemático macroscópico.

Para a modelagem de estágio de equilíbrio, é necessária a introdução do conceito de eficiência para corrigir os desvios oriundos da consideração do equilíbrio pois, na prática, dificilmente os estágios permitem o equilíbrio (Pescarini, 1996) entre as fases. Para descrever o modelo matemático é necessário estabelecer as equações de equilíbrio (E), dos balanços de massa (M) e energia (H), do número de estágios de equilíbrio, da localização da posição de alimentação e suas composições (Soares, 2000). Neste modelo, é feita a suposição de que as correntes que deixam o estágio estão em equilíbrio termodinâmico entre si. A solução das equações denominado MESH (“Mass, Equilibrium, Sum (Restrição) and Heat”), através de algoritmos específicos, permitem obter os fluxos de líquido e vapor, perfis discretos de temperatura e composição ao longo da coluna (Krishnamurthy e Taylor, 1985a).

Na modelagem de estágios, são consideradas equações de transferência de massa e energia nas fases líquida e vapor, assumindo relações de equilíbrio local na interface entre as fases, refutando a hipótese principal da modelagem de equilíbrio que relaciona o equilíbrio entre as correntes de líquido e vapor que deixam o prato. As equações de transferência de massa e energia, utilizadas na modelagem de estágios de não equilíbrio, necessitam de parâmetros físicos dos componentes e da mistura, tais como viscosidade, densidade, peso molecular, difusividade, capacidade calorífica, condutividade térmica, antes negligenciados para cálculos de colunas de destilação. Para resolução das equações, podem ser utilizados os mesmos métodos numéricos utilizados com o do modelo de equilíbrio.

Almeida (1994) observou que a área efetiva de transferência de massa é influenciada por parâmetros físicos das fases, além da geometria do prato. Tanto na modelagem de equilíbrio quanto na de não equilíbrio, é assumida a hipótese de equilíbrio mecânico, ou seja, $(P_i^V = P_i^L = P_i^I)$ (Barros, 1997). Esta hipótese pode mascarar alguns efeitos decorrentes do não equilíbrio mecânico que ocorre em um prato de destilação. O avanço tecnológico permite incrementar estes modelos, minimizando o número de hipóteses simplificadoras, gerando assim, um modelo mais abrangente na avaliação de colunas de destilação.

2.2 Fluidodinâmica Computacional

O avanço na modelagem matemática segue uma ordem cronológica e de complexidade, onde os efeitos fenomenológicos mais complexos vão sendo incorporados aos modelos. Os modelos são classificados da seguinte forma (Himmelblau e Bischoff, 1968):

- a) Modelagem macroscópica;
- b) Modelagem dos máximos gradientes;
- c) Modelagem dos múltiplos gradientes;
- d) Modelagem microscópica;
- e) Modelagem molecular.

A hipótese do *continuum*, caracterizada pela substituição da estrutura molecular real por um meio hipotético (Streeter, 1977), é assumida nos itens a, b, c, d. Já a modelagem molecular desconsidera esta hipótese, avaliando todas as interações moleculares envolvidas em cada fenômeno. Os modelos macroscópicos assumem que as variáveis não variam no espaço, somente o tempo aparece como uma variável independente dos balanços gerais. Estas simplificações tornam a resolução das equações fácil e rápida, mas também levam a uma perda das características do sistema. A modelagem microscópica tem suas equações baseadas no balanço diferencial de conservação de massa, energia e quantidade de movimento. Esta modelagem abrange quase todos os efeitos fenomenológicos mas, em contrapartida, torna complicada a solução das equações.

A resolução destas equações só é possível através de métodos numéricos que deram origem à fluidodinâmica computacional (CFD). As técnicas de CFD vêm ganhando espaço na engenharia química a partir da década de 90, sendo aplicada em muitos casos, tais como, escoamentos em ciclones (Meier, 1998); coluna de bolhas (Sokolichin e Eigenberger, 1999); precipitadores reativos (Al-Rashed e Jones, 1999); entre outros.

2.2.1 O que é CFD?

Fluidodinâmica Computacional (CFD – “Computational Fluid Dynamics”), refere-se a uma metodologia de análise dos fenômenos que envolvem escoamento de fluido associados ou não com a transferência simultânea de calor e massa, com ou sem reação química, mudanças de fase, fenômenos de interface, entre outros, por meios de simulações numéricas com computador.

2.2.2 Como CFD funciona?

Na atualidade, existem alguns “Softwares” comerciais destinados a resolver problemas que envolvam a metodologia de CFD. Embora, inicialmente, o método numérico mais aplicado para resolução das equações de conservação se baseasse em elementos finitos, os códigos atuais se baseiam no método dos volumes finitos. Entre eles se destacam o CFX, o FLUENT e o PHOENICS.

Os códigos de CFD estão estruturados em essência com algoritmos numéricos para a solução de problemas que envolvem o escoamento de fluidos. Para possibilitar fácil acesso ao seu poder de resolução, todos os pacotes comerciais de CFD incluem sofisticadas interfaces com o usuário no que diz respeito à caracterização do problema e à análise dos resultados. Portanto, todos os códigos contêm três elementos principais:

- (i) um pré-processador;**
- (ii) um processador ou “solver”;**
- (iii) um pós-processador.**

Estes elementos consistem em:

(i) Pré-processador: consiste na caracterização computacional de um problema físico real por meio de uma interface amigável e subsequente conformação adequada da

realidade no plano computacional para ser utilizado pelo processador. As atividades do usuário no estágio de pré processamento envolvem:

- Definição da geometria da região de interesse: o domínio físico;
- Geração da malha – a subdivisão do domínio físico em um número de pequenos sub-domínios, ou volumes finitos que no todo compõem a malha numérica (domínio computacional);
- Seleção do modelo para caracterização dos fenômenos físico-químicos;
- Definição das propriedades dos fluidos;
- Especificação apropriada das condições de contorno nas células, que coincidem ou fazem fronteira com os limites do domínio espacial;

(ii) **Processador:** A principal corrente de técnicas de solução numérica implementadas nos códigos comerciais de CFD é a dos volumes finitos. As principais diferenças entre as diferentes correntes estão associadas com a forma matemática das aproximações e com os processos de discretização das equações diferenciais parciais. Em linhas gerais, os métodos numéricos que formam a base do *solver* realizam os seguintes passos:

- Aproximação das variáveis através de esquemas de interpolação;
- Discretização das equações do modelo;
- Solução das equações algébricas.

(iii) **Pós-processador:** versáteis ferramentas para visualização dos resultados numéricos. Estas incluem:

- Visualização da geometria e malha;

- Gráficos de vetores;
- Gráficos de contorno (linhas e preenchimento);
- Gráficos de superfície (2D e 3D);
- Trajetórias de partícula e linhas de corrente;
- Animações.

2.3 Método Numérico

Os métodos numéricos tiveram uma revolução nas últimas três décadas, impulsionada pelo avanço na área da microeletrônica. O desenvolvimento de computadores com alto desempenho numérico tornou possível a utilização de métodos para a solução de modelos complexos e com poucas simplificações. O desejo de engenheiros e cientistas em solucionar problemas até então sem solução, motivou, por conseguinte, o avanço dos métodos numéricos.

Em princípio, entre os diversos métodos propostos para a solução das equações de conservação na ótica microscópica (Navier-Stokes), destacam-se dois: o método das diferenças finitas (MDF) e o método dos elementos finitos (MEF). No desenvolvimento do MDF, os problemas de interesse estavam relacionados à mecânica dos fluidos onde as não-linearidades, oriundas do termo convectivo, dificultavam a implementação de geometrias complexas. Paralelamente, o MEF foi desenvolvido para solucionar problemas elásticos, com ausência no modelo das não-linearidades dos termos convectivos. Mas, a principal vantagem do MEF é a utilização de malhas não estruturadas que permitem a análise de problemas com geometrias complexas. No início da década de 70 existiam, portanto, dois métodos capazes de resolver as equações de Navier-Stokes, ambos com suas vantagens e desvantagens. Suas fragilidades começaram a ser eliminadas com a adoção do método de Galerkin e dos resíduos ponderados para o MEF, e a utilização de sistemas adaptáveis à geometria arbitrária do domínio de cálculo para o MDF (Souza, 2000).

Estes métodos, entretanto, ainda apresentavam problemas de instabilidade onde a convecção era dominante. Estes problemas motivaram pesquisas para o desenvolvimento

do método dos volumes finitos² (MVF), que por manter o caráter físico de cada termo nas equações discretas, possibilita uma maior robustez (Maliska, 1995).

A literatura apresenta uma considerável quantidade de material relacionado à utilização do método dos volumes finitos. Destacam-se: Patankar e Spalding (1971) (precursores do método); Patankar (1981); Van Doormaal e Raithby (1984); Meier *et al.* (1999); além de livros como Patankar (1980), Minkowycz *et al.* (1988) e Maliska (1995).

Patankar (1980) relaciona problemas no uso de um arranjo colocalizado das variáveis conduzindo a inconsistências físicas nos resultados, especialmente relacionadas ao campo de pressão. Peric *et al.* (1988) e Marchi *et al.* (1989) utilizam arranjos que adotam funções de interpolação mais complexas, além de um processo mais completo para a equação de pressão, com resultados positivos. Maliska (1995) e Meier *et al.* (1999), destacam que num arranjo de variáveis descontraídas, onde as velocidades são armazenadas nas faces dos volumes de controle, e as variáveis escalares como a pressão, no centro da malha computacional, podem ser eliminados muitos problemas citados por Patankar (1980).

Existem vários esquemas de interpolação para definir as variáveis nas faces dos volumes de controle, tais como esquemas tradicionais (diferença central), esquemas de ordem superior, entre outros. A escolha do melhor esquema depende muito do modelo adotado. Esquemas de primeira ordem podem trazer problemas de difusão numérica, mas são de fácil implementação e exigem um menor esforço computacional. Além disso, algumas regras básicas devem ser seguidas na escolha do método (Patankar, 1980), como exemplo a positividade dos coeficientes, a conservação dos fluxos nas interfaces, etc.

A natureza segregada do processo de solução requer que cada variável tenha uma equação evolutiva para ser avançada (Maliska, (1995)). Considerando um problema de escoamento tridimensional com transferência de calor onde existem cinco equações a serem resolvidas: conservação da massa, uma equação do movimento para cada direção e uma equação da energia. As incógnitas são massa específica, pressão, temperatura e os três componentes do vetor velocidade. Nota-se uma diferença entre o número de equações e de

² O método dos volumes finitos é o método utilizado pelo código comercial CFX da AEA Technology.

variáveis, impossibilitando a solução do sistema de equações. Para tanto, em problemas que massa específica tem variação considerável com pressão, uma equação de estado, que relacione massa específica com temperatura e pressão pode ser empregada para o fechamento do problema. Já para problemas em que a massa específica não for fortemente dependente da pressão, uma equação de estado não pode ser utilizada como equação evolutiva para pressão. Mas sabemos que é necessária a adição de uma equação complementar para a pressão. Diante disto, é necessária a utilização de acoplamentos entre as equações, onde o acoplamento pressão-velocidade surge como solução para o fechamento do problema. O acoplamento pressão-velocidade foi tratado inicialmente por Patankar e Spalding (1971), com o desenvolvimento do método SIMPLE (“Semi IMPLICIT Linked Equations”), onde a pressão é escrita como a soma da melhor estimativa de pressão possível mais uma correção, que é calculada de forma a satisfazer a equação da conservação da massa. Os demais métodos que surgiram são derivados do SIMPLE como o SIMPLER (SIMPLE-Revisado), PRIME (“Pressure Implicit Momentum Explicit”), entre outros. O SIMPLEC (SIMPLE-Consistente), proposto por Van Doormaal e Raithby (1984), é o mais utilizado atualmente, pois foi desenvolvido visando maior estabilidade do acoplamento e, portanto, melhores taxas de convergência e estabilidade numérica.

Existem diversos métodos para a solução do sistema de equações tais como Jacobi, Gauss-Seidel, MSI (“Modified Strongly Implicit”), entre outros (Maliska (1995)). No entanto, o sistema de equações formado quando o método dos volumes finitos é usado, tem uma característica importante: a matriz é tridiagonal. Sistemas com esta característica podem ser resolvidas por um método muito simples, o TDMA (“TriDiagonal Matrix Algorithm”). Um sistema de equações não lineares pode ser resolvido por uma sequência de sistemas lineares, o que resulta numa técnica denominada linha por linha com TDMA.

2.4 Literatura atual

A literatura apresenta uma considerável quantidade de material bibliográfico referente a colunas de destilação. Porém, a aplicação de CFD em destilação é bastante recente, tendo como precursores Liu *et. al.* (2000), Van Baten e Krishna (2000) e Soares *et al.* (2001).

Historicamente, colunas de bolhas foram objeto inicial dos estudos de CFD em sistemas bifásicos gás-líquido. Provavelmente como os modelos para colunas de bolhas e para colunas de pratos perfurados são similares, é recomendável, face à simplicidade da geometria, iniciar os estudos numéricos com colunas de bolhas.

2.4.1 Colunas de Bolhas

Boisson e Malin (1996) apresentam um trabalho em que aplica técnicas de CFD em colunas de bolhas. Um modelo bidimensional baseado nas equações de Navier Stokes para a mistura gás-líquido, com a hipótese do escoamento heterogêneo foi usado como base teórica do trabalho. Além das equações de conservação, foram adicionadas ao modelo equações constitutivas para a força interfacial de arraste, forças de aceleração de massa aparente na fronteira da fase contínua nas imediações da fase dispersa (“Virtual Mass Force”), forças interfaciais de ascensão (“Satmann Lift Force”) e forças interfaciais de pressão. O modelo de turbulência utilizado foi o $k-\epsilon$ padrão. O método numérico empregado foi o método dos volumes finitos implementado no código comercial PHOENICS. Os resultados apresentados fazem referência à comparação de dados experimentais para validação do modelo e incorpora mapas de vetores e de fração volumétrica. O autor conclui que as forças adicionadas permitem a corroboração do modelo por comparação com os dados experimentais.

Pfleger e Becker (2001) apresentam um trabalho experimental juntamente com um modelo bifásico numa abordagem Euleriana-Euleriana para descrever o escoamento numa coluna de bolhas. O modelo de turbulência utilizado foi o $k-\epsilon$ padrão e foram negligenciados os termos de coalescência e quebra das bolhas. Os estudos numéricos tiveram como objetivo avaliar a influência da turbulência adicional gerada pela presença da fase dispersa, além da validação do modelo teórico com dados experimentais. Mapas de vetores e frações volumétricas são apresentados nos resultados. Conclui-se que a adição da turbulência gerada pelo gás cruzando o líquido, por modelo, traz um impacto positivo na correta simulação dos perfis axial e radial de velocidade e na predição das frações locais de gás e líquido.

Skolichin e Eigenberger (1999) fazem uma comparação entre os modelos laminar bidimensional, turbulento bidimensional e tridimensional. O modelo de turbulência utilizado foi o k- ϵ padrão. O método dos volumes finitos foi aplicado para resolução das equações, com um esquema de interpolação de alta ordem para evitar a difusão numérica. Os resultados apresentados dão ênfase à predição de mapas de vetores, isocurvas de fração volumétrica e velocidade. O autor sugere que o modelo 3D com modelo de turbulência k- ϵ padrão tem uma boa representação qualitativa e uma aceitável representação quantitativa frente aos dados experimentais.

Delnoij *et al.* (1997) apresenta uma modelagem Euleriana-Lagrangeana para descrever a fluidodinâmica de colunas de bolhas. As equações de continuidade e do movimento com modelos constitutivos para as forças de arraste, de ascensão, de massa virtual e de interações bolha - bolha, caracterizam um modelo bidimensional e bifásico. Os autores puderam observar claramente a presença de vórtices na fase líquida acima de determinada taxa de gás. Estes vórtices também foram observados nos estudos experimentais, validando assim o modelo apresentado.

Outros estudos feitos por Skolichin e Eigenberger (1997) fazem uma comparação entre a abordagem Euleriana-Euleriana e Euleriana-Lagrangeana. Os resultados mostraram que o enfoque Euleriano-Euleriano utilizando esquemas de interpolação de alta ordem, traz resultados similares aos encontrados com o enfoque Euleriano-Lagrangeano, tendo este último um menor tempo computacional em sistemas não sensíveis à difusão.

Casos de colunas de bolhas são mais comuns na literatura, pois sua fluidodinâmica obedece o mesmo modelo de colunas de destilação e, em geral, é muito mais simples em geometria e em tempo computacional. Algumas das forças modeladas pelos autores citados serão incorporadas nos modelos deste trabalho e testadas para posterior análise de sua aplicabilidade em colunas de destilação.

2.4.2 Colunas de Destilação

As predições do escoamento turbulento do líquido em um prato de destilação foram, inicialmente, apresentadas por Liu *et al.* (2000). Um modelo com enfoque

Euleriano, bidimensional e monofásico é proposto. A força resistiva gerada pelo borbulhamento do gás no líquido é considerada através de uma correlação empírica. O modelo de turbulência utilizado foi o k- ϵ padrão incrementado por um termo de geração de turbulência proveniente do borbulhamento. Outras correlações empíricas são utilizadas para prever a altura de líquido sobre o prato, perda de carga, etc. Nesta modelagem aparece uma constante que o autor chama de coeficiente de transferência, que é responsável pela geração de energia cinética turbulenta proveniente do efeito do borbulhamento do gás no líquido. O método numérico utilizado foi o método dos volumes finitos com algoritmo SIMPLE para o acoplamento pressão-velocidade. A técnica de anemometria de fio quente possibilitou aos autores a obtenção dos dados experimentais que foram usados nos estudos de corroboração. Os resultados mostram uma comparação entre os dados experimentais e numéricos, além de mapas do vetor velocidade. Conclui-se que os resultados do modelo monofásico e bidimensional acrescido das forças resistivas e o termo adicional nas equações de turbulência, quando comparados com os dados experimentais, é muito representativo para o escoamento do líquido em um prato de destilação, especialmente em casos onde há zonas de recirculação. Entretanto, esta modelagem é muito dependente de equações e parâmetros empíricos que limitam a sua utilização.

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

vários casos. É importante ressaltar que os autores trabalharam com o modelo heterogêneo que implica em equações do momento para ambas as fases e, por conseguinte, um alto tempo computacional. A principal conclusão dos autores faz referência à alta confiabilidade do modelo na predição da fluidodinâmica de um prato de destilação.

2.5 Aspectos de investigação

Como base no levantamento bibliográfico, é possível identificar alguns aspectos importantes para inspirar esta investigação científica:

- A aplicação das técnicas de CFD para predição de escoamentos em sistemas gás – líquido está em um estágio inicial de estudos. A modelagem atual apresenta dois enfoques: Euleriano/Euleriano e Euleriano/Lagrangeano. No primeiro enfoque, nota-se a utilização intensiva do modelo heterogêneo, que apesar de trazer resultados satisfatórios tem a desvantagem de necessitar de equações constitutivas para as forças extras entre as fases e de um grande tempo computacional. Uma alternativa, levantada como hipótese desta dissertação, para minimizar as desvantagens do modelo heterogêneo seria a aplicação do modelo homogêneo, que diminui drasticamente o número de equações, com a existência da velocidade de mistura e não mais da velocidade das fases. Este fato, no enfoque Euleriano/Euleriano, possibilita uma redução significativa do tempo computacional. Além disso, o modelo não requer equações constitutivas adicionais para representar efeitos de arraste entre fases;
- Associado à modelagem homogênea, aparecem alguns algoritmos de solução que necessitam de estudos, como, por exemplo, o algoritmo de alisamento de superfícies livres, ainda não apresentado na literatura, para prever a interface livre entre o líquido e o gás num prato de destilação;

- Algumas forças adicionais como de arraste, de ascensão, de massa virtual, já foram estudadas em colunas de bolha. Outras, como tensão superficial, necessitam de uma investigação mais profunda. Esta força mostra-se importante na formação das bolhas em determinados regimes. Os estudos poderão dar um melhor discernimento com relação à importância desta força adicional no escoamento em colunas de destilação;
- O domínio computacional utilizado por vários autores é bastante restrito, com muitas hipóteses simplificadoras. Com a proposição do modelo homogêneo, e conseqüente redução do tempo computacional, é possível expandir o domínio e avaliar a influência de tais hipóteses;
- O detalhamento da metodologia para solução do modelo homogêneo como uma atividade de verificação mostra-se um importante conhecimento para a seqüência dos estudos de CFD em colunas de destilação.
- Necessidade de validação dos modelos através de correlações e dados experimentais da literatura.

CAPÍTULO 3

3 Modelagem Matemática

Neste capítulo, propõe-se a modelagem matemática para a realização de experimentos numéricos deste trabalho. A Figura 3.1 mostra a situação física de interesse da modelagem. Consiste em um estágio de destilação com prato do tipo perfurado onde o líquido entra no estágio através da área de entrada do vertedor, percorre a superfície do prato, principalmente a área de borbulhamento, a qual é perfurada, e sai do estágio, através da área de saída do vertedor. Já o gás, entra pelas perfurações do prato e mantém contato com o líquido a fim de trocar calor e massa. São apresentados três modelos distintos todos num referencial Euleriano/Euleriano. No primeiro passo, é avaliada a proposta de Liu *et al.*(2000) que faz referência a um modelo monofásico e bidimensional. Em seguida, é apresentada uma modelagem homogênea, tridimensional e bifásica. Por fim, apresenta-se a modelagem heterogênea, tridimensional e bifásica para fins de comparação. O modelo de turbulência, as equações constitutivas e as condições de contorno são apresentados para o fechamento do modelo proposto.

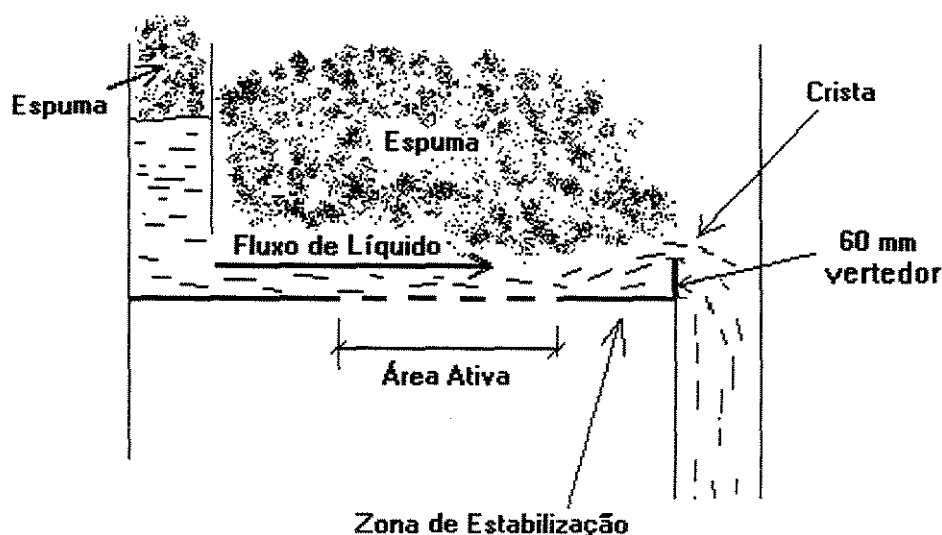


Figura 3.1. Representação da situação física a ser modelada.

3.1 Equação geral da conservação

Um modelo tridimensional, multifásico, transiente e turbulento em sistema de coordenadas cartesianas para qualquer propriedade, ϕ_k , na fase k , pode ser generalizado da seguinte forma (Meier *et al.*, 1999):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho_k f_k \phi_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k f_k v_x \phi_k) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_k f_k v_y \phi_k) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_k f_k v_z \phi_k) = \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left[f_k \Gamma_k \frac{\partial(\rho_k \phi_k)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[f_k \Gamma_k \frac{\partial(\rho_k \phi_k)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[f_k \Gamma_k \frac{\partial(\rho_k \phi_k)}{\partial z} \right] + S_\phi \end{aligned} \quad (3.1)$$

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

O primeiro termo da equação (3.1) refere-se ao acúmulo, seguido pelos termos convectivos. As taxas difusivas aparecem após a igualdade, juntamente com o termo de transformação da propriedade ϕ_k . A partir da equação generalizada, pode-se escrever os seguintes modelos propostos neste trabalho:

- Modelo 2-D monofásico (2-DSM);
- Modelo 3-D bifásico homogêneo (3-DHomM);
- Modelo 3-D bifásico heterogêneo (3-DHetM).

A particularização do modelo a partir da equação geral de conservação, por definição da fase k , da propriedade conservável ϕ_k , do coeficiente de difusão Γ e o termo fonte S , é apresentada em detalhes nos itens subseqüentes.

3.1.1 Modelo 2-D monofásico (2-DSM)

No modelo 2-DSM, algumas hipóteses simplificadoras estão implícitas e são apresentadas a seguir:

- O fluxo de líquido é mais importante que o de gás, de tal forma que o escoamento possa ser modelado como monofásico, e a ação do borbulhamento é incorporada ao modelo através da adição da força resistiva e de uma turbulência adicional devido ao escoamento cruzado da fase gás;
- Condições de simetria são assumidas para todas as variáveis, caracterizando um modelo bidimensional;
- Os efeitos térmicos não influenciam no desenvolvimento da fluidodinâmica.

Conforme hipóteses simplificadoras abordadas acima, é necessário introduzir ao modelo forças extras para representar os efeitos de borbulhamento do gás no seio da fase líquida. Esta influência aparece de duas formas: na troca de quantidade de movimento e no acréscimo da intensidade de turbulência ao sistema. Neste trabalho, a troca de movimento entre as fases é inserida no modelo através de forças resistivas que aparecessem como termo fonte nas equações do movimento. Já a turbulência é tratada como um termo fonte de geração de turbulência, inserido nas equações de conservação de energia cinética turbulenta e de sua taxa de dissipação.

As forças resistivas, F_x e F_y (Equação 3.2), segundo Zhang e Yu (1994), podem ser modeladas como uma função da velocidade superficial do gás e da altura da represa. Para Liu *et al.*(2000), esta hipótese implica que o gás que deixa a superfície líquida obtém um componente de velocidade horizontal igual ao do líquido:

$$F_x = -\frac{\rho_g u_s}{h_w} v_x \quad , \quad F_y = -\frac{\rho_g u_s}{h_w} v_y \quad (3.2)$$

onde h_w é a altura da represa e u_s a velocidade superficial do gás

A quantidade adicional de turbulência induzida pelo borbulhamento foi modelada por Liu *et al.*(2000), e é função da perda de carga, da velocidade de entrada do gás e da altura de líquido no prato, conforme a equação:

$$G_{T2} = C_e \frac{\Delta P u_s}{h} \quad (3.3)$$

sendo h a altura de líquido sobre o prato, ΔP a queda de pressão no prato e C_e um coeficiente de transferência de momento.

Para a determinação da perda de carga (ΔP), via equação constitutiva, considera-se uma expressão empírica discutida e apresentada por Liu *et al.*(2000):

$$\Delta P = \rho g h + \frac{4 \sigma}{d_o} \quad (3.3)$$

onde σ é a tensão superficial e d_o é o diâmetro médio da bolha.

A altura de líquido sobre prato foi correlacionado por Wang (1989) empiricamente da seguinte forma:

$$h = h_w + 8,04 \cdot 10^{-3} + 0,308 L + 2,523 h_w^{0.5} - 3,612 \cdot 10^{-3} F_o^2 \quad (3.4)$$

onde o fator F_o é definido por Van Winkle (1967) como:

$$F_o = u_s \sqrt{\rho_g} \quad (3.5).$$

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

Este modelo, descrito do Nallasamy (1987), insere duas equações de conservação adicional, uma para a energia cinética turbulenta (k), e outra para taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε):

- Conservação da energia cinética turbulenta (k),

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k f_k k_k) + \nabla \cdot (\rho_k f_k \mathbf{v}_k k_k) = f_k \nabla \cdot \left(\mu_k + \frac{\mu_k^t}{\sigma_k} \nabla k_k \right) + f_k [G_k - \rho_k \epsilon_k] \quad (3.6);$$

- Conservação da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε),

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k f_k \epsilon_k) + \nabla \cdot (\rho_k f_k \mathbf{v}_k \epsilon_k) = f_k \nabla \cdot \left(\mu_k + \frac{\mu_k^t}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_k \right) + f_k \frac{\epsilon_k}{k_k} [C_1 G_k - C_2 \rho_k \epsilon_k] \quad (3.7);$$

Onde a viscosidade turbulenta μ^t relaciona-se, no modelo k-ε, com a energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação por:

$$\mu^t = C_\mu \cdot \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.8)$$

e,

$$G_k = \mu^t \left[2 \left(\frac{\partial v_{x,k}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_{y,k}}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_{z,k}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{x,k}}{\partial y} + \frac{\partial v_{y,k}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{y,k}}{\partial z} + \frac{\partial v_{z,k}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{z,k}}{\partial x} + \frac{\partial v_{x,k}}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (3.9).$$

Sendo k a energia cinética turbulenta, ε a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, μ^t a viscosidade turbulenta e $C_1, C_2, C_\mu, \sigma^k$ e σ^ε constantes do modelo.

A Tabela 3.1 apresenta os valores das constantes empíricas do modelo k - ε padrão.

Tabela 3.1. Constantes do modelo k - ε padrão

Constante	C_1	C_2	C_μ	σ^k	σ^ε
Valor	0,09	1,44	1,92	1,00	1,30

A Tabela 3.2 apresenta uma forma compacta do modelo 2-DSM, onde são definidos os termos fontes para cada variável ϕ_k , S_{ϕ_k} , e as expressões para o coeficiente de difusão Γ de acordo com a equação (3.1).

Tabela 3.2. Forma compacta do modelo 2-D monofásico (2-DSM).

Conservação	f_k	ϕ_k	Γ_k	S_{ϕ_k}
Massa	1	1	0	0
<i>Momentum</i> na direção x	1	v_x	$\frac{\mu + \mu^t}{\rho}$	$F_x - \frac{\partial p}{\partial x}$
<i>Momentum</i> na direção y	1	v_y	$\frac{\mu + \mu^t}{\rho}$	$F_y - \frac{\partial p}{\partial y}$
Energia cinética turbulenta	1	k	$\frac{\mu + \frac{\mu^t}{\sigma^k}}{\rho}$	$G_T - \rho \epsilon$
Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta	1	ϵ	$\frac{\mu + \frac{\mu^t}{\sigma^\epsilon}}{\rho}$	$\frac{\epsilon}{k} (C_1 G_T - C_2 \rho \epsilon)$
Equações constitutivas				
$F_x = -\frac{\rho_g u_s}{h_w} v_x \quad F_y = -\frac{\rho_g u_s}{h_w} v_y \quad G_T = G_k + G_{T2}$				
$G_k = \mu^t \left[2 \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 \right] \quad G_{T2} = C_e \frac{\Delta P u_s}{h}$				
$\mu^t = C_\mu \cdot \frac{k^2}{\epsilon}$				

3.1.2 Modelo 3-D bifásico homogêneo (3-DHomM)

O modelo homogêneo é uma simplificação do modelo multi-fluido no qual é assumido que as propriedades de transporte são as mesmas para todas as fases presentes, ou seja:

$$\phi_k = \phi \quad 1 \leq k \leq N_k \quad (3.10).$$

No entanto, as frações volumétricas são distintas. Então, a continuidade individual da fase deve ser resolvida para determinar as frações volumétricas, com a restrição de que:

$$\sum_{k=1}^{N_p} f_k = 1 \quad (3.11).$$

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

Com a interface entre dois fluidos, há uma força de tensão superficial que pode ter um efeito considerável em determinados sistemas. Os modelos de forças e de tensão superficial são baseados nos gradientes de fração volumétrica. O modelo sugerido por Brackbill *et al.* (1992) segue este princípio e se encaixa perfeitamente aos propósitos deste trabalho. Neste caso, a força de tensão superficial é dada por:

$$F_s = \sigma \kappa \nabla f_k \quad (3.12)$$

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

$$\kappa = \frac{1}{|\mathbf{n}|} \left(\left(\frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} \cdot \nabla \right) |\mathbf{n}| - \nabla \cdot \mathbf{n} \right) \quad (3.13),$$

para um vetor normal à superfície dado por:

$$\mathbf{n} = \nabla f \quad (3.14).$$

Quando a interface intercepta uma parede, há uma força adicional de adesão que pode ser incluída no tratamento acima, proporcionando uma modificação na superfície normal e na curvatura adjacente à parede. Isto pode ser incluído ao modelo como condição de contorno para fração volumétrica na parede.

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

A Tabela 3.3 mostra, de forma compacta, o modelo 3-D homogêneo onde se pode identificar cada termo que caracteriza este modelo e suas equações constitutivas.

Tabela 3.3. Forma compacta do modelo 3-D homogêneo. (3-DhomM)

Conservação	f_k	ϕ_k	Γ_k	S_ϕ
Massa	f_l	1	0	0
Fase Líquida				
Massa	f_g	1	0	0
Fase Vapor				
<i>Momentum</i>				
Direção x	1	v_x	$\frac{\mu_{mix} + \mu^t}{\rho_{mix}}$	$-\frac{\partial p}{\partial x} + \rho_{mix}g_x + Fs_x$
Direção y	1	v_y	$\frac{\mu_{mix} + \mu^t}{\rho_{mix}}$	$-\frac{\partial p}{\partial y} + \rho_{mix}g_y + Fs_y$
Direção z	1	v_z	$\frac{\mu_{mix} + \mu^t}{\rho_{mix}}$	$-\frac{\partial p}{\partial z} + \rho_{mix}g_z + Fs_z$
Energia cinética turbulenta	1	k	$\frac{\mu_{mix} + \frac{\mu^t}{\sigma^k}}{\rho_{mix}}$	$G_T - \rho_{mix}\varepsilon$
Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta	1	ε	$\frac{\mu_{mix} + \frac{\mu^t}{\sigma^\varepsilon}}{\rho_{mix}}$	$\frac{\varepsilon}{k}(C_1G_k - C_2\rho_{mix}\varepsilon)$
Equações constitutivas				
$\mu_{mix} = f_g\mu_g + f_l\mu_l \qquad \rho_{mix} = f_g\rho_g + f_l\rho_l$ $G_k = \mu^t \left[2 \left(\frac{\partial v_{x,k}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_{y,k}}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_{z,k}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{x,k}}{\partial y} + \frac{\partial v_{y,k}}{\partial x} \right)^2 \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial v_{y,k}}{\partial z} + \frac{\partial v_{z,k}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{z,k}}{\partial x} + \frac{\partial v_{x,k}}{\partial z} \right)^2 \right]$ $\mu^t = C_\mu \cdot \frac{k^2}{\varepsilon}$ $Fs_x = \sigma\kappa \frac{\partial f_l}{\partial x} \quad Fs_y = \sigma\kappa \frac{\partial f_l}{\partial y} \quad Fs_z = \sigma\kappa \frac{\partial f_l}{\partial z}$				

3.1.3 Modelo 3-D bifásico heterogêneo (3-DHetM)

No modelo multi-fluido heterogêneo, cada fase tem campos de velocidade solucionados separadamente. As quantidades transportadas interagem através do termo de transferência inter-fase (F_R).

Para um fluxo de bolhas cruzando uma coluna de líquido o termo de transferência inter-fase é definido como (Van Baten e Krishna, 2000):

$$F_R = \frac{3}{4} \rho_l \frac{f_g}{d_o} C_D (v_g - v_l) |v_g - v_l| \quad (3.15)$$

onde d_o é o diâmetro médio das bolhas e C_D é o coeficiente de arraste entre as fases.

O coeficiente de arraste (C_D) é uma função do número Reynolds da bolha (Re_g),

$$Re_g = \frac{\rho_l v_g d_o}{\mu_l} \quad (3.16)$$

A dependência do C_D com Re_g é função do regime de contato gás-líquido e é conhecido por curva de arrasto:

- Regime de Stokes, $0 \leq Re_g \leq 0,2$:

No limite onde $Re_g \rightarrow 0$, o arrasto é causado somente pelo tensor tensão e pode ser determinado analiticamente. O resultado é a lei de Stokes:

$$C_D = \frac{24}{Re_g} \quad (3.17);$$

- Regime de transição, $0,2 \leq Re_g \leq 500$

No regime de transição o arrasto é causado por ambos os componentes, tensor tensão e distribuição de pressão em torno da bolha, na mesma ordem de grandeza, e C_D pode ser definido como (CFX-4.4 User Guide (2000)):

$$C_D = \frac{24}{Re_g} (1 + 0.1 Re_g^{0.75}) \quad (3.18);$$

- Regime inercial, $500 \leq Re_g \leq 5 \times 10^5$

Na região de regime turbulento, o arrasto é causado somente pela distribuição de pressão em torno das bolhas sendo independente do número de Reynolds, ou seja,

$$C_D = 0,44 \quad (3.19).$$

No modelo 3-DTHetM, somente a fase contínua é tratada como turbulenta. A fase dispersa, fase gás, é tratada como laminar pois, a partir de uma análise de ordem de grandeza verifica-se que a energia cinética turbulenta associada ao gás é da ordem de 0,1 % da energia cinética turbulenta associada ao líquido e, portanto, desprezível.. O modelo k-ε padrão com duas equações de conservação adicionais para k e ε, foi utilizado para inclusão dos efeitos de flutuação das propriedades fluidodinâmicas na fase líquida.

A Tabela 3.4 mostra, de forma compacta e à luz da Equação 3.1, o modelo 3-D heterogêneo e suas equações constitutivas.

Tabela 3.4. Forma compacta do modelo 3-D heterogêneo (3-DhetM).

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
<i>Momentum</i> (Direção x) Fase Líquida	f_l	$(v_x)_l$	$\frac{\mu_l + \mu_l^t}{\rho_l}$	$-f_l \frac{\partial p}{\partial x} + f_l \rho_l g_x - F_{R_x}$
<i>Momentum</i> (Direção x) Fase Vapor	f_g	$(v_x)_g$	$\frac{\mu_g}{\rho_g}$	$-f_g \frac{\partial p}{\partial x} + f_g \rho_g g_x + F_{R_x}$
<i>Momentum</i> (Direção y) Fase Líquida	f_l	$(v_y)_l$	$\frac{\mu_l + \mu_l^t}{\rho_l}$	$-f_l \frac{\partial p}{\partial y} + f_l \rho_l g_y - F_{R_y}$
<i>Momentum</i> (Direção y) Fase Vapor	f_g	$(v_y)_g$	$\frac{\mu_g}{\rho_g}$	$-f_g \frac{\partial p}{\partial y} + f_g \rho_g g_y + F_{R_y}$
<i>Momentum</i> (Direção z) Fase Líquida	f_l	$(v_z)_l$	$\frac{\mu_l + \mu_l^t}{\rho_l}$	$-f_l \frac{\partial p}{\partial z} + f_l \rho_l g_z - F_{R_z}$
<i>Momentum</i> (Direção z) Fase Vapor	f_g	$(v_z)_g$	$\frac{\mu_g}{\rho_g}$	$-f_g \frac{\partial p}{\partial z} + f_g \rho_g g_z + F_{R_z}$
Energia cinética turbulenta Fase Líquida	f_l	k	$\frac{\mu_l + \frac{\mu^t}{\sigma^k}}{\rho_l}$	$f_l [G_k - \rho_l \varepsilon]$
Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta Fase Líquida	f_l	ε	$\frac{\mu_l + \frac{\mu^t}{\sigma^\varepsilon}}{\rho_l}$	$f_l \frac{\varepsilon}{k} (C_1 G_k - C_2 \rho_l \varepsilon)$
Equações constitutivas				
$\mu^t = C_\mu \cdot \frac{k^2}{\varepsilon}$				

Tabela 3.4. Continuação
Equações constitutivas

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

$$F_{Rx} = \frac{3}{4} \rho_l \frac{f_g}{D_g} C_D (v_{x,g} - v_{x,l}) |v_{x,g} - v_{x,l}|$$

$$F_{Ry} = \frac{3}{4} \rho_l \frac{f_g}{D_g} C_D (v_{y,g} - v_{y,l}) |v_{y,g} - v_{y,l}|$$

$$F_{Rz} = \frac{3}{4} \rho_l \frac{f_g}{D_g} C_D (v_{z,g} - v_{z,l}) |v_{z,g} - v_{z,l}|$$

$$0,0 < Re_g < 0,2$$

$$C_D = \frac{24}{Re_g}$$

$$0,2 < Re_g < 500,0$$

$$C_D = \frac{24}{Re_g} (1 + 0,1 Re_g^{0,75})$$

$$Re_g > 500,0$$

$$C_D = 0,44$$

3.2 Condições de contorno

As condições de contorno mais utilizadas são do tipo entrada ou saída de massa, condição de pressão constante, condição de não-deslizamento ou deslizamento para paredes, condição de fluxos conhecidos, entre outros. Cada condição aplicada depende da situação física real de análise e de suas simplificações. Detalhes sobre os tipos de condições de contorno e suas hipóteses são discutidas no capítulo 4 e as definições das condições de contorno para os diversos casos analisados são apresentados no capítulo 5.

CAPÍTULO 4

4 Metodologia Numérica

Este capítulo tem o objetivo de desenvolver o conhecimento necessário e algumas particularidades do método numérico utilizado pelo código comercial CFX 4-4 para solução das equações de conservação. A partir da equação geral da conservação, demonstra-se como chegar à equação geral de discretização e suas hipóteses, além de alguns algoritmos e esquemas de solução mais utilizados.

O método dos volumes finitos foi escolhido para o desenvolvimento deste trabalho devido à sua robustez e facilidade de generalização e implementação computacional. Percebe-se, nas equações discretas, a manutenção do caráter físico em cada termo, ao contrário dos métodos MDF e MEF que são baseados puramente em aproximações matemáticas. Nas seções seguintes, demonstra-se a discretização da equação geral de conservação, na forma conservativa monofásica.

4.1 Integração Formal

A equação geral de discretização é a equação discreta e aproximada resultante da integração formal das equações de conservação. Neste trabalho, para efeito de demonstração, utilizou-se a equação geral da conservação, na forma conservativa e monofásica,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) = -\nabla \cdot \mathbf{F}_\phi + S_\phi, \quad (4.1)$$

onde t é o tempo, ρ é a massa específica, ϕ é uma propriedade fluidodinâmica (u , v , w , k e ϵ), F_ϕ o fluxo difusivo e S_ϕ é o termo fonte. Fazendo-se a integração formal da Equação 4.1 tem-se:

$$\iiint_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dV + \iiint_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) dV = \iiint_V -\nabla \cdot \mathbf{F}_\phi dV + \iiint_V S_\phi dV. \quad (4.2)$$

Com o teorema da divergência de Gauss

$$\iiint_V \nabla \cdot \mathbf{f} dV = \iint_A (\mathbf{f} \cdot \mathbf{n}) dA, \quad (4.3)$$

aplicado na Equação 4.2, chega-se facilmente a

$$\iiint_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dV + \iint_A (\rho \mathbf{v} \phi \cdot \mathbf{n}) dA = - \iint_A (\mathbf{F}_\phi \cdot \mathbf{n}) dA + \iiint_V S_\phi dV. \quad (4.4)$$

A Equação 4.4 está pronta para a integração formal em um volume de controle genérico, conforme Figura 4.1³, onde P é um ponto da malha cuja posição coordenada é (x, y, z) e N, S, W, E, T, B seus vizinhos ortogonais nas direções norte $(x, y+(\Delta y)_n, z)$, sul $(x, y-(\Delta y)_s, z)$, oeste $(x-(\Delta x)_w, y, z)$, leste $(x+(\Delta x)_e, y, z)$, topo $(x, y, z+(\Delta z)_t)$ e base $(x, y, z-(\Delta z)_b)$, respectivamente. As faces do volume de controle nas respectivas direções são nomeadas por n, s, w, e, t e b . O volume de controle tem um volume dado por $\Delta x \Delta y \Delta z$.

³A Figura 4.1 apresenta um volume de controle em duas dimensões para que a compreensão da estrutura de integração seja facilitada.

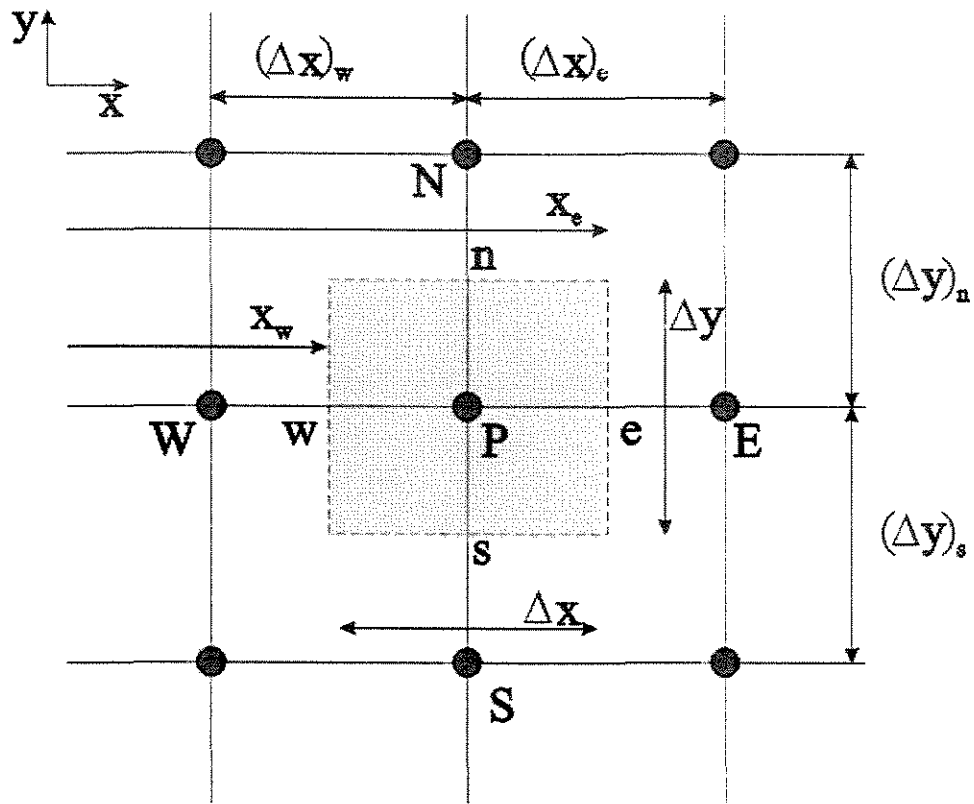


Figura 4.1. Representação de um volume de controle genérico

Reagrupando-se e integrando-se no tempo a Equação 4.4 tem-se:

$$\int_{t+\Delta t}^t \left\{ \iiint_V \left[\frac{\partial}{\partial \tau} (\rho \phi) - S_\phi \right] dV + \iint_A [(\rho \mathbf{v} \phi \cdot \mathbf{n}) + (\mathbf{F}_\phi \cdot \mathbf{n})] dA \right\} dt = 0, \quad (4.5)$$

e fazendo-se a integração sobre o volume elementar de controle, representado pela Figura 4.1, num intervalo de tempo de t até $t+\Delta t$, tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \begin{aligned} & \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) - S_\phi \right] dx dy dz + \int_S [-(\rho v_x \phi)_w - (F_{\phi x})_w] dy dz \\ & + \int_S [(\rho v_x \phi)_e + (F_{\phi x})_e] dy dz + \int_S [-(\rho v_z \phi)_s - (F_{\phi z})_s] dx dz \\ & + \int_S [(\rho v_z \phi)_n + (F_{\phi z})_n] dx dz + \int_S [-(\rho v_y \phi)_t - (F_{\phi y})_t] dx dy \\ & + \int_S [(\rho v_y \phi)_b + (F_{\phi y})_b] dx dy \end{aligned} \right\} dt = 0 \quad (4.6)$$

ou,

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) - S_\phi \right]_P \Delta V - (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_w A_w + (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_e A_e - (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_s A_s \right. \\ \left. - (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_n A_n - (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_t A_t + (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_b A_b \right\} dt = 0 \quad (4.7)$$

onde A_e , A_w , A_s , A_n , A_t e A_b são as áreas em suas respectivas faces, e ΔV o volume do volume elementar de controle.

4.2 Formulação Totalmente Implícita no Tempo

A formulação totalmente implícita no tempo é adotada como aproximação numérica básica por razões de estabilidade numérica. A formulação totalmente implícita, onde somente ϕ no ponto P no tempo anterior e ϕ das vizinhanças no tempo atual influenciam na obtenção de ϕ em P no tempo atual, é utilizada na maioria dos métodos (Maliska (1995)).

Integrando-se a equação (4.7) no tempo, dividindo-se por Δt e adotando-se o superescrito $t+\Delta t$ sem índice e t sendo OLD, tem-se;

$$\begin{aligned} & \left[(\rho\phi)_P - (\rho\phi)_P^{\text{OLD}} \right] \frac{\Delta V}{\Delta t} - (S_\phi) \Delta V - (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_w A_w + (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_e A_w \\ & - (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_s A_s + (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_n A_n - (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_t A_t + (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_b A_b = 0. \end{aligned} \quad (4.8)$$

4.3 Linearização do Termo Fonte

Outra aproximação numérica adotada é a linearização do termo fonte para que a solução iterativa do sistema de equações atinja convergência (Maliska (1995)). O objetivo é obter uma linearização do tipo:

$$(S_\phi) \Delta V = S_P \phi_P + S_C \quad (4.9)$$

onde S_P é o coeficiente angular e S_C o coeficiente linear da linearização. Substituindo-se (4.9) em (4.8), tem-se a seguinte equação de discretização:

$$\begin{aligned} & \left[(\rho\phi)_P - (\rho\phi)_P^{\text{OLD}} \right] \frac{\Delta V}{\Delta t} - (S_P \phi_P + S_C) \Delta V - (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_w A_w + (\rho v_x \phi + F_{\phi x})_e A_w \\ & - (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_s A_s + (\rho v_y \phi + F_{\phi y})_n A_n - (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_t A_t + (\rho v_z \phi + F_{\phi z})_b A_b = 0. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Note que o fluxo de ϕ , F_ϕ , é dado pela equação constitutiva, $F_\phi = \Gamma \nabla \phi$, cujos componentes em coordenadas cartesianas são:

$$F_{\phi x} = \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad F_{\phi y} = \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}, \quad F_{\phi z} = \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}. \quad (4.11)$$

4.4 Interpolação

Por inspeção das equações 4.10 e 4.11, pode-se verificar claramente que, neste ponto do desenvolvimento é necessário o valor da propriedade ϕ e de suas derivadas primeiras nas faces do volume elementar. Esta tarefa exige a definição de interpolações para os termos convectivos e difusivos. Uma definição genérica que não especifica o esquema de interpolação é sugerido por Minkowycz *et al.* (1988) e Maliska (1995). As equações 4.12 e 4.13 mostram a definição para os termos convectivos e difusivos, respectivamente:

$$\begin{aligned}\phi_w &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_w\right)\phi_w + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w\right)\phi_P, & \phi_e &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_e\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right)\phi_E, \\ \phi_s &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_s\right)\phi_s + \left(\frac{1}{2} - \alpha_s\right)\phi_P, & \phi_n &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_n\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_n\right)\phi_N, \\ \phi_t &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_t\right)\phi_t + \left(\frac{1}{2} - \alpha_t\right)\phi_P, & \phi_b &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_b\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_b\right)\phi_B\end{aligned}\quad (4.12),$$

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_w &= \beta_w \left(\frac{\phi_P - \phi_w}{\Delta x_w}\right), & \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_e &= \beta_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_e}\right), \\ \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_s &= \beta_s \left(\frac{\phi_P - \phi_s}{\Delta y_s}\right), & \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_n &= \beta_n \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y_n}\right), \\ \left(\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)_t &= \beta_t \left(\frac{\phi_P - \phi_t}{\Delta z_t}\right), & \left(\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)_b &= \beta_b \left(\frac{\phi_B - \phi_P}{\Delta z_b}\right),\end{aligned}\quad (4.13).$$

Onde α e β são parâmetros que definem o esquema de interpolação de cada variável em cada face. Pode-se notar que, fazendo-se uma definição genérica do esquema de interpolação, a implementação numérica é simples, pois a equação discreta é a mesma para qualquer esquema específico, variando-se somente o valor de α e β .

Substituindo-se as Equações 4.11, 4.12 e 4.13 na Equação 4.10 e assumindo-se que o termo fonte é constante no volume e com valor correspondente ao ponto P (Meier (1998)), têm-se:

$$\begin{aligned}
& \left[(\rho\phi)_P - (\rho\phi)_P^{\text{OLD}} \right] \frac{\Delta V}{\Delta t} - (S_C + S_P \phi_P) \\
& - \left\{ (\rho v_x)_w \left[\left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) \phi_w + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w \right) \phi_P \right] - \Gamma_{\phi x} \beta_w \left[\frac{\phi_P - \phi_w}{\Delta x_w} \right] \right\} A_w \\
& + \left\{ (\rho v_x)_e \left[\left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) \phi_E \right] - \Gamma_{\phi x} \beta_e \left[\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_e} \right] \right\} A_e \\
& - \left\{ (\rho v_y)_s \left[\left(\frac{1}{2} + \alpha_s \right) \phi_s + \left(\frac{1}{2} - \alpha_s \right) \phi_P \right] - \Gamma_{\phi y} \beta_s \left[\frac{\phi_P - \phi_s}{\Delta y_s} \right] \right\} A_s \\
& + \left\{ (\rho v_y)_n \left[\left(\frac{1}{2} + \alpha_n \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_n \right) \phi_N \right] - \Gamma_{\phi y} \beta_n \left[\frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y_n} \right] \right\} A_n \\
& - \left\{ (\rho v_z)_t \left[\left(\frac{1}{2} + \alpha_t \right) \phi_T + \left(\frac{1}{2} - \alpha_t \right) \phi_P \right] - \Gamma_{\phi z} \beta_t \left[\frac{\phi_P - \phi_T}{\Delta z_t} \right] \right\} A_t \\
& + \left\{ (\rho v_z)_b \left[\left(\frac{1}{2} + \alpha_b \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_b \right) \phi_B \right] - \Gamma_{\phi z} \beta_b \left[\frac{\phi_B - \phi_P}{\Delta z_b} \right] \right\} A_b = 0. \quad (4.14)
\end{aligned}$$

Rearranjando-se a equação 4.14 e colocando-se ϕ_P , ϕ_w , ϕ_E , ϕ_s , ϕ_n , ϕ_T e ϕ_B em evidência, tem-se:

$$\begin{aligned}
& \left\{ \left[(\rho v_x)_w \left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) + \frac{\Gamma_{\phi x} \beta_w}{\Delta x_w} \right] A_w + \left[-(\rho v_x)_e \left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) + \frac{\Gamma_{\phi x} \beta_e}{\Delta x_e} \right] A_e \right. \\
& \left[(\rho v_y)_s \left(\frac{1}{2} + \alpha_s \right) + \frac{\Gamma_{\phi y} \beta_s}{\Delta y_s} \right] A_s + \left[-(\rho v_y)_n \left(\frac{1}{2} + \alpha_n \right) + \frac{\Gamma_{\phi y} \beta_n}{\Delta y_n} \right] A_n \\
& \left[(\rho v_z)_t \left(\frac{1}{2} + \alpha_t \right) + \frac{\Gamma_{\phi z} \beta_t}{\Delta z_t} \right] A_t + \left[-(\rho v_z)_b \left(\frac{1}{2} + \alpha_b \right) + \frac{\Gamma_{\phi z} \beta_b}{\Delta z_b} \right] A_b \\
& \left. + \rho \frac{\Delta V}{\Delta t} - S_P - (\rho v_x)_w A_w + (\rho v_x)_e A_e - (\rho v_y)_s A_s + (\rho v_y)_n A_n - (\rho v_z)_t A_t + (\rho v_z)_b A_b \right\} \phi_P = \\
& \left\{ (\rho v_x)_w \left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) + \frac{\Gamma_{\phi x} \beta_w}{\Delta x_w} \right\} A_w \phi_w - \left\{ (\rho v_x)_e \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) + \frac{\Gamma_{\phi x} \beta_e}{\Delta x_e} \right\} A_e \phi_E + \\
& \left\{ (\rho v_y)_s \left(\frac{1}{2} + \alpha_s \right) + \frac{\Gamma_{\phi y} \beta_s}{\Delta y_s} \right\} A_s \phi_s - \left\{ (\rho v_y)_n \left(\frac{1}{2} - \alpha_n \right) + \frac{\Gamma_{\phi y} \beta_n}{\Delta y_n} \right\} A_n \phi_N + \\
& \left\{ (\rho v_z)_t \left(\frac{1}{2} + \alpha_t \right) + \frac{\Gamma_{\phi z} \beta_t}{\Delta z_t} \right\} A_t \phi_T - \left\{ (\rho v_z)_b \left(\frac{1}{2} - \alpha_b \right) + \frac{\Gamma_{\phi z} \beta_b}{\Delta z_b} \right\} A_b \phi_B + \rho \phi_P^{\text{OLD}} \frac{\Delta V}{\Delta t} + S_C. \quad (4.15)
\end{aligned}$$

A Equação 4.15 pode ser escrita na forma da equação geral de discretização como segue,

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_T \phi_T + a_B \phi_B + b, \quad (4.16)$$

onde:

$$\begin{aligned} a_W &= \left[(\rho v_x)_w \left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) + \frac{\Gamma_{\phi x} \beta_w}{\Delta x_w} \right] A_w \quad ; \\ a_E &= \left[-(\rho v_x)_e \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) + \frac{\Gamma_{\phi x} \beta_e}{\Delta x_e} \right] A_e \quad ; \\ a_S &= \left[(\rho v_y)_s \left(\frac{1}{2} + \alpha_s \right) + \frac{\Gamma_{\phi y} \beta_s}{\Delta y_s} \right] A_s \quad ; \\ a_N &= \left[-(\rho v_y)_n \left(\frac{1}{2} - \alpha_n \right) + \frac{\Gamma_{\phi y} \beta_n}{\Delta y_n} \right] A_n \quad ; \\ a_T &= \left[(\rho v_z)_t \left(\frac{1}{2} + \alpha_t \right) + \frac{\Gamma_{\phi z} \beta_t}{\Delta z_t} \right] A_t \quad ; \\ a_B &= \left[-(\rho v_z)_b \left(\frac{1}{2} - \alpha_b \right) + \frac{\Gamma_{\phi z} \beta_b}{\Delta z_b} \right] A_b \quad ; \\ a_P &= a_W + a_E + a_S + a_N + a_T + a_B + \rho \frac{\Delta V}{\Delta t} - S_P - (\rho v_x)_w A_w + (\rho v_x)_e A_e \\ &\quad - (\rho v_y)_s A_s + (\rho v_y)_n A_n - (\rho v_z)_t A_t + (\rho v_z)_b A_b \quad ; \\ b &= \rho \phi_P^{OLD} \frac{\Delta V}{\Delta t} + S_C. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Na definição do coeficiente a_P , aparece um termo que representa a equação da conservação da massa total discreta. Então, para escoamentos incompressíveis tem-se:

$$-(\rho v_x)_w A_w + (\rho v_x)_e A_e - (\rho v_y)_s A_s + (\rho v_y)_n A_n - (\rho v_z)_t A_t + (\rho v_z)_b A_b = 0. \quad (4.18)$$

Substituindo-se a Equação 4.18 em 4.17, pode-se definir a_p como:

$$a_p = \sum a_{nb} - S_p + \rho \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (4.19)$$

onde nb indica os vizinhos do ponto P .

A Equação 4.16 pode ser aplicada a qualquer variável ϕ para formar um sistema de equações algébricas a ser resolvido pelo método mais adequado. Um método simples e bastante utilizado é o método linha-por-linha com TDMA (Patankar (1981)), a ser discutido posteriormente.

É necessário salientar que as aproximações numéricas básicas são minimizadas na medida em que a malha numérica é concentrada. Isto é, tal que no limite, quando o volume de controle tender a zero, elas praticamente deixam de ser aproximações para representar o valor exato (Meier (1998)).

4.5 Esquemas de Interpolação

Como vimos anteriormente, é necessário conhecer o valor das variáveis nas faces dos volumes de controle. Para isto, utilizam-se os esquemas de interpolação. Na literatura, aparecem diversos tipos de esquemas que são apresentados por Patankar (1981), Minkowycz *et al.* (1989), Maliska (1995), Meier (1998), entre outros. Apresentam-se a seguir, alguns esquemas que foram efetivamente estudados, e que se encaixam na definição genérica adotada na discretização.

- Diferença Central:

$$\begin{aligned} \alpha &= 0 \\ \beta &= 1. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Este esquema não é aconselhável para problemas convectivos, pois pode levar a resultados não realísticos.

- “Upwind”:

$$\alpha = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{se } v \geq 0 \\ \frac{1}{2} & \text{se } v < 0 \end{cases} \quad (4.21)$$

$$\beta = 1 .$$

Pode-se perceber uma ponderação na interpolação dos termos convectivos com o esquema “Upwind”. Mas, para problemas com um componente de velocidade muito maior que os demais, o esquema pode trazer problemas de difusão numérica, que consiste em um amortecimento numérico dos gradientes.

- “Upwind” ponderado (WUDS):

$$|\alpha| = \frac{Pe^2}{10 + 2Pe^2} \quad (4.22)$$

$$\beta = \frac{(1 + 0.005Pe^2)}{1 + 0.05Pe^2} ,$$

com

$$Pe = \frac{\rho(v)_s A \Delta S}{\Gamma} , \quad (4.23)$$

onde o sinal de α é definido pelo esquema “Upwind” e Δs é elemento diferencial na direção genérica s . Este esquema pondera os termos difusivos e convectivos, minimizando efeitos indesejáveis associados ao fenômeno da difusão numérica.

- Exponencial

$$\alpha = \frac{1}{2} - \frac{e^{\frac{Pe}{2}} - 1}{e^{Pe} - 1}$$

$$\beta = Pe \frac{e^{\frac{Pe}{2}}}{e^{Pe} - 1}.$$
(4.24)

O esquema exponencial resulta da solução analítica aproximada e unidimensional de um clássico problema advectivo-difusivo, e foi largamente utilizado quando do desenvolvimento do MFV (Patankar (1981)).

4.6 Acoplamento Pressão-Velocidade

Considerando-se um problema tridimensional cartesiano, não isotérmico, incompressível e monofásico, tem-se o seguinte sistema de equações algébricas para um volume finito genérico:

- Equação da Continuidade,

$$-\dot{M}_w + \dot{M}_e - \dot{M}_s + \dot{M}_n - \dot{M}_t + \dot{M}_b = 0;$$

- Componentes de Velocidade,

$$a_P u_P = a_W u_W + a_E u_E + a_S u_S + a_N u_N + a_T u_T + a_B u_B + b^u - \Delta P^u \frac{\Delta V}{\Delta x},$$

$$a_P v_P = a_W v_W + a_E v_E + a_S v_S + a_N v_N + a_T v_T + a_B v_B + b^v - \Delta P^v \frac{\Delta V}{\Delta y},$$

$$a_P w_P = a_W w_W + a_E w_E + a_S w_S + a_N w_N + a_T w_T + a_B w_B + b^w - \Delta P^w \frac{\Delta V}{\Delta z};$$
(4.25)

- Equação da energia Térmica,

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + a_S T_S + a_N T_N + a_T T_T + a_B T_B + b^T.$$

Onde P é a pressão e \dot{M} é o fluxo mássico, u , v e w são os componentes de velocidade nas direções x , y e z , respectivamente.

Pode-se perceber claramente, que o sistema tem quatro equações, pois a conservação da massa não serve como equação evolutiva para qualquer variável, assumindo então um caráter restritivo para o campo de velocidade. Entretanto, as variáveis são cinco, o que impossibilita a solução do sistema. Como, então, determinar um campo de pressão, que por sua vez quando inserido nas equações de *momentum*, que origine um campo de velocidades que satisfaça a conservação da massa? A resposta a essa pergunta surgiu com o desenvolvimento do acoplamento pressão-velocidade. Patankar e Spalding (1972) descrevem o método SIMPLE (“Semi IMPLICIT Linked Equations”) desenvolvido a partir das idéias de Chorin (1971) e, posteriormente, otimizado por Van Doormaal e Raithby (1984) e chamado de SIMPLEC (SIMPLE consistente). É importante lembrar que o problema do cálculo do campo de pressão surge devido à natureza segregada da solução do sistema linear e da inexistência de uma equação elíptica⁴ para a pressão.

Nas próximas linhas, demonstra-se como combinar a conservação da massa com a conservação da quantidade de movimento para gerar uma equação evolutiva elíptica que permita resolver o campo de pressão.

A partir da Equação 4.1, escreve-se a conservação da massa como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (4.26)$$

que discretizada por volumes finitos, é escrita como:

$$\left[\rho_P - \rho_P^{\text{OLD}} \right] \frac{\Delta V}{\Delta t} - (\rho u)_w A_w + (\rho u)_e A_e - (\rho v)_s A_s + (\rho v)_n A_n - (\rho w)_t A_t + (\rho w)_b A_b = 0. \quad (4.27)$$

⁴ Uma equação é considerada elíptica, de acordo com este ponto de vista, quando a variável dependente aparece em todas as fronteiras do volume finito.

Segundo Chorin (1971), pode-se escrever a pressão e as velocidades por:

$$\begin{aligned}
 P &= P^* + \lambda_p P' \\
 u &= u^* + u' \\
 v &= v^* + v' \\
 w &= w^* + w',
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

onde $*$ e $'$ são as estimativa e um valor de correção respectivamente, e λ_p é um fator de relaxação.

No método SIMPLEC, a correção das velocidades é obtida a partir das equações do movimento. Se um campo de pressão estimada, P^* , é introduzido nas equações do movimento, tem-se (para cada estimativa dos componentes de velocidade):

$$\begin{aligned}
 a_P u_P^* &= a_W u_W^* + a_E u_E^* + a_S u_S^* + a_N u_N^* + a_T u_T^* + a_B u_B^* + b^u - [\Delta P^u]^* \frac{\Delta V}{\Delta x} \\
 a_P v_P^* &= a_W v_W^* + a_E v_E^* + a_S v_S^* + a_N v_N^* + a_T v_T^* + a_B v_B^* + b^v - [\Delta P^v]^* \frac{\Delta V}{\Delta y} \\
 a_P w_P^* &= a_W w_W^* + a_E w_E^* + a_S w_S^* + a_N w_N^* + a_T w_T^* + a_B w_B^* + b^w - [\Delta P^w]^* \frac{\Delta V}{\Delta z}.
 \end{aligned} \tag{4.29}$$

De forma análoga, para um campo de pressão real, tem-se:

$$\begin{aligned}
 a_P u_P &= a_W u_W + a_E u_E + a_S u_S + a_N u_N + a_T u_T + a_B u_B + b^u - \Delta P^u \frac{\Delta V}{\Delta x} \\
 a_P v_P &= a_W v_W + a_E v_E + a_S v_S + a_N v_N + a_T v_T + a_B v_B + b^v - \Delta P^v \frac{\Delta V}{\Delta y} \\
 a_P w_P &= a_W w_W + a_E w_E + a_S w_S + a_N w_N + a_T w_T + a_B w_B + b^w - \Delta P^w \frac{\Delta V}{\Delta z}.
 \end{aligned} \tag{4.30}$$

Subtraindo-se as equações 4.30 das equações 4.29, considerando-se os coeficientes e termos fontes constantes, tem-se:

$$\begin{aligned}
 a_p u'_p &= \sum a_{nb} u'_{NB} - \Delta[P^u] \frac{\Delta V}{\Delta x} \\
 a_p v'_p &= \sum a_{nb} v'_{NB} - \Delta[P^v] \frac{\Delta V}{\Delta y} \\
 a_p w'_p &= \sum a_{nb} w'_{NB} - \Delta[P^w] \frac{\Delta V}{\Delta z}.
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

Subtraindo-se, em ambos os lados, o termo $\sum a_{nb} u'_p$ e seus correspondentes na Equação 4.31, observa-se que:

$$\begin{aligned}
 u_p &= u_p^* - \frac{\Delta[P^u] \frac{\Delta V}{\Delta x}}{a_p - \sum a_{nb}} \\
 v_p &= v_p^* - \frac{\Delta[P^v] \frac{\Delta V}{\Delta y}}{a_p - \sum a_{nb}} \\
 w_p &= w_p^* - \frac{\Delta[P^w] \frac{\Delta V}{\Delta z}}{a_p - \sum a_{nb}}.
 \end{aligned} \tag{4.32}$$

E, finalmente, aplicando-se as Equações 4.32 nas faces e substituindo-se na Equação 4.27, obtém-se uma equação elíptica para correção da pressão:

$$a_p P'_p = \sum a_{nb} P'_{NB} + b, \tag{4.33}$$

onde os coeficientes são:

$$a_w = \left[\frac{\left(\frac{\Delta V}{\Delta x} \right)_w}{(a_p - \sum a_{nb})_w^u} \right] \rho A_w, \quad a_e = \left[\frac{\left(\frac{\Delta V}{\Delta x} \right)_e}{(a_p - \sum a_{nb})_e^u} \right] \rho A_e, \quad a_s = \left[\frac{\left(\frac{\Delta V}{\Delta y} \right)_s}{(a_p - \sum a_{nb})_s^v} \right] \rho A_s,$$

$$a_n = \left[\frac{\left(\frac{\Delta V}{\Delta y} \right)_n}{(a_p - \sum a_{nb})_n^v} \right] \rho A_n, \quad a_t = \left[\frac{\left(\frac{\Delta V}{\Delta z} \right)_t}{(a_p - \sum a_{nb})_t^w} \right] \rho A_t, \quad a_b = \left[\frac{\left(\frac{\Delta V}{\Delta z} \right)_b}{(a_p - \sum a_{nb})_b^w} \right] \rho A_b,$$

$$a_p = a_w + a_e + a_s + a_n + a_t + a_b$$

$$b = -(\rho u^*)_w A_w + (\rho u^*)_e A_e - (\rho v^*)_s A_s + (\rho v^*)_n A_n - (\rho w^*)_t A_t + (\rho w^*)_b A_b$$

(4.34)

Verifica-se que a Equação 4.33 tem a mesma forma matemática da equação geral de discretização (Equação 4.16), onde o termo fonte é a exata representação da equação da continuidade calculada para a estimativa de velocidade. Este termo é utilizado como indicador de convergência do acoplamento pressão velocidade (Meier (1998)).

O exposto acima faz parte do acoplamento conhecido como SIMPLEC. Maliska (1995) propõe o seguinte algoritmo para o ciclo iterativo de solução do acoplamento pressão-velocidade:

- Estimar os campos de velocidades (u^* , v^* e w^*) e pressão (P^*);
- Calcular os coeficientes das equações do movimento u , v e w ;
- Resolver as equações do movimento, usando P^* , obtendo-se u^* , v^* e w^* ;
- Resolver a Equação 4.33 e obter P' ;

- e) Corrigir u^* , v^* e w^* , obtendo-se o campo de velocidades que satisfaz a equação da continuidade;
- f) Calcular P através da equação 4.28;
- g) Resolver as equações de conservação para outras variáveis;
- h) Fazer $P^* = P$ e recomeçar no item (b) até atingir um critério de convergência.

4.7 Solução do Sistema de Equações

O sistema de equações formado pelas equações de discretização pode ser resolvido de forma agregada ou segregada. A forma agregada implica na solução do sistema como um todo, ou seja, todas as variáveis são resolvidas simultaneamente. Neste caso, não é necessário o acoplamento entre as variáveis, por exemplo acoplamento pressão-velocidade, pois estes são feitos pelos membros não nulos de uma matriz esparsa. É fácil perceber que para problemas com grande número de pontos e, conseqüentemente equações, a matriz gerada pode ter proporções gigantescas, que por sua vez são impossíveis de serem resolvidas devido à limitação física dos computadores atuais.

A idéia da solução do sistema de uma forma segregada, consiste em resolver um sistema de equações não lineares através da solução de sistemas lineares consecutivos, ou seja, solução iterativa. O método mais conhecido que trata a solução como segregada é o Linha-Por-Linha com TDMA onde se assume que a linha anterior e a linha posterior são conhecidas.

Na Figura 4.2, pode-se observar a linha na qual será aplicada a Equação 4.16, representada por •, sabendo-se que suas linhas anterior e posterior são conhecidas, e representadas por ■. Fazendo-se a varredura em todas as linhas, tem-se a solução do sistema não linear. Para problemas bidimensionais e tridimensionais, a varredura deve ser realizada não somente nas linhas mas também coluna-por-coluna e, assim, sucessivamente.

Sabe-se, também, que a estrutura da matriz de coeficientes é do tipo tridiagonal e pode ser facilmente resolvida pelo algoritmo de Thomas (TDMA) (Maliska (1995)).

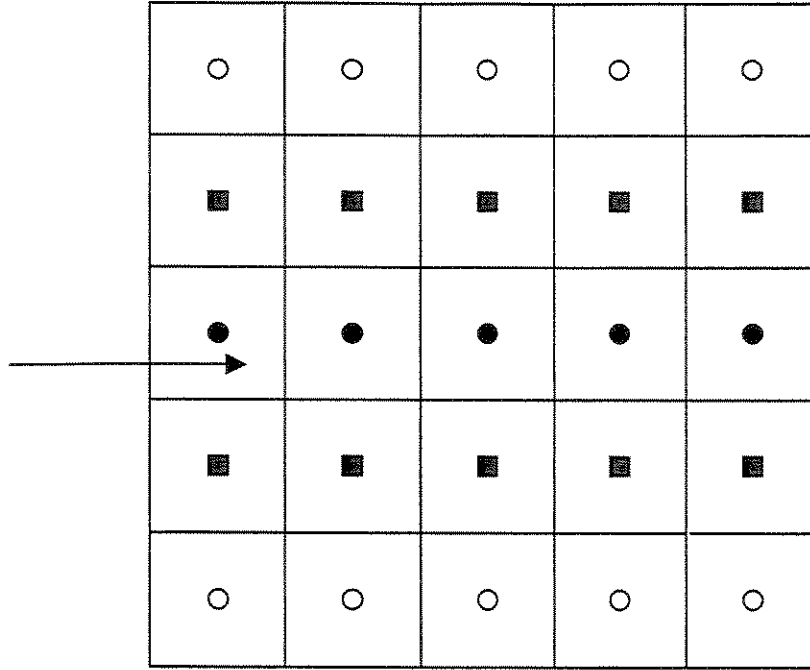


Figura 4.2. Representação esquemática dos pontos em um sistema bidimensional

Os critérios de convergência mais utilizados são baseados no cálculo dos resíduos das equações e na norma euclidiana dos resíduos, onde o resíduo para o ponto P genérico é dado por:

$$R_P = a_P \phi_P - \sum a_{nb} \phi_{nb} - b, \quad (4.35)$$

e a norma euclidiana é definida como:

$$R_{Eucl} = \sqrt{\sum (R_P)^2}. \quad (4.36)$$

Meier (1995) utiliza dois parâmetros de convergência, um que define a tolerância para o máximo resíduo e outra para a norma euclidiana:

$$\begin{cases} (R_P)_{MAX} \leq Tol_1 \\ R_{Eucl} \leq R_f (R_{Eucl})_0 \end{cases}, \quad (4.37)$$

onde $(R_P)_{MAX}$ é o maior resíduo de todos os pontos, Tol_1 é a tolerância para o máximo resíduo, $(R_{Eucl})_0$ é a norma euclidiana para a primeira iteração do linha-por-linha com TDMA e R_f o fator de redução que, segundo Van Doormaal e Raithby (1984), um bom valor situa-se entre 0,05 e 0,25.

Para o sistema como um todo é freqüente utilizar a norma euclidiana da fonte de massa da equação de correção de pressão.

4.8 Relaxações

As não linearidades geradas pelas equações e acoplamentos entre as variáveis podem desestabilizar a solução e levar a divergência numérica. Um método para aliviar a ação das não linearidades na solução iterativa do sistema é utilizar o que se chama de relaxação das variáveis no procedimento linha-por-linha com TDMA. O método consiste em diminuir a taxa de atualização das variáveis através de um coeficiente de relaxação, λ , inserido na Equação 4.16, ou seja:

$$\frac{a_P}{\lambda} \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_T \phi_T + a_B \phi_B + b + (1 - \lambda) \frac{a_P}{\lambda} \phi_P^{old}, \quad (4.37)$$

onde ϕ_P^{old} é o valor de ϕ_P obtido na iteração anterior. Os valores de λ podem variar de -1 a 1 com:

$$\lambda \begin{cases} < 1 \rightarrow \text{Desaceleração} \\ = 1 \rightarrow \text{Sem Relaxação} \\ > 1 \rightarrow \text{Aceleração.} \end{cases} \quad (4.38)$$

Outros métodos de relaxação são citados na literatura, tais como coeficientes de inércia (Meier(1998)), transiente distorcido (Maliska (1995)), entre outros. É importante salientar que tais métodos podem dar mais estabilidade à solução mas, em problemas onde a solução transiente é importante, efeitos de atraso do tempo real podem ser notados.

4.9 Malha Numérica

Os malhas numéricas mais comuns fazem com que suas variáveis sejam concentradas em um único ponto no volume diferencial. No entanto, Patankar (1981) sugere o deslocamento das variáveis, ou seja, as variáveis devem ser calculadas em pontos diferentes do volume elementar. A estratégia mais utilizada atualmente é fixar as velocidades nas faces dos volumes e as demais variáveis no centro. Esta técnica é chamada de malha desencontrada. A grande vantagem deste método é que se as velocidades são calculadas nas faces, consequentemente, não é necessário interpolar as velocidades, eliminando-se possíveis erros numéricos relacionados às aproximações impostas pelos esquemas de interpolação. No entanto, a implementação computacional é muito complexa, pois a indexação das variáveis torna-se exaustiva. Segundo Maliska (1995), a necessidade da solução de problemas com geometrias complicadas através de coordenadas generalizadas, motivou vários pesquisadores a desenvolverem métodos de acoplamento baseados no arranjo colocalizado (concentrado), que reduzam problemas numéricos como “ZigZag” ou “Check-Boarding”, onde soluções oscilatórias são obtidas para o campo de pressão, mesmo satisfazendo a equação da conservação da massa.

4.10 Discretização dos Contornos

As definições para os coeficientes da Equação 4.16, apresentadas pelas Equações 4.17, são válidas para os pontos no interior do domínio de cálculo. Os pontos das fronteiras devem ser tratados de uma forma especial, pois nestes pontos são aplicadas as condições de contorno. Os pontos dos contornos podem ser localizados de duas formas: uma que

coincide com a fronteira (ponto coincidente com fronteira), ou volume coincidente com a fronteira, onde a face do volume é a fronteira do domínio de cálculo. Para volumes coincidentes com as fronteiras é usual criar um volume imaginário, ou seja, um volume que não faz parte do domínio físico, mas faz parte do domínio de cálculo, com o objetivo de auxiliar a determinação ou especificação dos valores nos contornos ou faces dos volumes.

Afim de manter a forma geral da equação de discretização, Equação 4.16, definem-se os novos coeficientes para os volumes localizados nos contornos. Apresentam-se essas definições para as condições de contorno mais comuns, com volumes coincidentes com fronteira, por aplicação dos balanços de conservação nos volumes de fronteira e no uso de volumes fictícios, conforme Figura 4.3.

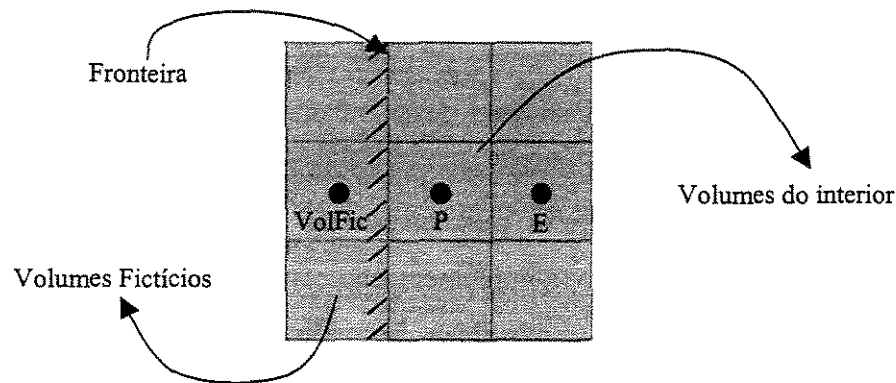


Figura 4.3. Volumes de controle em uma fronteira hipotética

4.10.1 Balanços de Conservação nos Volumes de Fronteira

- **Simetria:** envolve problemas nos quais pode-se assumir a hipótese de que o escoamento é simétrico. Para o caso do lado oeste ser simétrico ao lado leste⁵, definem-se os coeficientes para a Equação 4.16 como:

⁵ Na apresentação das modificações para os contornos, em todos os casos, uma fronteira a oeste do volume finito é adotada.

$$a_w = 0 \quad (4.39)$$

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_T \phi_T + a_B \phi_B + b,$$

e os demais coeficientes são idênticos aos definidos nas Equações 4.17.

- Valor de ϕ prescrito (sem convecção), para casos em que se conhece o valor da propriedade ϕ no contorno. Neste caso:

$$a_w = 0$$

$$S_P = -2 \left(\frac{\Gamma_{\phi x} \beta}{\Delta x} \right)_w A_w$$

$$S_C = 2 \left(\frac{\Gamma_{\phi x} \beta}{\Delta x} \right)_w A_w \left(\frac{\phi_{VolFic} + \phi_P}{2} \right)$$

$$\phi_{VolFic} = 2\phi_{Prescrito} - \phi_P$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_T + a_B + \rho \frac{\Delta V}{\Delta t} - S_P$$

$$b = \rho \phi_P^{OLD} \frac{\Delta V}{\Delta t} + S_C$$

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_T \phi_T + a_B \phi_B + b, \quad (4.40)$$

onde ϕ_{VolFic} é o valor da propriedade ϕ no ponto centrado no volume fictício, e $\phi_{Prescrito}$ é o valor conhecido da propriedade ϕ . Os demais coeficientes seguem a mesma estrutura já detalhada.

- Fluxo de ϕ conhecido (sem convecção): para situações em que se conhece o fluxo difusivo na fronteira, considerando-se o fluxo convectivo nulo, define-se os coeficientes como,

$$a_w = 0$$

$$S_C = Q_{\text{Conhecido}}$$

(4.41)

$$a_p = a_w + a_e + a_s + a_n + a_t + a_b + \rho \frac{\Delta V}{\Delta \tau} - S_p$$

$$b = \rho \phi_p^{\text{OLD}} \frac{\Delta V}{\Delta \tau} + S_C,$$

onde $Q_{\text{Conhecido}}$ é o valor do fluxo difusivo na face do volume do contorno.

- ϕ prescrito no interior do domínio: para situações onde é necessário fixar o valor da variável em um ou mais pontos do domínio de cálculo, (por exemplo, uma parede interna), tem-se,

$$a_w = a_e = a_n = a_s = a_t = a_b = 0$$

$$S_C = 10^{30} \phi_{\text{prescrito}} - \rho \phi_p^{\text{OLD}} \frac{\Delta V}{\Delta t}$$

$$S_p = -10^{30} + \rho \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (4.42)$$

$$a_p = a_w + a_e + a_s + a_n + a_t + a_b + \rho \frac{\Delta V}{\Delta t} - S_p$$

$$b = \rho \phi_p^{\text{OLD}} \frac{\Delta V}{\Delta t} + S_C.$$

- Fronteira com entrada e saída de massa: quando se tem um problema em que a entrada e/ou saída de massa são conhecidas, deve-se considerar o fluxo

difusivo na fronteira igual a zero. Se esta afirmação não for verdadeira, deve-se trazer a fronteira para uma região onde isto seja verdadeiro. Para este caso, conhece-se o fluxo convectivo e, assim, substitui-se este valor na equação de discretização, de forma a definir os coeficientes como:

$$a_w = 0$$

$$S_C = \dot{M}_{\text{Conhecido}}$$

(4.43)

$$a_P = a_w + a_E + a_S + a_N + a_T + a_B + \rho \frac{\Delta V}{\Delta \tau} - S_P$$

$$b = \rho \phi_P^{\text{OLD}} \frac{\Delta V}{\Delta \tau} + S_C,$$

onde $\dot{M}_{\text{Conhecido}}$ é o fluxo convectivo na fronteira. Para casos em que seja necessário obter-se o valor de ϕ na fronteira, o mesmo deverá ser extrapolado de valores internos de ϕ .

4.10.2 Uso do Volumes Fictícios

Para o uso dos volumes fictícios, torna-se necessário definir as equações dos volumes fictícios na forma da Equação 4.16, para as várias condições de contorno.

- Simetria:

$$a_{\text{VolFic}} = 1 \quad ; \quad a_E = 1 \quad ; \quad a_w = a_N = a_S = a_T = a_B = b = 0. \quad (4.44)$$

- Valor de ϕ prescrito (sem convecção):

$$a_{\text{VolFic}} = 1 ; a_E = -1 ; b = 2\phi_{\text{Prescrito}} ; a_W = a_N = a_S = a_T = a_B = 0. \quad (4.45)$$

- Fluxo de ϕ conhecido (sem convecção):

$$a_{\text{VolFic}} = 1 ; a_E = 1 ; b = -2 \frac{Q_{\text{Conhecido}} \frac{\Delta x_e}{2}}{\Gamma_{\phi e}} ; a_W = a_N = a_S = a_T = a_B = 0 \quad (4.46)$$

- Fronteira com entrada e saída de massa:

$$a_{\text{VolFic}} = 1 ; a_E = 0 ; b = \phi_e ; a_W = a_N = a_S = a_T = a_B = 0, \quad (4.47)$$

onde a_{VolFic} é o coeficiente do ponto, no volume fictício e ϕ_{VolFic} é a variável fluidodinâmica no volume fictício.

Com base na Figura 4.3, as discretizações dos contornos e volumes de fronteira mostram as equações que definem os coeficientes para contornos a esquerda, ou seja, na face oeste (W). No entanto, estas definições podem ser transportadas por analogia para contornos localizados em qualquer posição no domínio de cálculo.

O método dos volumes finitos, descrito neste capítulo, é base do “software” CFX 4.4 da AEA Technology, que subsidiará as soluções numéricas deste trabalho. Vale a pena ressaltar que a profunda compreensão do método, buscada neste capítulo, é de fundamental importância para a correta condução, análise e discussão dos resultados da experimentação numérica.

CAPÍTULO 5

5 Resultados e Discussões

Neste capítulo, são apresentados os resultados e discussões dos estudos de fluidodinâmica computacional realizados durante o desenvolvimento deste trabalho. Com o intuito de aprimorar a nossa experiência no que tange ao escoamento bifásico gás-líquido, formulou-se uma metodologia de estudos de casos com acréscimo seqüencial de complexidade. Tais casos são detalhados a seguir.

5.1 Caso 1-E escoamento em um Módulo Experimental de Hidráulica

O estudo experimental de um escoamento multifásico simplificado é de grande importância para se adquirir sensibilidade aos parâmetros envolvidos no escoamento. Pensando nesta afirmação e pela facilidade de aquisição de dados experimentais, decidiu-se estudar o escoamento em um módulo experimental de hidráulica.

O módulo constitui-se de um canal retangular em acrílico, aberto na parte superior, com um acumulador para entrada de água em uma das extremidades, e um tanque coletor na outra conforme Figura 5.1.

O sistema é auto-suficiente, pois a água do tanque é bombeada, passa por tubulações, entra no acumulador, percorre toda a calha retangular e retorna ao tanque, sendo que, no início, todo o sistema está cheio com ar atmosférico, exceto o tanque acumulador que contém água até certo nível.

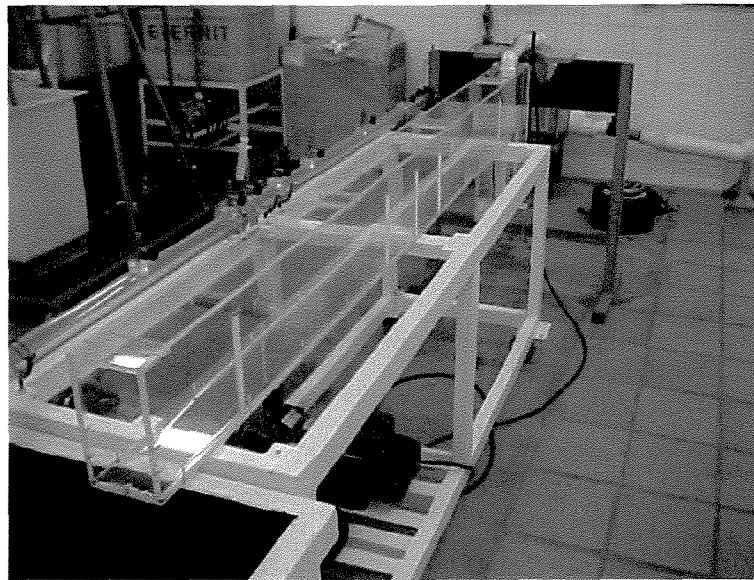


Figura 5.1. Módulo de hidráulica.

5.1.1 Aspectos geométricos

As condições geométricas do estudo de caso são apresentadas na Figura 5.2. convém salientar a possibilidade de se obstruir o escoamento no canal mediante a introdução de uma placa plana também em acrílico⁶.

Pela natureza elíptica do escoamento, todas as condições de fronteira devem ser especificadas. Quando da aplicação do modelo tridimensional homogêneo (3-DHomM).

Na entrada, o campo de velocidade é uniforme e normal à entrada. A faixa de vazão de entrada, medida por placa de orifício no duto de alimentação e por vertedouro na saída do canal, foi de 0,0 a 8,0 m³/h.

Em duas regiões, como pode-se observar na Figura 5.3, são consideradas condições de pressão e escoamento completamente desenvolvido. A condição de pressão é aplicada, pois estas regiões são abertas, ou seja, estão expostas à entrada e saída de massa. Para baixas velocidades, a condição de pressão ambiente constante pode ser assumida.

⁶ O obstáculo não foi analisado neste trabalho

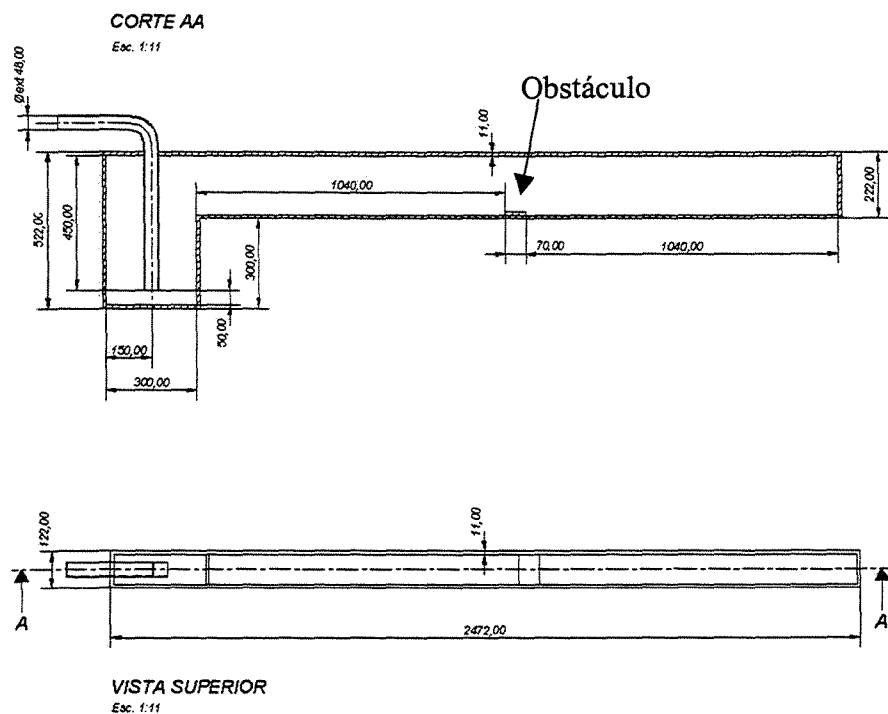


Figura 5.2. Dimensões do módulo de hidráulica (em milímetros).

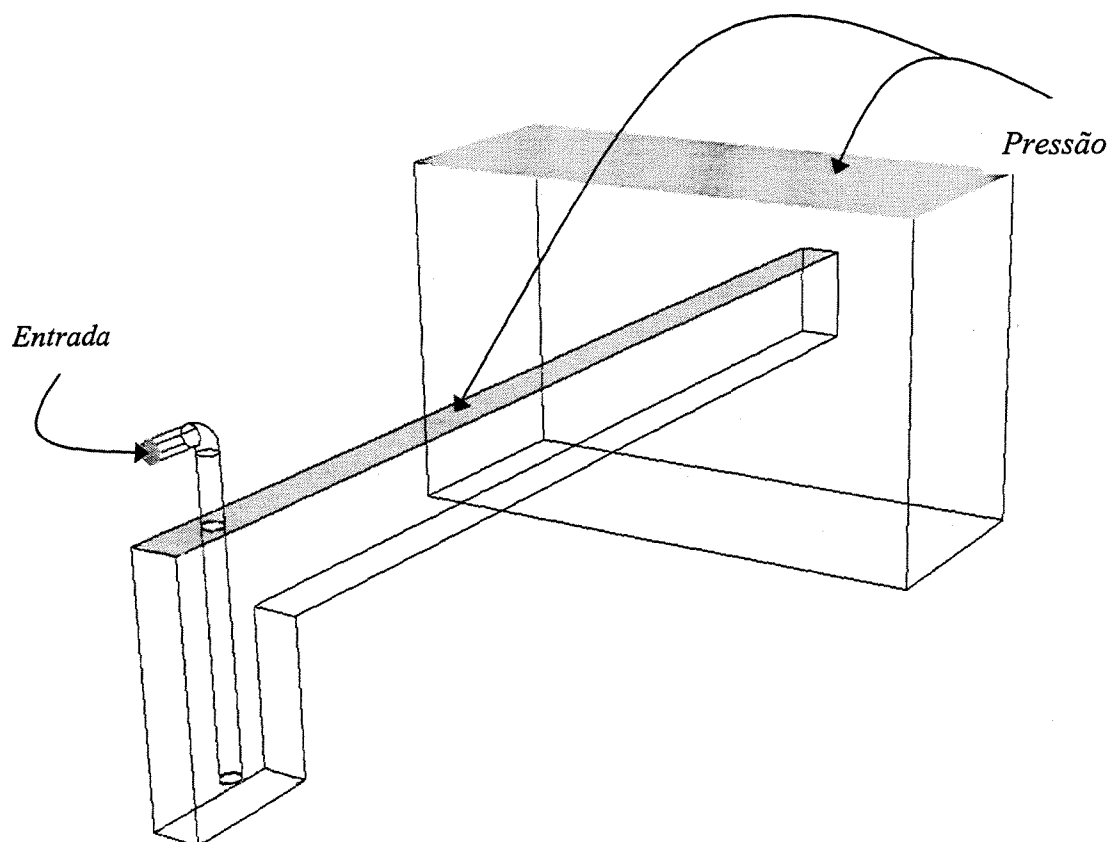


Figura 5.3 Domínio físico para o caso 1.

A tabela 5.1 mostra, na forma matemática, as condições de contorno em todos os contornos do domínio físico.

Tabela 5.1. Condições de contorno para o caso 1 (modelo 3-DTHomM).

Condição de Contorno	Fase		
	Mistura	Líquida	Gás
Entrada	$v_x _{x=0} = v_{ent} \quad v_y _{x=0} = 0$ $v_z _{x=0} = 0$ $k _{x=0} = 1,5 \left(i \cdot v_x _{x=0} \right)^2$ $\varepsilon _{x=0} = \frac{(k _{x=0})^{1,5}}{0.3 L_s}$	$f_l = f_{l,in}$	$f_g = 1 - f_{l,in}$
Pressão	$\frac{\partial v_x}{\partial z} \Big _{outl} = \frac{\partial v_y}{\partial z} \Big _{outl} = \frac{\partial k}{\partial z} \Big _{outl} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \Big _{outl} = 0$ $P = P_{ref}$	$\frac{\partial f_l}{\partial z} \Big _{outl} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial z} \Big _{outl} = 0$
Parede	$v_x _{wall} = v_y _{wall} = k _{wall} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \zeta} \Big _{wall} = 0$	$\frac{\partial f_l}{\partial \zeta} \Big _{wall} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial \zeta} \Big _{wall} = 0$
ζ é a direção ortogonal à parede			

5.1.2 Metodologia de solução

O pré-processador CFX 4.4-BUILD foi utilizado para criar a malha numérica que representa a geometria no domínio computacional. A malha numérica é apresentada na Figura 5.4, com um total de 13016 elementos, mostrou-se independente da concentração nos estudos de experimentação numérica deste trabalho.

O modelo foi resolvido utilizando-se esquemas de interpolação “upwind” de primeira ordem e acoplamento pressão-velocidade do tipo SIMPLEC. Todas as variáveis escalares são discretizadas e avaliadas no centro da célula e as velocidades necessárias nas faces das células são preditas aplicando-se um algoritmo de interpolação do tipo Rhie-Chow (CFX 4.4 User Guide).

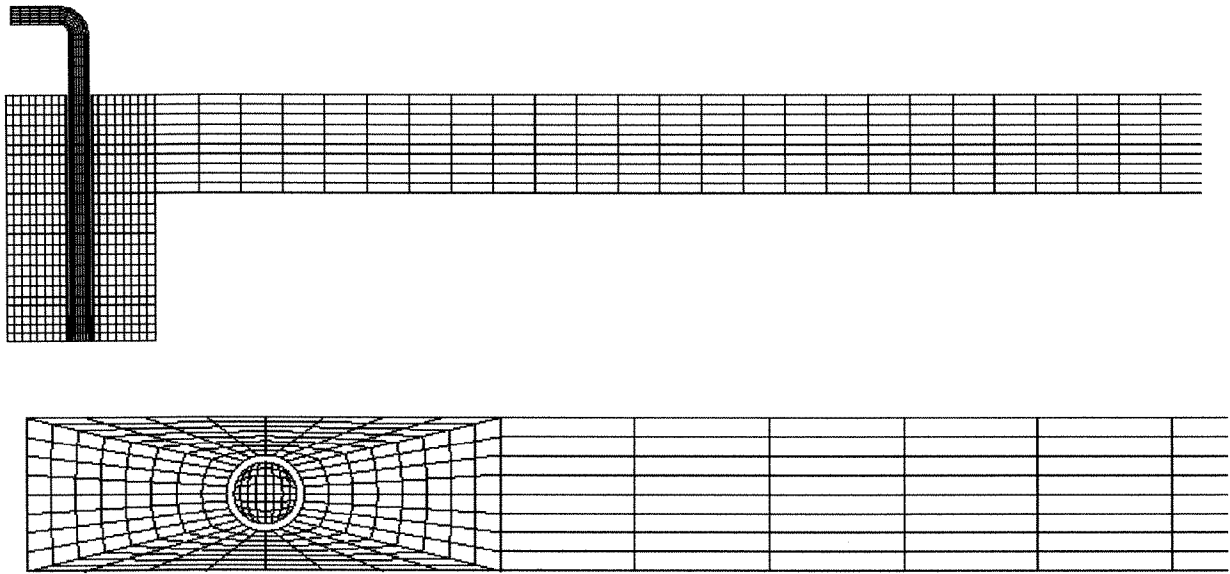


Figura 5.4. Malha numérica gerada para o caso 1.

5.1.3 Algoritmo de alisamento

Para escoamentos com superfícies livres, o enfoque homogêneo no escoamento multi-fluido é uma boa aproximação (Soares, (2002)). No entanto, necessita-se de um algoritmo de alisamento de superfícies livres (SSA) que gere uma modificação das frações volumétricas dos fluidos nas imediações da interface. Neste algoritmo a interface é definida onde as frações dos fluidos, f_g e f_l , são iguais a 0,5. Então, são identificadas as frações de massa localizadas no lado errado da interface, ou seja, se $f_l - 0,5$ para a célula é diferente em sinal de alguma das células vizinhas, é removida para o lado certo da interface, garantindo que o volume da fase seja conservado (CFX 4.4 User Guide).

A Figura 5.5 mostra a comparação entre os resultados obtidos sem o algoritmo de alisamento e com o algoritmo, em três tempos distintos. Pode-se perceber que a inclusão do algoritmo de alisamento de superfícies livres (SSA) permite melhor definição da interface entre as duas fases, o que não acontece sem o algoritmo onde ocorre uma dispersão muito grande da região de interface além de retardar a dinâmica do escoamento.

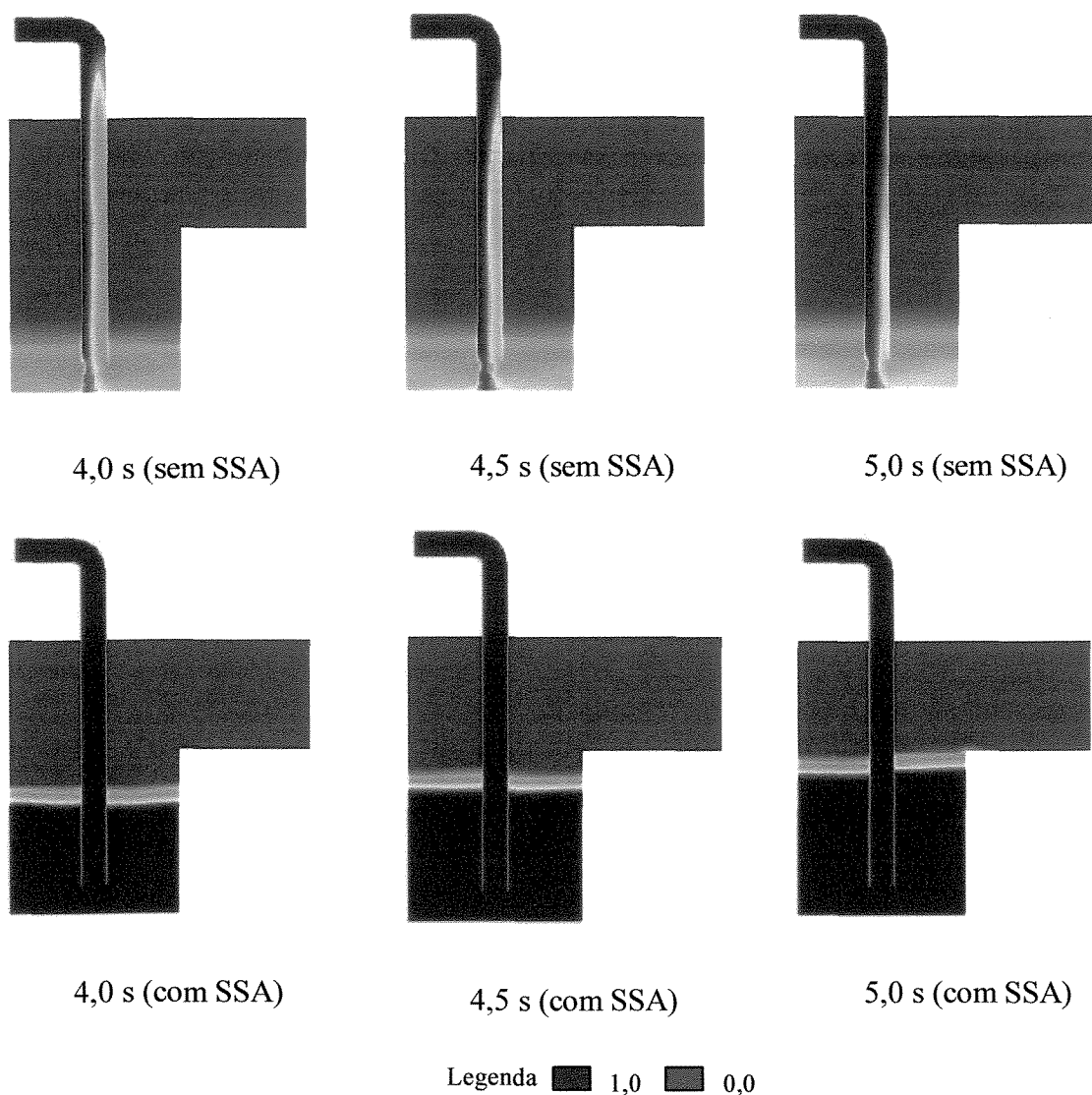


Figura 5.5. Avaliação do algoritmo de Alisamento (fração volumétrica de líquido).

Percebe-se também uma melhora na convergência, provavelmente, devido à pouca dispersão na interface gás líquido.

Na Figura 5.6, pode-se observar a dinâmica do escoamento no canal do módulo experimental de hidráulica onde se alcançou um regime estacionário após aproximadamente 30 segundos de tempo real. Percebe-se claramente o surgimento de uma onda no escoamento, devido aos efeitos conjuntos da interação do fluido com a parede e a força adicional devido à tensão superficial que atua na interface das fases, que, em seguida, é estabilizada até atingir o regime estacionário.

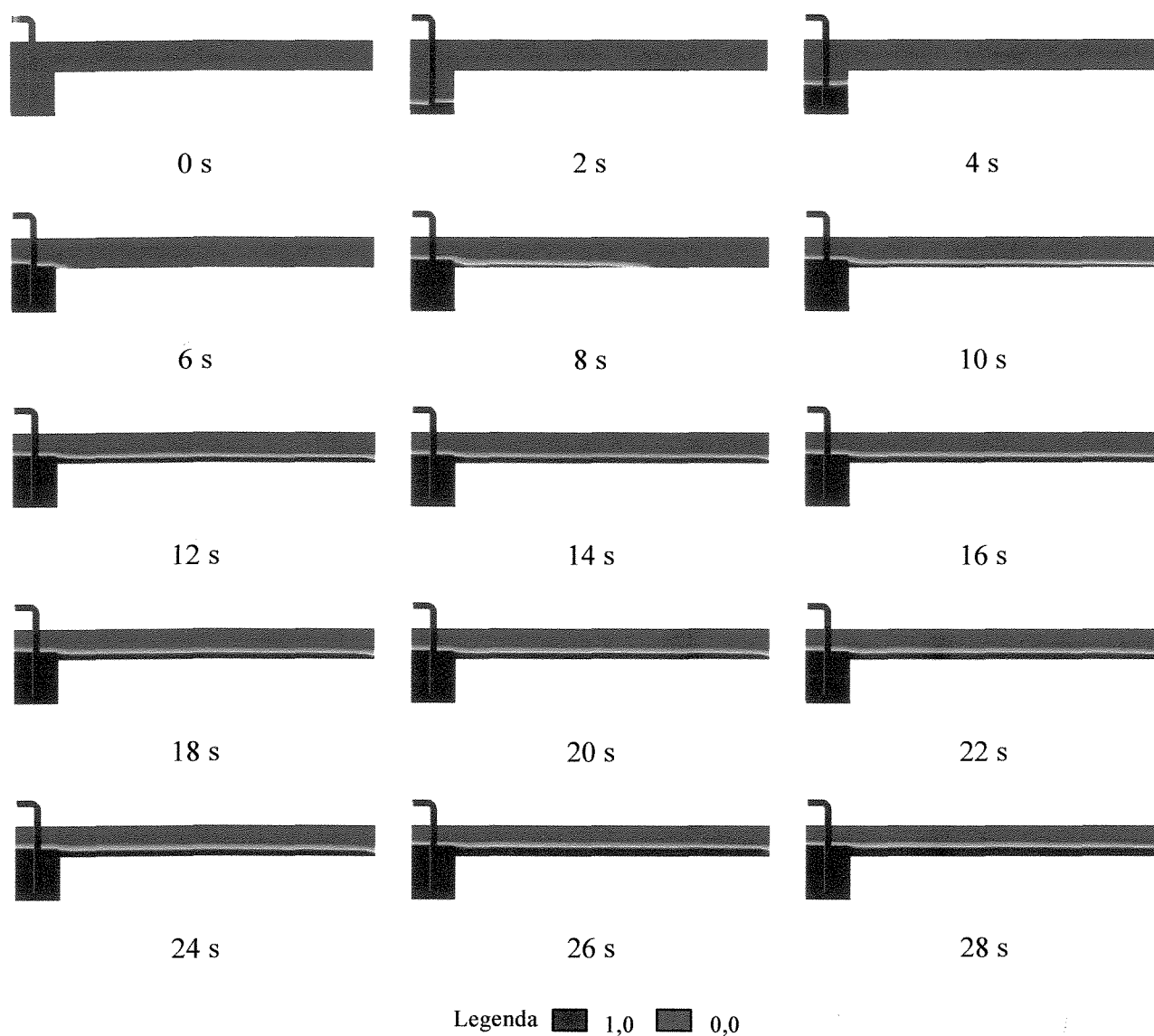


Figura 5.6. Dinâmica do escoamento em um módulo de hidráulica (fração de líquido).

Cinco dias de processamento, em computador dotado de um processador Pentium III com 1,0 Gbyte de memória RAM, foram necessários para se obter o regime estacionário.

As Figuras 5.7 e 5.8 dão um detalhamento dos campos de pressão e velocidade, respectivamente, nas quais observam-se grandes zonas de recirculação, para a fase líquida, no acumulador inicial, e na região da calha para a fase gás, isto devido provavelmente ao arraste sofrido pelo gás em contato com o líquido escoando.

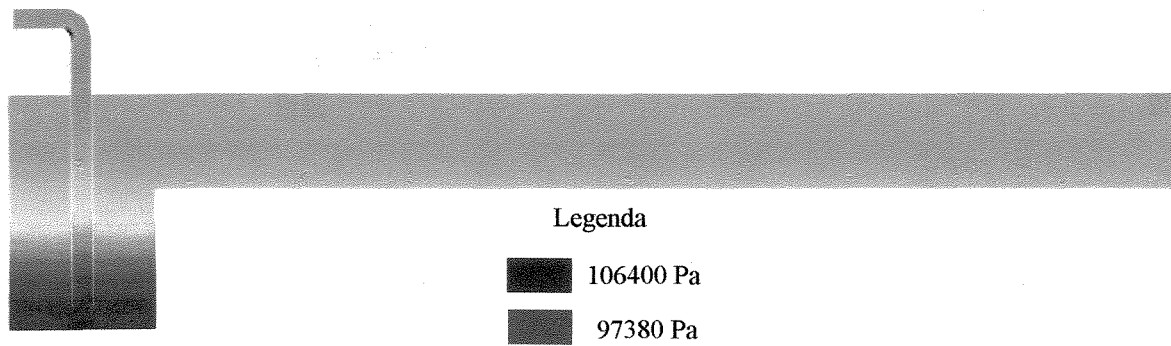


Figura 5.7. Campo de pressão.

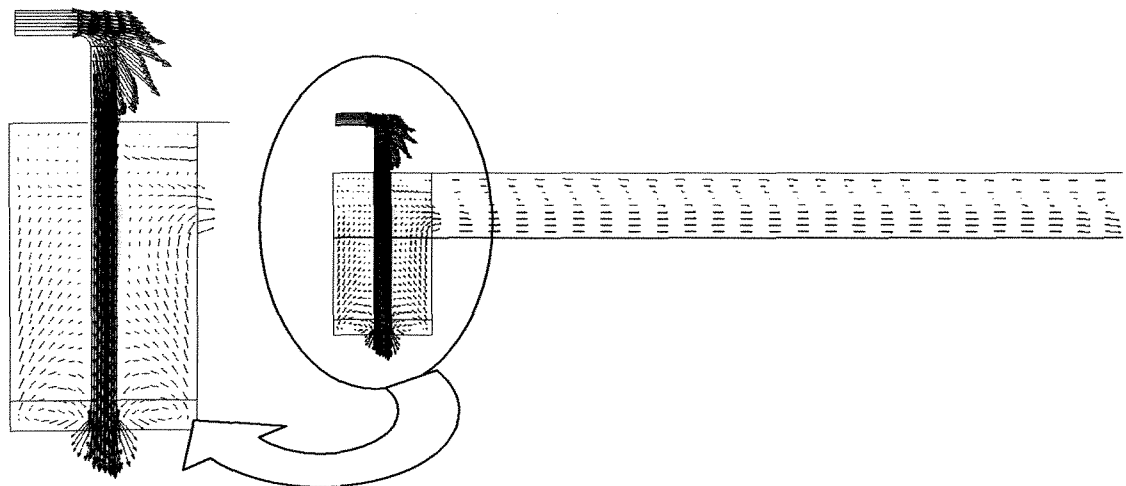


Figura 5.8. Campo de velocidade.

5.1.4 Corroboração do modelo

Com o estudo experimental, formulou-se uma metodologia de comparação de dados experimentais com os resultados numéricos. Para tal caso, observou-se a altura de líquido formada pelo escoamento no módulo de hidráulica. Foram seleccionados oito pontos distintos ao longo do módulo onde, em regime estacionário, foram feitas as medições. Os pontos seleccionados foram em X igual a 0,0, 0,30, 0,60, 1,20, 1,40, 1,60, 2,20, 2,40 metros, os quais se mostraram suficientes para a comparação dos dados.

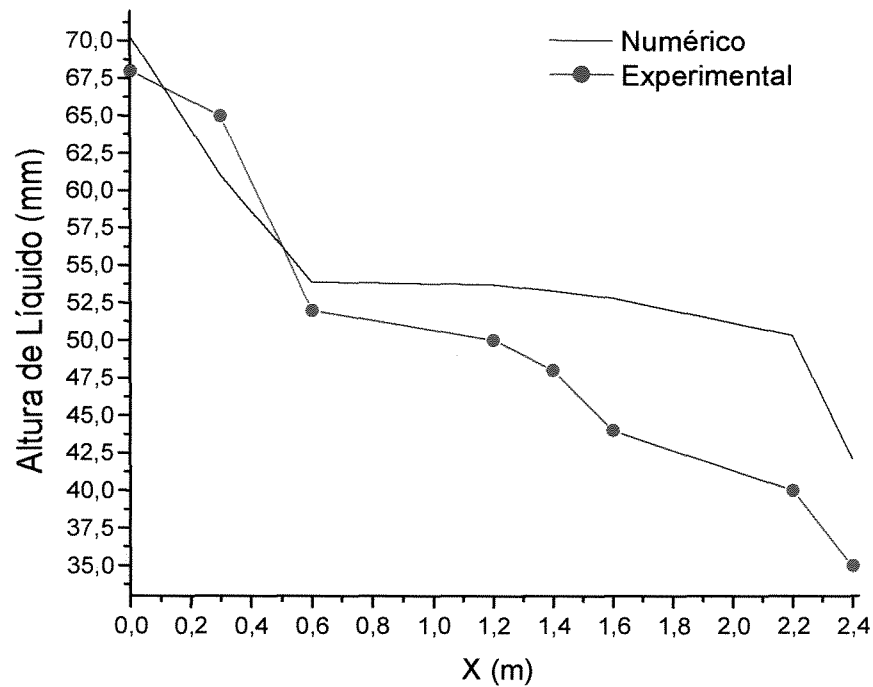


Figura 5.9. Comparação com dados experimentais.

Pode-se observar, na Figura 5.9, uma representação satisfatória dos resultados numéricos quando comparado com os dados experimentais, com erros em torno 10%.

5.1.5 Algumas conclusões

O estudo de caso 1 permite chegar a algumas conclusões primárias sobre o escoamento gás – líquido:

- O modelo homogêneo traz resultados realísticos para escoamentos com superfícies livres;

- O algoritmo de alisamento (SSA) tem uma aplicação fundamental em escoamentos com superfícies livres;
- A técnica de CFD mostrou-se uma poderosa ferramenta na predição de escoamentos gás-líquido com superfícies livres;
- Novos testes com variações das condições de entrada são necessários para a consolidação do modelo;
- Este estudo proporcionou conhecimento suficiente para iniciar a experimentação numérica com escoamentos em pratos de destilação.

5.2 Caso 2-Prato Bidimensional

Em um prato de destilação, o líquido flui através do prato desde o vertedor de entrada até o vertedor de saída, enquanto que o gás passa por perfurações existentes no prato e atravessa a coluna de líquido trocando massa, calor e quantidade de movimento.

Como a transferência de calor e a massa não são objetos deste estudo, e admitindo-se que o escoamento de líquido na coluna muito mais importante que o de gás (em conformidade com o trabalho de Liu *et al.* (2000)), pode-se aplicar o modelo 2-DSM apresentado e discutido no capítulo 3 (item 3.1.1).

5.2.1 Condições geométricas

As características do caso analisado, como geometria e as condições operacionais, bem como as propriedades físicas do sistema, foram extraídas do trabalho de Liu *et al.* (2000), e são apresentados na Tabela 5.2.

Tabela 5.2. Características do caso analisado.

Geométricas	Operacionais	Propriedades físicas
$D = 1,20 \text{ m}$	$L = 0,009 \text{ m}^3/\text{m.s}$	$\rho_g = 1,0 \text{ kg/m}^3$
$W/D = 0,645$	$U_s = 1,3 \text{ m/s}$	$\rho = 1000,0 \text{ kg/m}^3$
$h_w = 0,025 \text{ m}$	-	$\mu = 0,01 \text{ cP}$

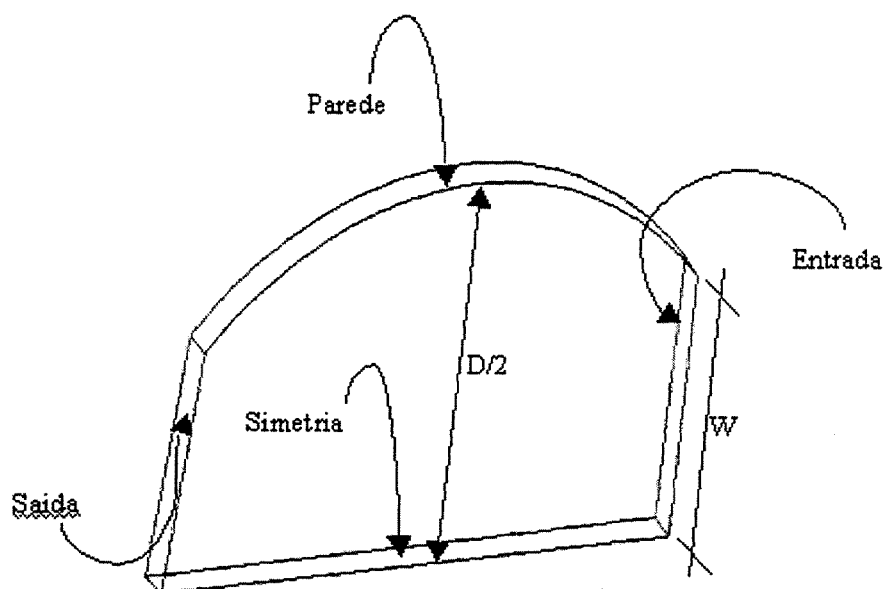


Figura 5.10. Domínio físico e condições de contorno para o caso 2.

Devido às características elípticas das equações diferenciais parciais do modelo, as condições de contorno em todas as fronteiras do domínio físico também são necessárias.

Na entrada de líquido, são assumidas algumas simplificações no que tange à geometria real de uma coluna de destilação. É considerada uma entrada bidimensional e um perfil de velocidade normal, além de propriedades turbulentas fixas.

Como a geometria é simétrica, pode-se assumir uma condição de simetria para todas as variáveis dinâmicas na linha central do prato, conforme apresentado na Figura 5.10.

Nas paredes, a condição de não deslizamento para todas as variáveis é adotada e na saída, com as mesmas simplificações adotadas na entrada, é aplicada uma condição de pressão uniforme e constante com o escoamento completamente desenvolvido.

A descrição matemática das condições de contorno, é apresentada na Tabela 5.3.

Tabela 5.3. Condições de contorno para o caso 2 (modelo 2-DSM).

Condição de contorno	Fase	
	Líquido	Gás
Entrada	$v_x _{x=0} = \frac{L}{h} \quad v_y _{x=0} = 0$ $k _{x=0} = 0.003(v_x _{x=0})^2$ $\varepsilon _{x=0} = \frac{0.09(k _{x=0})^{3/2}}{0.03 W/2}$	-
Saída (pressão)	$\frac{\partial v_x}{\partial y}\bigg _{out} = \frac{\partial v_y}{\partial y}\bigg _{out} = \frac{\partial k}{\partial y}\bigg _{out} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\bigg _{out} = 0$ $P=P_{ref}$	-
Parede	$v_x _{wall} = v_y _{wall} = k _{wall} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\bigg _{wall} = 0$ <p>(não-deslizamento)</p>	-
Simetria	$\frac{\partial v_x}{\partial y}\bigg _{y=0} = \frac{\partial k}{\partial y}\bigg _{y=0} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\bigg _{y=0} = v_y = 0$	-

5.2.2 Metodologia de solução

Como no caso 1, o método dos volumes finitos com esquemas de interpolação de primeira ordem (UPWIND), acoplamento pressão-velocidade do tipo SIMPLEC, foram utilizados para discretizar o modelo matemático. Todas as variáveis escalares foram avaliadas no centro de cada célula, e as velocidades necessárias nas faces das células foram obtidas pela aplicação de um algoritmo de interpolação do tipo RHIE – CHOW para evitar problemas de “check-boarding” ou oscilação na solução numérica. Fatores de relaxação e um falso passo de tempo também foram aplicados para garantir a estabilidade e a convergência da solução numérica.. A malha gerada neste caso teste é do tipo colocalizada que acompanha a geometria.

5.2.3 Dependência da solução com a malha

Quatro malhas diferentes foram construídas com uma distribuição dos pontos na geometria uniforme e variando de 400 a 6400 pontos. A Figura 5.11 mostra as diferentes malhas analisadas nos estudos de dependência da solução com a malha.

A Figura 5.12 apresenta a velocidade axial no centro da geometria. Verifica-se que uma malha acima de 60×60 (3600 elementos) não espelha efeitos significativos na solução. Os efeitos negativos produzidos por malhas com menos elementos, provavelmente, têm relação com mudanças das propriedades no volume de controle, ou seja, o elemento não é suficientemente pequeno para que se possa aplicar a hipótese de que no volume de controle a propriedade não varia. Se houver alguma mudança significativa na solução com malhas acima de 3600 pontos, deverá ter relação com esquemas de interpolação (efeitos de difusão numérica), fatores de relaxação (retardo na solução), entre outros.

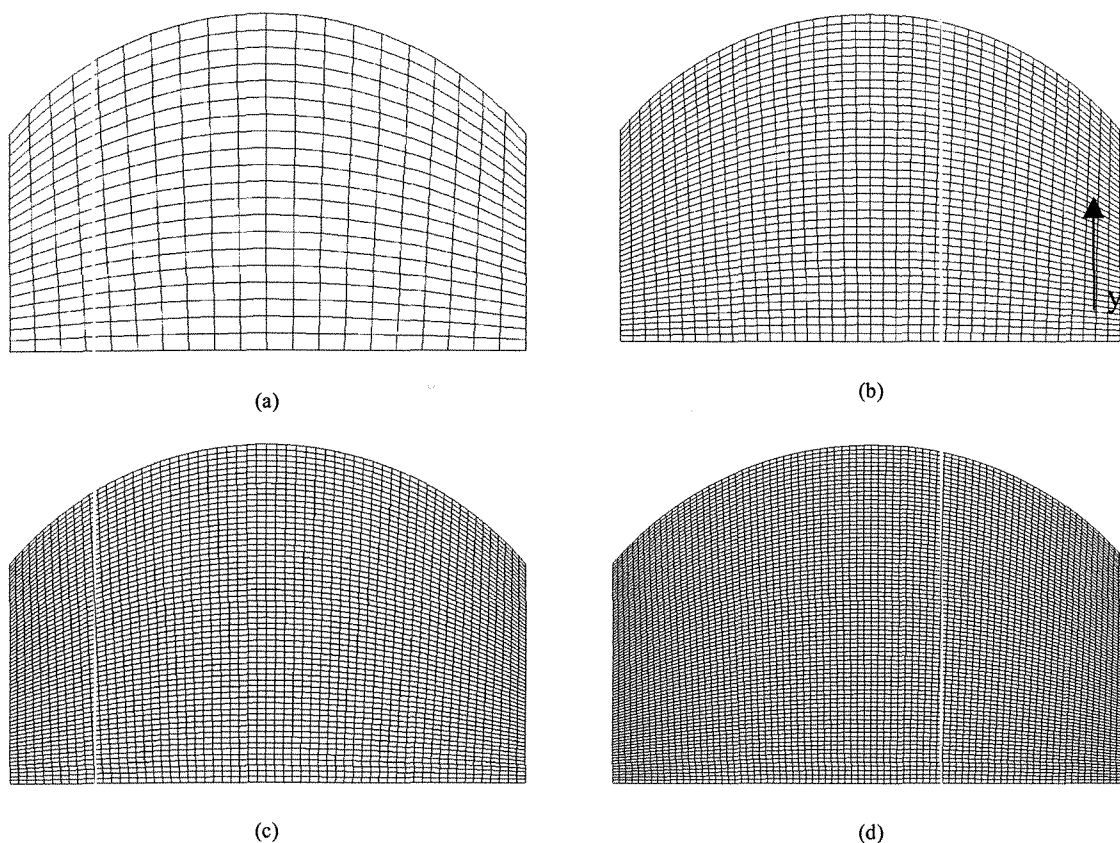


Figura 5.11. Malha numérica: (a) 20×20 ; (b) 40×40 ; (c) 60×60 ; (d) 80×80 células.

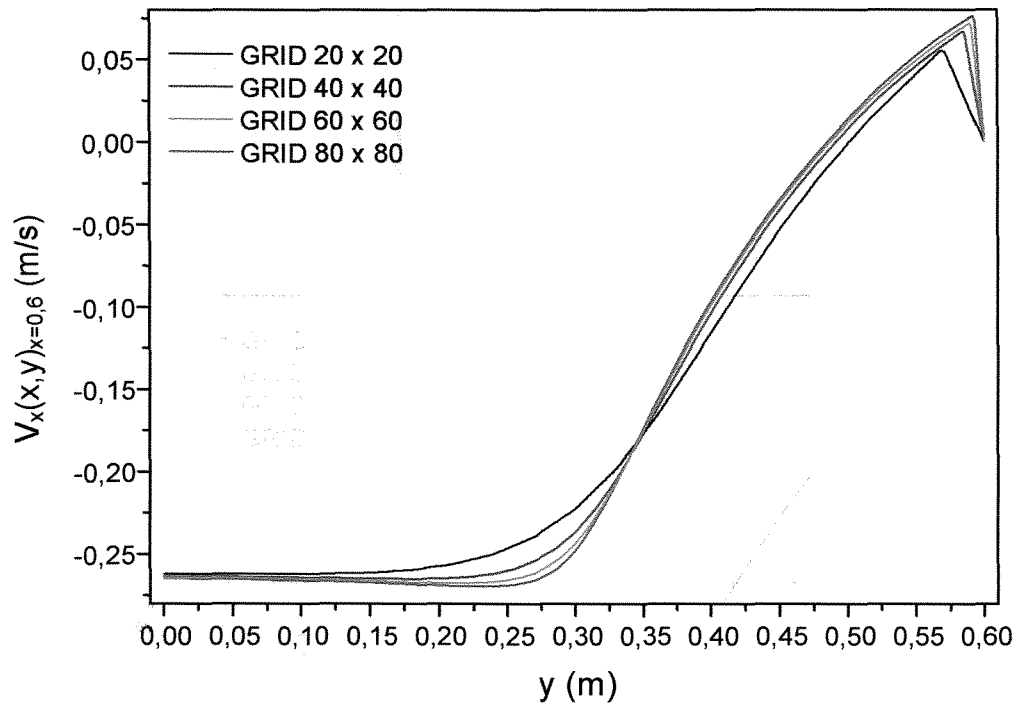


Figura 5.12. Análise das diferentes malhas numéricas.

5.2.4 Corroboração do modelo

A validação do modelo foi realizada, primeiramente, a partir da análise do parâmetro empírico (C_e). Em trabalho anterior, Liu *et al.* (2000) obtiveram um valor em torno de 0,0033. No entanto, o modelo definido por Liu não apresenta os termos cruzados de difusão nas equações de *momentum*. Provavelmente, esta aproximação foi utilizada por considerar as equações padrão de Navier-Stokes na forma não conservativa, ao invés das equações gerais de conservação.

A Figura 5.13 mostra uma comparação de vários casos para diferentes valores de C_e , com dados experimentais. As comparações foram feitas com respeito ao vetor velocidade no centro da geometria. Pode-se observar uma dependência muito grande da solução com este parâmetro. Sugere-se, neste trabalho, um valor para tal coeficiente em torno de 0,0001.

Na Figura 5.14, observa-se a relação do parâmetro C_e com o percentual de recirculação no prato, na qual percebe-se que, com o acréscimo no valor de C_e , a área de recirculação diminui. Este fato acontece pois o parâmetro C_e está diretamente relacionado com o acréscimo de energia turbulenta, que tem como efeito homogeneizar o escoamento, eliminando assim, as zonas de recirculação.

Na Figura 5.15, observa-se o campo de pressão para C_e igual a 0,0001. Percebe-se que a afirmação macroscópica de que o escoamento vai da região de maior pressão para a de menor não é sempre verdadeira. Neste caso a parcela referente à convecção de quantidade de movimento é bem maior que a parcela referente ao diferencial de pressão, e responsável direta pelo escoamento. Mas este diferencial provoca regiões de recirculação no prato, prejudicando, assim, a eficiência do mesmo.

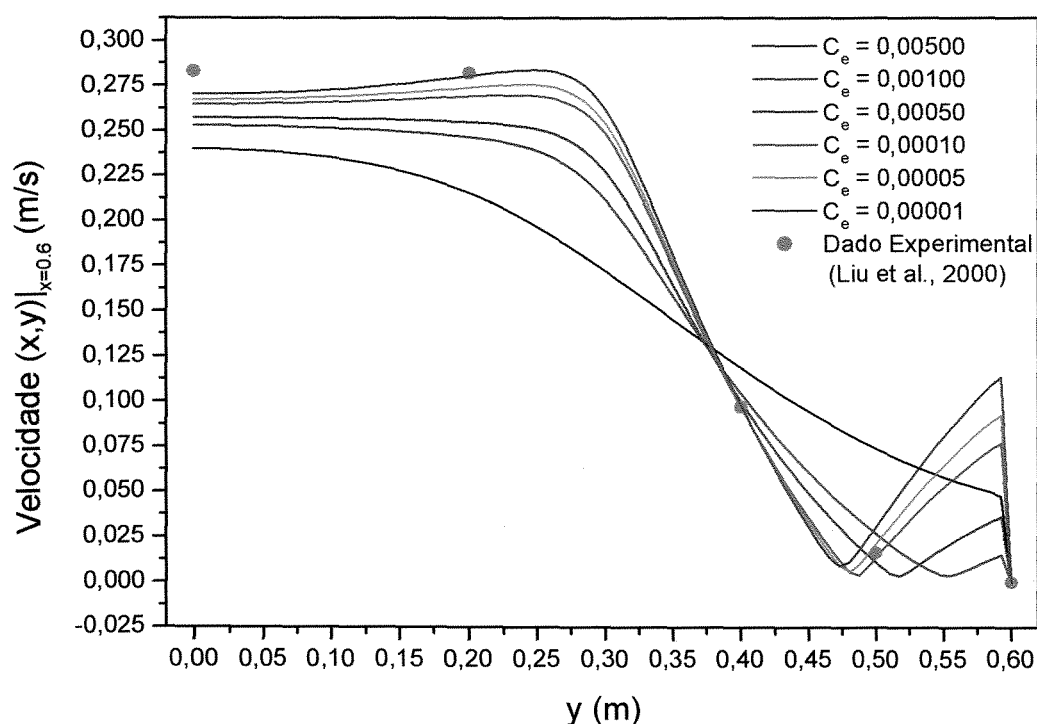


Figura 5.13. Avaliação de C_e (Coeficiente de Transferência).

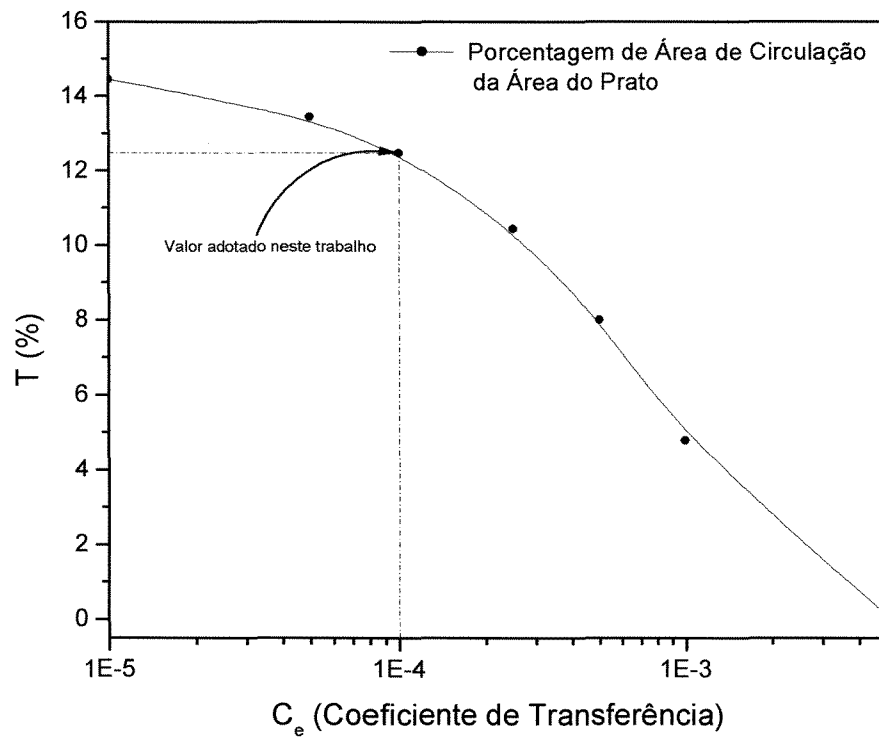


Figura 5.14. Percentual de recirculação no prato.

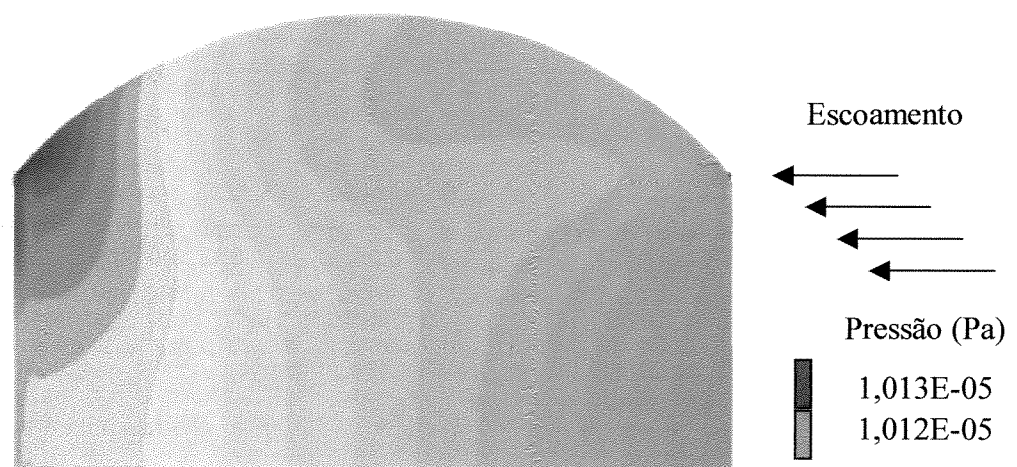


Figura 5.15. Campo de pressão.

A Figura 5.16 mostra o campo de vetores resultantes da simulação, onde percebe-se uma área de recirculação na região da parede, oposta à entrada do líquido. Esta recirculação aparece, provavelmente, devido ao fato de que o componente radial de velocidade sofre maior impacto do campo de pressão oposto ao escoamento, que o componente axial de velocidade.

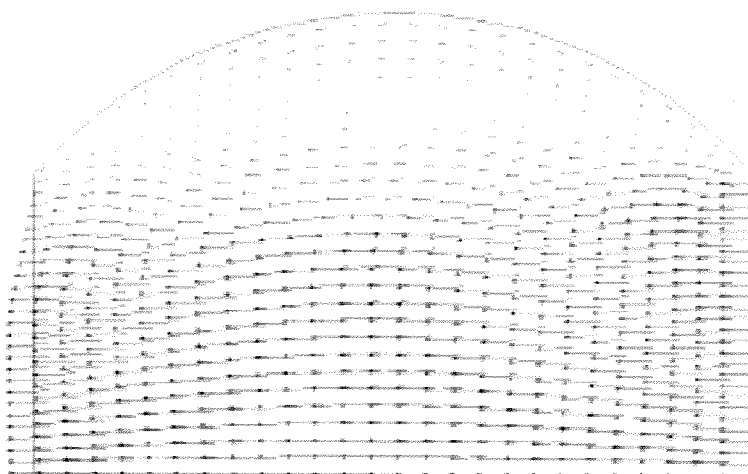


Figura 5.16. Campo de velocidade.

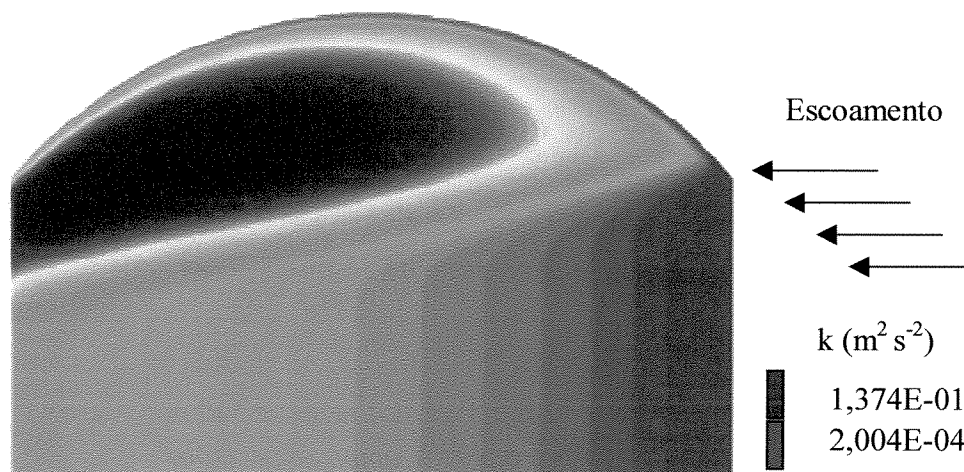


Figura 5.17. Mapa de energia cinética turbulenta (k).

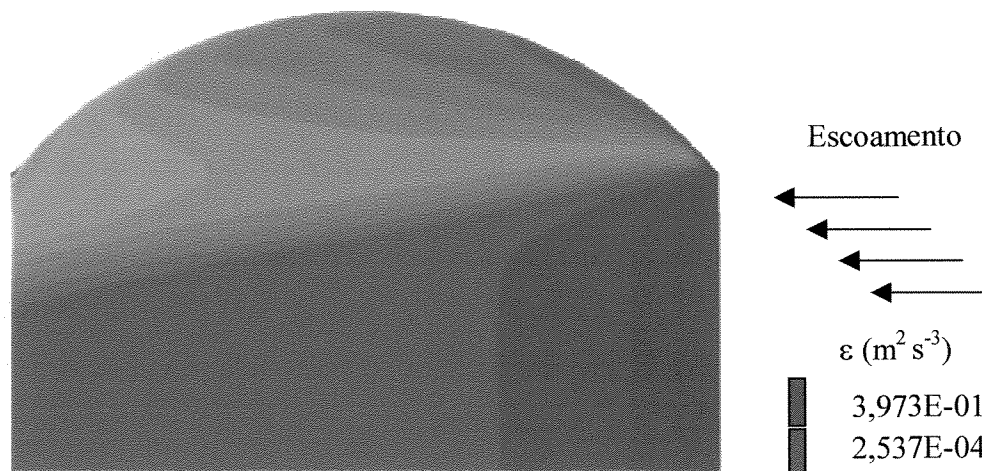


Figura 5.18. Mapa da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ).

As Figuras 5.17 e 5.18 apresentam os mapas das propriedades turbulentas, energia cinética turbulenta (k) e sua taxa de dissipação (ϵ), respectivamente. Nota-se que, tanto a energia cinética turbulenta como sua taxa de dissipação, sofrem os efeitos do campo de pressão. As Figuras 5.15, 5.16, 5.17 e 5.18 vistas em conjunto mostram claramente este efeito.

5.2.5 Algumas conclusões

As principais conclusões obtidas neste estudo de caso são:

- O modelo empírico para a geração de turbulência devido ao borbulhamento é muito dependente do parâmetro linear C_e que precisa ser muito bem ajustado, além de tirar a característica teórica da predição da fluidodinâmica do escoamento em um prato de destilação;
- A técnica de CFD utilizada neste estudo representa uma importante ferramenta para analisar o fenômeno da fluidodinâmica em pratos de

destilação, e pode ser usada em estudos avançados de otimização da geometria de colunas de destilação;

- Este estudo gerou uma publicação no 22nd Iberian Latin-American Congress on Computational methods in Engineering and 2nd Brazilian Congress on Computational Mechanics (CILAMCE) realizado na cidade de Campinas-SP nos dias 7, 8 e 9 de novembro de 2001.

5.3 Caso 3-Coluna de Bolhas

A formação das bolhas é avaliada através de uma coluna onde o ar é injetado através de um furo na parte inferior. Este estudo tem por objetivo fazer uma avaliação primária do modelo homogêneo (3-DhomM) para o prato de destilação.

Uma coluna experimental foi construída com objetivo de fornecer dados experimentais para avaliar o modelo e constitui-se de uma coluna em acrílico com um bico de injeção de gás na base da coluna previamente cheia de líquido. A Figura 5.19 mostra com mais detalhes o experimento.

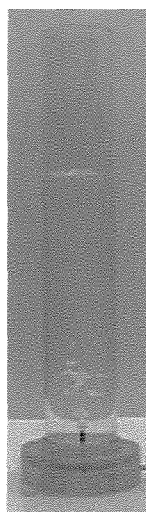


Figura 5.19. Coluna de bolha experimental.

5.3.1 Geometria e condições de contorno

A vazão de ar é medida através de um fluxômetro colocado na linha de ar comprimido que alimenta o bico injetor da coluna. A coluna foi previamente preenchida com água formando uma coluna de 0,25 metros de água. A Tabela 5.4 detalha as condições operacionais e geométricas da coluna.

Tabela 5.4. Características do caso analisado.

Geométricas	Operacionais
$H = 0,38 \text{ m}$ (Altura da coluna)	$Q_g = 1,000 \text{ l/min}$
$D = 0,05 \text{ m}$ (Diâmetro da coluna)	$h = 0,250$
$d = 0,001 \text{ m}$ (Diâmetro do furo)	$T = 25,000 \text{ }^{\circ}\text{C}$

A Figura 5.20 mostra o domínio físico e as condições de contorno adotados para o estudo.

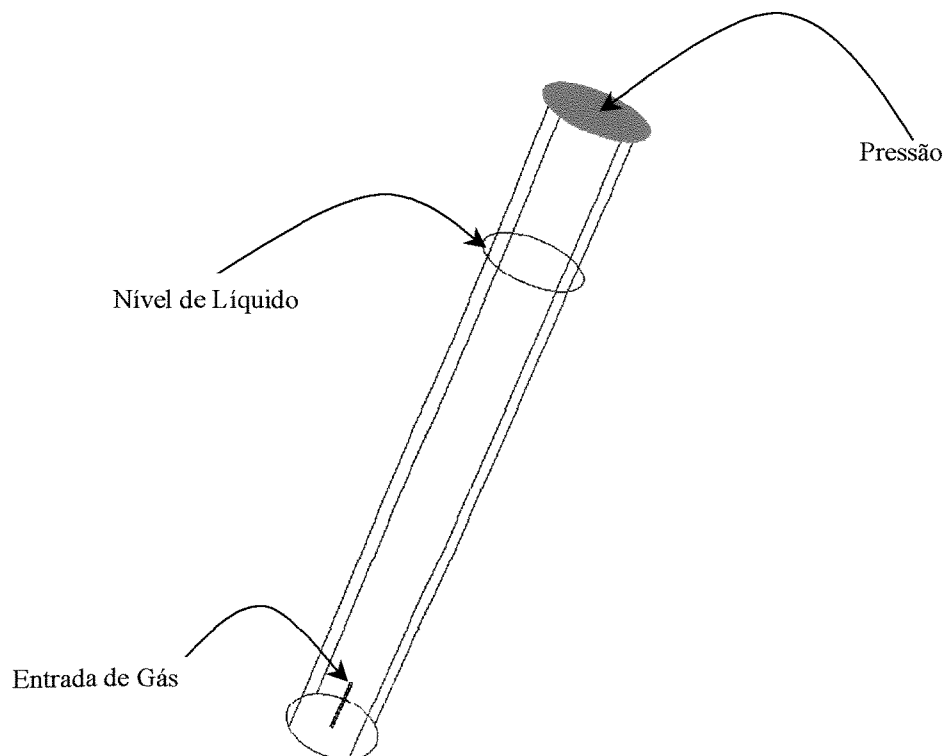


Figura 5.20. Domínio físico e condições de contorno para o caso 3.

Tabela 5.5. Condições de contorno para o caso 3 (modelo 3-DTHM).

Condição de contorno	Fase		
	Mistura	Líquida	Gás
Entrada	$v_x _{x=0} = v_{ent} \quad v_y _{x=0} = 0$ $v_z _{x=0} = 0$ $k _{x=0} = 1,5(i \cdot v_x _{x=0})^2$ $\varepsilon _{x=0} = \frac{(k _{x=0})^{1,5}}{0.3 Ls}$	$f_l = f_{l,in}$	$f_g = 1 - f_{l,in}$
Pressão	$\frac{\partial v_x}{\partial z}\bigg _{outl} = \frac{\partial v_y}{\partial z}\bigg _{outl} = \frac{\partial k}{\partial z}\bigg _{outl} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z}\bigg _{outl} = 0$ $P = P_{ref}$	$\frac{\partial f_l}{\partial z}\bigg _{outl} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial z}\bigg _{outl} = 0$
Parede	$v_x _{wall} = v_y _{wall} = k _{wall} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\zeta\bigg _{wall} = 0$	$\frac{\partial f_l}{\partial \zeta}\bigg _{wall} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial \zeta}\bigg _{wall} = 0$
ζ é a direção ortogonal à parede			

O ar entra através de um furo com velocidade constante e normal à entrada. Na parte superior da coluna é imposta a condição de pressão e na parede, a condição de não deslizamento. A Tabela 5.5 apresenta as condições de contorno escritas na sua forma matemática.

5.3.2 Método numérico

O método numérico utilizado para resolver as equações diferenciais parciais do modelo foi o método dos volumes finitos. Esquemas de interpolação de primeira (UPWIND) e alta ordem (HIGHERUPWIND) foram testados, e o acoplamento pressão velocidade do tipo SIMPLEC foi empregado. Um algoritmo de interpolação RHIE – CHOW com procedimento AMG para resolver as equações algébricas foi usado para evitar problemas de divergência e oscilações na solução. Testes com o algoritmo de alisamento de superfícies livres (SSA) também foram realizados.

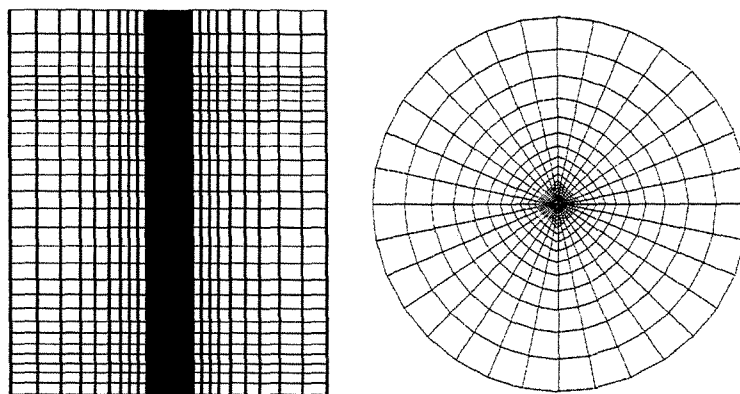


Figura 5.21. Malha numérico para o caso 3 com 16416 células.

Os fatores de relaxação não foram utilizados, pois, em problemas transientes, esses fatores podem trazer atrasos, ou seja, o tempo simulado não concorda com o tempo real.

Como nos casos anteriores, o código comercial CFX 4.4 da AEA Technology foi usado para gerar a malha, resolver e analisar os resultados. Um computador com processador Pentium IV e 1,0 Gbyte de memória RAM, necessitou de aproximadamente 24,0 horas de processamento para se atingir algumas vezes o tempo espacial da coluna com uma malha 3-D composta por 16416 células.

A Figura 5.21 ilustra a malha numérica utilizada.

5.3.3 Visualização científica

Fotografias feitas a partir de uma câmara digital do experimento possibilitam uma comparação qualitativa entre o comportamento real e o simulado da coluna de bolhas. As Figuras 5.22, 5.23, 5.24, e 5.25 fazem uma comparação entre a coluna experimental e a solução numérica com algoritmo SSA, esquema de interpolação de primeira e alta ordem, respectivamente, do início até o estabelecimento do regime estacionário em aproximadamente 10 s de tempo real.

Pode-se perceber, ao se comparar as Figuras 5.22 e 5.23, que o algoritmo de alisamento (SSA) trouxe efeitos negativos ao desenvolvimento do escoamento gás-líquido impedindo a destruição da interface (superfície) observada experimentalmente.

Os esquemas de interpolação numérica são artifícios matemáticos necessários para a solução numérica dos modelos. Estes, por sua vez, podem trazer grandes influências aos resultados dependendo de algumas características do fenômeno físico. Quando um dos componentes de velocidade é muito superior aos outros, por exemplo, um esquema de baixa ordem pode contaminar a solução amortecendo os gradientes. Este efeito é chamado de difusão numérica. Então é necessário testar os diversos esquemas para que os melhores resultados sejam alcançados. Neste trabalho, ao se utilizar um esquema de interpolação de primeira ordem (Figura 5.24), percebe-se uma discrepância com os dados experimentais pois, em decorrência da difusão numérica não ocorre a formação de aglomerados de bolhas observadas na prática e quando da utilização de esquemas de ordem superior.

Observa-se, por tanto, que quando utilizado um esquema de interpolação de alta ordem (Figura 5.25), resultados satisfatórios são obtidos quando comparados com os experimentais (Figura 5.22) onde observa-se a formação dos aglomerados de bolhas.

A partir desta análise percebeu-se que o método de solução das equações consiste em aplicar um esquema de ordem superior sem o algoritmo de alisamento (SSA).

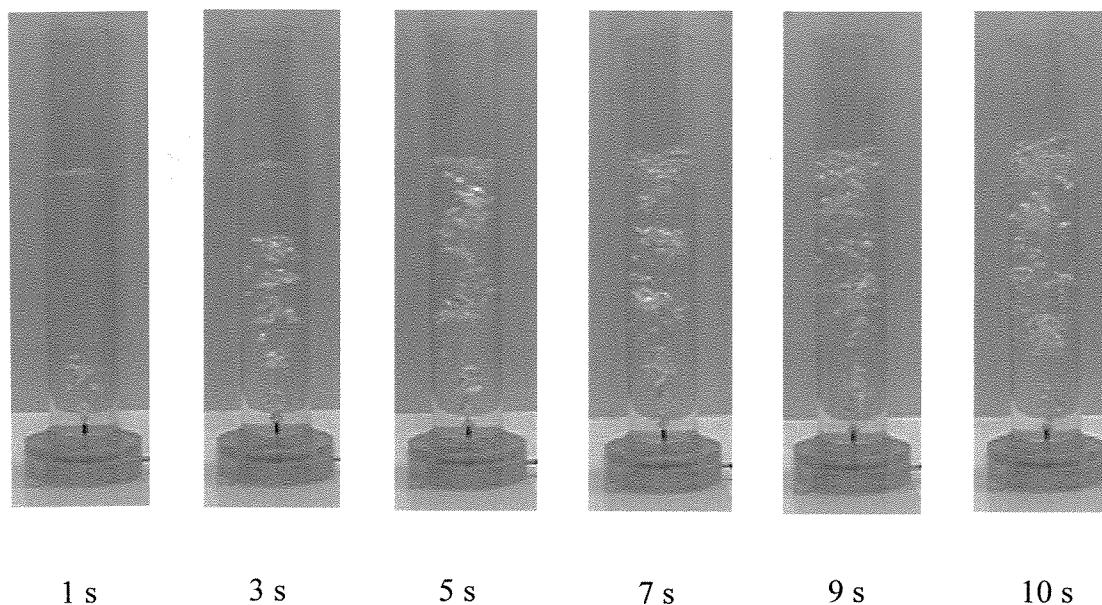


Figura 5.22. Fotografias da coluna de bolhas experimental em 10 segundos de tempo real.

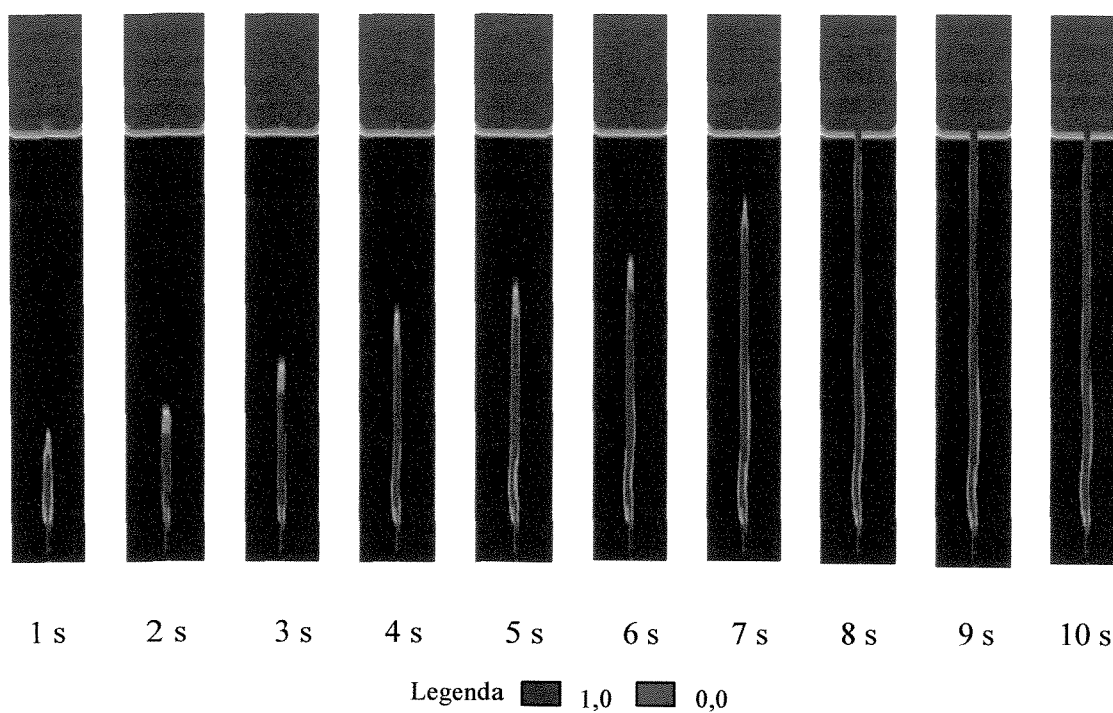


Figura 5.23. Mapas de fração volumétrica de líquido obtidos com esquema de interpolação de ordem superior e algoritmo de alisamento (SSA) para 10 segundos de tempo real.

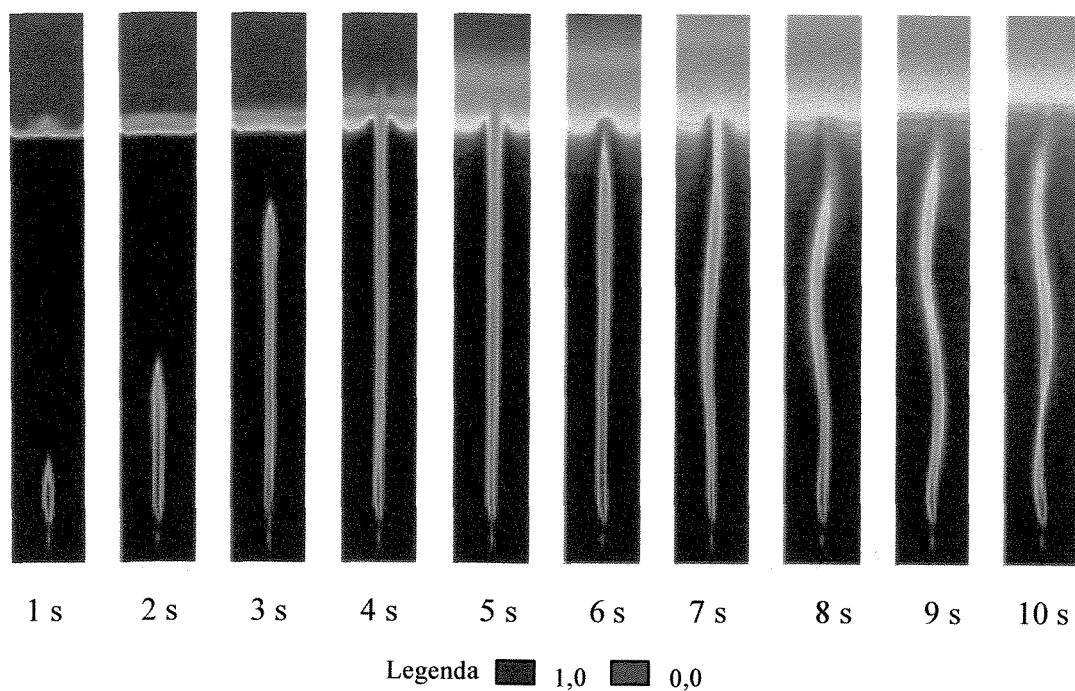


Figura 5.24. Mapas de fração volumétrica de líquido obtidos com esquema de interpolação de primeira ordem para 10 segundos de tempo real.

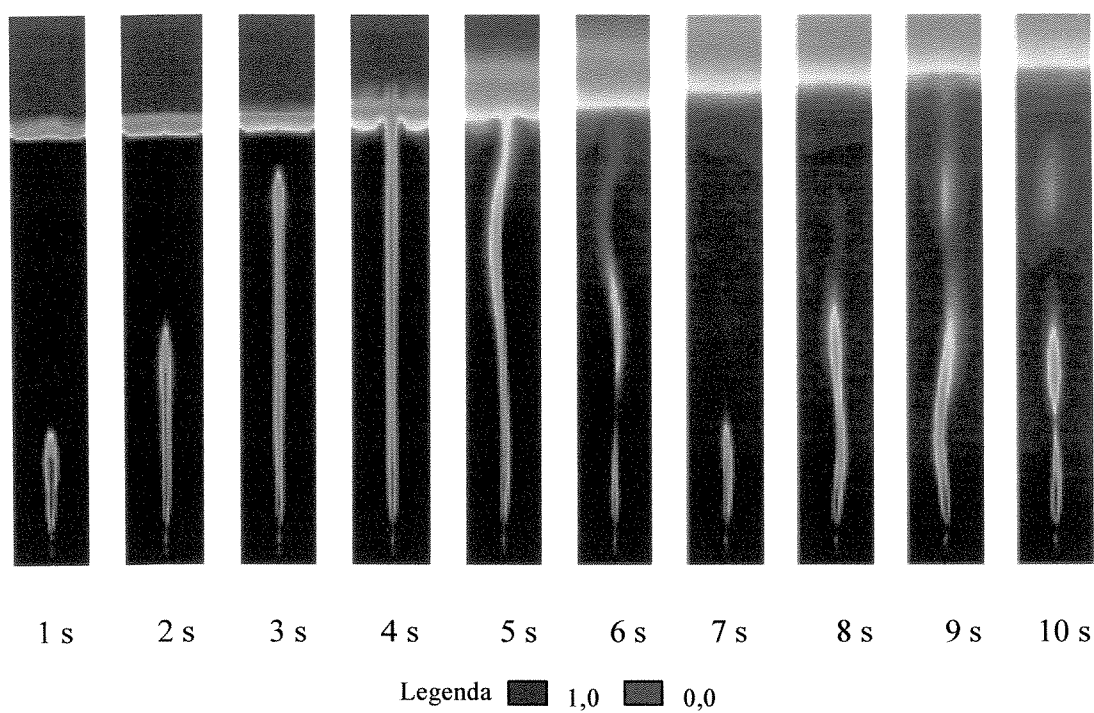


Figura 5.25. Mapas de fração volumétrica de líquido obtidos com esquema de interpolação de ordem superior para 10 segundos de tempo real.

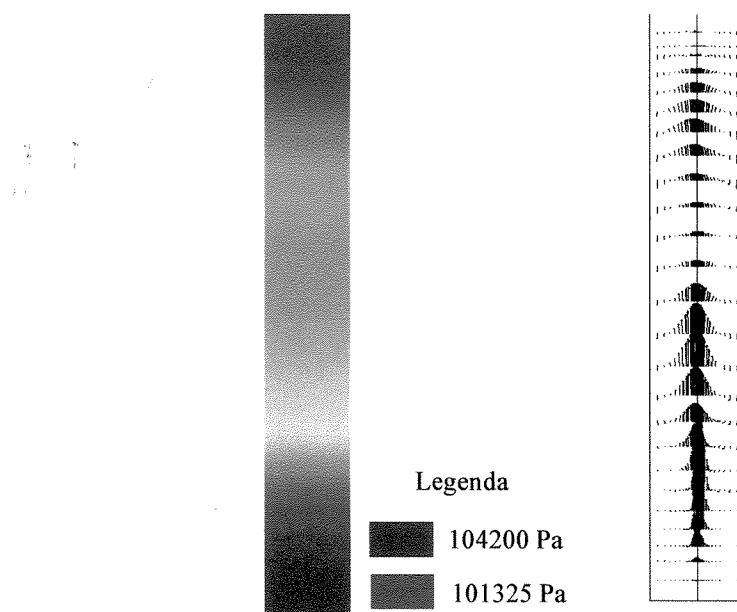


Figura 5.26. Mapas de pressão e velocidades em regime estacionário.

A Figura 5.26 mostra os campos de pressão e velocidade quando o sistema atingiu o tempo espacial da coluna. No campo de velocidade, percebe-se uma grande região de

recirculação. Este efeito é motivado pela ascensão do gás pelo leito de líquido. O gás arrasta o líquido em torno de sua interface e, por sua vez, o líquido que está na parte superior da coluna desce para ocupar o lugar do líquido que ascendeu, daí o motivo pelo qual, no centro, o escoamento é para cima e, nas paredes, para baixo.

5.3.4 Algumas conclusões

- O algoritmo de alisamento de superfícies livres (SSA) impede a destruição da interface (superfície) observada experimentalmente, no entanto, não verifica-se a formação clara das bolhas, pois, quando tratamos a fase dispersa como contínua, enfoque Euleriano, não tratamos cada bolha isoladamente e sim como muitas bolhas se comportando como um fluido;
- Os esquemas de interpolação de primeira ordem não devem ser aplicados quando um dos componentes de velocidade é muito maior que os demais, pois a difusão numérica pode contaminar a solução, sendo preferíveis, nestes casos, esquemas de ordem superior;
- O estudo da coluna de bolha forneceu subsídios necessários para aplicação do modelo 3-DHomM em pratos perfurados de colunas de destilação.

5.4 Caso 4-Estágio com prato de 24 Furos

Estabelecidas as características do modelo, iniciou-se sua aplicação em um prato perfurado de destilação tridimensional. Um teste primário com um estágio com um prato de 24 furos e em escala de laboratório é proposto. As condições de contorno aplicadas são as mesmas do Caso 3, incluindo entradas de líquido e gás com perfil de velocidade constante e normal à entrada.

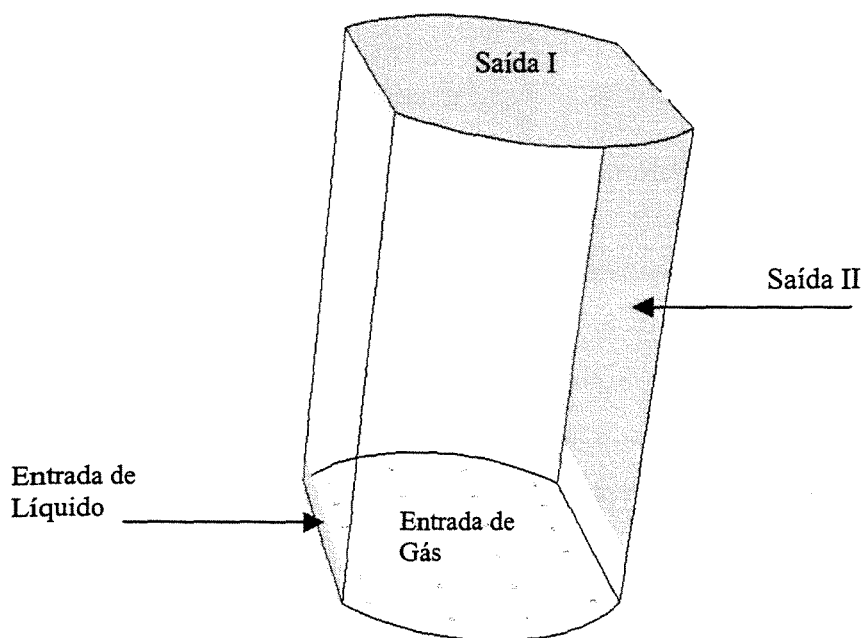


Figura 5.27. Domínio físico para o Caso 4.

O domínio físico pode ser observado na Figura 5.27, e representa aproximadamente, o domínio tridimensional de um estágio real de destilação em colunas de pratos perfurados.

5.4.1 Condições operacionais e geométricas

A Tabela 5.6 detalha as condições operacionais utilizadas nos estudos de CFD em colunas de destilação caracterizado como caso 4. O sistema escolhido foi o ar – água, pois a ênfase está concentrada na fluidodinâmica da coluna e não nos fenômenos de transferência de calor e massa.

A condição inicial do prato de destilação consiste no preenchimento do prato com água até a altura da represa e o restante com ar. As velocidades de entrada de gás e líquido são normais e constantes nas fronteiras. Impôs-se a pressão de 101325 Pa nas condições de pressão. A condição de que a água é isenta de ar e o ar é isento de água nas suas entradas foi imposta para facilitar a análise das regiões de maior e menor concentração de cada fase.

A condição de não deslizamento na parede foi aplicada e a temperatura é constante em todo o volume.

As condições de contorno na forma matemática estão apresentadas na Tabela 5.7.

Tabela 5.6. Parâmetros geométricos e operacionais do caso 4.

Parâmetro		Caso 4-a	Caso 4-b
Geométrico	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
	Altura da represa (m)	0,0070	0,0070
	W/D (m)	0,750-	0,750
Operacional	Vazão volumétrica de gás $\times 10^6 \text{ (m}^3/\text{s)}$	8,4444	0,7389
	Vazão volumétrica de líquido $\times 10^6 \text{ (m}^3/\text{s)}$	9,1420	1,4844
	Temperatura (°C)	25,0000	25,0000

Tabela 5.7. Condições de contorno para o caso 4 (modelo 3-DTHM).

Condição de contorno	Fase		
	Mistura	Líquido	Gás
Entrada	$v_x _{in} = \frac{L}{h_w} \quad v_y _{in} = 0 \quad v_z _{in} = 0$ $k _{in} = 1,5(i \cdot v_x)^2 \quad \epsilon _{in} = \frac{(k _{x=0})^{1,5}}{0.3 \text{ Ls}}$	$f_{l,in} = 1,00$	$f_{g,in} = 1 - f_{l,in}$
Saída I (pressão)	$\frac{\partial v_x}{\partial z} _{outI} = \frac{\partial v_y}{\partial z} _{outI} = \frac{\partial k}{\partial z} _{outI} = \frac{\partial \epsilon}{\partial z} _{outI} = 0$	$\frac{\partial f_l}{\partial z} _{outI} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial z} _{outI} = 0$
Saída II (Pressão)	$\frac{\partial v_x}{\partial x} _{outII} = \frac{\partial v_y}{\partial x} _{outII} = \frac{\partial k}{\partial x} _{outII} = \frac{\partial \epsilon}{\partial x} _{outII} = 0$	$\frac{\partial f_l}{\partial x} _{outII} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial x} _{outII} = 0$
Parede	$v_x _{wall} = v_y _{wall} = k _{wall} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \zeta} _{wall} = 0$	$\frac{\partial f_l}{\partial \zeta} _{wall} = 0$	$\frac{\partial f_g}{\partial \zeta} _{wall} = 0$
ζ é a direção ortogonal à parede			

5.4.2 Metodologia de solução

A mesma estratégia numérica utilizada para a coluna de bolhas (caso 3) foi adotada para o estágio de destilação (caso 4).

A Figura 5.28 mostra a malha numérica utilizada composta por 56700 volumes finitos em todos os experimentos numéricos apresentados.

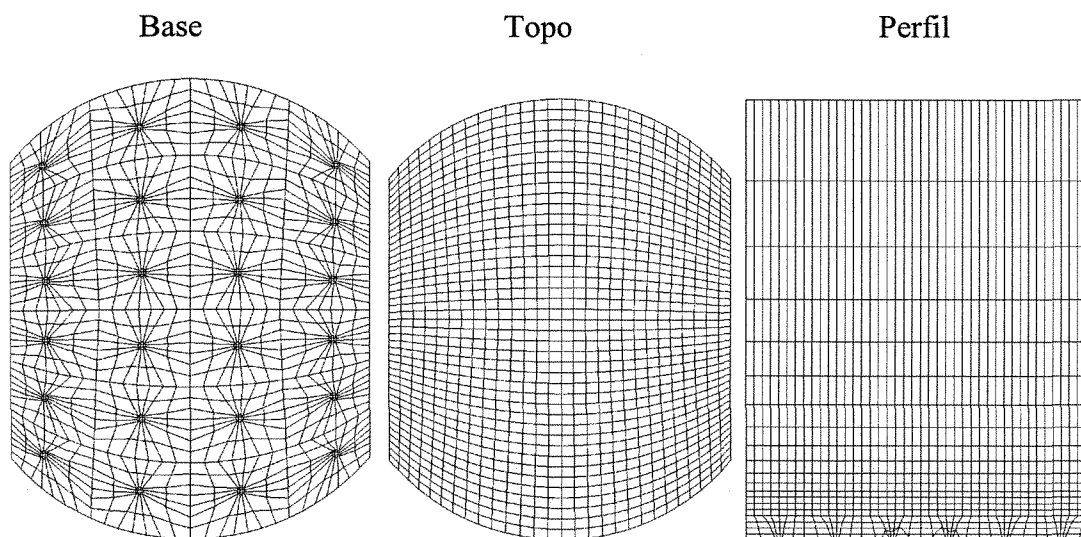


Figura 5.28. Malha numérica gerada para o caso 4.

5.4.3 Análise dos resultados

Com o intuito de analisar a capacidade do modelo 3-DHomM em prever a dinâmica do escoamento gás-líquido em um prato perfurado de destilação, obteve-se resultados para duas condições operacionais distintas, apresentadas na Tabela 5.6 (caso 4-a e 4-b).

As Figuras 5.29, 5.30 e 5.31 mostram a dinâmica do escoamento a partir de uma situação inicial onde o prato de destilação contém líquido estagnado até a altura da represa. Inicia-se a injeção de ar e água e evolui para o estado estacionário.

As Figuras 5.29 e 5.30 mostram o desenvolvimento da fluidodinâmica a partir da fração volumétrica de líquido para os casos 4-a e 4-b, respectivamente, em um corte na região central e ortogonal à entrada de líquido. Para ambos, os casos atingiu-se o estado estacionário em torno de 12 segundos de tempo real, com tempo de processamento em torno de 5 horas. A diferença verificada entre os casos é devido ao fato de que a relação vazão de líquido/vazão de ar é maior no caso 4-a. A Figura 5.31 mostra uma visão da superfície do prato para o caso 4-a.

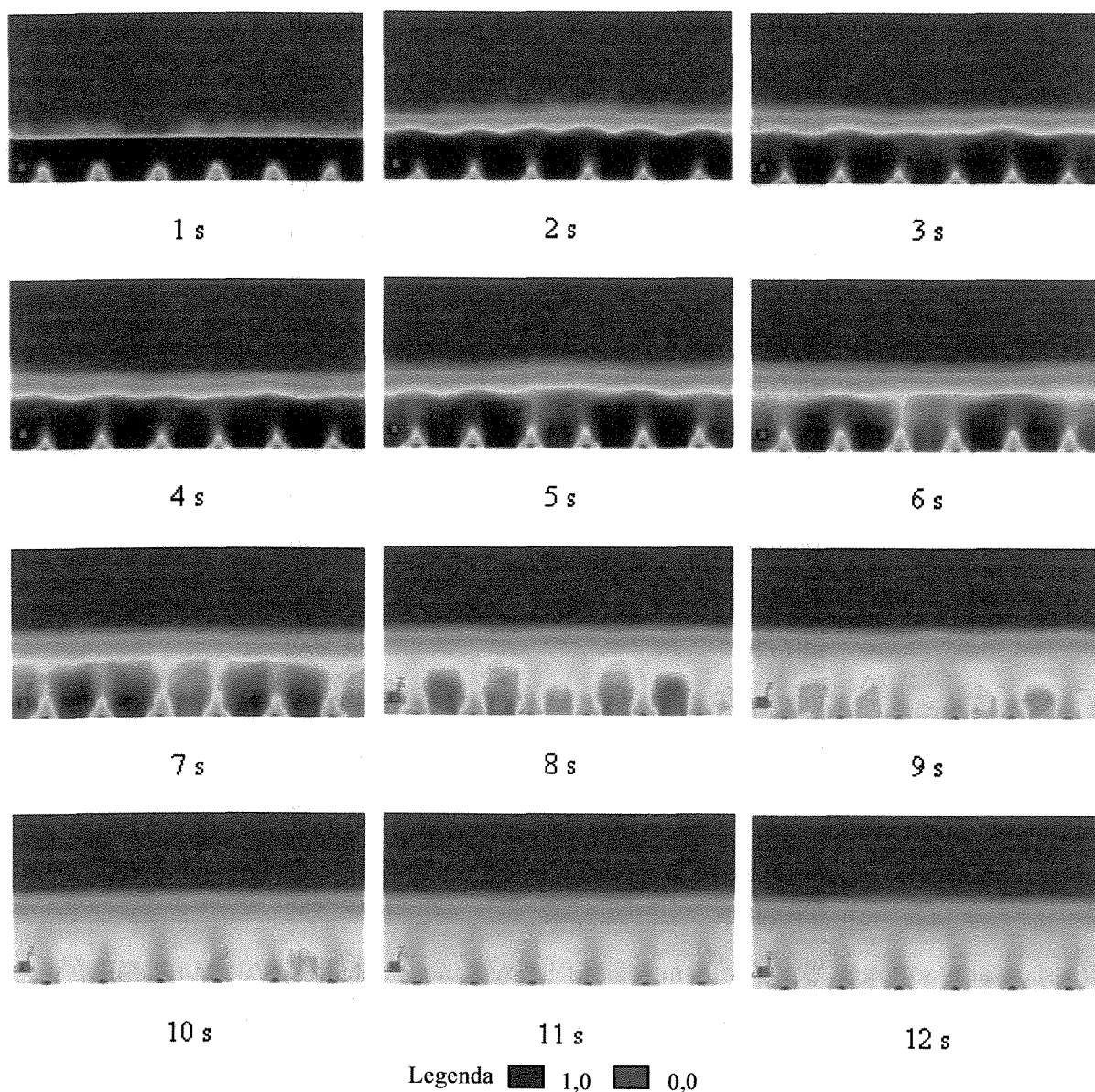


Figura 5.29. Mapas de fração volumétrica de líquido para o caso 4-a, em 12 segundos de tempo real (plano central e ortogonal à entrada).

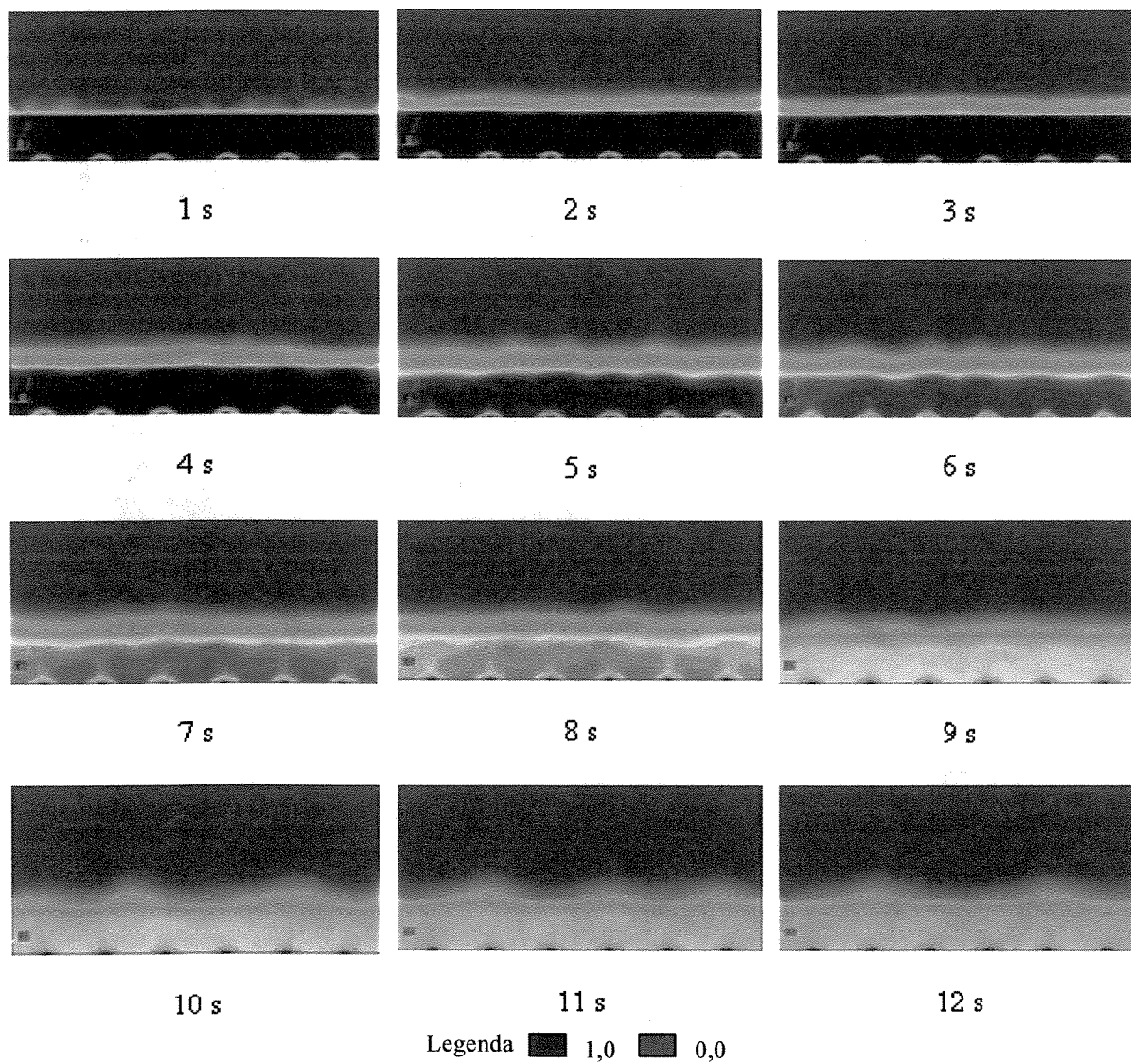


Figura 5.30. Mapas de fração volumétrica de líquido para o caso 4-b, em 12 segundos de tempo real (plano central e ortogonal à entrada).

A Figura 5.32 mostra os campos de pressão e velocidade, respectivamente, quando atingido o regime permanente. Percebe-se que o campo de pressão é heterogêneo, ou seja a pressão varia ao longo do prato com regiões de máximo nas entradas de líquido e de gás. No campo de velocidades, é possível verificar pequenas regiões de recirculação, tornando os resultados mais realísticos.

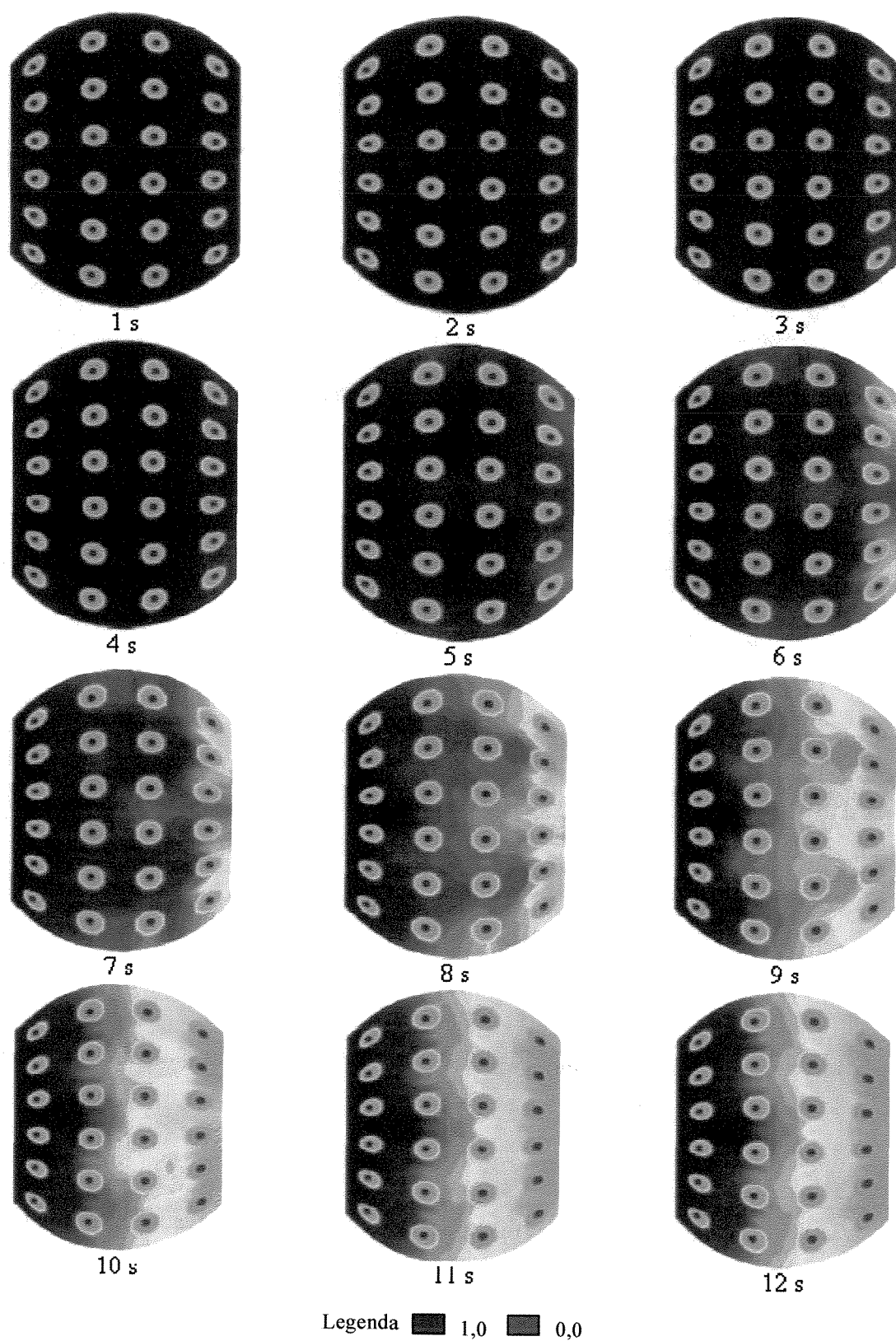


Figura 5.31. Mapas de fração volumétrica de líquido para o caso 4-a, em 12 segundos de tempo real (visão de topo na superfície do prato).

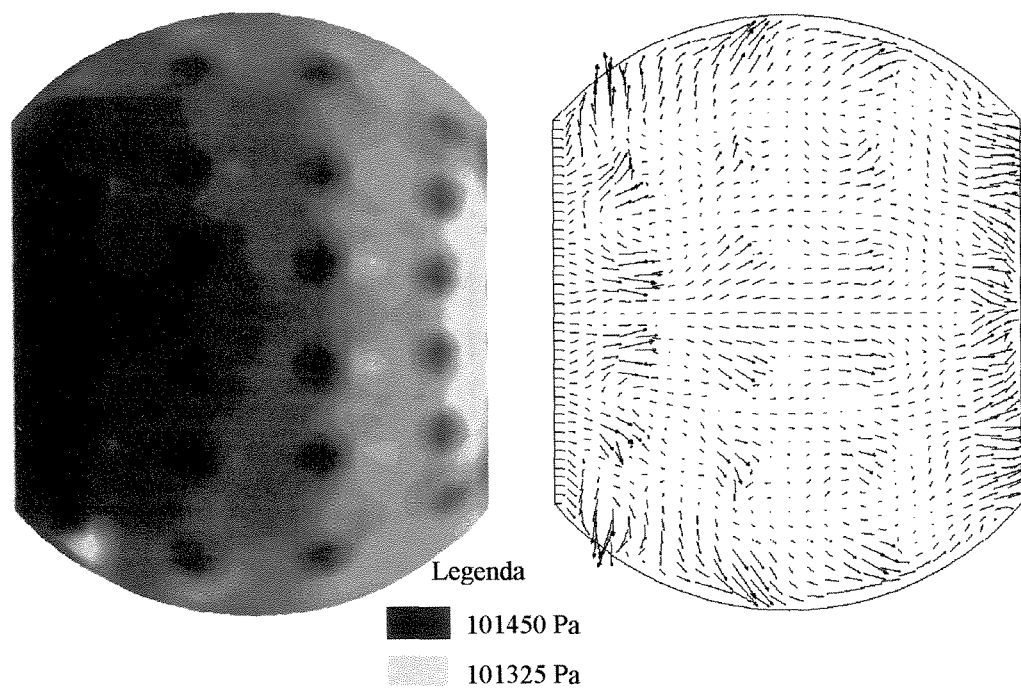


Figura 5.32. Mapas de pressão e velocidade para o modelo 3-DHomM no caso 4-a.

5.4.4 Algumas conclusões

Deste estudo conclui-se:

- De maneira qualitativa, o modelo 3-DHomM representa de forma satisfatória a fluidodinâmica do escoamento em um prato perfurado de destilação;
- O estudo gerou um artigo que foi submetido, aprovado e apresentado no “Distillation & Absorption Conference”, realizado na Alemanha de 30 de setembro a 02 de outubro de 2002.

5.5 Caso 5-Comparação entre os Modelos 3-DHomM e 3-DHetM para um estágio com prato de 66 furos

Com a metodologia para solução numérica do modelo 3-D homogêneo definida, propõe-se a comparação entre os modelos 3-DHomM e 3-DHetM. A metodologia proposto por van Baten e Krishna (2000) para a solução do modelo 3-D heterogêneo foi adotada neste trabalho. Para tal, estuda-se um prato de destilação com as características geométricas detalhadas na Tabela 5.8, com as condições de contorno adotadas no item anterior e descritas na Tabela 5.7.

Um estudo experimental em bancada norteou o desenvolvimento desta comparação como uma atividade preliminar de verificação, em conformidade com a proposta de verificação e validação em CFD de Oberkampf e Trucano (2002). A Tabela 5.8 contém as principais informações da unidade experimental de bancada.

Tabela 5.8. Parâmetros geométricos e operacionais do caso 5.

Parâmetro		Valor
Geométrico	Altura do estágio (m)	0,74
	Diâmetro da coluna (m)	0,360
	Diâmetro do furo (m)	0,006
	Número de furos	66,0000
	Altura da represa (m)	0,060
	W/D	0,670

5.5.1 Unidade experimental

Afim de se obter um maior discernimento sobre os fenômenos físicos reais que ocorrem em um estágio de destilação, fez o acompanhamento do projeto, instalação e “star-up” de uma unidade experimental de bancada com as mesmas características geométricas e operacionais do Caso 5.

Analisando-se o esboço do aparato experimental da Figura 5.33, pode-se descrever basicamente o seu funcionamento.

A água entra no prato superior através da área de entrada do vertedor, percorre a superfície do prato, principalmente a área de borbulhamento, a qual é perfurada, e desce para o prato logo abaixo, através da área de saída do vertedor, repetindo o seu trajeto nesse prato. Assim, a água percorre todos os pratos compreendidos na altura da coluna, e sai através da tubulação de saída, situada no último prato. O ar, representando a fase gás, é injetado na região central do prato inferior da coluna através de um ventilador, e percorre todos os pratos compreendidos na altura da coluna, passando pelas perfurações da área de borbulhamento e saindo livremente pela parte superior da coluna, que é aberta, sem qualquer restrição.

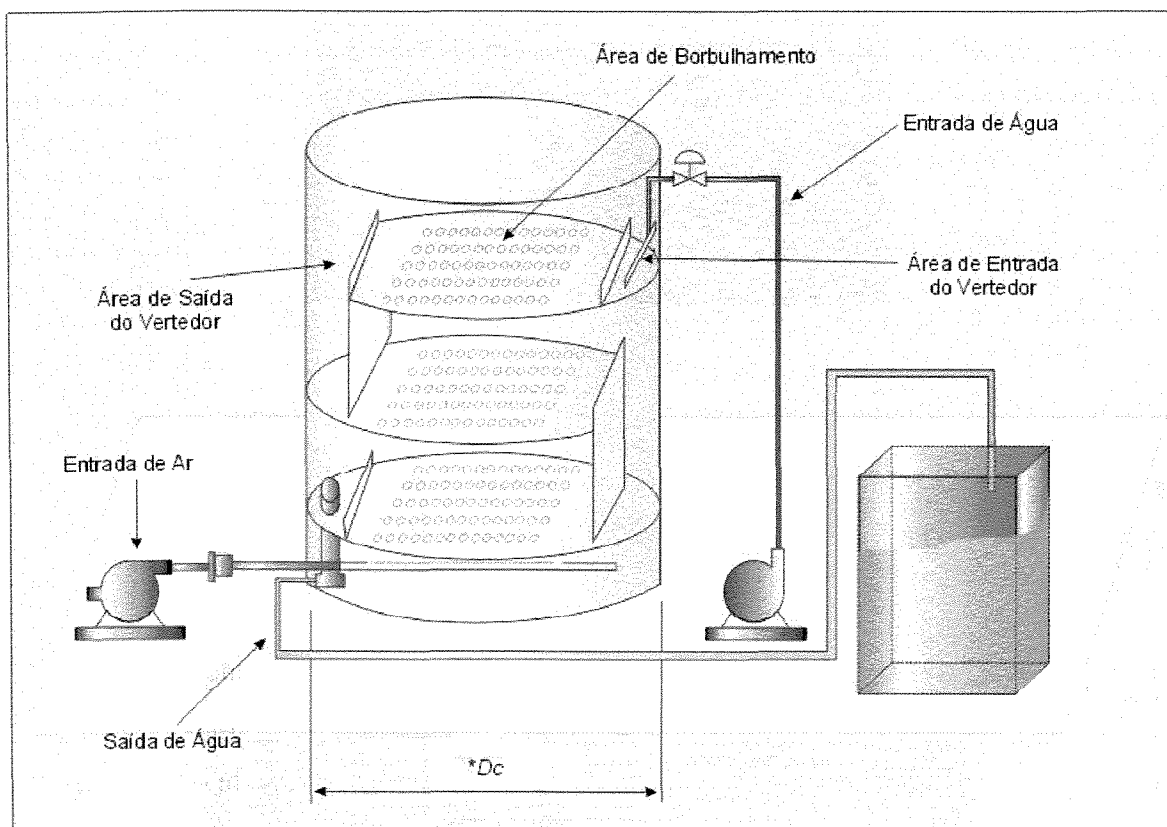


Figura 5.33. Esquema do aparato experimental.

Após o detalhamento do projeto da unidade, fez a instalação junto ao Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação. As Figuras 5.34 e 5.35 mostram em detalhes a unidade montada e em operação.

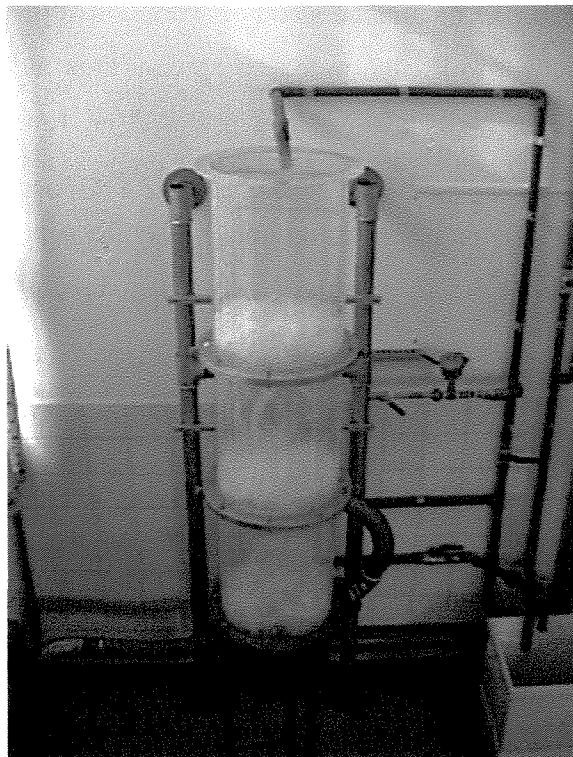


Figura 5.34. Esquema do aparato experimental (a).

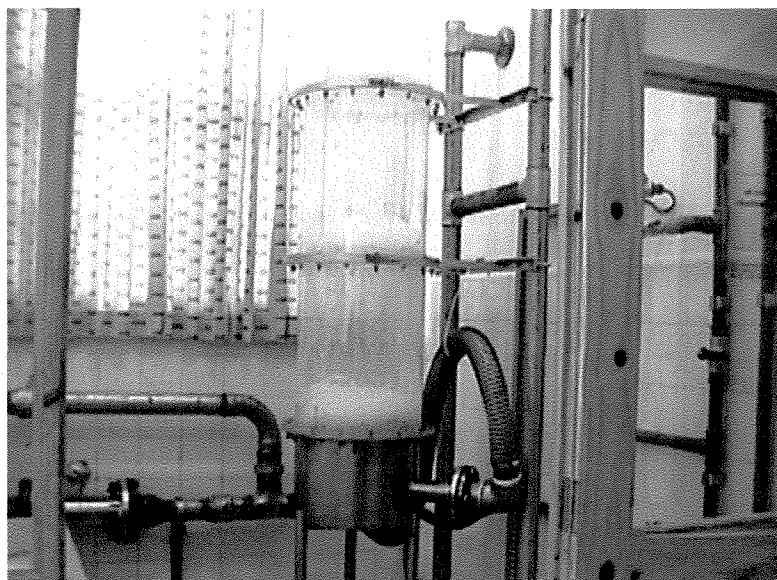


Figura 5.35. Esquema do aparato experimental (b).

Convém salientar que esta atividade de tem como objetivo a verificação, pois são análises meramente qualitativas. A validação, análises quantitativas, serão efetuadas através da técnica de anemometria de fio quente e não são objeto deste trabalho.

5.5.2 Dinâmica do processo

O acompanhamento da dinâmica do processo foi feito através do acúmulo da massa de líquido no domínio computacional. Este parâmetro mostra-se importante para determinar o intervalo de tempo necessário para o cálculo das variáveis de análise tais como, altura de líquido claro, frações volumétricas, componentes de velocidade, entre outros. A Figura 5.36 mostra a evolução do líquido acumulado ao longo do tempo onde determinou-se o intervalo de 15 a 19 segundos, que se mostra um intervalo suficientemente grande para se atingir um estado quasi-estacionário.

Percebe-se, por inspeção da Figura 5.36, que no modelo homogêneo há um acréscimo inicial de massa de líquido no domínio, seguido de um decréscimo, até atingir um estado quasi-estacionário, devido à dinâmica da formação da dispersão gás-líquido sobre o prato. No início da dinâmica, o gás projeta-se através de uma espécie de tubos no interior do líquido causando o acréscimo de massa de líquido. Assim que o gás começa a dispersar-se no líquido, formando a zona de “espuma”, a massa decai até atingir um estado estacionário. Para o modelo heterogêneo, não se verifica a formação da dispersão, região de “espuma”, ou seja, o gás percorre o interior do líquido em pequenos tubos justificando o acréscimo gradual representado pelo modelo.

Para ambos, os casos o tempo real para o estado quasi-estacionário apresenta o mesmo valor, mas no tempo computacional para a solução da dinâmica houve uma discrepância enorme. Para a solução dos modelos em um computador Pentium IV 1.6 GHz com 1,0 Gb de memória RAM, foi necessário um esforço computacional de 5 horas, para o modelo 3-DHomM, e cerca de 72 horas, para o modelo 3-DHetM.

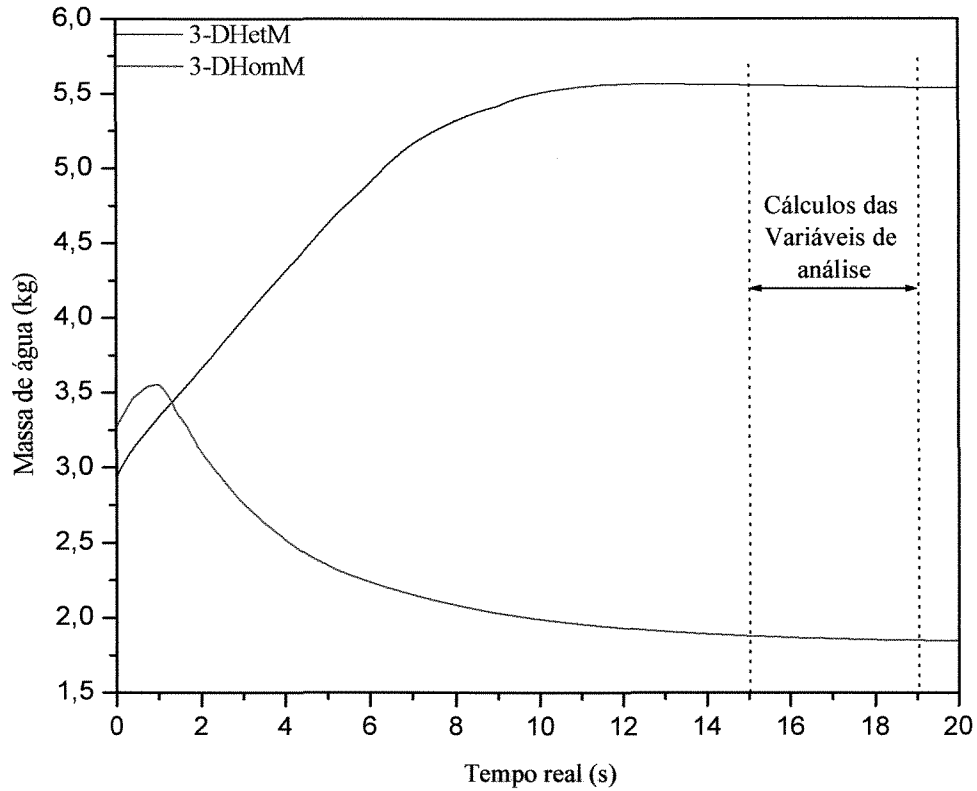


Figura 5.36. Acompanhamento da taxa de acúmulo.

5.5.3 Altura de líquido claro sobre o prato

Os valores de líquido claro⁷ foram obtidos pela média em um intervalo suficiente de tempo para garantir a condição de quasi estado estacionário, e determinados pelo fração volumétrica média do líquido vezes a altura do domínio computacional.

Os resultados numéricos foram comparados com a correlação experimental de Bennett *et al.* (1983):

⁷ A altura de líquido claro é definida como a altura de líquido acumulado, a partir da superfície do prato, quando da ausência de injeção de gás.

$$h_{cl} = f_l^B \left[h_w + C \left(\frac{Q_L}{W f_l^B} \right)^{0,67} \right] \quad (5.1)$$

com

$$C = 0,50 + 0,438 \exp(-137,8 h_w) \quad (5.2)$$

e

$$f_l^B = \exp \left[-12,55 \left(u_s \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l - \rho_g}} \right) \right] \quad (5.3),$$

e apresentados na Figura 5.37.

Pode-se observar na Figura 5.37 uma discrepância entre os valores simulados e os obtidos através da correlação. O afastamento do modelo 3-DHetM para valores acima da altura da represa mostram uma característica contrária às expectativas de altura de líquido claro. Zuiderweg (1982) afirma que existem dois regimes principais para dinâmica em pratos perfurados de destilação. Em ambos os regimes, regime *spray* e regime de emulsão, existe uma região sobre o prato onde o gás e o líquido se misturam formando uma dispersão gás-líquido, forçando a concluir de que a altura de líquido claro sobre o prato será menor que a altura da represa. Já o modelo 3-DHomM mostrou uma tendência similar à correlação experimental de Bennett. Através da análise dos dados experimentais de Krishna *et al.* (2000) para o sistema ar-água, a altura de líquido claro sofre um pequeno afastamento para valores abaixo dos correlacionados por Bennett, confirmando a tendência apresentada pelo modelo 3-DhomM.

Assim, acredita-se que os resultados preditos pelo modelo homogêneo prediz de forma mais aceitável a altura de líquido claro em um prato de perfurado de destilação

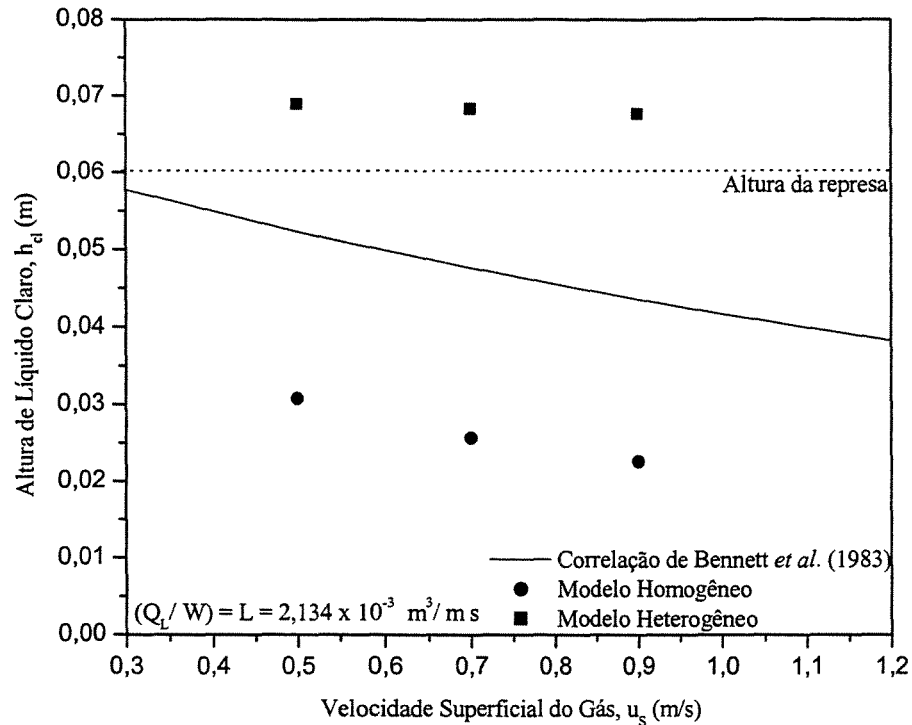


Figura 5.37. Comparação entre os modelos 3-DHomM e 3-DHetM com a correlação de Bennett et al. (1983) para altura de líquido claro.

5.5.4 Distribuição das frações volumétricas ao longo da altura do estágio

A distribuição das frações volumétrica ao longo da altura do estágio foram calculadas a partir da média das frações ao longo do plano x-y em um tempo suficiente para garantir um estado permanente. Observando-se a figura 5.38, percebe-se uma grande diferença entre os modelos homogêneo e heterogêneo, devido principalmente à dificuldade do modelo heterogêneo em prever a formação da região “espumante” que existe no prato perfurado.

Na figura 5.39 observa-se o efeito do acréscimo da velocidade superficial do gás em relação a fração volumétrica ao longo da dispersão. Pode-se perceber que a fração volumétrica de líquido ao longo da dispersão é inversamente proporcional ao aumento da velocidade superficial do gás.

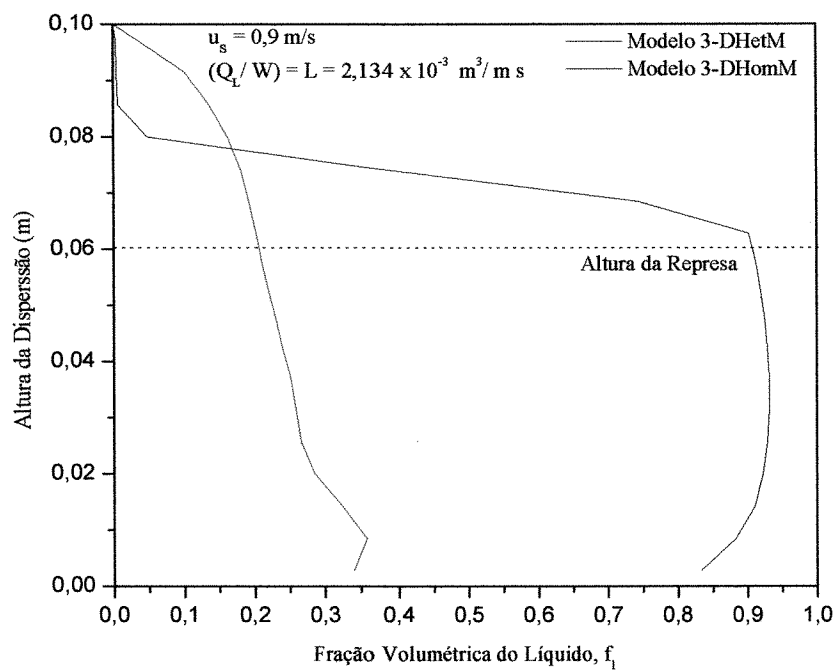


Figura 5.38. Comparação entre os modelos 3-DHomM e 3-DHetM para dispersão ao longo da dispersão

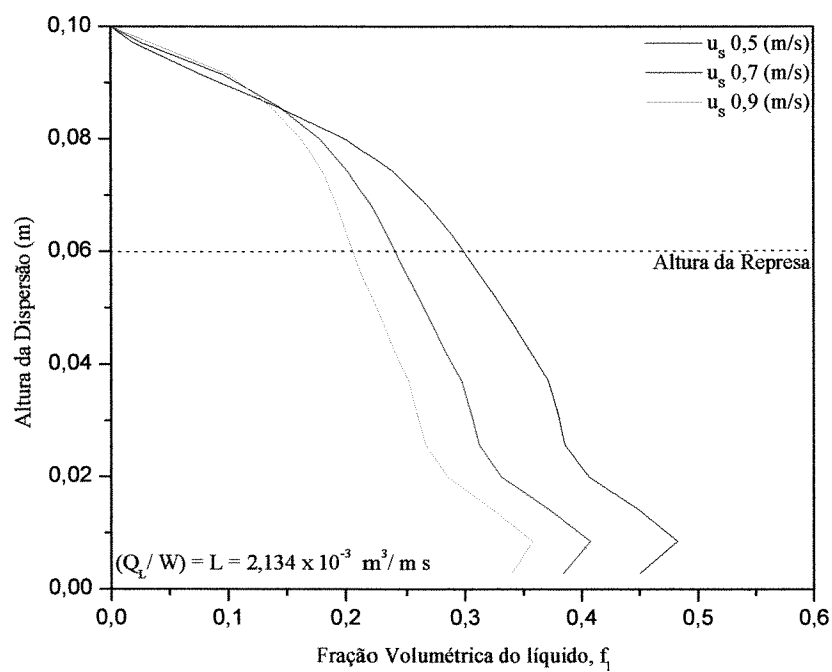


Figura 5.39. Variação da velocidade superficial do gás para fração de líquido ao longo da dispersão

5.5.5 Campo vetorial e frações volumétricas

As Figura 5.40 e 5.41 mostram o campo vetorial em um plano central x-z desde a entrada até a saída, e um plano x-y 5 centímetros acima do prato para os modelos heterogêneo (a), e homogêneo(b), respectivamente. Pode-se verificar, claramente, que o padrão fluidodinâmico é similar para ambos os casos, com diferenças principais relacionadas à localização espacial das zonas de circulação de fluido.

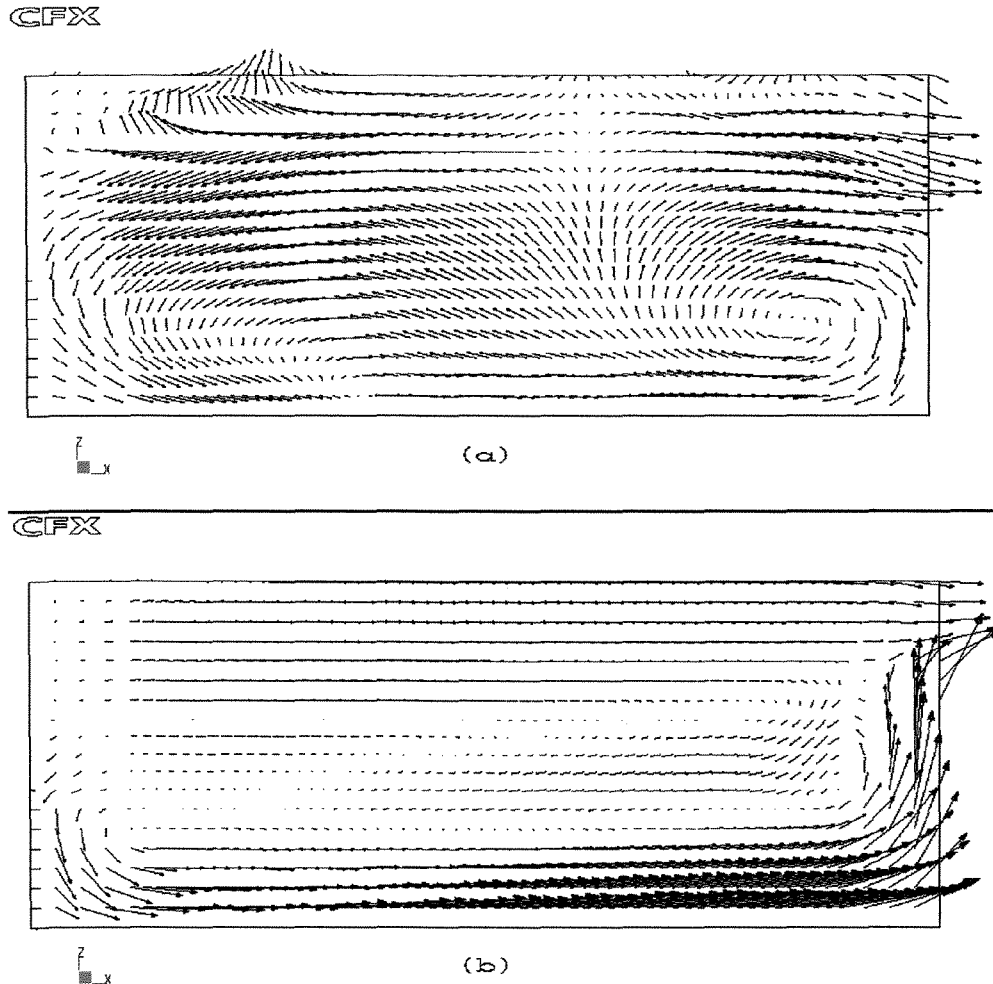
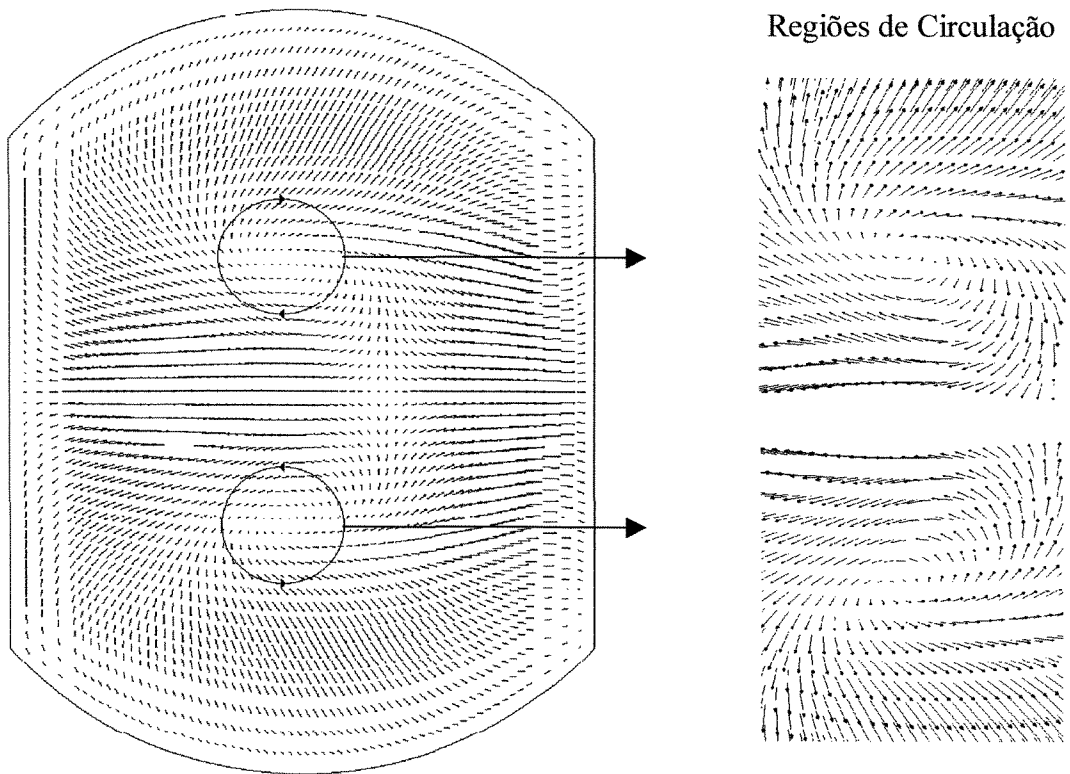
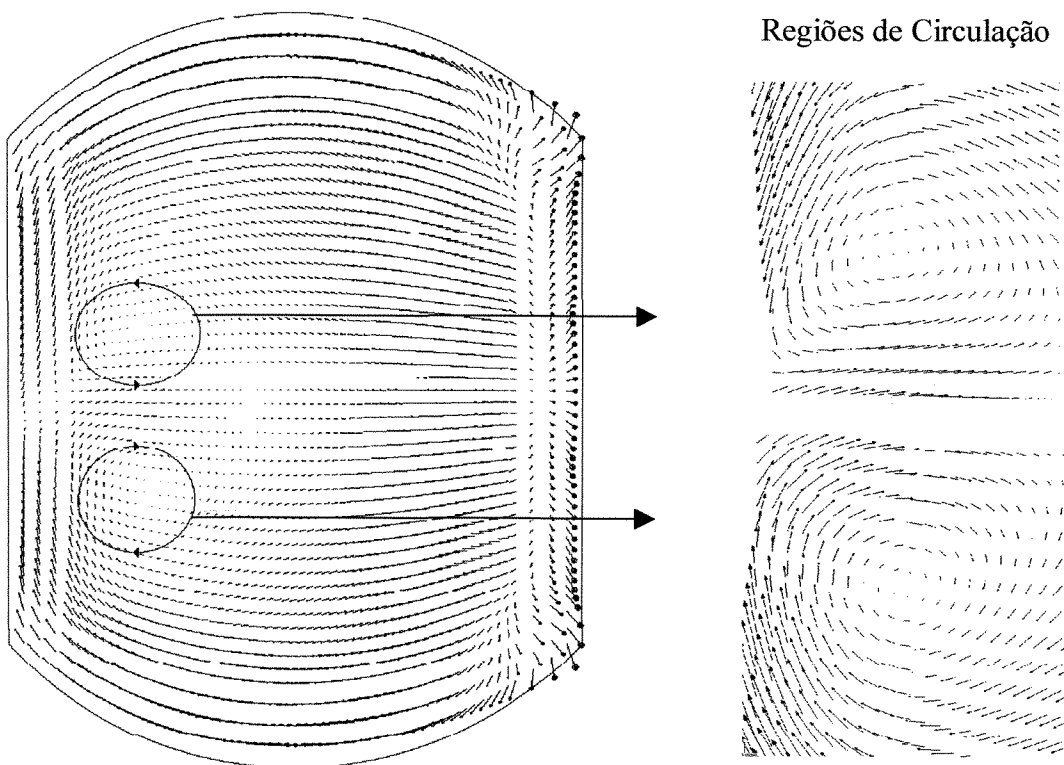


Figura 5.40. Campo vetorial em um plano central x-z para $Q_L/W=2,134 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $u_g=0,9 \text{ m/s}$: (a) 3-DHetM, (b) 3-DHomM



(a)



(b)

Figura 5.41. Campo vetorial a 0,05 m acima do prato para $Q_L/W=2,134 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $u_g=0,9 \text{ m/s}$: (a) 3-DHetM, (b) 3-DHomM

Observa-se na Figura 5.40, zonas de circulação nas extremidades devido à presença da entrada, em uma extremidade, e da represa, em outra. Para o modelo homogêneo as velocidades adjacentes ao prato são de maior intensidade, caracterizando uma região de fluxo preferencial junto ao prato não presente na solução do modelo heterogêneo. Isto deve-se, provavelmente, ao fato de ,que no modelo homogêneo, considera-se uma massa específica da mistura e, como consequência, torna-se os efeitos da ação do gás sobre o líquido mais contundentes. Zonas de circulação (detalhe da figura 5.41) que para o modelo homogêneo, desloca-se em direção à entrada devido à presença dos fluxos preferenciais, são visualizados nas Figura 5.41.

A Figura 5.42 mostra os mapas de frações volumétricas em um plano central x-z. Pode-se verificar que a dispersão gás-líquido predita pelo modelo heterogêneo, Figura 5.42a, é deficiente ficando claro que o gás ascende preferencialmente pelos “tubos” e não se dispersa para formar a região de “espuma”. Esta dispersão é observada na Figura 5.42b, modelo homogêneo e na situação física real (Figura 5.44), onde existe uma concentração maior de líquido na entrada e uma dispersão gás-líquido homogênea ao longo do prato, fato este verificado qualitativamente em pratos perfurados

A Figura 5.43 mostra o mapa de frações volumétricas em um plano x-y 5 centímetros acima do prato. Fica evidente que o modelo heterogêneo não representa, de forma aceitável, os mapas de frações volumétricas do estágio e que, de forma qualitativa, o modelo homogêneo representa de forma satisfatória o campo de velocidade, altura de líquido claro e mapas de frações volumétricas existentes em um prato perfurado de destilação, em conformidade com a principal hipótese desta dissertação.

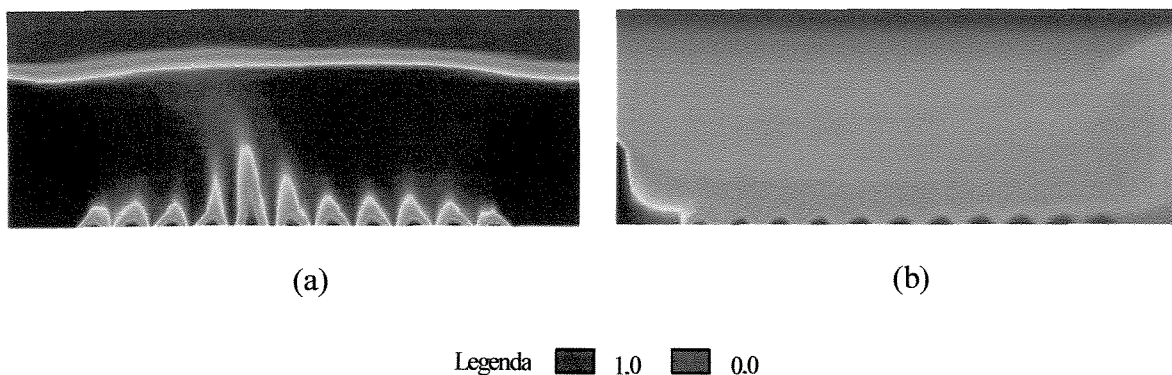
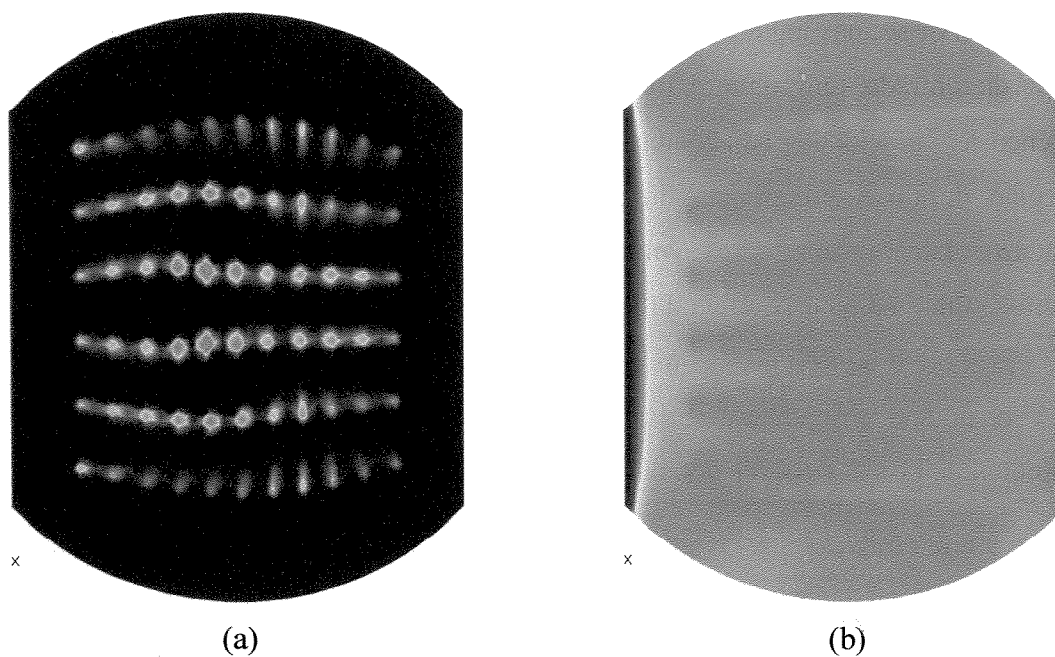


Figura 5.42. Mapa de frações volumétricas em um plano central x-z para $Q_L/W=2,134 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $u_g=0,9 \text{ m/s}$: (a) 3-DHetM, (b) 3-DHomM



Legenda 1.0 0.0

Figura 5.43. Mapa de frações volumétricas a 0,05 m acima do prato para $Q_L/W=2,134 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $u_g=0,9 \text{ m/s}$: (a) 3-DHetM, (b) 3-DHomM

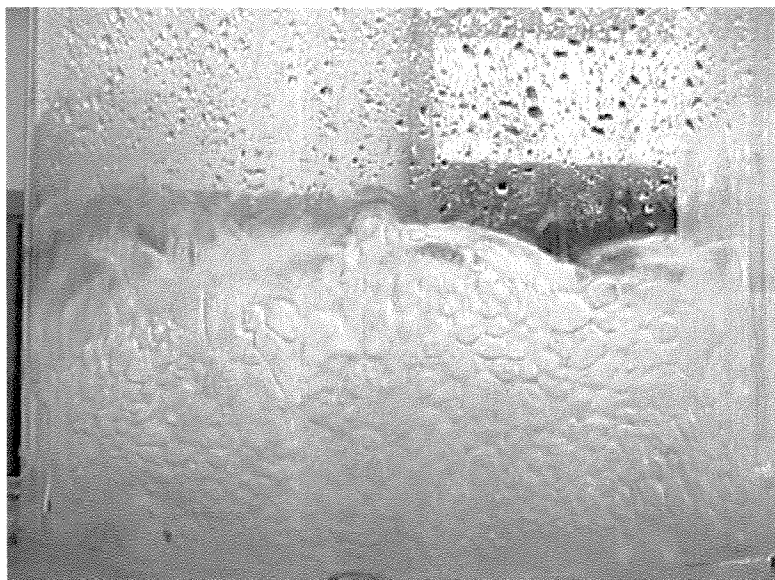


Figura 5.44. Dispersão gás-líquido em um estágio real de destilação para $Q_L/W=L=2,134 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{ms}$ e $u_g=0,9 \text{ m/s}$

Diante do exposto, é possível concluir que, de uma forma qualitativa, o modelo homogêneo tem uma representação mais satisfatória frente aos resultados previstos pelo modelo heterogêneo.

CAPÍTULO 6

6 Conclusões e sugestões

6.1 Conclusões

As principais conclusões alcançadas com os desenvolvimentos deste trabalho são:

- A metodologia adotada para o desenvolvimento deste trabalho mostrou-se eficiente no que tange aos objetivos propostos. Por exemplo, o modelo microscópico homogêneo representou qualitativamente as principais características fenomenológicas do escoamento gás-líquido presente em um prato de destilação. Ao mesmo tempo, a simulação microscópica transiente e multidimensional apresentou-se viável, do ponto de vista computacional, tanto em relação ao tempo computacional, quanto à convergência numérica;
- O algoritmo de alisamento de superfícies livres (SSA) traz resultados positivos somente em casos onde não haja borbulhamento, pois nestes, fisicamente, as bolhas impedem a formação de uma superfície bem definida;
- Esquemas de interpolação de primeira ordem causam efeitos de difusão numérica quando um dos componentes de velocidade é muito maior que os demais;

- O modelo 2-DSM é fortemente dependente de um parâmetro empírico (C_e) que precisa ser muito bem ajustado, tirando, assim, o caráter generalista do modelo;
- O estudo da coluna de bolha foi de fundamental importância para avaliar os parâmetros mais importantes no desenvolvimento do modelo de colunas e sua solução, pois trouxe, a partir de apenas um “pedaço da realidade”, experiência numérica e experimental para a análise complexa da realidade presente no estágio de destilação;
- O modelo heterogêneo requer um tempo de processamento muito superior ao modelo homogêneo, dificultando a sua aplicação nos estudos de fluidodinâmica de um prato de destilação para fins de otimização e solução de casos reais;
- Foram produzidos dois artigos, um com relação à modelagem bidimensional monofásica publicado nos anais do CILAMCE 2001, outro faz referência à comparação entre o modelo 2-DSM e 3-DTHM submetido ao D&A;
- De uma forma qualitativa, pode-se afirmar que o modelo homogêneo, desenvolvido e implementado neste trabalho, representa melhor a fluidodinâmica de um estágio de destilação. Este resultado é aparentemente paradoxal, visto que, o modelo heterogêneo, largamente utilizado na literatura, apresenta uma maior capacidade e flexibilidade na representação do escoamento gás-líquido, por inclusão de um maior número de parâmetros empíricos. Entretanto, diante da necessidade de um bom ajuste de parâmetros, o que parece ser uma vantagem do modelo heterogêneo, apresenta-se como uma desvantagem, quando comparado com a simplicidade do modelo homogêneo;
- A técnica de CFD mostrou-se uma importante ferramenta para a predição de escoamentos em regimes turbulentos em pratos de destilação e pode ser

utilizada, evidentemente com cautela, na otimização do projeto, na definição de políticas de operação de colunas de destilação e, principalmente, em estudos de eficiência de prato e de componente. Esta cautela refere-se principalmente a uma boa escolha dos modelos e métodos numéricos, conforme apresentado em detalhes neste trabalho.

6.2 Sugestões

A partir dos estudos realizados neste trabalho, os seguintes passos para trabalhos futuros são sugeridos:

- As forças adicionais como de arraste, de ascensão e de massa virtual, já foram estudadas em colunas de bolha. Para destilação, elas devem ser mais bem avaliadas.
- Aprimoramento do modelo heterogêneo para que este tenha uma melhor representação da fluidodinâmica do prato perfurado de destilação. Avaliar a modificação no modelo do coeficiente de arraste proposto por Krishna *et al.* (1999);
- modelo de turbulência utilizado por todos os autores é o k- ϵ padrão para fase contínua e laminar para fase dispersa. Uma análise dos efeitos gerados pelos modelos existentes teria uma grande relevância, pois em, alguns casos, o modelo pode trazer sérios impactos na predição do escoamento, como por exemplo em ciclones (Meier, 1998).

- Com a metodologia da solução do modelo homogêneo definida, implementar uma geometria mais complexa para avaliar os efeitos geométricos do prato.
- Estudos de otimização de geometrias com o objetivo de minimizar as resistências à transferência de calor e massa.
- Corroboração dos modelos com dados experimentais microscópicos.
- Acoplar ao modelo os efeitos de transferência de calor e massa.

CAPÍTULO 7

7 Bibliografia

Almeida, N. H., (1994). *Determinação da eficiência do recheio estruturado Mellapak 500Y na destilação da terebintina em coluna piloto*. Tese de Doutorado, USP, São Paulo.

Al-Rashed, M. H., Jones, A. G., (1999). *CFD modelling of gas-liquid reactive precipitation*. Chemical Engineering Science., 54, 4779-4784.

Barros, A. A. C., (1997). *Desenvolvimento de modelo de estágio de não equilíbrio e proposição de correlações para processos de destilação convencional e extrativa*. Tese de Doutorado, Unicamp, Campinas., São Paulo

Bennett, D. L., Agrawal, R., Cook, P. J., (1983). *New pressure drop correlation for sieve tray distillation columns*, AIChE, 26, 434-442.

Boisson, N., Malin, M. R., (1996). *Numerical prediction of two-phase flow in bubble columns*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 23, 1289-1310

Brackbill, J. U., Kothe, D. B., Zemach, C., (1992), *A continuum method for modeling surface tension*. Journal of Computational Physics, 100, 335-354.

CFX-4 for Windows NT. CFX-4.4 User Guide. AEA Technology. Oxfordshire, United Kingdom, 2001.

Chorin, A. J., (1971), *Numerical solution of the Navier-Stokes equations*. Math. of Computations, 22, 745-762

Coulson, J. M., Richardson, L. F., Backhurst, J. R., Harker, J. H., (1991). *Chemical engineering*. Vol. 2, 4th edition, Pergamon Press, Oxford-New York-Seoul-Tokyo.

Delnoij, E., Kuipers, J. A., Swaaij, W. P. M., (1997). *Dynamic simulation of gas-liquid two-phase flow: effect of column aspect ratio on flow structure*. Chemical Engineering Science, 52, 3759-3772

Himmelblau, D. M., Bischoff, K. B., (1968). *Process analysis and simulation. Deterministic systems*. 1st edition, John Wiley & Sons Inc., New York.

King, C. J., (1980). *Separation processes*. 2nd edition, McGraw Hill Inc.

Krishna, R., van Baten, J. M., Ellenberger, J., Higler, A. P., Taylor, R., (1999). *CFD simulation of sieve tray hydrodynamics* Chem. Eng. Res. Design, Trans IChE, 77, 639-646.

Krishnamurthy, R., Taylor, R., (1985a). *A nonequilibrium stage model of multicomponent separation processes – Part I: Model description and method of solution*. AIChE Journal, 31, 456-465.

Liu, C. J., X. Yuan, G., Yu, K. T., Zhu, X. J., (2000). *A fluid-dynamic model for flow pattern on a distillation tray*. Chemical Engineering Science, 55 2287-2294.

- Maliska, C. R., (1995), *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, LTC editora, Rio de Janeiro.
- Marchi, C. H., Maliska, C. R., Bortoli A. L., (1989), *The use of co-located variables in the solution of supersonic flow*, Anais do X Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 157-160.
- Meier, H. F., (1998). *Modelagem fenomenológica e simulação bidimensional de ciclones por técnicas da fluidodinâmica*. Tese de Doutorado, Unicamp, Campinas, São Paulo.
- Meier, H. F., Alves, J. J. N., Mori, M., (1999), *Comparison between staggered and collocated grids in the finite-volume method performance for single and multi-phase flows*, Computers and Chemical Engineering, 23, 247-262.
- Minkowycz, W. J., Sparrow, E. M., Schneider, G. E., Plecther, R. H., (1988), *Handbook of numerical heat transfer*, Ed. John Wiley & Sons Inc., New York.
- Nallasamy, M., (1987), *Turbulence models and their applications to the prediction of internal flows: a review*. Computers & Fluids, 15, 151-194.
- Oberkampf, W. L., Trucano, T. G., (2002). *Verification and validation in Computational Fluid Dynamics*, SANDIA Report, SAND2002-0529, Sandia National Laboratories, Albuquerque – New Mexico.
- Patankar, S. V., (1980), *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Ed. Hemisphere Pub. Co., New York.

- Patankar, S. V., (1981), *A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations*, Numerical Heat Transfer, 4, 409-425
- Patankar, S. V., Spalding, D. B., (1971), *A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows*, Int. Journal Heat Mass Transfer, 15, 1787-1806.
- Peric, M., kessler, R., Scheuerer, G., (1988), *Comparison of finite-volume numerical methods with staggered and co-located grid*, Computers and Fluids, 16, 398-403
- Pescarini, M. H., (1996). *Desenvolvimento de um algoritmo para simulação de colunas de destilação multicomponente em estado estacionário utilizando a modelagem de estágio de não equilíbrio*. Dissertação de Mestrado, Unicamp, Campinas, São Paulo.
- Pfleger, D., Becker, S., (2001). *Modelling and simulation of the dynamic flow behaviour in a bubble column*. Chemical Engineering Science, 56, 1737-1747
- Soares C., Noriler, D., Barros, A. A. C., Meier, H. F., Wolf Maciel, M. R., (2001) *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, 22 e 2, 2001, Campinas – São Paulo – Brasil. Anais do 22nd Iberian Latin-American Congress On Computational Methods In Engineering and 2nd Brazilian Congress on Computational Mechanics. São Paulo, 2001 (CD-Rom).
- Soares, C., Noriler, D., Barros, A. A. C., Meier, H. F., Mmaciel, M. R. W, (2002) *Computational Fluid Dynamics for Simulation of Gas-Liquid Flow on a Sieve Plate: Model Comparisons*. In: International Conference on Distillation & Absorption, 2002, Baden-Baden. (CD-Rom).

- Soares, C., (2000). *Avaliação experimental dos coeficientes de transferência de massa e calor em uma coluna com pratos perfurados*. Dissertação de Mestrado, Unicamp, Campinas, São Paulo.
- Sokolichin, A., Eigenberger, G., (1997). *Dynamic numerical simulation of gas-liquid two-phase flows Euler/Euler versus Euler/Lagrange*. Chemical Engineering Science, 52, 611-626.
- Sokolichin, A., Eigenberger, G., (1999). *Applicability of standart $k-\varepsilon$ turbulence model to the dynamic simulatin of buble columns: Part I. Detailed numerical simulations*. Chemical Engineering Science, 54, 2273-2284.
- Souza, D. P. de, (2000). *Aplicação das equações fundamentais para a solução do escoamento em ciclones e hidrociclones*. Dissertação de Mestrado, UFSC, Florianópolis, Santa Catarina.
- Streeter, V. L., (1977). *Mecânica dos fluidos*. McGraw Hill Inc.
- van Baten, J. M., Krishna, R., (2000). *Modelling sieve tray hydraulics using computational fluid dynamics*. Chemical Engineering Journal, 77, 143-151.
- Van Doormaal, J. P., Raithby, G. D., (1984), *Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows*, Numerical Heat Transfer, 7, 147-163.
- Van Winkle, M., (1967), *Distillation*, McGraw-Hill, New York.
- Wang, Z. C., (1989). *Dissertation in chemical engineering*. Tianjin Universityl.

Zhang, M. Q., Yu, K. T., (1994), *Simulation of two dimensional liquid phase on a distillation tray*. Journal of Chemical Engineering, 2, 63-71.

Zuiderweg, F. J., (1982), *Sieve trays: a view on the state of the art*. Chemical Engineering Science, 37, 1441-1464.