

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO ESCOLA POLITÉCNICA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**ESCOAMENTO EM COLUNA DE ABSORÇÃO GASOSA COM  
PROMOTOR DE PELÍCULA**

Jorge Luis Ale Cezar  
William Lombardo Nunes de Mello

Orientador: Prof. Dr. José Luis de Paiva

São Paulo  
2011

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO ESCOLA POLITÉCNICA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**ESCOAMENTO EM COLUNA DE ABSORÇÃO GASOSA COM  
PROMOTOR DE PELÍCULA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Escola  
Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção  
do título de Graduação em Engenharia

Jorge Luis Ale Cezar  
William Lombardo Nunes de Mello

Orientador: Prof. Dr. José Luis de Paiva

Área de Concentração:  
Engenharia Química

São Paulo  
2011

## **AGRADECIMENTOS**

Agradecemos ao Prof. Dr. José Luis de Paiva, pela dedicação e presença contínua no desenvolvimento deste trabalho; à Danielle Matsumoto, pelo apoio constante na utilização do software CFD; e às nossas famílias e amigos, pelo apoio e confiança durante estes cinco anos de graduação.

## RESUMO

Este trabalho consiste no estudo de uma coluna de filme de líquido descendente com promotor de película e é baseado na modelagem do escoamento da fase gasosa e em simulações com o uso da ferramenta de Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics* – CFD), com posterior comparação com resultados experimentais.

Para avaliar a influência do promotor de película no transporte de massa na coluna, foram realizados dois conjuntos de experimentos de dessorção de etanol: um com o promotor de película inserido na coluna e outro sem o promotor de película. Além disso, foram realizadas simulações CFD no software PHOENICS para verificar se estas seriam coerentes com os resultados obtidos experimentalmente. Tanto os experimentos como as simulações CFD tinham como objetivo o cálculo do coeficiente de transporte de massa médio da coluna para a fase gasosa,  $k_G$  a.

Concluiu-se que a tela promotora de película não teve influência significativa na dessorção do etanol para o ar. Além disso, os valores do coeficiente de transporte de massa médio na coluna para a fase gasosa obtidos por CFD foram significativamente inferiores aos obtidos experimentalmente.

**Palavras-chave:** Fluidodinâmica Computacional (CFD), Coluna, Filme de Líquido Descendente, Coeficiente de Transporte de Massa.

## ABSTRACT

The objective of this work is to study a falling film column which has a metallic grid. It is based on modeling gaseous phase flow and Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations, which are compared with experiments.

In order to analyze metallic grid influence on mass transfer, two series of experiments were performed: one of them with the metallic grid inserted in the column, and the other one without the grid. Moreover, CFD simulations were carried out using PHOENICS software and then compared with experimental results. Both experiments and simulations were performed to calculate gaseous-phase mean mass transfer coefficient,  $k_G a$ .

The metallic grid didn't have significant influence on ethanol stripping to the air. Furthermore, gaseous-phase mean mass transfer coefficients obtained via CFD were significantly inferior to the experimental ones.

**Key-words:** Computational Fluid Dynamics (CFD), Column, Falling Film, Mass Transfer Coefficient.

## LISTA DE FIGURAS

|                                                                                           |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1 – Coluna existente no Laboratório de Separações Térmicas e Mecânicas. ....       | 2  |
| Figura 2 – Detalhe da coluna com o promotor de película (rede metálica).....              | 2  |
| Figura 3 – Elemento de volume central e elementos vizinhos utilizados no MVF. ....        | 6  |
| Figura 4 – Perfil de velocidades na entrada do tubo, até a altura de 15 cm.....           | 9  |
| Figura 5 – Perfil de velocidades na parte intermediária do tubo, na altura de 2,5 m.....  | 10 |
| Figura 6 – Perfil de velocidades na altura de 4,85 m até a saída do tubo. ....            | 10 |
| Figura 7 – Perfil de velocidades na entrada do tubo, até a altura de 15 cm.....           | 11 |
| Figura 8 – Perfil de velocidades na parte intermediária do tubo, na altura de 2,5 m.....  | 11 |
| Figura 9 – Perfil de velocidades na altura de 4,85 m até a saída do tubo. ....            | 12 |
| Figura 10 – Perfil de velocidades na entrada do tubo, até a altura de 15 cm.....          | 13 |
| Figura 11 – Perfil de velocidades na parte intermediária do tubo, na altura de 2,5 m..... | 13 |
| Figura 12 – Perfil de velocidades na altura de 4,85 m até a saída do tubo. ....           | 14 |
| Figura 13 – Perfil de velocidades na entrada do tubo, até a altura de 15 cm.....          | 15 |
| Figura 14 – Perfil de velocidades na parte intermediária do tubo, na altura de 2,5 m..... | 15 |
| Figura 15 – Perfil de velocidades na altura de 4,85 m até a saída do tubo. ....           | 16 |

|                                                                                                                                                                                                     |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 16 – Malha utilizada – direção radial.....                                                                                                                                                   | 17 |
| Figura 17 – Comparação entre a solução analítica e a solução por<br>CFD do perfil de velocidades para $x = 1,25$ cm. ....                                                                           | 19 |
| Figura 18 – Comparação entre a solução analítica e a solução por<br>CFD do perfil de velocidades para $x = 12,5$ cm. ....                                                                           | 19 |
| Figura 19 – Comparação entre a solução analítica e a solução por<br>CFD do perfil de velocidades para $x = 56,2$ cm. ....                                                                           | 20 |
| Figura 20 – Geometria de entrada do gás na coluna inserida no<br>software CFD.....                                                                                                                  | 21 |
| Figura 21 – Perfil de velocidades na entrada, na região intermediária<br>e na saída da coluna. ....                                                                                                 | 22 |
| Figura 22 – Perfil de concentração na entrada, na região<br>intermediária e na saída da coluna.....                                                                                                 | 23 |
| Figura 23 – Montagem experimental para dessorção de etanol. ....                                                                                                                                    | 25 |
| Figura 24 – Comparação dos valores de $k_G \cdot a$ obtidos<br>experimentalmente. ....                                                                                                              | 30 |
| Figura 25 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região<br>intermediária e na saída da coluna, com destaque para<br>a recirculação na parede, para a menor vazão de gás.....                 | 33 |
| Figura 26 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região<br>intermediária e na saída da coluna, com destaque para<br>a recirculação na parede, para a maior vazão de gás.....                 | 33 |
| Figura 27 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do<br>tempo para vazão de gás $20,6 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$ e vazão de<br>líquido de $1,2 \text{ g} \cdot \text{s}^{-1}$ . .... | 37 |
| Figura 28 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do<br>tempo para vazão de gás $20,6 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$ e vazão de<br>líquido de $1,8 \text{ g} \cdot \text{s}^{-1}$ . .... | 37 |
| Figura 29 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do<br>tempo para vazão de gás $20,6 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$ e vazão de<br>líquido de $2,6 \text{ g} \cdot \text{s}^{-1}$ . .... | 38 |

|                                                                                                                                                                                                    |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 30 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás $34,0 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $1,2 \text{ g.s}^{-1}$ .                                     | 38 |
| Figura 31 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás $34,0 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $1,8 \text{ g.s}^{-1}$ .                                     | 39 |
| Figura 32 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás $34,0 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ .                                     | 39 |
| Figura 33 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás $20,6 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $1,2 \text{ g.s}^{-1}$ .                                     | 41 |
| Figura 34 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás $20,6 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $1,8 \text{ g.s}^{-1}$ .                                     | 41 |
| Figura 35 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás $20,6 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ .                                     | 42 |
| Figura 36 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás $34,0 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $1,2 \text{ g.s}^{-1}$ .                                     | 42 |
| Figura 37 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás $34,0 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $1,8 \text{ g.s}^{-1}$ .                                     | 43 |
| Figura 38 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás $34,0 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ .                                     | 43 |
| Figura 39 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de $20,6 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $1,2 \text{ g.s}^{-1}$ . | 46 |

|                                                                                                                                                                                                        |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 40 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 20,6 L.min <sup>-1</sup> e vazão de líquido de 1,2 g.s <sup>-1</sup> . .... | 46 |
| Figura 41 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu. ....                                             | 47 |
| Figura 42 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 20,6 L.min <sup>-1</sup> e vazão de líquido de 1,8 g.s <sup>-1</sup> . ....  | 47 |
| Figura 43 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 20,6 L.min <sup>-1</sup> e vazão de líquido de 1,8 g.s <sup>-1</sup> . .... | 48 |
| Figura 44 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu. ....                                             | 48 |
| Figura 45 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 20,6 L.min <sup>-1</sup> e vazão de líquido de 2,6 g.s <sup>-1</sup> . ....  | 49 |
| Figura 46 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 20,6 L.min <sup>-1</sup> e vazão de líquido de 2,6 g.s <sup>-1</sup> . .... | 49 |
| Figura 47 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu. ....                                             | 50 |
| Figura 48 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 34,0 L.min <sup>-1</sup> e vazão de líquido de 1,2 g.s <sup>-1</sup> . ....  | 50 |
| Figura 49 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 34,0 L.min <sup>-1</sup> e vazão de líquido de 1,2 g.s <sup>-1</sup> . .... | 51 |

|                                                                                                                                                                                                          |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 50 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu. ....                                               | 51 |
| Figura 51 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de $34,0 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $1,8 \text{ g.s}^{-1}$ . ....  | 52 |
| Figura 52 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de $34,0 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $1,8 \text{ g.s}^{-1}$ . .... | 52 |
| Figura 53 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu. ....                                               | 53 |
| Figura 54 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de $34,0 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ . ....  | 53 |
| Figura 55 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de $34,0 \text{ L.min}^{-1}$ e vazão de líquido de $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ . .... | 54 |
| Figura 56 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu. ....                                               | 54 |

## SUMÁRIO

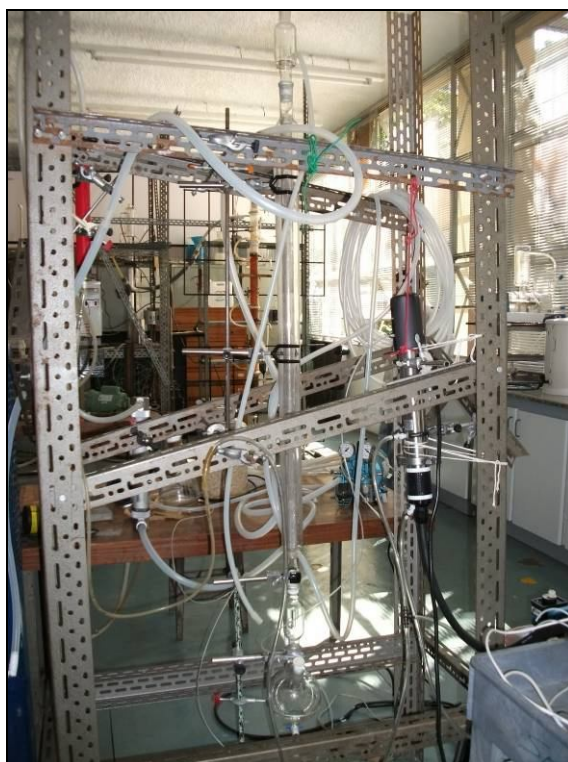
|     |                                                                                 |    |
|-----|---------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1   | INTRODUÇÃO.....                                                                 | 1  |
| 2   | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....                                                     | 4  |
| 2.1 | Fluidodinâmica Computacional.....                                               | 4  |
| 2.2 | Equações para o cálculo do coeficiente de transporte de massa....               | 6  |
| 3   | FAMILIARIZAÇÃO COM O SOFTWARE CFD .....                                         | 8  |
| 3.1 | Modelo Laminar e Regime de Escoamento Laminar .....                             | 9  |
| 3.2 | Modelo Turbulento e Regime de Escoamento Laminar.....                           | 11 |
| 3.3 | Modelo Laminar e Regime de Escoamento Turbulento.....                           | 12 |
| 3.4 | Modelo Turbulento e Regime de Escoamento Turbulento.....                        | 14 |
| 3.5 | Conclusões dos testes.....                                                      | 16 |
| 4   | VALIDAÇÃO DA MALHA .....                                                        | 17 |
| 5   | SIMULAÇÃO COM INCLUSÃO DA VARIÁVEL CONCENTRAÇÃO ....                            | 21 |
| 6   | CÁLCULO DO COEFICIENTE DE TRANSPORTE DE MASSA MÉDIO<br>PARA A FASE GASOSA ..... | 24 |
| 6.1 | Experimentos.....                                                               | 24 |
| 6.2 | Simulações CFD.....                                                             | 27 |
| 6.3 | Comparações .....                                                               | 29 |
|     | ANEXO A – EXPERIMENTOS.....                                                     | 35 |
|     | ANEXO B – SIMULAÇÕES CFD .....                                                  | 45 |
|     | REFERÊNCIAS .....                                                               | 56 |
|     | BIBLIOGRAFIA RECOMENDADA.....                                                   | 57 |

## 1 INTRODUÇÃO

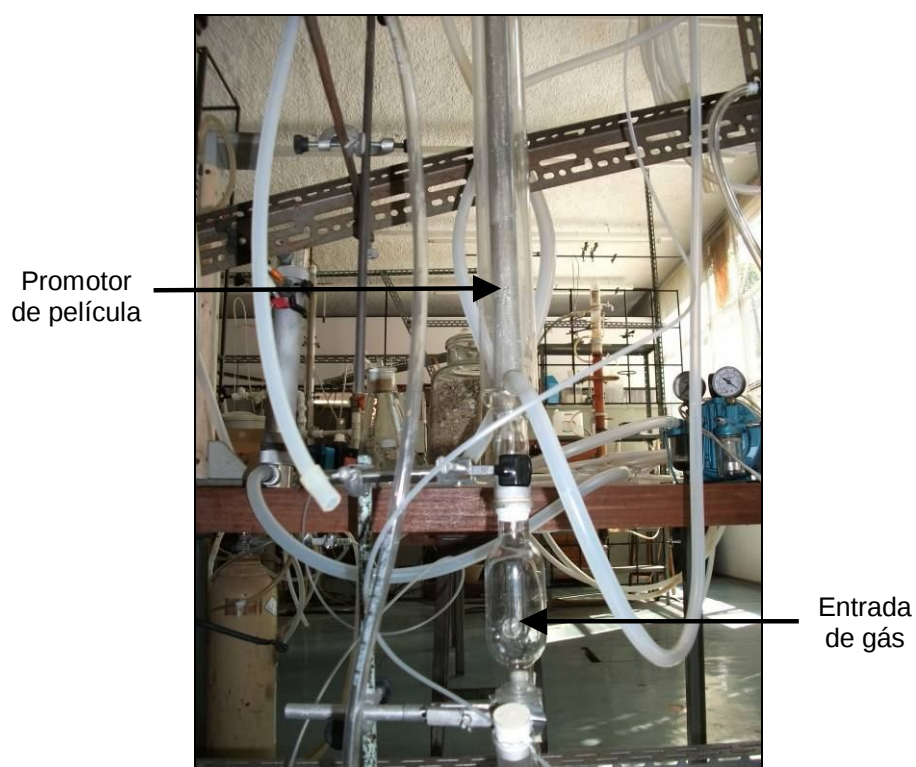
O presente trabalho consiste em um estudo de uma coluna de filme de líquido descendente com promotor de película e será baseado na modelagem do escoamento e em simulações com o uso da ferramenta de Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics* – CFD), com posterior comparação com resultados experimentais da coluna existente no Laboratório de Separações Térmicas e Mecânicas do Departamento de Engenharia Química da Escola Politécnica da USP para validação das simulações. A coluna utilizada nas simulações tem as mesmas dimensões desta coluna utilizada nos experimentos.

A coluna utilizada para obtenção dos resultados experimentais possui 1,16 m de altura e 2,2 cm de diâmetro interno e é apresentada na Figura 1. A entrada de gás na coluna ocorre por um tubo de 0,9 cm de diâmetro. Pode ser utilizada para a absorção de gases em filme de líquido descendente, como, por exemplo, CO<sub>2</sub> em água ou solução alcalina, e opera em contracorrente. A coluna também pode ser utilizada para o estudo do fenômeno da dessorção, que consiste na passagem de uma substância do filme de líquido para o gás, como, por exemplo, evaporação de etanol do filme de líquido para o ar.

Esta coluna possui um promotor de película (Figura 2), que consiste em uma rede metálica com abertura especificada, justaposta à parede interna da coluna, e faz com que a película se mantenha estável.



**Figura 1 – Coluna existente no Laboratório de Separações Térmicas e Mecânicas.**



**Figura 2 – Detalhe da coluna com o promotor de película (rede metálica).**

A tela promotora de película afeta a interação entre as fases líquida e gasosa, influenciando, portanto, a troca de massa entre as duas fases. Neste trabalho, pretende-se avaliar tal influência através da realização de experimentos de dessorção na coluna com e sem a tela.

Este trabalho pretende ainda comparar o valor obtido experimentalmente do coeficiente de transporte de massa na fase gasosa,  $k_G.a$ , com o valor obtido pela simulação com a ferramenta CFD.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 Fluidodinâmica Computacional

A ferramenta CFD (*Computational Fluid Dynamics* – Fluidodinâmica Computacional) consiste em técnicas numéricas e computacionais utilizadas para resolver as equações de balanço de massa, de energia e de momento, permitindo a posterior visualização dos resultados. Suas vantagens estão relacionadas ao fato de que ela permite investigar o escoamento de fluidos inclusive dentro de equipamentos empregados em processos na indústria, eliminando a necessidade de realização de experimentos, que demandam tempo, apresentam um custo associado e podem até mesmo envolver situações de risco, que devem ser evitadas.

Além disso, as propriedades do fluido, a geometria do sistema, as condições iniciais, as condições de contorno e os parâmetros do processo fornecidos ao software podem ser facilmente alterados, o que não ocorre no caso de experimentos.

A técnica serve também como previsão inicial dos resultados, permitindo uma análise mais criteriosa na etapa de elaboração e seleção de experimentos a serem realizados, característica útil em casos de experimentos de difícil realização ou muito caros.

As equações diferenciais resolvidas em CFD apresentam a seguinte forma generalizada:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w\phi) = \\ = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial z}\right) + S^\phi \end{aligned} \quad (1)$$

onde  $u$ ,  $v$  e  $w$  são as componentes da velocidade nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ ,  $\rho$  é a massa específica do fluido,  $\Gamma^\phi$  é o coeficiente de transferência,  $\phi$  é a variável do escoamento e  $S^\phi$  é o termo fonte.

A Tabela 1 mostra o significado de cada termo da equação generalizada.

**Tabela 1 – Termos da equação generalizada.**

| Expressão                                                                                                                                                                                                                                                      | Termo      |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| $\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)$                                                                                                                                                                                                                        | Temporal   |
| $\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w\phi)$                                                                                                                                  | Convectivo |
| $\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma\phi \frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma\phi \frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma\phi \frac{\partial\phi}{\partial z}\right)$ | Difusivo   |
| $S^\phi$                                                                                                                                                                                                                                                       | Fonte      |

Todas as equações de conservação podem ser representadas nesta forma, modificando-se somente os respectivos termos temporais, difusivos, convectivos, fontes e a variável  $\phi$  correspondente. A Tabela 2 apresenta a variável  $\phi$  associada a cada equação de conservação.

**Tabela 2 – Variável  $\phi$  associada a cada equação de conservação.**

| Equação de conservação   | $\phi$ |
|--------------------------|--------|
| Continuidade             | 1      |
| Momento em x             | u      |
| Momento em y             | v      |
| Momento em z             | w      |
| Energia                  | T      |
| Massa de um componente i | C      |

Apesar de serem equações diferenciais, as equações de conservação não são aplicadas desta forma nos cálculos. Elas são discretizadas no espaço ( $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta z$ ) e no tempo ( $\Delta t$ ), de modo que o computador resolve equações algébricas. O domínio de simulação (a região do espaço em que o fluido escoa) é subdividido em um número finito de elementos de volume. Quando este número de elementos tende a infinito, a equação de conservação discretizada tende à equação diferencial, mas o tempo de simulação aumenta e o problema pode inclusive não convergir para a solução.

Um dos métodos de discretização mais utilizados é o Método de Volumes Finitos (MVF). Neste método, cada elemento de volume é um “batch” em que as equações de conservação são resolvidas. Como os outros métodos, as equações finais levam a um sistema algébrico de equações, uma vez que os cálculos para um dado elemento de volume dependem dos cálculos nos elementos vizinhos, conforme a Figura 3.

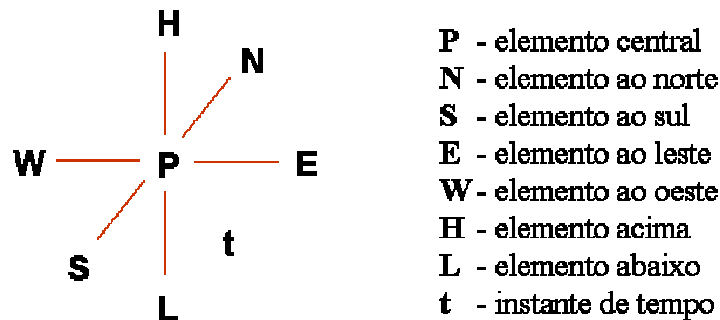


Figura 3 – Elemento de volume central e elementos vizinhos utilizados no MVF.

## 2.2 Equações para o cálculo do coeficiente de transporte de massa

Existem na literatura diferentes correlações para o cálculo do coeficiente de transporte de massa, algumas delas empíricas ou semiempíricas e outras que correspondem a soluções analíticas das equações diferenciais que regem o transporte de massa. As correlações dependem também das condições do escoamento: se o perfil de velocidades e o perfil de concentração já estão desenvolvidos ou se estão em desenvolvimento.

Hines; Maddox (1985) apresentaram a seguinte correlação (solução analítica) para o cálculo do coeficiente de transporte de massa médio para a fase gasosa em tubos cilíndricos, com concentração constante na parede e perfil de velocidades parabólico completamente desenvolvido (escoamento laminar):

$$Sh = \frac{k_G D}{D_{AB}} = 3,66 + \frac{0,0668[(D/L)ReSc]}{1 + 0,04[(D/L)ReSc]^{2/3}} \quad (2)$$

onde

$k_G$  – coeficiente de transporte de massa médio para a fase gasosa na coluna;

$D$  – diâmetro do tubo;

$D_{AB}$  – difusividade mássica da substância A na substância B;

$L$  – comprimento do tubo;

$Re$  – número de Reynolds,  $Re = \frac{\rho v D}{\mu}$ ;

$Sc$  – número de Schmidt,  $Sc = \frac{\mu}{\rho D_{AB}}$ ;

onde  $\rho$  é a massa específica,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica e  $v$  é a velocidade média de escoamento do fluido.

Uma correlação empírica também apresentada em Hines; Maddox (1985) é válida para uma coluna de parede molhada com a presença de ondulações no filme de líquido, escoamento turbulento do gás em contracorrente e mistura diluída:

$$Sh = \frac{k_G D}{D_{AB}} = 0,00814 Re^{0,83} Sc^{0,44} \left( \frac{4\Gamma}{\mu} \right)^{0,15} \quad (3)$$

onde  $\Gamma$  é a razão entre a vazão mássica e o perímetro molhado (no caso de tubos cilíndricos,  $\pi D$ ).

### 3 FAMILIARIZAÇÃO COM O SOFTWARE CFD

Para a familiarização com o software PHOENICS, foram realizadas na primeira etapa deste trabalho algumas simulações para verificar a influência do modelo de escoamento inserido no software nos resultados das simulações, a saber:

- Modelo Laminar e Regime de Escoamento Laminar
- Modelo Turbulento e Regime de Escoamento Laminar
- Modelo Laminar e Regime de Escoamento Turbulento
- Modelo Turbulento e Regime de Escoamento Turbulento

Nos quatro casos, foi simulado um tubo com entrada livre com 3 cm de diâmetro e 5 m de altura, de modo a garantir um longo comprimento com perfil de velocidades desenvolvido. Nos casos de modelo turbulento, foi inserida uma intensidade de turbulência de 5% na entrada. Além disso, utilizou-se nos quatro casos:

- Coordenadas cilíndricas
- Estado estacionário
- Malha de 12500 elementos ( $X = 1$ ,  $Y = 25$  e  $Z = 500$ )
- Fluido do domínio: Ar a 20 °C e 1 atm tratado como incompressível
- Modelo de gravidade constante, com valor de  $9,81 \text{ m.s}^{-2}$  na direção – Z (para baixo)
- 1000 iterações

Os resultados de cada um dos testes serão apresentados a seguir.

### 3.1 Modelo Laminar e Regime de Escoamento Laminar

Foi utilizada uma velocidade de entrada do ar de  $0,5 \text{ m.s}^{-1}$  na direção +Z, de modo que, sendo a densidade do ar de  $1,189 \text{ kg.m}^{-3}$  e a viscosidade do ar de  $1,544.10^{-5} \text{ kg.(m.s)}^{-1}$ , tem-se que

$$Re = \frac{\rho v D}{\mu} = \frac{1,189 \cdot 0,5 \cdot 0,03}{1,544.10^{-5}} = 1155 \leq 2100$$

e, portanto, escoamento laminar do gás no tubo. O perfil de velocidades obtido é apresentado na Figura 4, na Figura 5 e na Figura 6 para diferentes regiões do tubo.

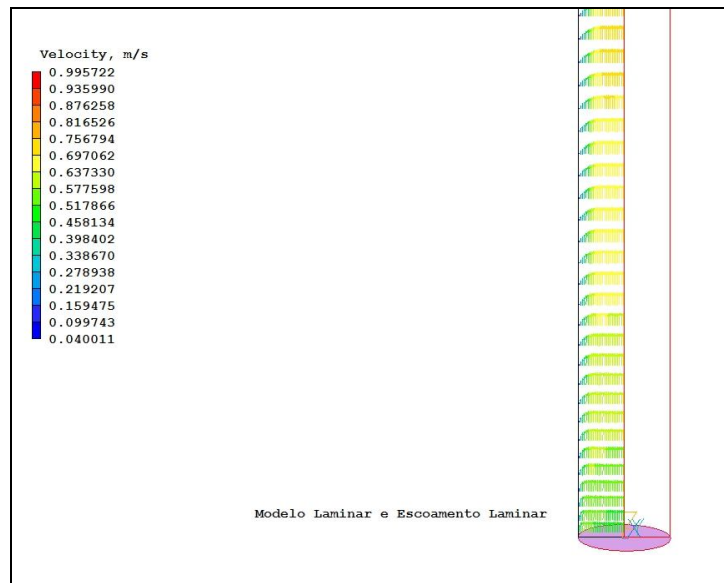
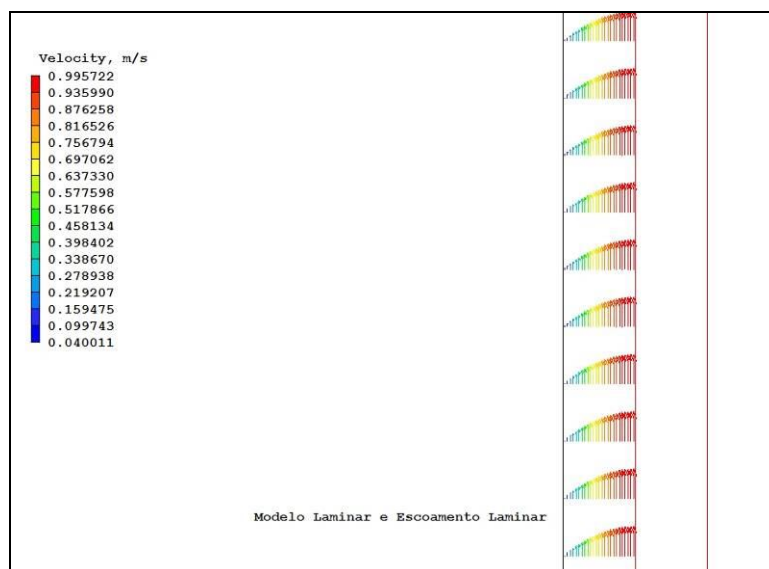
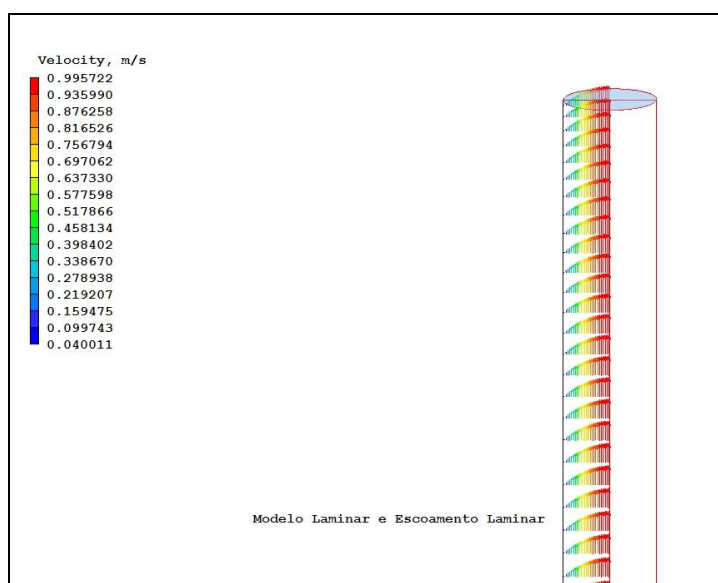


Figura 4 – Perfil de velocidades na entrada do tubo, até a altura de 15 cm.



**Figura 5 – Perfil de velocidades na parte intermediária do tubo, na altura de 2,5 m.**



**Figura 6 – Perfil de velocidades na altura de 4,85 m até a saída do tubo.**

Observa-se que, após o escoamento tornar-se desenvolvido, é obtido o perfil parabólico de velocidades esperado para o escoamento laminar em tubos.

### 3.2 Modelo Turbulento e Regime de Escoamento Laminar

Assim como no item 3.1, tem-se que  $Re = 1155$  e, portanto, escoamento laminar do gás no tubo. O modelo de escoamento utilizado foi o modelo de turbulência  $k-\epsilon$  modificado por Chen (KECHEN). O perfil de velocidades obtido é apresentado na Figura 7, na Figura 8 e na Figura 9 para diferentes regiões do tubo.

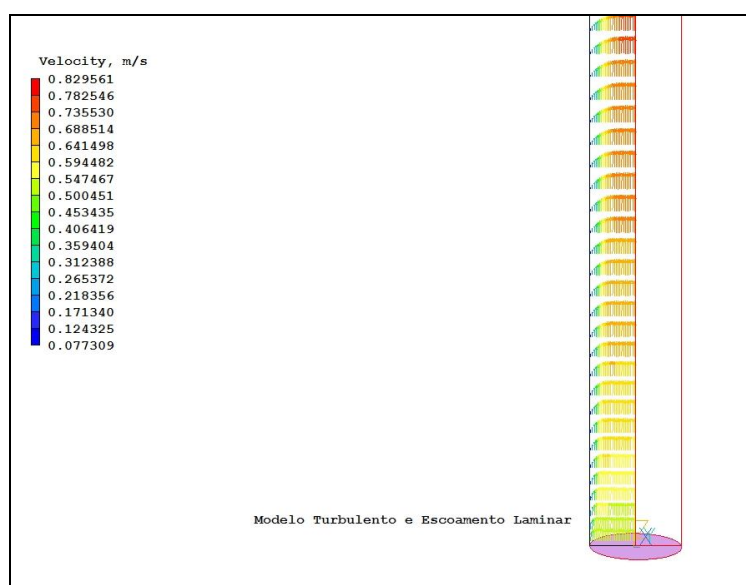


Figura 7 – Perfil de velocidades na entrada do tubo, até a altura de 15 cm.

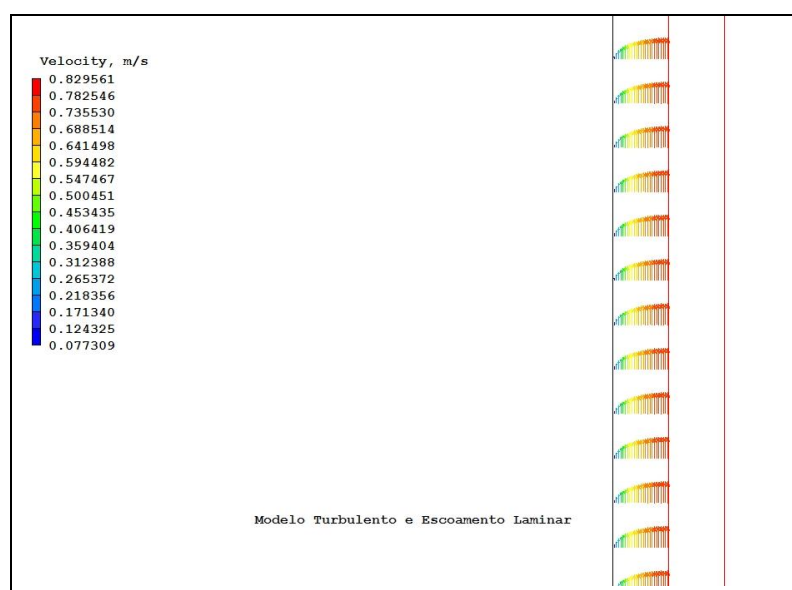
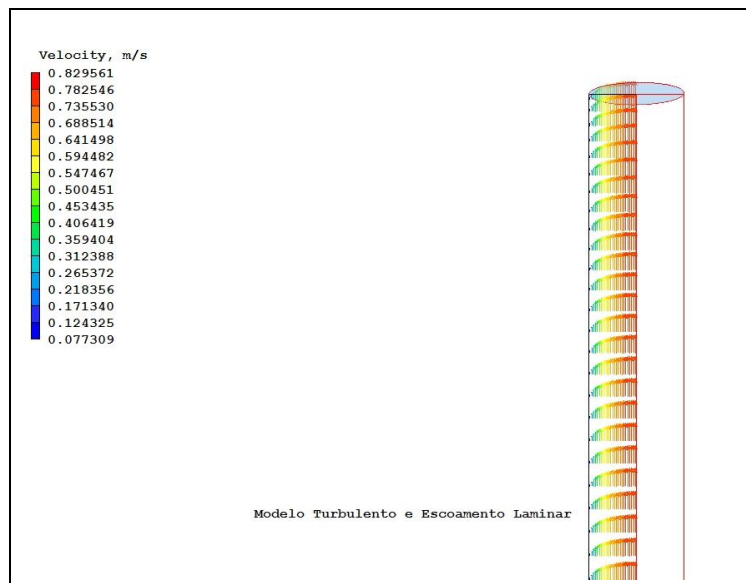


Figura 8 – Perfil de velocidades na parte intermediária do tubo, na altura de 2,5 m.



**Figura 9 – Perfil de velocidades na altura de 4,85 m até a saída do tubo.**

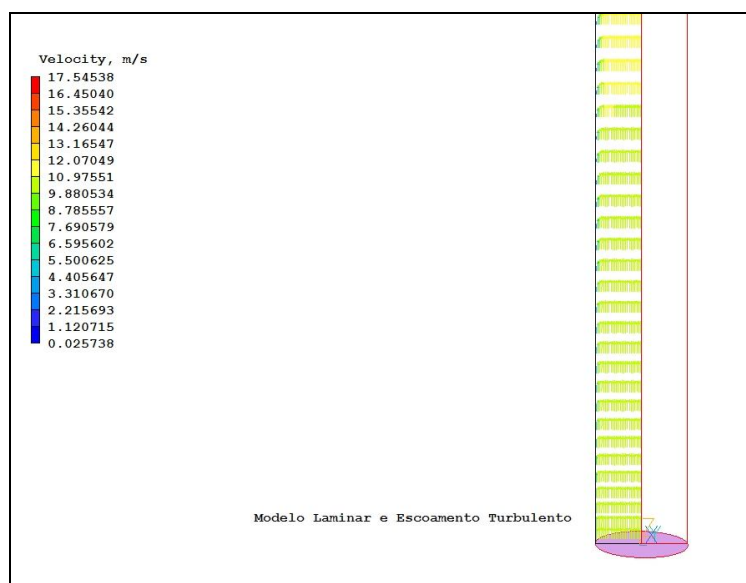
Observa-se que a entrada apresenta perfil de velocidades achatado devido à intensidade de turbulência na entrada, mas o perfil desenvolvido assemelha-se ao perfil de velocidades do regime de escoamento laminar.

### 3.3 Modelo Laminar e Regime de Escoamento Turbulento

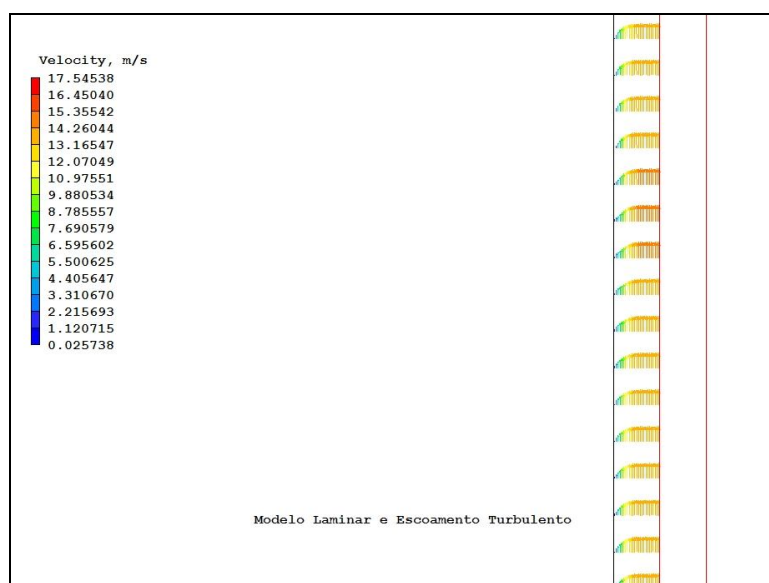
Foi utilizada uma velocidade de entrada do ar de  $10 \text{ m.s}^{-1}$  na direção +Z, de modo que, para os mesmos valores de densidade e viscosidade do ar do item 3.1, tem-se:

$$Re = \frac{\rho v D}{\mu} = \frac{1,189 \cdot 10 \cdot 0,03}{1,544 \cdot 10^{-5}} = 23102$$

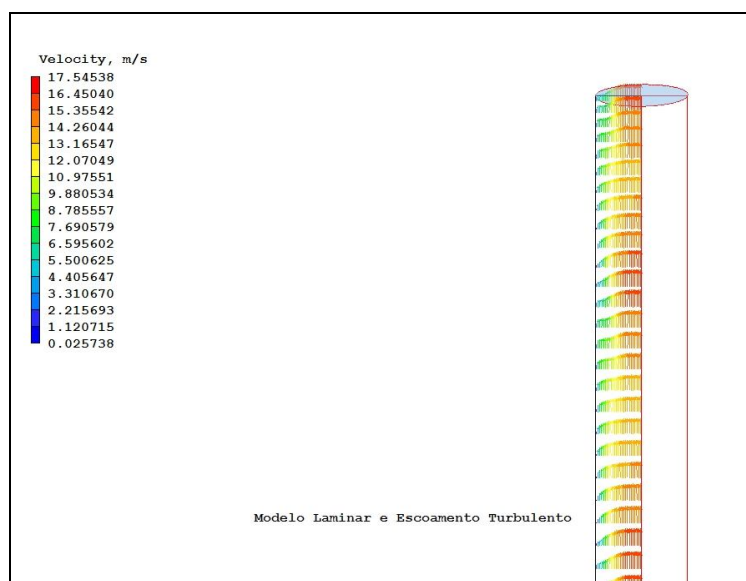
e, portanto, escoamento turbulento do gás no tubo. O perfil de velocidades obtido é apresentado na Figura 10, na Figura 11 e na Figura 12 para diferentes regiões do tubo.



**Figura 10 – Perfil de velocidades na entrada do tubo, até a altura de 15 cm.**



**Figura 11 – Perfil de velocidades na parte intermediária do tubo, na altura de 2,5 m.**

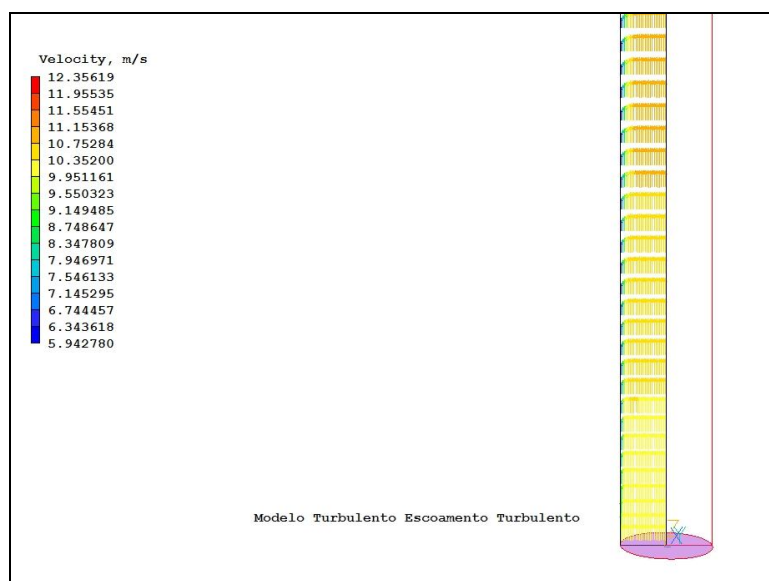


**Figura 12 – Perfil de velocidades na altura de 4,85 m até a saída do tubo.**

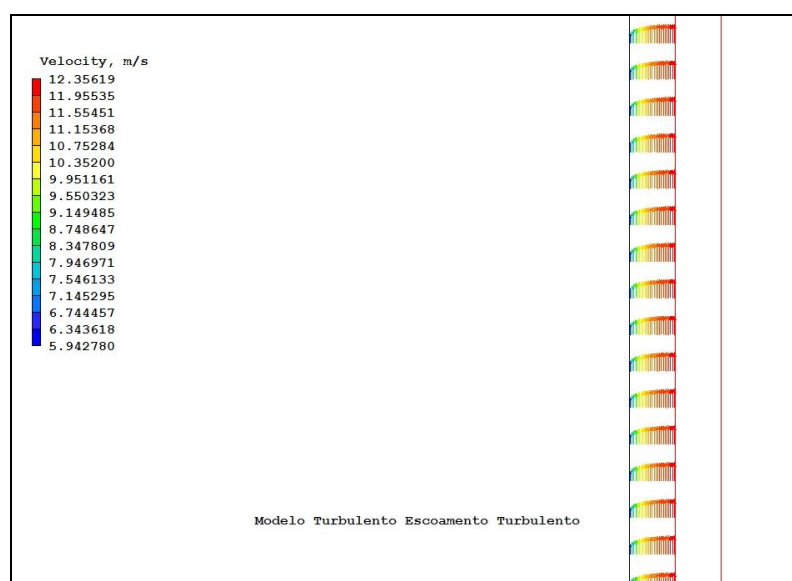
Observa-se que a entrada apresenta perfil de velocidades achatado devido à alta velocidade de entrada do gás, mas o perfil desenvolvido apresenta certa semelhança com o perfil de velocidades do regime de escoamento laminar perto da parede do tubo, com algumas distorções.

### **3.4 Modelo Turbulento e Regime de Escoamento Turbulento**

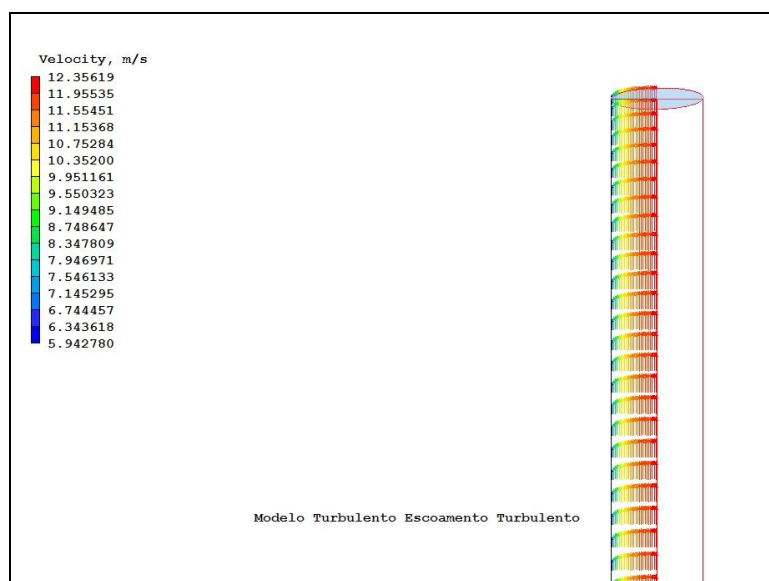
Assim como no item 3.3, tem-se que  $Re = 23102$  e, portanto, escoamento turbulento do gás no tubo. O modelo de escoamento utilizado foi o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  modificado por Chen (KECHEN). O perfil de velocidades obtido é apresentado na Figura 13, na Figura 14 e na Figura 15 para diferentes regiões do tubo.



**Figura 13 – Perfil de velocidades na entrada do tubo, até a altura de 15 cm.**



**Figura 14 – Perfil de velocidades na parte intermediária do tubo, na altura de 2,5 m.**



**Figura 15 – Perfil de velocidades na altura de 4,85 m até a saída do tubo.**

Observa-se que o perfil de velocidades desenvolvido assemelha-se ao perfil achatado de velocidades do regime de escoamento turbulento.

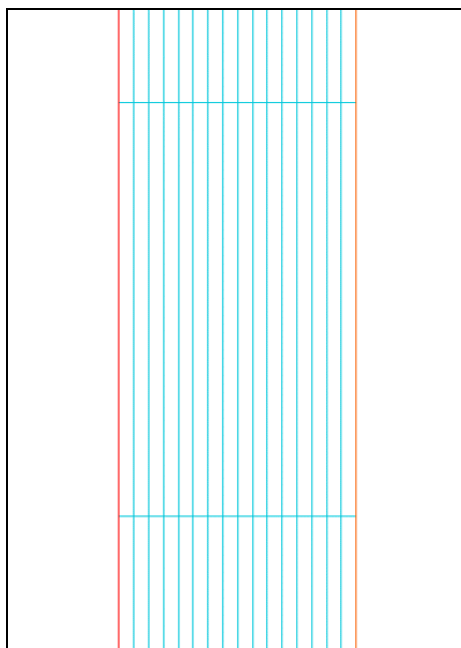
### **3.5 Conclusões dos testes**

Os testes forneceram como resultados:

- Se o escoamento é laminar e insere-se o modelo de turbulência k- $\epsilon$ , obtém-se um perfil de velocidades semelhante ao perfil obtido inserindo-se modelo laminar.
- Se o escoamento é turbulento e insere-se o modelo laminar, o perfil de velocidades obtido apresenta semelhança com o perfil do regime de escoamento laminar próximo à parede da coluna. O perfil é achatado na entrada do tubo, mas vai se aproximando do perfil laminar conforme o gás escoar no tubo, e não se tornou completamente desenvolvido para este comprimento de tubo (5 m).

## 4 VALIDAÇÃO DA MALHA

Com o intuito de validar os resultados obtidos utilizando-se uma malha mais esparsa (com menos volumes), cuja simulação é mais rápida e de convergência mais fácil, foi realizada uma simulação de um tubo com entrada livre, sendo o perfil de velocidades na entrada um perfil chato. Foi utilizado o modelo de escoamento laminar, e a malha utilizada possuía 16 volumes na direção radial (Figura 16) e 60 volumes na direção axial. O problema apresenta simetria cilíndrica e, portanto, a malha possui apenas um volume na direção circunferencial.



**Figura 16 – Malha utilizada – direção radial.**

Crawford; Kays (1993) apresentaram uma solução numérica para o perfil de velocidades para essas condições de escoamento. Foi realizada, então, uma comparação entre a solução presente na literatura e a solução fornecida pelo software PHOENICS.

As curvas encontradas na literatura representam a velocidade do fluido em função da distância radial a partir do centro do tubo ( $u/V$  em função de  $r/r_o$ ) para diferentes seções transversais do tubo, de acordo com a seguinte expressão:

$$\frac{x}{\frac{D}{Re}} = c \quad (4)$$

onde

$x$  – distância axial a partir da entrada do tubo;

$D$  – diâmetro do tubo (0,022 m);

$Re$  – número de Reynolds ( $Re = 1135$ );

$c$  – valor da expressão;

$u$  – velocidade do fluido;

$V$  – velocidade média do fluido ( $0,8038 \text{ m.s}^{-1}$ );

$r$  – distância radial a partir do centro do tubo;

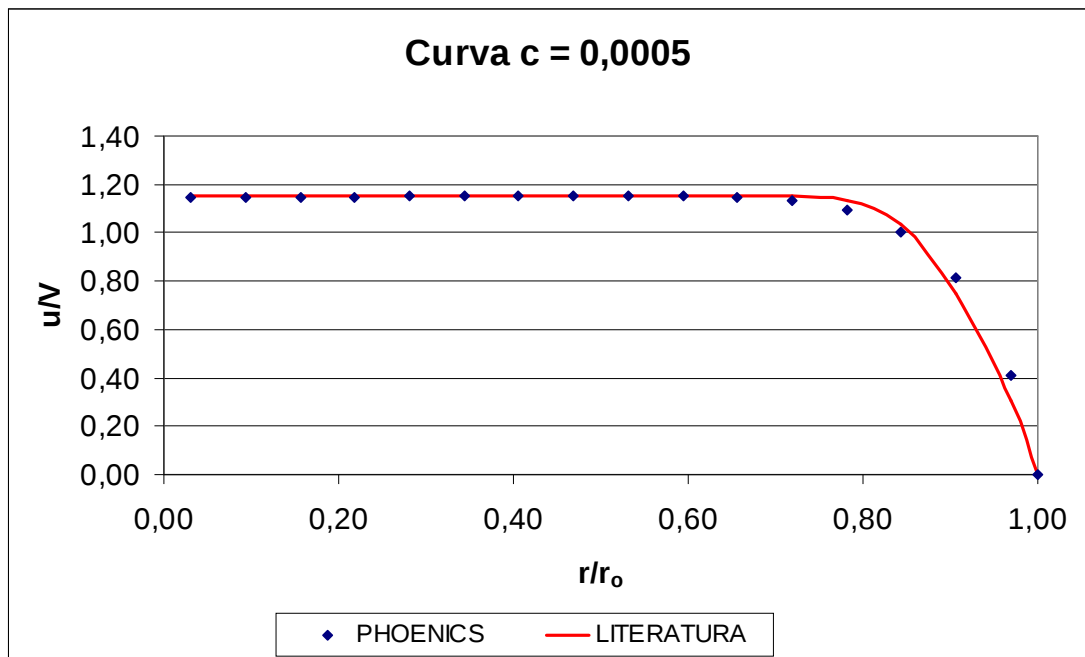
$r_0$  – raio do tubo (0,011 m).

A Tabela 3 apresenta a correspondência entre os valores de  $c$  e os valores de  $x$ .

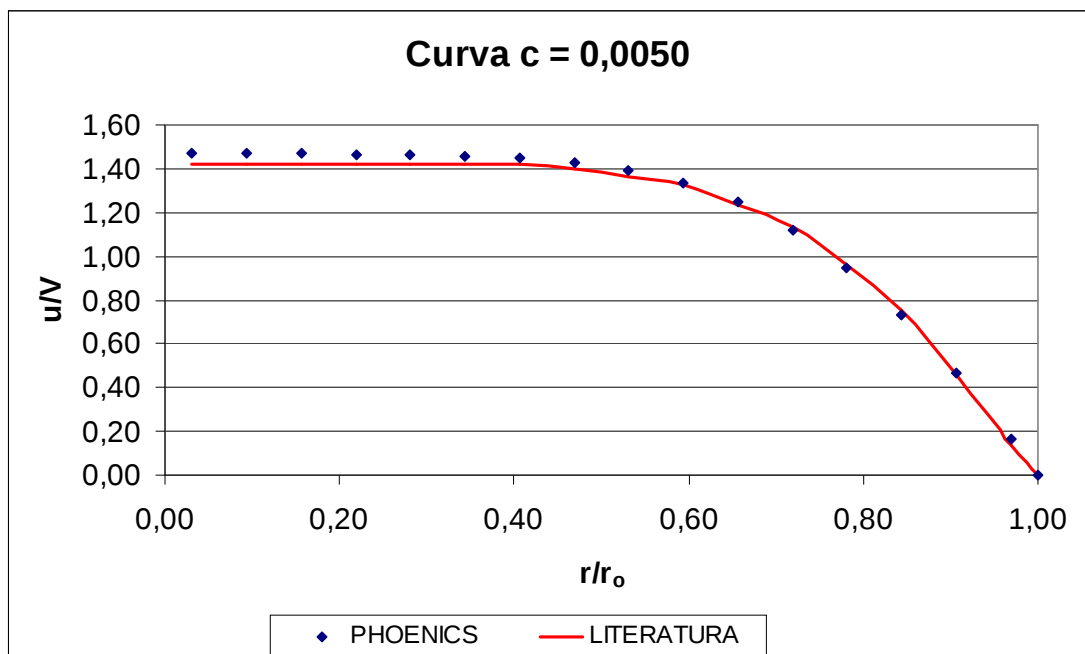
**Tabela 3 – Valores de  $x$  para diferentes curvas da literatura (diferentes valores de  $c$ ).**

| $c$    | $x \text{ (cm)}$ |
|--------|------------------|
| 0,0005 | 1,25             |
| 0,0050 | 12,5             |
| 0,0225 | 56,2             |

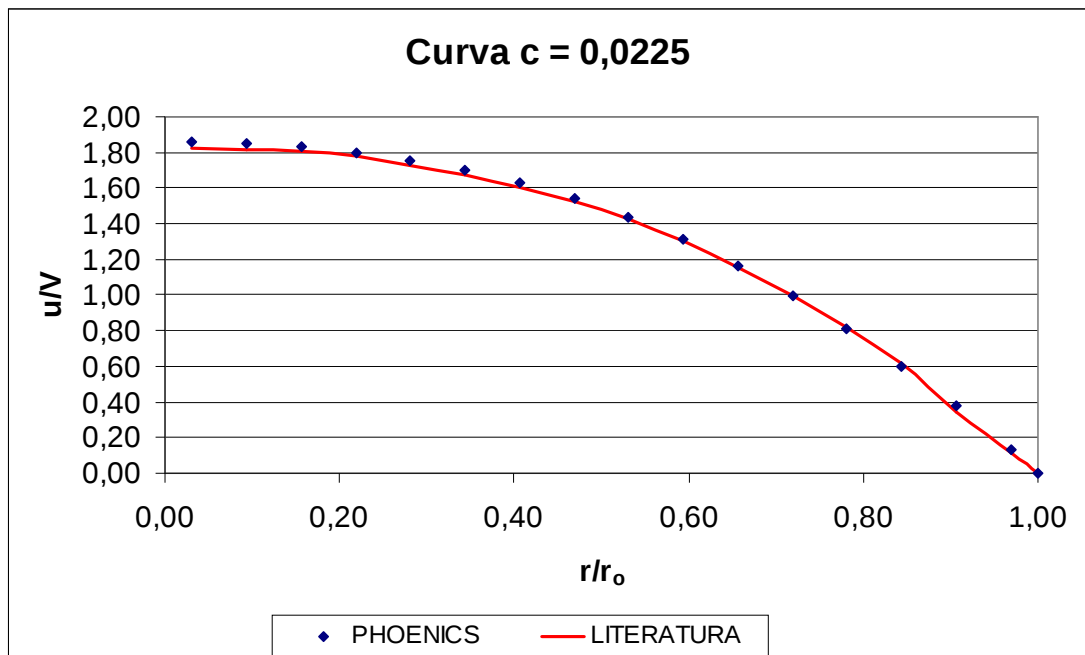
Geralmente, considera-se que, nestas condições, o escoamento está praticamente desenvolvido para  $c = 0,05$ . Os gráficos a seguir apresentam a comparação entre a solução analítica e a obtida por CFD.



**Figura 17 – Comparação entre a solução analítica e a solução por CFD do perfil de velocidades para  $x = 1,25$  cm.**



**Figura 18 – Comparação entre a solução analítica e a solução por CFD do perfil de velocidades para  $x = 12,5$  cm.**



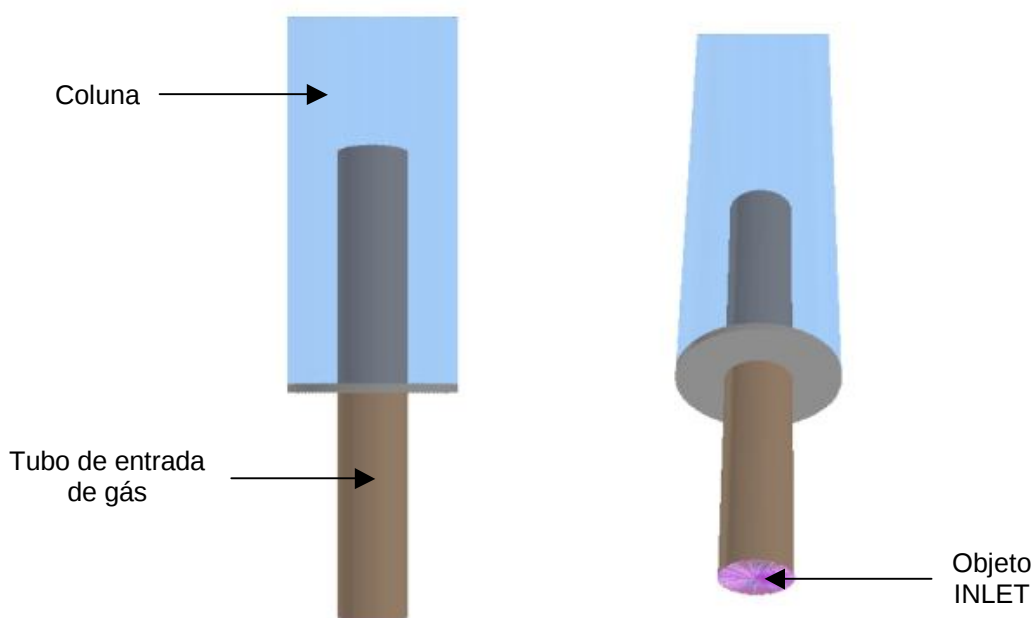
**Figura 19 – Comparação entre a solução analítica e a solução por CFD do perfil de velocidades para  $x = 56,2$  cm.**

Observa-se que as soluções obtidas por CFD são satisfatórias, uma vez que seus resultados são coerentes com as soluções encontradas na literatura (Crawford; Kays, 1993).

Deste modo, considerou-se que a malha utilizada nas simulações CFD é válida e apresenta resultados coerentes com o fenômeno real.

## 5 SIMULAÇÃO COM INCLUSÃO DA VARIÁVEL CONCENTRAÇÃO

Após a validação dos resultados obtidos com a malha esparsa (16 elementos em Y – direção radial – e 60 elementos em Z – direção axial) para um tubo com entrada livre, foi realizada uma simulação CFD com esta mesma malha para avaliar o escoamento do gás na coluna, porém agora com uma geometria de entrada do gás que se assemelha à coluna utilizada nos experimentos, conforme a Figura 20.



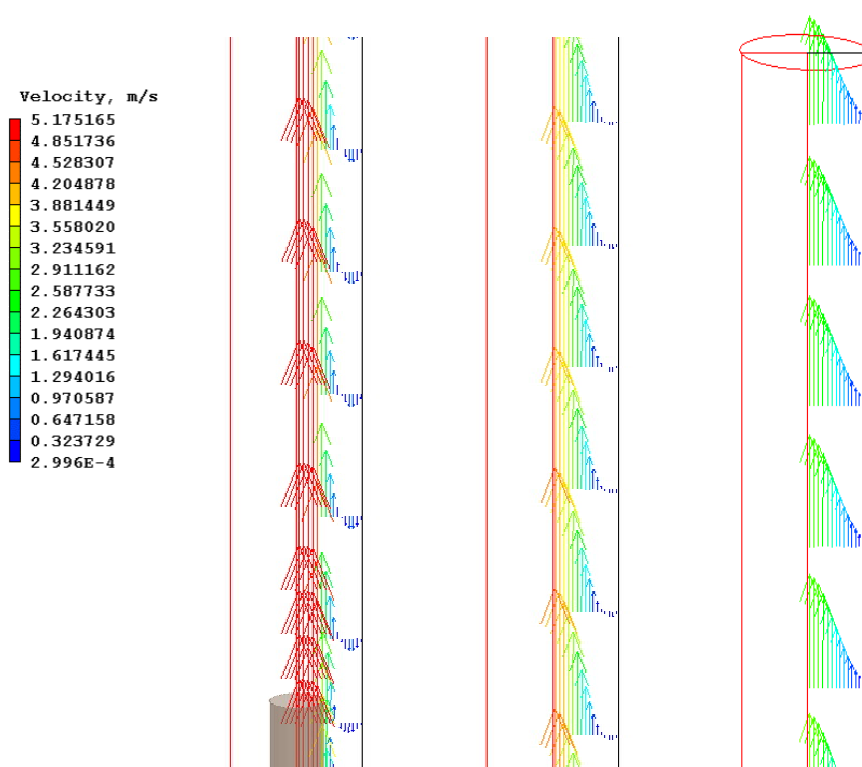
**Figura 20 – Geometria de entrada do gás na coluna inserida no software CFD.**

Além disso, nessa simulação foi ativada a variável C1 do software CFD. Esta variável representa a variável  $\phi$  genérica (Equação 1), sendo neste caso considerada como concentração. No software CFD, a variável C1 não influencia o escoamento (perfil de velocidades), mas é por ele influenciada.

Assim, trata-se de uma concentração relativa de uma dada substância na fase gás. Por exemplo, se a concentração de um poluente no ar que entra na coluna pode variar de 0 a  $5 \text{ g.L}^{-1}$ , pode-se colocar a variável C1

variando de 0 a 100 no software, de modo que  $C1 = 100$  significa concentração de poluente no ar de  $5 \text{ g.L}^{-1}$ .

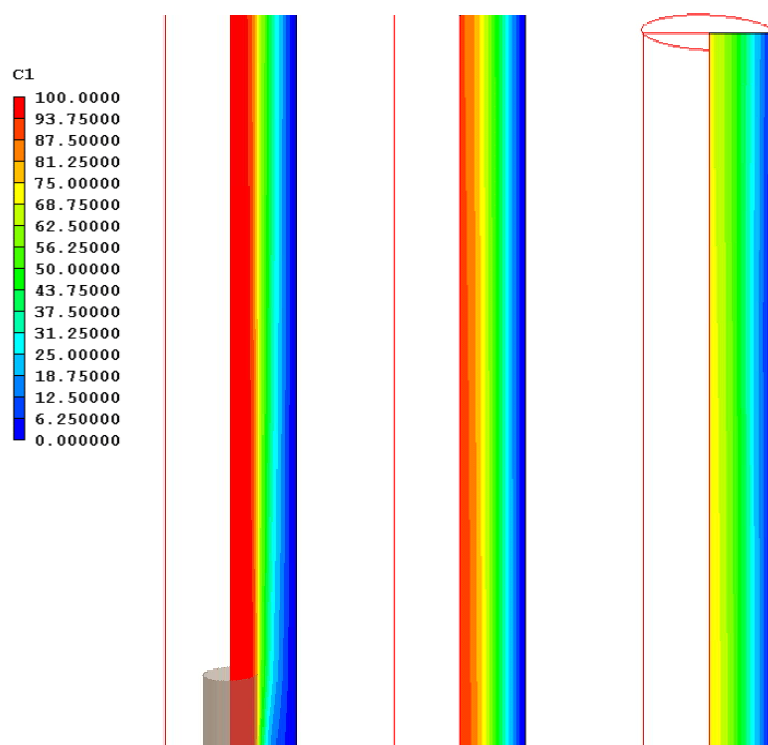
A vazão de ar utilizada na simulação foi de  $1,1 \text{ m}^3.\text{h}^{-1}$ , de modo que o número de Reynolds na coluna é 1135. Portanto, espera-se um perfil de velocidades desenvolvido parabólico. Porém, devido aos efeitos de entrada provocados pela mudança abrupta de diâmetro no escoamento do gás na entrada da coluna, o comprimento de coluna necessário para que o perfil de velocidades se torne desenvolvido aumenta em relação ao escoamento com entrada livre. Como pode ser observado na Figura 21, a altura da coluna não foi suficiente para que o escoamento se tornasse completamente desenvolvido (parabólico).



**Figura 21 – Perfil de velocidades na entrada, na região intermediária e na saída da coluna.**

Foi especificado  $C1 = 100$  para o ar de entrada na coluna, e a condição de contorno  $C1 = 0$  foi imposta na parede da coluna (onde estaria o filme de líquido descendente), de modo a simular um transporte de massa

com reação química na interface. O perfil de concentrações obtido é apresentado na Figura 22.



**Figura 22 – Perfil de concentração na entrada, na região intermediária e na saída da coluna.**

Vale ressaltar que, refinando-se a malha, isto é, aumentando-se o número de elementos de volume da malha, a simulação não convergiu. Deste modo, foi utilizada a malha esparsa (1 x 16 x 60 volumes), cujos resultados foram validados com o esperado na literatura (item 4), para a realização das simulações seguintes, cujos resultados serão comparados com os resultados experimentais.

## **6 CÁLCULO DO COEFICIENTE DE TRANSPORTE DE MASSA MÉDIO PARA A FASE GASOSA**

Para avaliar a influência do promotor de película no transporte de massa na coluna, foram realizados dois conjuntos de experimentos de dessorção de etanol: um com o promotor de película inserido na coluna e outro sem o promotor de película. Além disso, foram realizados dois conjuntos de simulações CFD no software PHOENICS para verificar se estas seriam coerentes com os resultados obtidos experimentalmente.

### **6.1 Experimentos**

Nos experimentos, utilizou-se etanol puro como líquido descendente, e fez-se subir ar puro em contracorrente pela coluna.

A circulação do etanol na coluna consistia em um circuito fechado. O etanol que chegava à base da coluna era coletado em um béquer posicionado sobre uma balança, e era então recirculado para o topo da coluna através de uma bomba. A Figura 23 apresenta a montagem experimental.

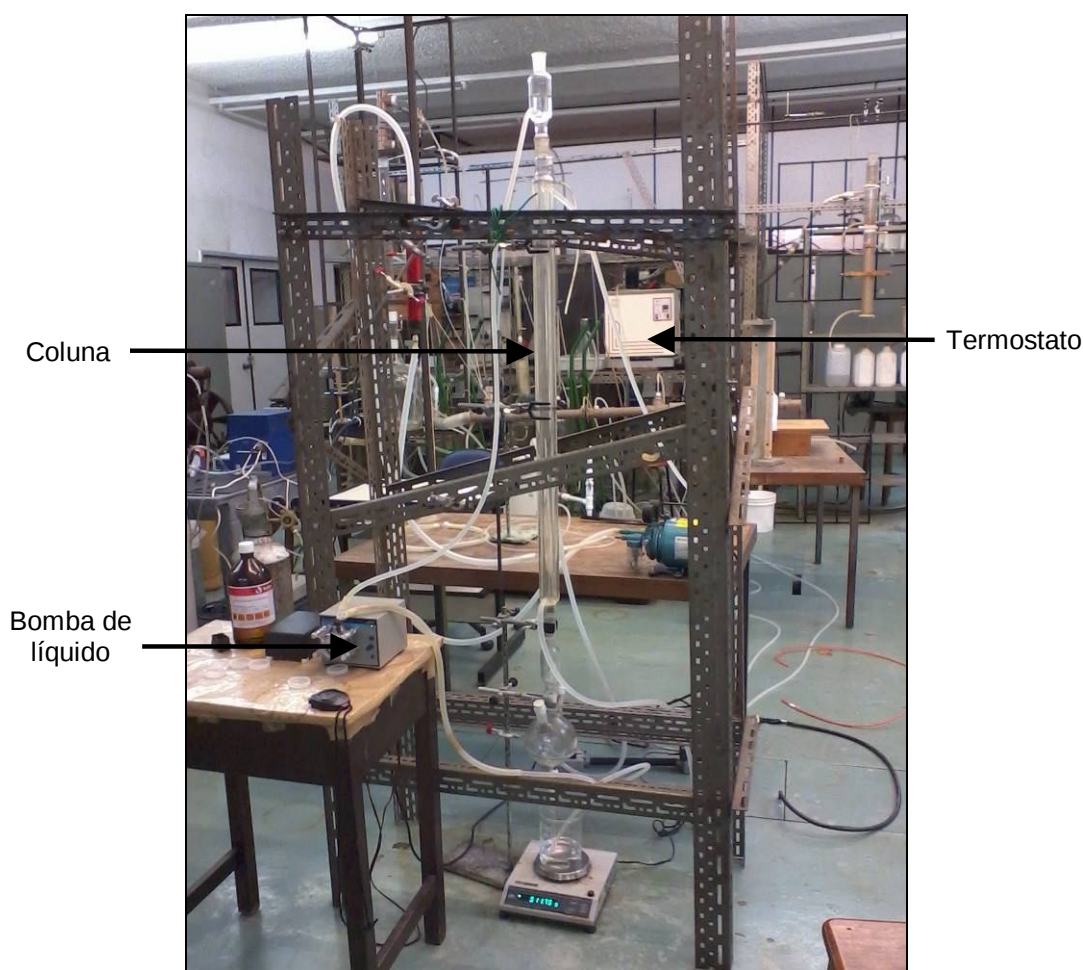


Figura 23 – Montagem experimental para dessorção de etanol.

Após a estabilização da massa indicada pela balança, o que indicava que o líquido atingiu o estado estacionário, iniciava-se o escoamento do ar em contracorrente. Por se tratar de um circuito fechado, a variação da massa de etanol no béquer era devida à evaporação do etanol do filme de líquido para o ar ascendente na coluna. Deste modo, era possível quantificar a troca de massa entre as fases líquido e gás e, então, obter o coeficiente de transporte de massa médio na coluna para a fase gasosa.

Considerando como volume de controle a fase gás, o balanço de massa para o etanol é dado por:

$$\text{Entrada na coluna} + \text{Evaporação} = \text{Saída da coluna}$$

Admitindo-se fluido incompressível e que a vazão volumétrica total do gás é constante, uma vez que se trata de um sistema diluído, tem-se:

$$\frac{\dot{m}}{\rho_{\text{fluido}}} C1_{\text{ent}} + \text{Evaporação} = \frac{\dot{m}}{\rho_{\text{fluido}}} C1_{\text{sai}} \quad (5)$$

onde  $C1_{\text{ent}} = 0$  (ar puro). Portanto:

$$C1_{\text{sai}} = \text{Evaporação} \frac{\rho_{\text{fluido}}}{\dot{m}} = \frac{\text{Evaporação}}{Q} \quad (6)$$

onde  $Q$  é a vazão volumétrica e o termo de evaporação é obtido experimentalmente (Anexo A).

Calculada a concentração  $C1$  na saída do gás da coluna, pode-se calcular o coeficiente de transporte de massa médio na coluna para a fase gasosa, de acordo com as seguintes expressões:

$$\text{Evaporação} = \bar{k}_G \pi DL \Delta C_{LN} \quad (7)$$

onde

$$\Delta C_{LN} = \frac{(C1_{\text{int}} - C1_{\text{sai}}) - (C1_{\text{int}} - C1_{\text{ent}})}{\ln\left(\frac{C1_{\text{int}} - C1_{\text{sai}}}{C1_{\text{int}} - C1_{\text{ent}}}\right)} = \frac{-C1_{\text{sai}}}{\ln\left(\frac{C1_{\text{int}} - C1_{\text{sai}}}{C1_{\text{int}}}\right)} \quad (8)$$

onde  $C1_{\text{int}}$  é a concentração na interface líquido-gás. Admitindo-se equilíbrio de fases na interface, válida a lei de Raoult e gás ideal (pressão utilizada no experimento é baixa), essa concentração pode ser calculada por:

$$C1_{\text{int}} = \frac{P_{\text{vap}}}{P} \frac{PM_{\text{etanol}}}{RT} = \frac{P_{\text{vap}} M_{\text{etanol}}}{RT} \quad (9)$$

Portanto:

$$\bar{k}_G = -\frac{Q}{\pi DL} \ln\left(\frac{C1_{\text{int}} - C1_{\text{sai}}}{C1_{\text{int}}}\right) \quad (10)$$

A temperatura do filme de líquido nos experimentos era 15 °C, temperatura mantida por um banho de água. Porém, o ar entrava na coluna a 16°C, temperatura ambiente nos experimentos. Para cada experimento, calculou-se a evaporação média de etanol com base na perda de massa registrada pela balança ao longo do experimento, de acordo com os cálculos do Anexo A.

Os resultados dos cálculos para o experimento com a tela são apresentados na Tabela 4.

**Tabela 4 – Valores do coeficiente de transporte de massa médio para a fase gasosa obtidos experimentalmente.**

| Vazão de Gás (L.min <sup>-1</sup> ) | Vazão de Líquido (g.s <sup>-1</sup> ) | k <sub>G</sub> (m.s <sup>-1</sup> ) | k <sub>G</sub> .a (s <sup>-1</sup> ) |
|-------------------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|
| 20,6                                | 1,2                                   | 0,0038                              | 0,70                                 |
|                                     | 1,8                                   | 0,0034                              | 0,63                                 |
|                                     | 2,6                                   | 0,0036                              | 0,65                                 |
| 34,0                                | 1,2                                   | 0,0063                              | 1,14                                 |
|                                     | 1,8                                   | 0,0055                              | 1,01                                 |
|                                     | 2,6                                   | 0,0066                              | 1,20                                 |

Os resultados dos cálculos para o experimento sem a tela são apresentados na Tabela 5.

**Tabela 5 – Valores do coeficiente de transporte de massa médio para a fase gasosa obtidos experimentalmente.**

| Vazão de Gás (L.min <sup>-1</sup> ) | Vazão de Líquido (g.s <sup>-1</sup> ) | k <sub>G</sub> (m.s <sup>-1</sup> ) | k <sub>G</sub> .a (s <sup>-1</sup> ) |
|-------------------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|
| 20,6                                | 1,2                                   | 0,0033                              | 0,60                                 |
|                                     | 1,8                                   | 0,0042                              | 0,76                                 |
|                                     | 2,6                                   | 0,0044                              | 0,79                                 |
| 34,0                                | 1,2                                   | 0,0052                              | 0,95                                 |
|                                     | 1,8                                   | 0,0059                              | 1,08                                 |
|                                     | 2,6                                   | 0,0054                              | 0,98                                 |

Vale ressaltar que o coeficiente de transporte de massa médio na coluna para a fase gasosa, k<sub>G</sub> em m.s<sup>-1</sup>, foi calculado com a hipótese de que a parede da coluna é completamente molhada pelo líquido, de modo que a área interfacial é igual a  $\pi DL$ .

## 6.2 Simulações CFD

Para comparação com os resultados experimentais, foram realizadas simulações CFD. As simulações foram configuradas para escoamento monofásico de ar subindo na coluna. A influência do líquido no transporte de massa foi incluída apenas na velocidade do gás, a qual foi inserida no software como a velocidade relativa entre o ar ascendente e o líquido descendente na coluna para corrigir o referencial de velocidade. Não foi considerada a influência do filme de líquido no escoamento do gás nas simulações.

Além disso, a influência da tela não foi considerada nas simulações. Buscou-se comparar a simulação CFD apenas com os resultados experimentais obtidos sem a presença da tela na coluna.

Inicialmente, foi calculada a velocidade do filme de líquido descendente na interface com o ar. O número de Reynolds para o filme de líquido é dado por (Green; Perry, 2008):

$$Re = \frac{4\Gamma}{\mu} \quad (11)$$

onde

$$\Gamma = \frac{\dot{m}}{\pi D} \quad (12)$$

A espessura do filme de líquido é calculada pela expressão:

$$\delta = \left( \frac{3\Gamma\mu}{\rho^2 g} \right)^{1/3} \quad (13)$$

onde  $g$  é a aceleração da gravidade local ( $9,81 \text{ m.s}^{-2}$ ).

A velocidade média do filme de líquido é:

$$V = \frac{\Gamma}{\rho\delta} \quad (14)$$

e a velocidade ao longo da espessura do filme é:

$$u = 1,5V \left[ \frac{2y}{\delta} - \left( \frac{y}{\delta} \right)^2 \right] \quad (15)$$

onde  $y = 0$  na superfície sólida (parede da coluna) e  $y = \delta$  na interface líquido-gás. Portanto, a velocidade máxima do filme ( $y = \delta$ ) é:

$$u_{\max} = 1,5V \quad (16)$$

Desta forma, foi inserida no software PHOENICS como velocidade de escoamento do gás a velocidade relativa entre gás e líquido, dada pela soma entre a velocidade real do gás e a velocidade máxima do líquido, de modo a simular no caso monofásico o efeito do filme de líquido descendente. Procedeu-se, então, à análise dos resultados das simulações para o cálculo do coeficiente de transporte de massa médio na coluna para a fase gasosa.

Neste caso, o coeficiente de transporte de massa também é calculado pela expressão (10). Porém, a concentração na interface foi inserida no software como  $C_{1_{int}} = 100$  (condição de contorno na parede da coluna) e, por isso, a concentração obtida na saída é calculada em relação a este valor.

Os resultados dos cálculos (Anexo B) são apresentados na Tabela 6.

**Tabela 6 – Valores do coeficiente de transporte de massa médio para a fase gasosa obtidos por simulação no software CFD.**

| Vazão de Gás (L.min <sup>-1</sup> ) | Vazão de Líquido (g.s <sup>-1</sup> ) | $k_G$ (m.s <sup>-1</sup> ) | $k_{G.a}$ (s <sup>-1</sup> ) |
|-------------------------------------|---------------------------------------|----------------------------|------------------------------|
| 20,6                                | 1,2                                   | 0,00185                    | 0,336                        |
|                                     | 1,8                                   | 0,00183                    | 0,333                        |
|                                     | 2,6                                   | 0,00180                    | 0,328                        |
| 34,0                                | 1,2                                   | 0,00162                    | 0,294                        |
|                                     | 1,8                                   | 0,00161                    | 0,292                        |
|                                     | 2,6                                   | 0,00160                    | 0,291                        |

### 6.3 Comparações

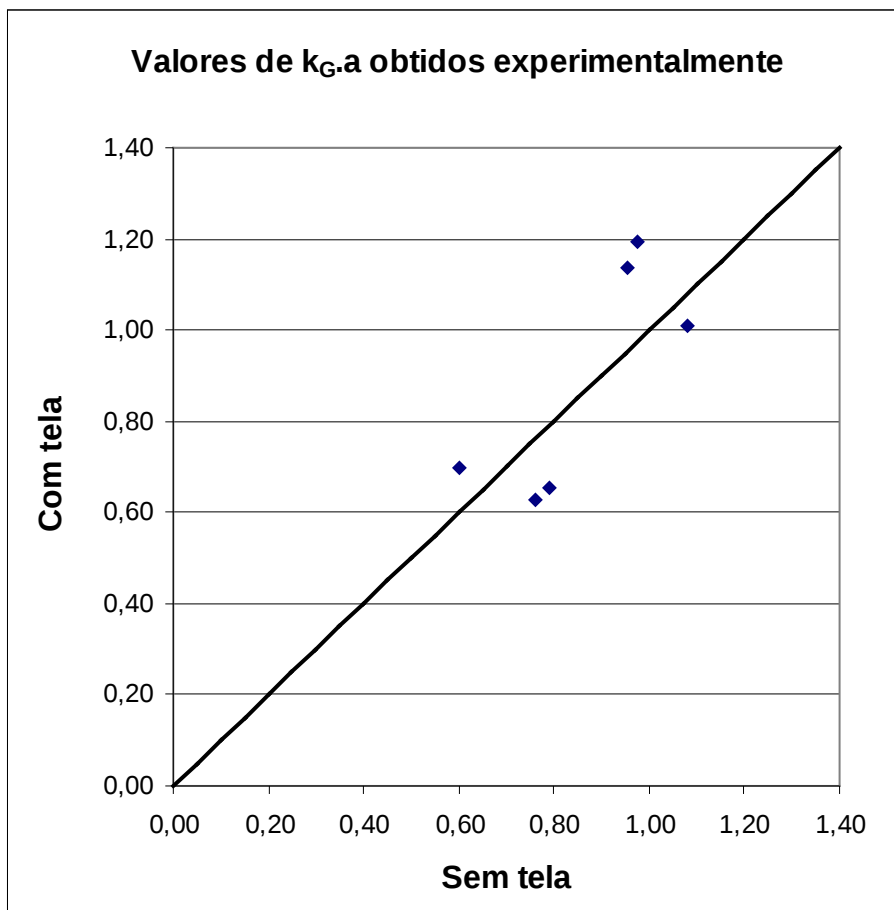
A Tabela 7 apresenta os valores do coeficiente de transporte de massa,  $k_{G.a}$ , calculados pelos três métodos descritos anteriormente.

**Tabela 7 – Resumo dos valores do coeficiente de transporte de massa médio para a fase gasosa calculados.**

| Vazão de Gás (L.min <sup>-1</sup> ) | Vazão de Líquido (g.s <sup>-1</sup> ) | $k_{G.a}$ (s <sup>-1</sup> ) |                      |      |
|-------------------------------------|---------------------------------------|------------------------------|----------------------|------|
|                                     |                                       | Experimento com tela         | Experimento sem tela | CFD  |
| 20,6                                | 1,2                                   | 0,70                         | 0,60                 | 0,34 |
|                                     | 1,8                                   | 0,63                         | 0,76                 | 0,33 |
|                                     | 2,6                                   | 0,65                         | 0,79                 | 0,33 |
| 34,0                                | 1,2                                   | 1,14                         | 0,95                 | 0,29 |
|                                     | 1,8                                   | 1,01                         | 1,08                 | 0,29 |
|                                     | 2,6                                   | 1,20                         | 0,98                 | 0,29 |

A influência da tela promotora de película na dessorção de etanol para o ar pode ser avaliada comparando-se os resultados dos dois conjuntos

de experimentos (com e sem tela). O gráfico da Figura 24 apresenta uma comparação destes resultados.



**Figura 24 – Comparação dos valores de  $k_G.a$  obtidos experimentalmente.**

Observa-se que os resultados experimentais não se distanciam significativamente da correlação  $y = x$ . Os desvios apresentados são devidos aos erros experimentais, tais como:

- diferença na temperatura ambiente de um conjunto de experimentos para o outro;
- dificuldades para se manter a coluna a 15 °C, uma vez que o termostato utilizado não mantinha o banho no set-point desejado automaticamente, exigindo um controle manual da temperatura;
- dificuldade de reprodução das mesmas vazões de líquido nos dois conjuntos de experimentos. Apesar de serem próximas, as vazões de líquido utilizadas não foram as mesmas, uma vez que tais

vazões foram calculadas medindo-se a variação de massa de líquido em um dado intervalo de tempo. A determinação desta variação de massa não era muito precisa, devido às constantes oscilações do valor indicado pela balança.

Deste modo, conclui-se que a tela promotora de película não teve influência significativa na dessorção do etanol para o ar. Uma das características da tela é aumentar a área interfacial líquido-gás e melhorar a troca de massa. Porém, o fato de o etanol apresentar baixa tensão superficial na interface com o ar indica grande molhabilidade da coluna, ou seja, a parede da coluna fica quase completamente molhada mesmo sem a presença da tela, de modo que, ao se inserir a tela na coluna, não ocorre um aumento significativo da área interfacial de troca.

Já a comparação dos resultados das simulações CFD com os resultados experimentais revela diferenças significativas. Além disso, com o aumento da vazão de gás os valores de  $k_G a$  sofreram ligeira queda nos cálculos por CFD, o que não condiz com os resultados experimentais (aumento de  $k_G a$  com o aumento da vazão de gás).

Assim, foi realizada uma nova simulação, para validação dos resultados do software PHOENICS com resultados conhecidos na literatura. Foi simulado um tubo com as mesmas dimensões da coluna estudada e com a mesma malha utilizada nas simulações anteriores, mas agora com o perfil de velocidades do gás de entrada no tubo completamente desenvolvido (parabólico), ou seja, eliminando-se o efeito de entrada existente na coluna experimental. Optou-se por esta análise devido à disponibilidade de resultados precisos provenientes de solução analítica das equações de conservação. Neste caso, a correlação para o cálculo do coeficiente de transporte de massa médio na coluna para a fase gasosa é a expressão (2), conforme o item 2.2:

$$Sh = \frac{k_G D}{D_{AB}} = 3,66 + \frac{0,0668[(D/L)ReSc]}{1 + 0,04[(D/L)ReSc]^{2/3}}$$

Os resultados desta nova simulação são apresentados na Tabela 8.

**Tabela 8 – Valores do coeficiente de transporte de massa médio para a fase gasosa calculados por CFD e pela correlação da literatura.**

| Vazão de Gás<br>(L.min <sup>-1</sup> ) | k <sub>G</sub> .a (s <sup>-1</sup> ) |      |
|----------------------------------------|--------------------------------------|------|
|                                        | Literatura                           | CFD  |
| 20,6                                   | 0,59                                 | 0,70 |
| 34,0                                   | 0,67                                 | 0,80 |

Observa-se que, neste caso, os valores obtidos por CFD são coerentes com a literatura, sendo a diferença bem inferior à obtida na comparação com os resultados experimentais. Além disso, o valor de k<sub>G</sub>.a neste caso aumentou com o aumento da vazão de gás.

Desta forma, conclui-se que os valores de k<sub>G</sub>.a obtidos por CFD na comparação com os experimentos não apresentam erros significativos de cálculo do software. Analisando-se o perfil de velocidades obtido no software CFD, observa-se que, na parede, há uma recirculação do gás em cerca de 84% da coluna para a menor vazão de gás e em toda a coluna para a maior vazão de gás. A Figura 25 e a Figura 26 apresentam o perfil de velocidades obtido para as diferentes vazões de gás, com destaque para a recirculação do gás na parede da coluna.

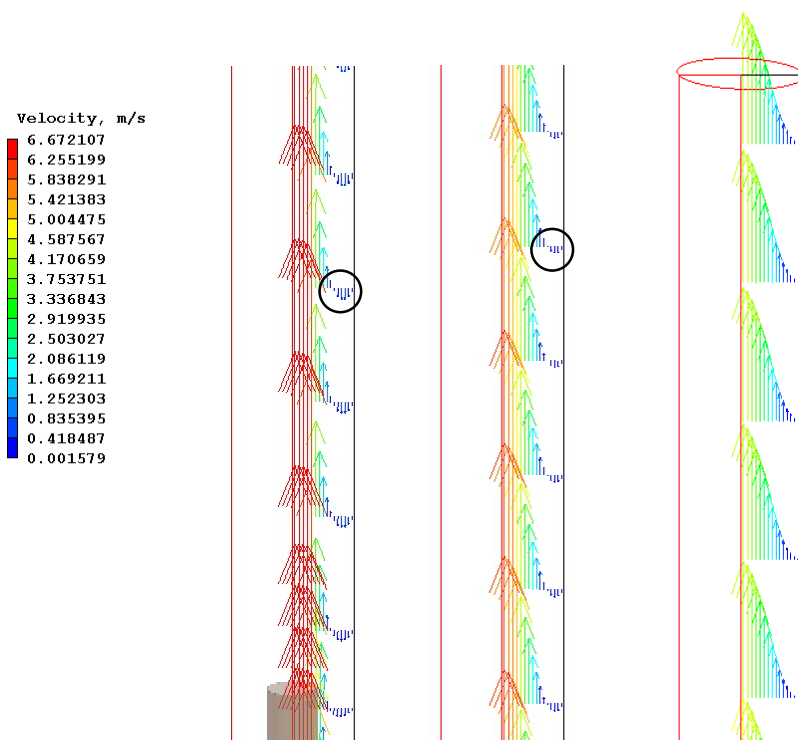


Figura 25 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, com destaque para a recirculação na parede, para a menor vazão de gás.

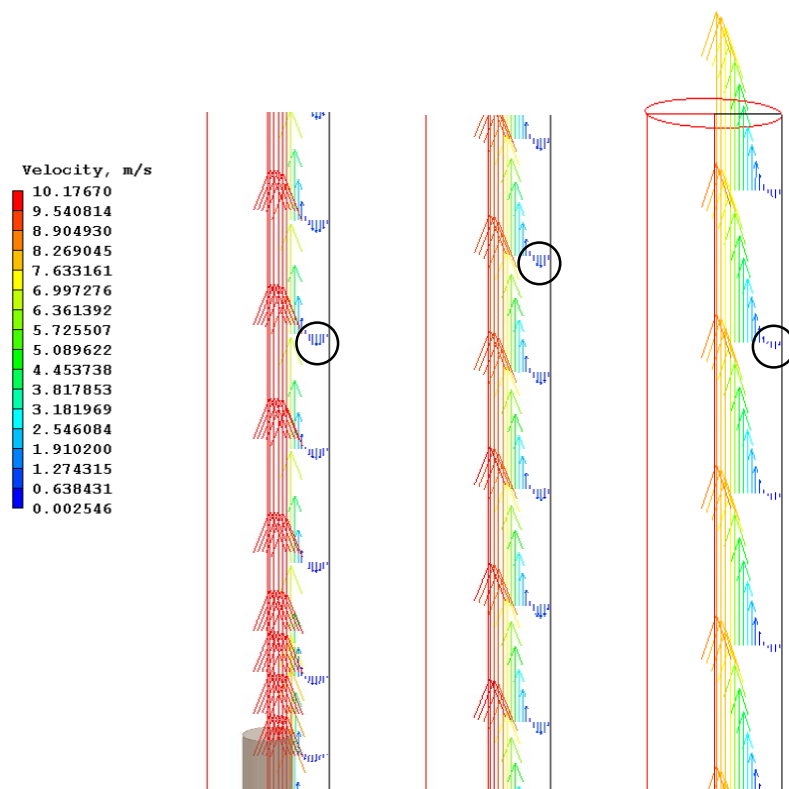


Figura 26 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, com destaque para a recirculação na parede, para a maior vazão de gás.

Essa recirculação perturba o escoamento e dificulta a troca de massa entre as duas fases, afetando os cálculos do software, o que pode explicar os menores valores de  $k_G.a$  obtidos por CFD e também a diminuição de  $k_G.a$  com o aumento da vazão de gás, já que a recirculação é mais intensa com maior vazão de gás.

Se a influência do filme de líquido no escoamento do gás fosse considerada nas simulações, essa recirculação de gás na parede poderia desaparecer dependendo da espessura e das ondulações do filme de líquido e, deste modo, alteraria o perfil de concentração e o valor de  $k_G.a$  obtidos pela simulação. O escoamento do gás poderia até mesmo se tornar turbulento, de modo que o coeficiente de transporte de massa obtido pela simulação seria significativamente diferente.

## ANEXO A – EXPERIMENTOS

Foram realizados seis experimentos com a tela promotora de película e seis experimentos sem a tela, sendo avaliadas duas vazões de gás e três vazões de líquido. Os dados experimentais foram obtidos medindo-se a massa de etanol contido em um béquer. O etanol circulava em circuito fechado, e a variação de massa de etanol no béquer era devida à passagem do etanol do filme de líquido para o ar no interior da coluna. O tratamento dos dados experimentais consistiu em elaborar um gráfico da massa do conjunto béquer + etanol em função do tempo, de modo que a evaporação média de etanol é dada pelo coeficiente angular da reta que ajusta os pontos experimentais.

A vazão de gás foi medida por um rotâmetro, calibrado para as seguintes condições: 760 mmHg e 21°C. A vazão de gás foi corrigida para as condições do experimento (705 mmHg e 16°C) pela seguinte expressão:

$$Q_{\text{corrigido}} = Q_{\text{medido}} \cdot \sqrt{\frac{P_{\text{calibração}}}{P_{\text{atual}}} \cdot \frac{T_{\text{atual}}}{T_{\text{calibração}}} \cdot \frac{\bar{M}_{\text{calibração}}}{\bar{M}_{\text{atual}}}} \quad (17)$$

onde  $P$  é a pressão,  $T$  é a temperatura e  $\bar{M}$  é a massa molar do gás, de modo que  $\bar{M}_{\text{calibração}} = \bar{M}_{\text{atual}}$ .

A Tabela 9 apresenta as vazões de gás (ar) e líquido (etanol) para cada um dos experimentos realizados.

**Tabela 9 – Vazões de gás e de líquido utilizadas nos experimentos.**

| Experimento | Vazão de Gás (L.min <sup>-1</sup> ) | Vazão de Líquido (g.s <sup>-1</sup> ) |
|-------------|-------------------------------------|---------------------------------------|
| 1           | 20,6                                | 1,2                                   |
| 2           |                                     | 1,8                                   |
| 3           |                                     | 2,6                                   |
| 4           | 34,0                                | 1,2                                   |
| 5           |                                     | 1,8                                   |
| 6           |                                     | 2,6                                   |

Nos cálculos, foi utilizada a pressão de vapor do etanol a 15°C, 32,4 mmHg, calculada pela equação de Antoine:

$$\log P_{\text{vap}} = A - \frac{B}{C + T} \quad (18)$$

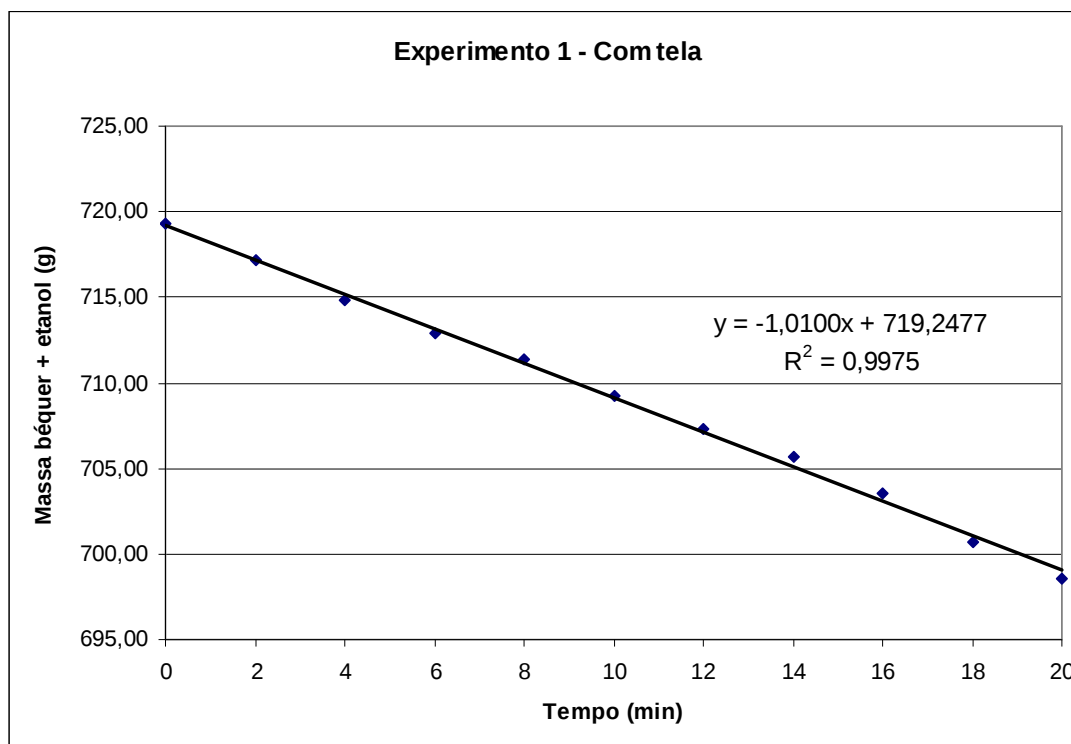
onde  $A = 5,37229$ ;  $B = 1670,409$ ;  $C = -40,191$ ;  $P_{\text{vap}}$  em bar e  $T$  em Kelvin (Kretschmer; Wiebe, 1949).

Assim, a concentração na interface é:

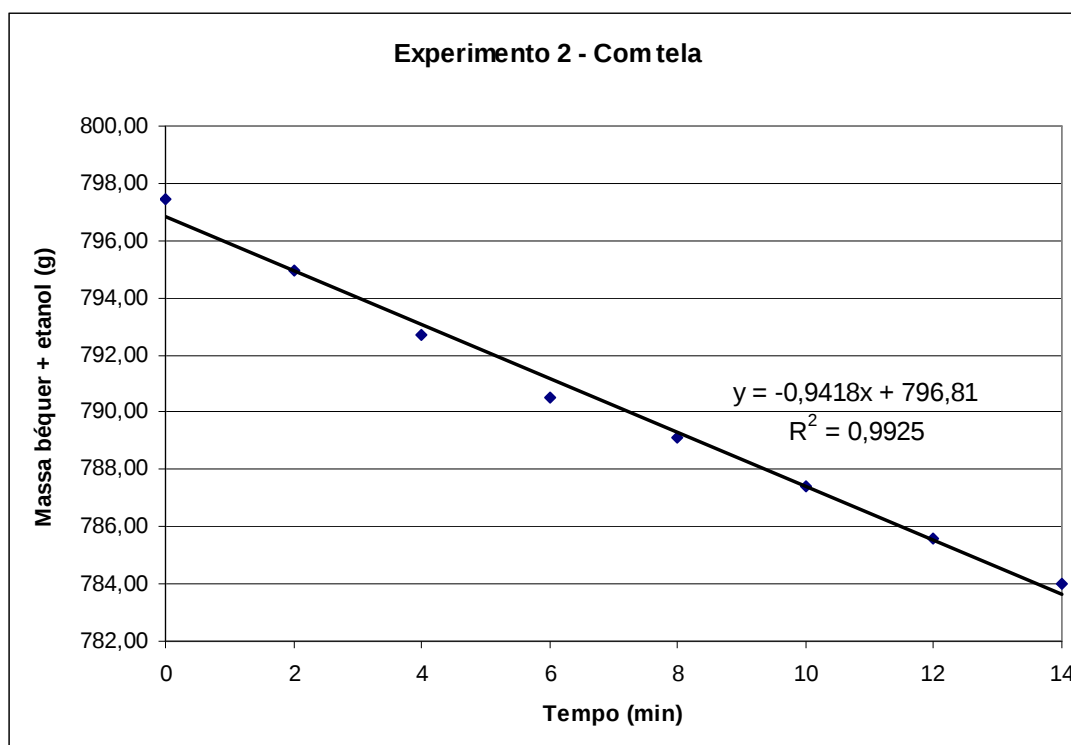
$$C_{1\text{int}} = \frac{P_{\text{vap}} M_{\text{etanol}}}{RT} = 0,0827 \text{ g.L}^{-1}$$

### *Experimento com tela*

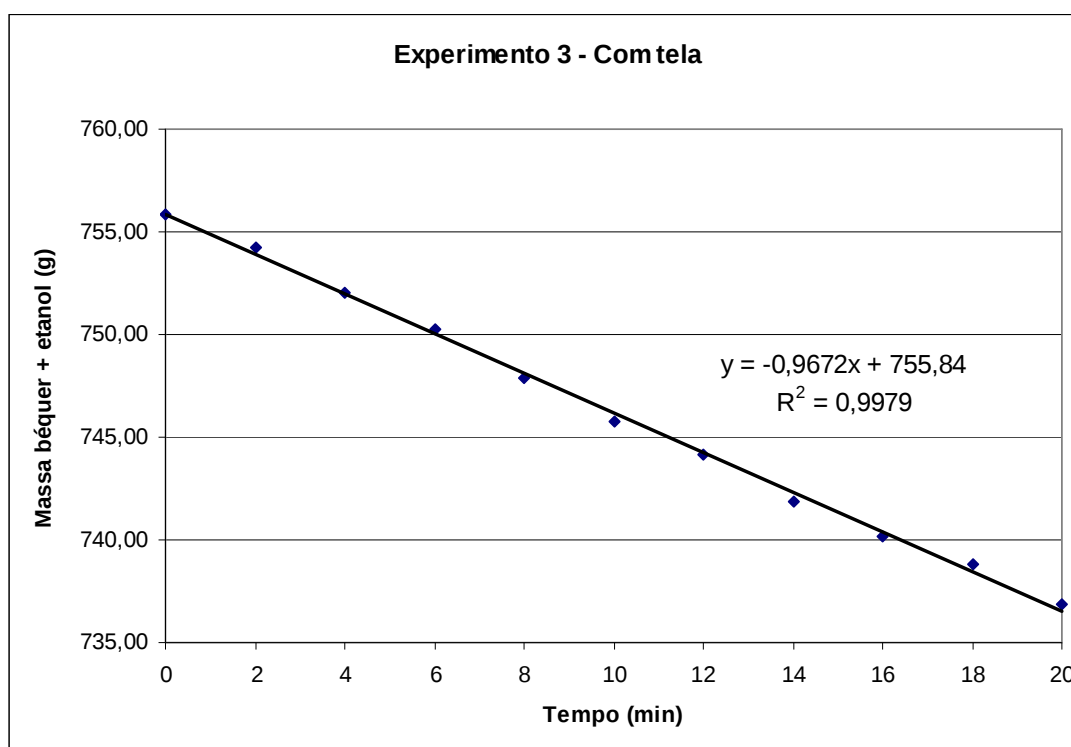
Os gráficos seguintes apresentam a massa do conjunto béquer + etanol ao longo do tempo para os seis experimentos realizados com a tela inserida na coluna, utilizados para a determinação da evaporação média de etanol. Os experimentos 1 a 3 foram realizados durante 20 minutos, enquanto os experimentos 4 a 6 foram realizados por 10 minutos. No caso do experimento 2, os 6 minutos iniciais foram desprezados, uma vez que os dados experimentais obtidos estavam incoerentes, provavelmente porque ainda não havia sido atingido o estado estacionário para o líquido.



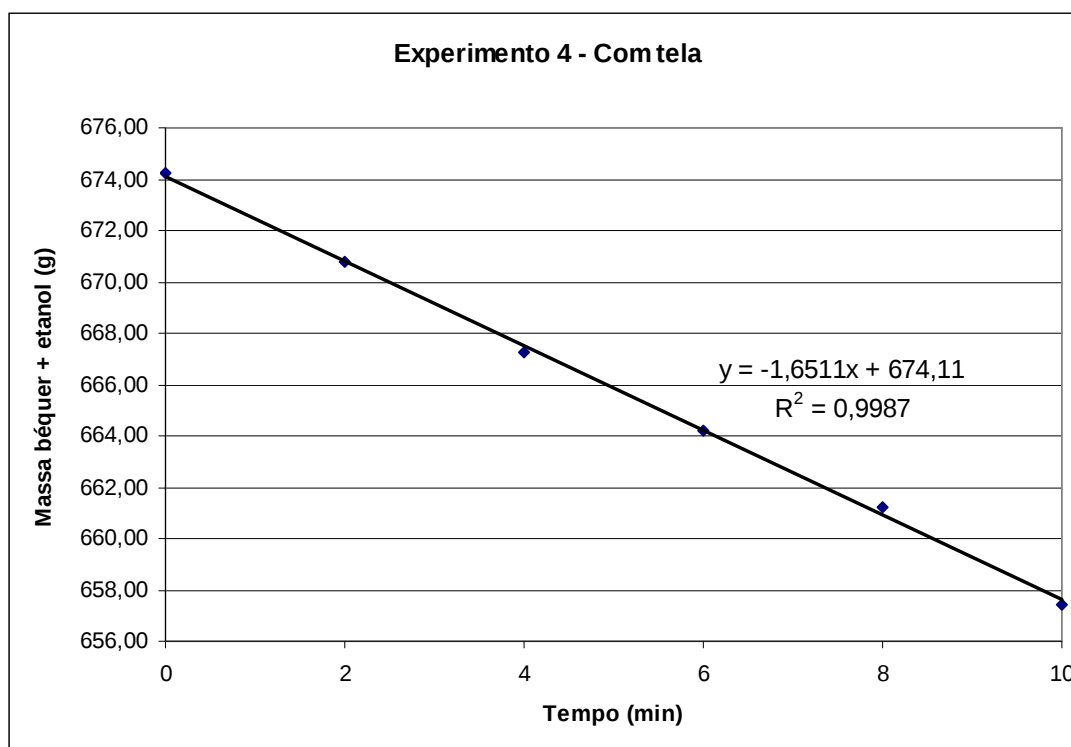
**Figura 27 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás  $20,6 \text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,2 \text{ g}\cdot\text{s}^{-1}$ .**



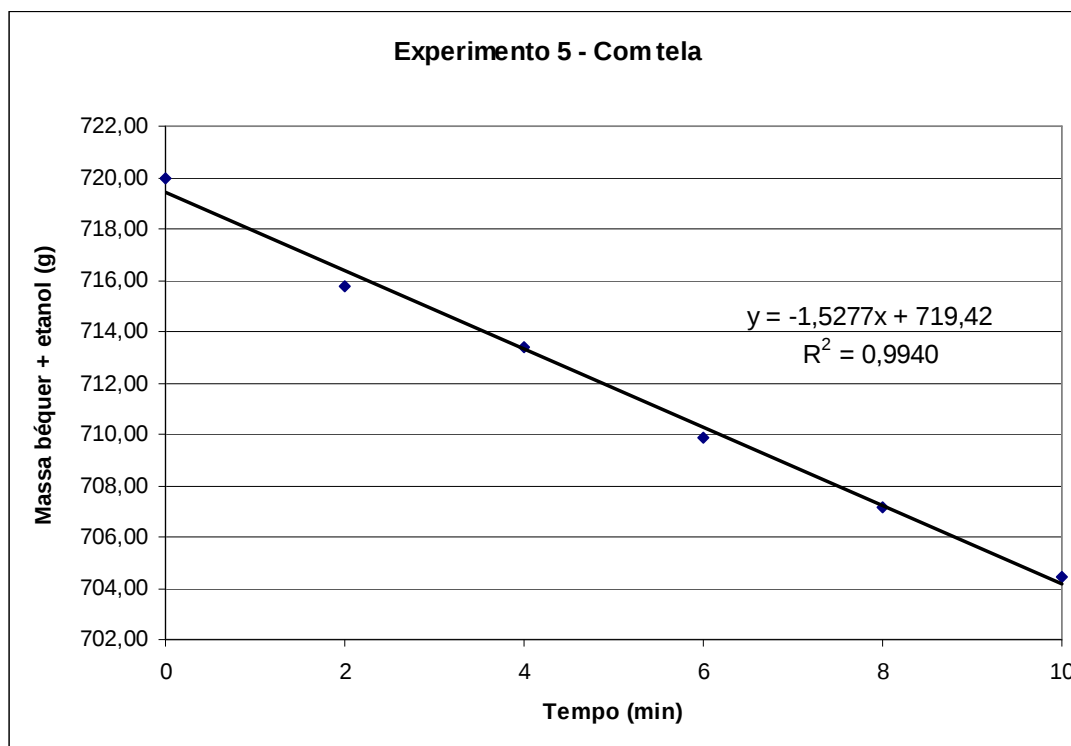
**Figura 28 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás  $20,6 \text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,8 \text{ g}\cdot\text{s}^{-1}$ .**



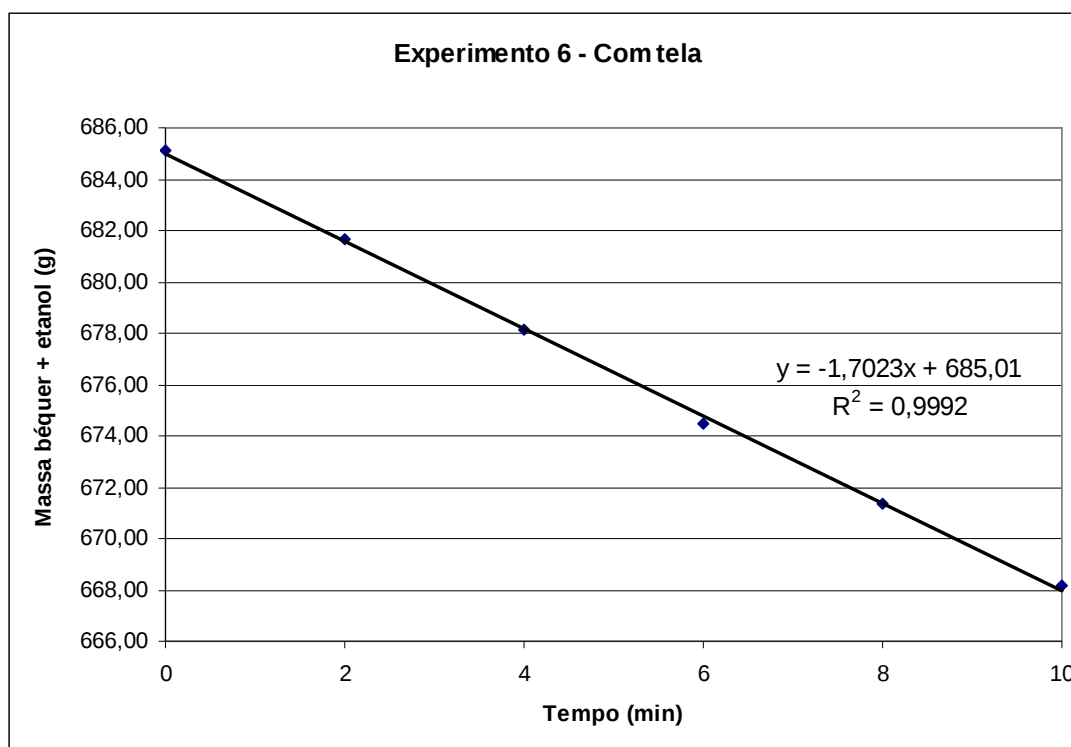
**Figura 29 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás  $20,6 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ .**



**Figura 30 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás  $34,0 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,2 \text{ g.s}^{-1}$ .**



**Figura 31 – Variação da massa de etanol no bquer ao longo do tempo para vazão de gás  $34,0 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,8 \text{ g.s}^{-1}$ .**



**Figura 32 – Variação da massa de etanol no bquer ao longo do tempo para vazão de gás  $34,0 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ .**

A Tabela 10 apresenta os resultados do tratamento dos dados experimentais obtidos nos seis experimentos. A variável  $a$  é a área interfacial disponível para troca de massa por unidade de volume da coluna, que no caso de uma coluna cilíndrica, suposta completamente molhada, é:

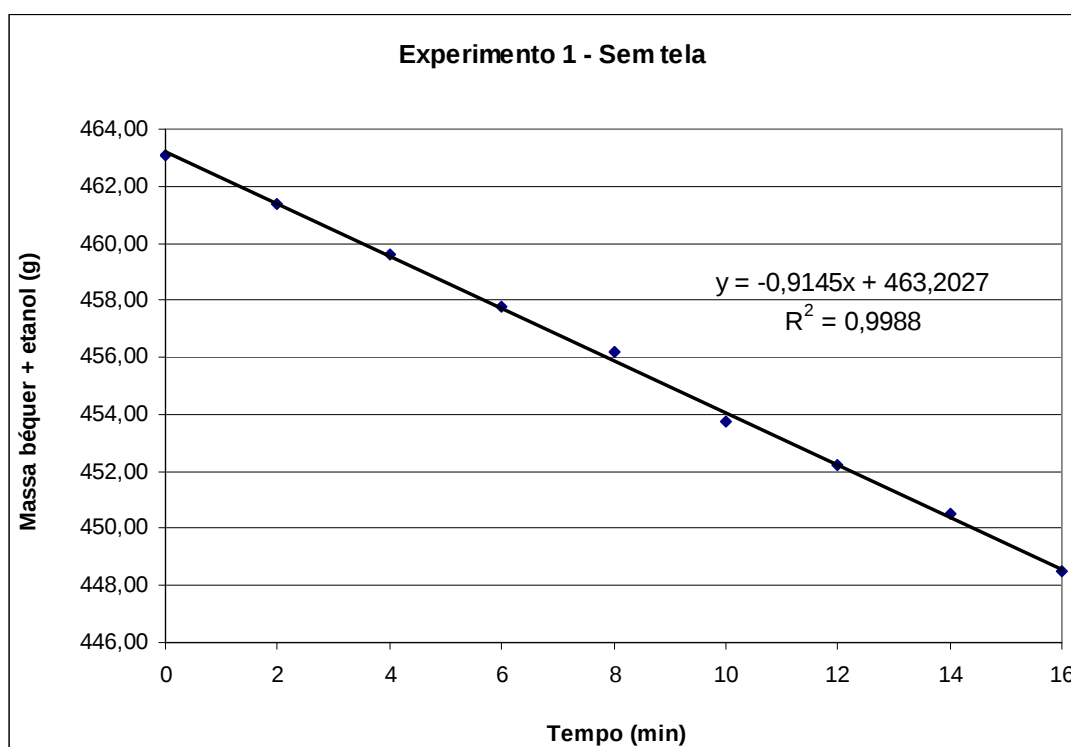
$$a = \frac{A_{\text{troca}}}{\text{Volume}} = \frac{\pi DL}{\frac{\pi}{4} D^2 L} = \frac{4}{D} = 181,8 \text{ m}^2 \cdot \text{m}^{-3} \quad (19)$$

**Tabela 10 – Resultados do tratamento dos dados experimentais para o experimento com tela.**

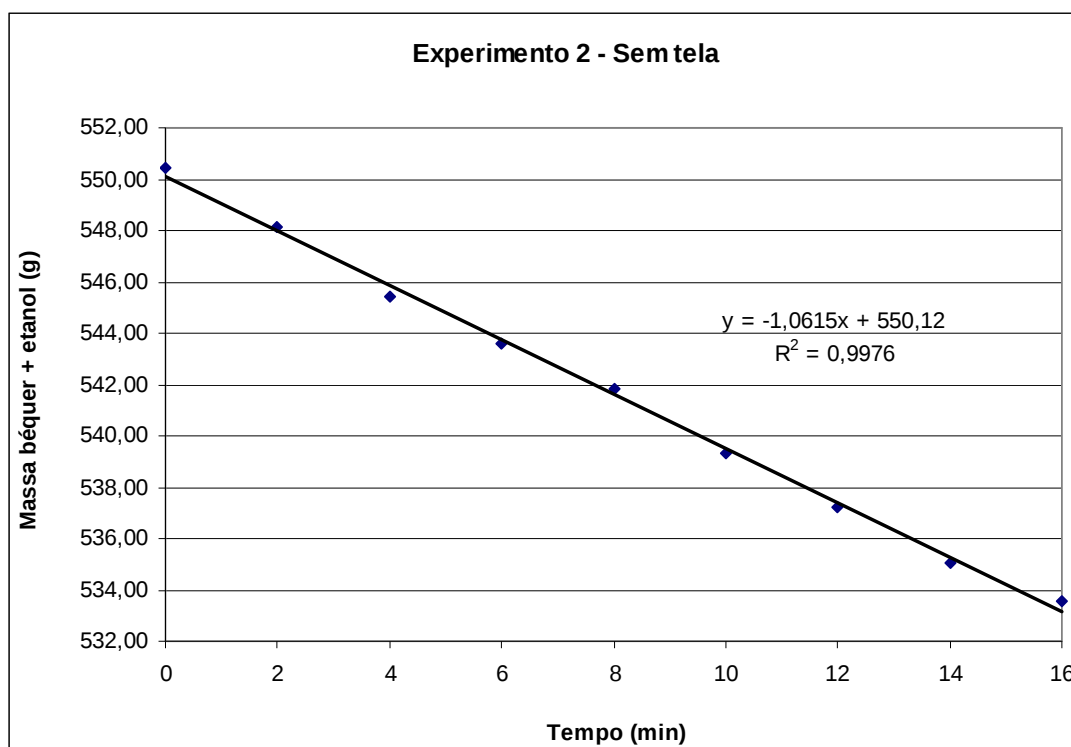
| Experimento | Evaporação média (g.min <sup>-1</sup> ) | C1 <sub>saí</sub> (g.L <sup>-1</sup> ) | k <sub>G</sub> (m.s <sup>-1</sup> ) | k <sub>G</sub> .a (s <sup>-1</sup> ) |
|-------------|-----------------------------------------|----------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|
| 1           | 1,01                                    | 0,049                                  | 0,00385                             | 0,70                                 |
| 2           | 0,94                                    | 0,046                                  | 0,00345                             | 0,63                                 |
| 3           | 0,97                                    | 0,047                                  | 0,00359                             | 0,65                                 |
| 4           | 1,65                                    | 0,049                                  | 0,00626                             | 1,14                                 |
| 5           | 1,53                                    | 0,045                                  | 0,00554                             | 1,01                                 |
| 6           | 1,70                                    | 0,050                                  | 0,00658                             | 1,20                                 |

#### *Experimento sem tela*

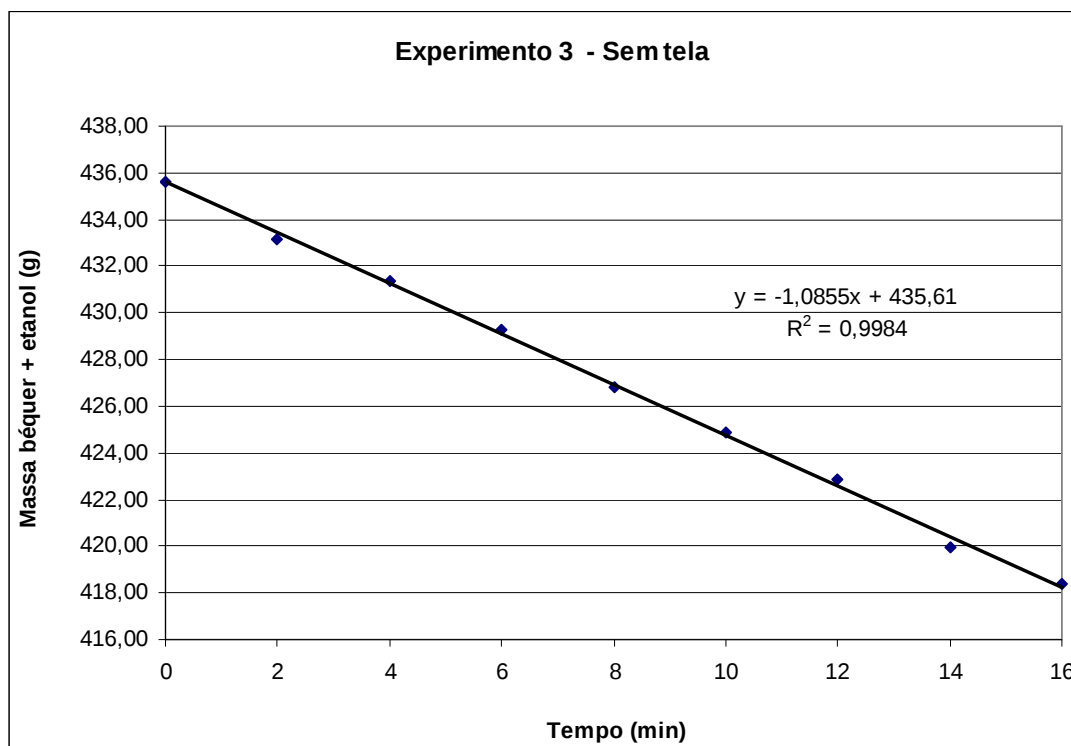
Os gráficos seguintes apresentam a massa do conjunto béquer + etanol ao longo do tempo para os seis experimentos realizados sem a tela. Neste caso, os experimentos foram realizados durante 16 minutos. No caso do experimento 6, o último ponto experimental foi desprezado, uma vez que, devido a oscilações do valor indicado pela balança, a massa de etanol no béquer aumentou, dado incoerente com a realidade.



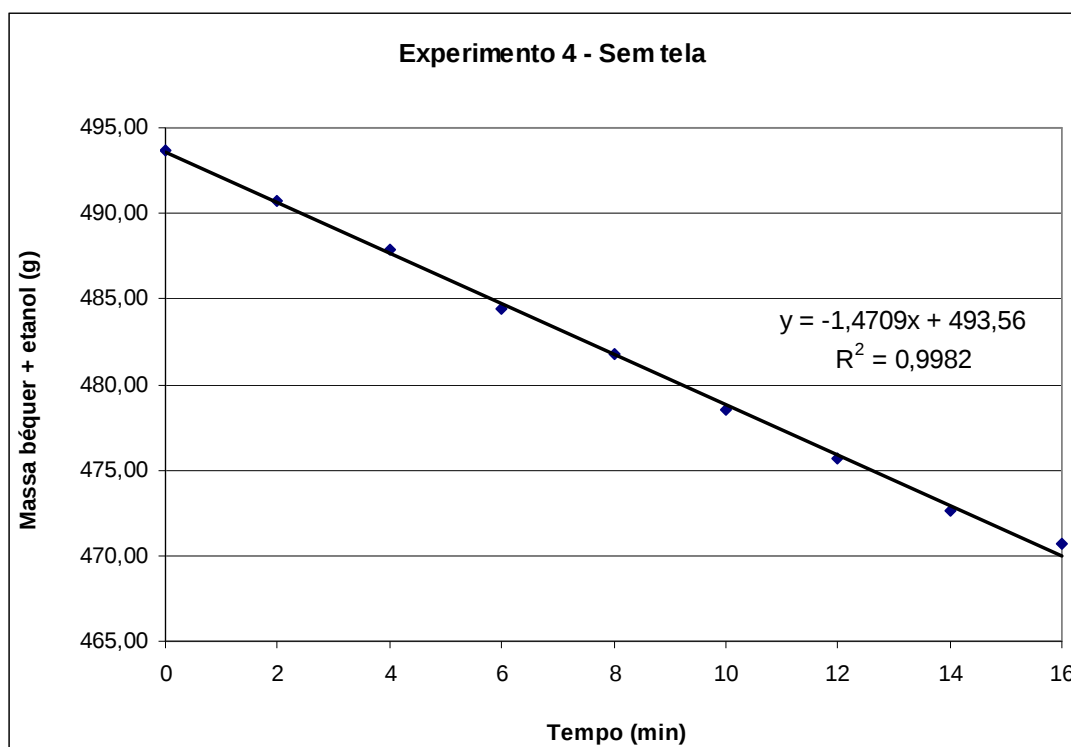
**Figura 33 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás  $20,6 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,2 \text{ g.s}^{-1}$ .**



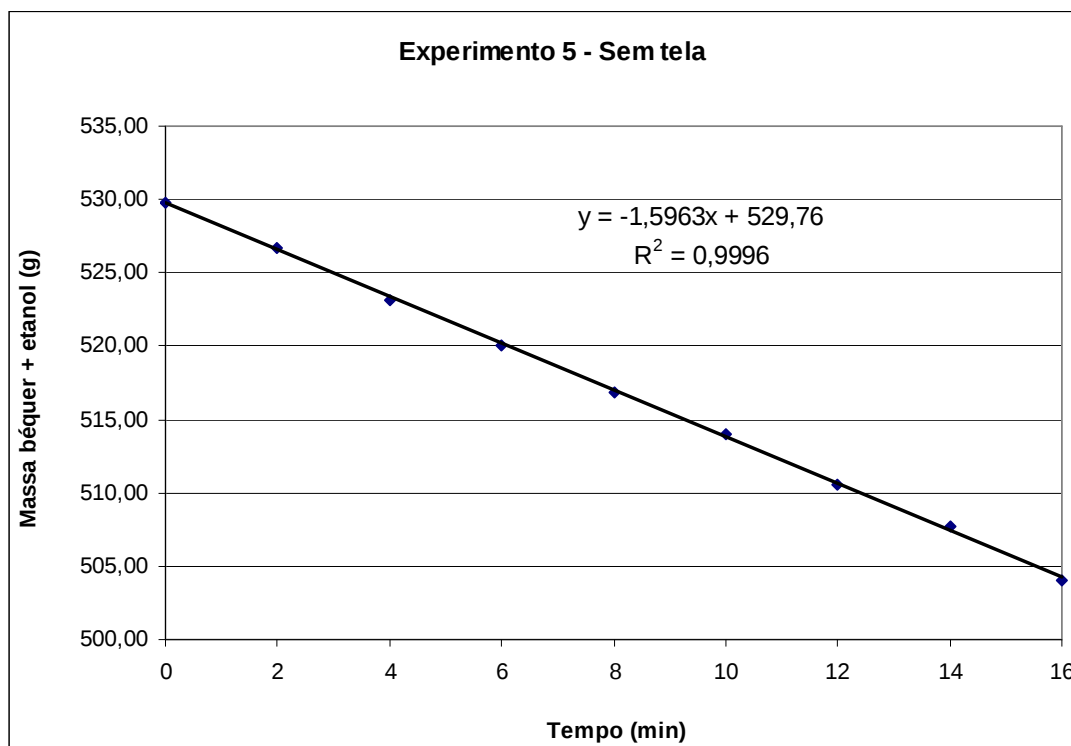
**Figura 34 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás  $20,6 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,8 \text{ g.s}^{-1}$ .**



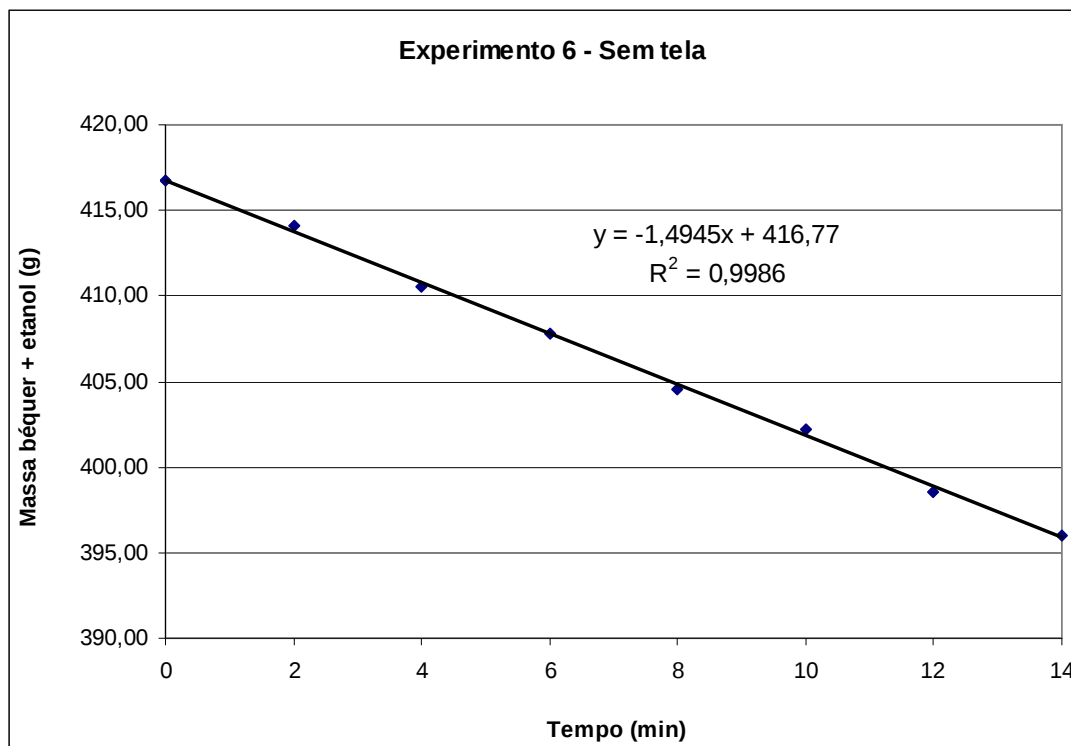
**Figura 35 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás  $20,6 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ .**



**Figura 36 – Variação da massa de etanol no béquer ao longo do tempo para vazão de gás  $34,0 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,2 \text{ g.s}^{-1}$ .**



**Figura 37 – Variação da massa de etanol no bquer ao longo do tempo para vazão de gás  $34,0 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,8 \text{ g.s}^{-1}$ .**



**Figura 38 – Variação da massa de etanol no bquer ao longo do tempo para vazão de gás  $34,0 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ .**

A Tabela 11 apresenta os resultados do tratamento dos dados experimentais obtidos nos seis experimentos.

**Tabela 11 – Resultados do tratamento dos dados experimentais para o experimento sem tela.**

| <b>Experimento</b> | <b>Evaporação média (g.min<sup>-1</sup>)</b> | <b>C1<sub>sai</sub> (g.L<sup>-1</sup>)</b> | <b>k<sub>G</sub> (m.s<sup>-1</sup>)</b> | <b>k<sub>G.a</sub> (s<sup>-1</sup>)</b> |
|--------------------|----------------------------------------------|--------------------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------|
| 1                  | 0,91                                         | 0,044                                      | 0,00330                                 | 0,60                                    |
| 2                  | 1,06                                         | 0,052                                      | 0,00419                                 | 0,76                                    |
| 3                  | 1,09                                         | 0,053                                      | 0,00435                                 | 0,79                                    |
| 4                  | 1,47                                         | 0,043                                      | 0,00525                                 | 0,95                                    |
| 5                  | 1,60                                         | 0,047                                      | 0,00594                                 | 1,08                                    |
| 6                  | 1,49                                         | 0,044                                      | 0,00537                                 | 0,98                                    |

## ANEXO B – SIMULAÇÕES CFD

As simulações CFD foram configuradas como um escoamento monofásico, incluindo na velocidade de subida do gás o efeito do líquido descendente na coluna (inserção da velocidade relativa entre líquido e gás no software). Além disso, foram utilizadas as seguintes configurações:

- Coordenadas cilíndricas
- Estado estacionário
- Malha de 960 elementos (X = 1, Y = 16 e Z = 60)
- Fluido do domínio: Ar a 16 °C e 0,93 atm, tratado como gás ideal (massa específica e viscosidade dinâmica inseridas manualmente, sem utilizar a tabela de propriedades de fluidos do software)
- Modelo de gravidade constante, com valor de  $9,81 \text{ m.s}^{-2}$  na direção – Z (para baixo)
- 2000 iterações

Foi utilizado modelo de escoamento laminar, sendo o número de Schmidt para o gás de  $Sc = \frac{\mu}{\rho D_{\text{etanol-ar}}} = 1,1457$ . A difusividade mássica de etanol em ar foi retirada de Hines; Maddox (1985) e corrigida para as condições do experimento de acordo com a relação

$$D_{\text{etanol-ar}} \propto \frac{T^{1,5}}{P} \quad (20)$$

As figuras a seguir apresentam os perfis de velocidade e de concentração obtidos em cada uma das seis simulações realizadas, bem como o gráfico do valor de cada variável e do erro numérico ao longo da simulação, mostrando que as simulações convergiram.

## Experimento 1

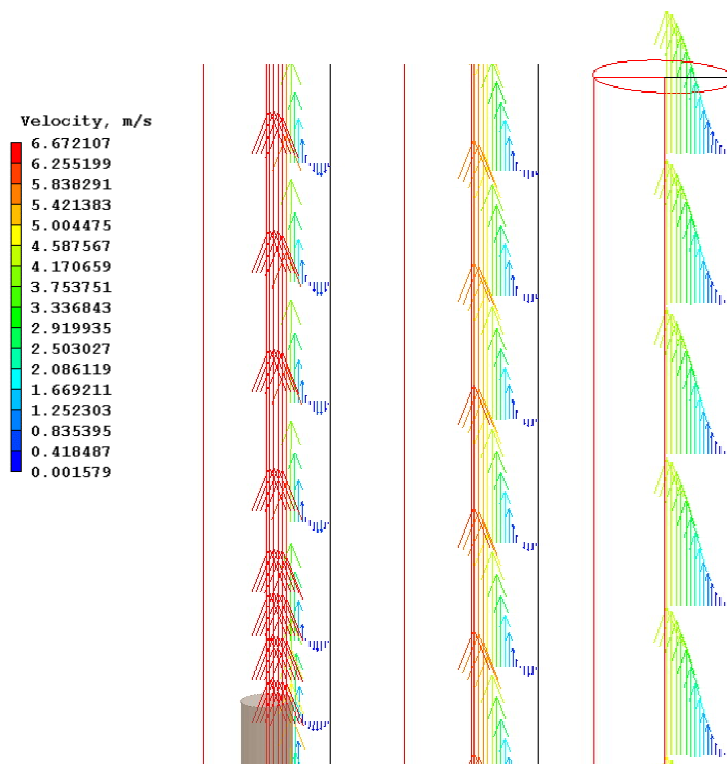


Figura 39 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de  $20,6 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,2 \text{ g.s}^{-1}$ .

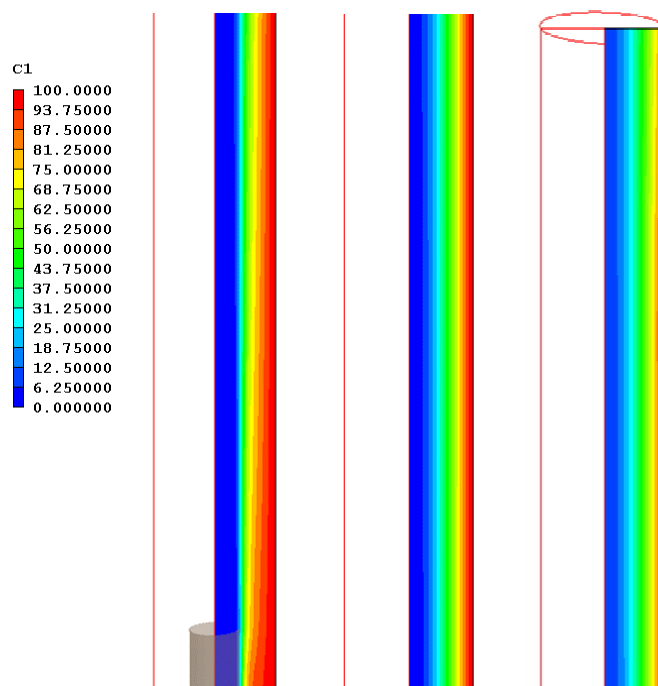


Figura 40 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de  $20,6 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,2 \text{ g.s}^{-1}$ .

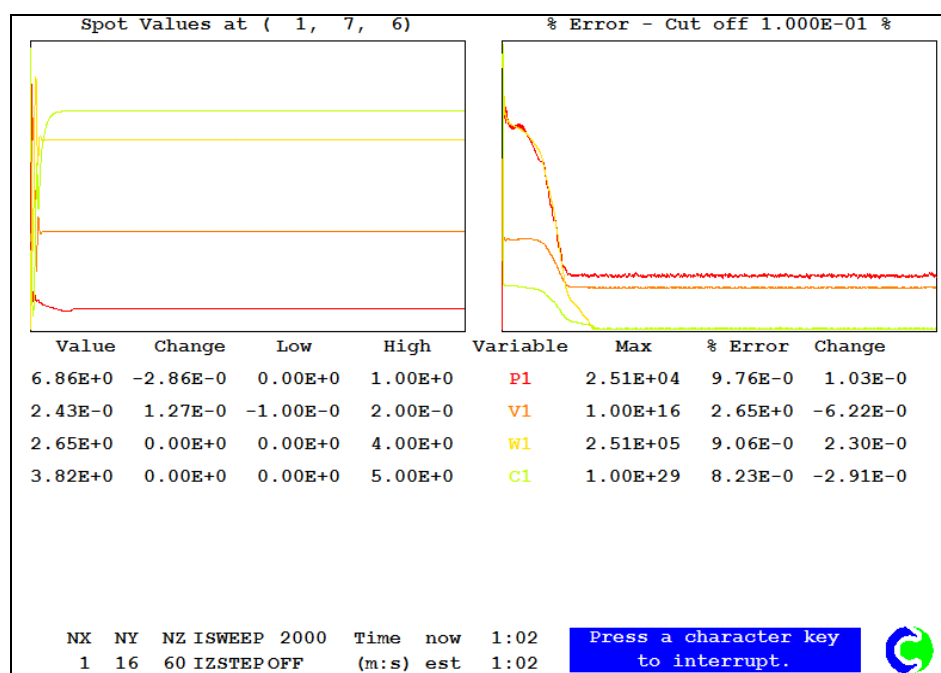


Figura 41 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu.

## Experimento 2

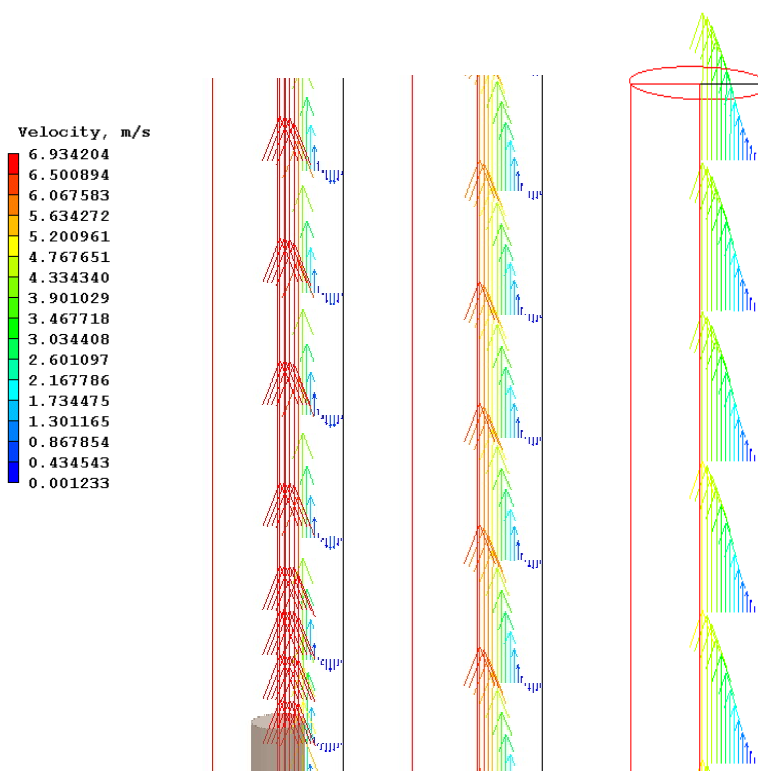


Figura 42 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 20,6 L.min<sup>-1</sup> e vazão de líquido de 1,8 g.s<sup>-1</sup>.

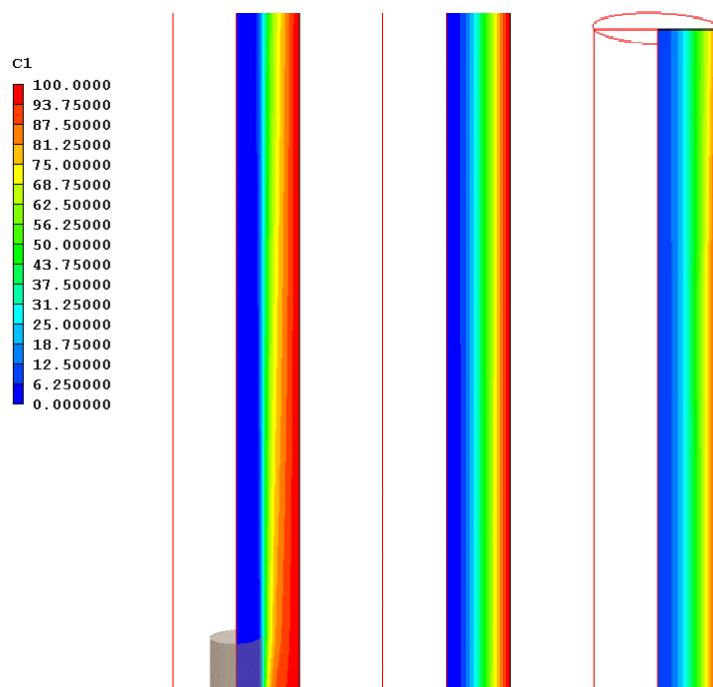


Figura 43 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 20,6 L.min<sup>-1</sup> e vazão de líquido de 1,8 g.s<sup>-1</sup>.

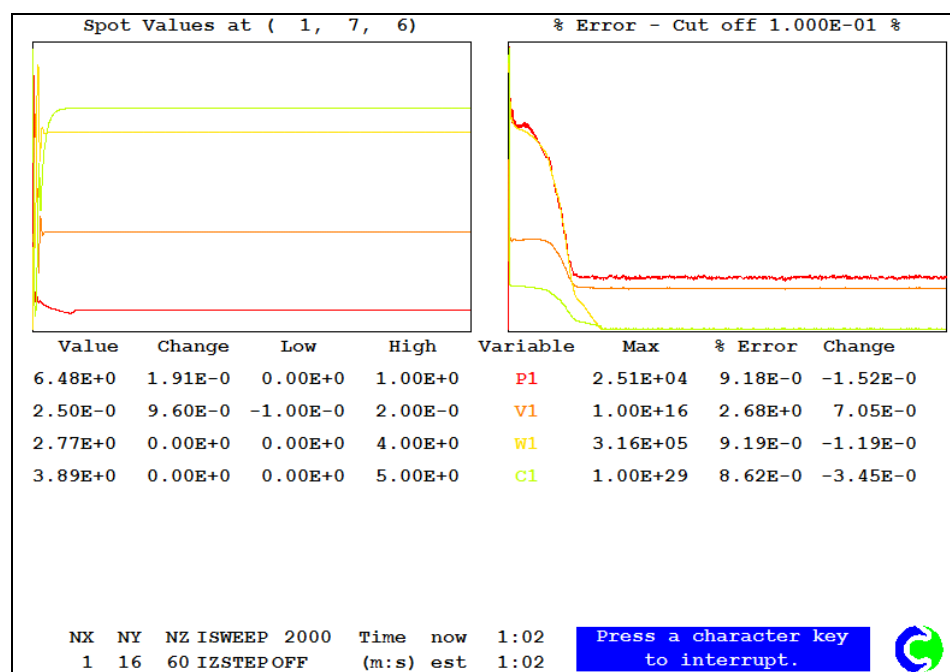


Figura 44 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu.

### Experimento 3

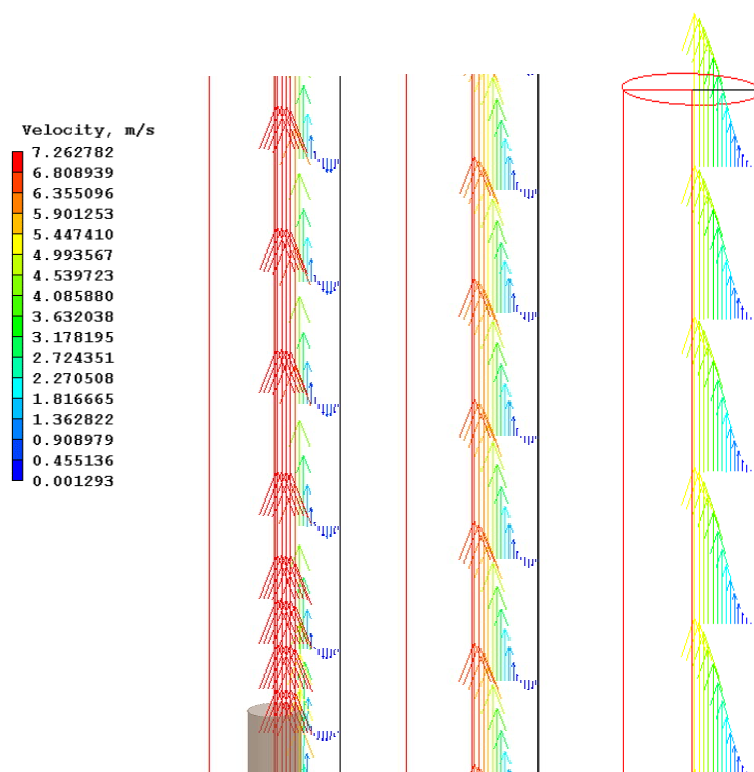


Figura 45 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de  $20,6 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ .

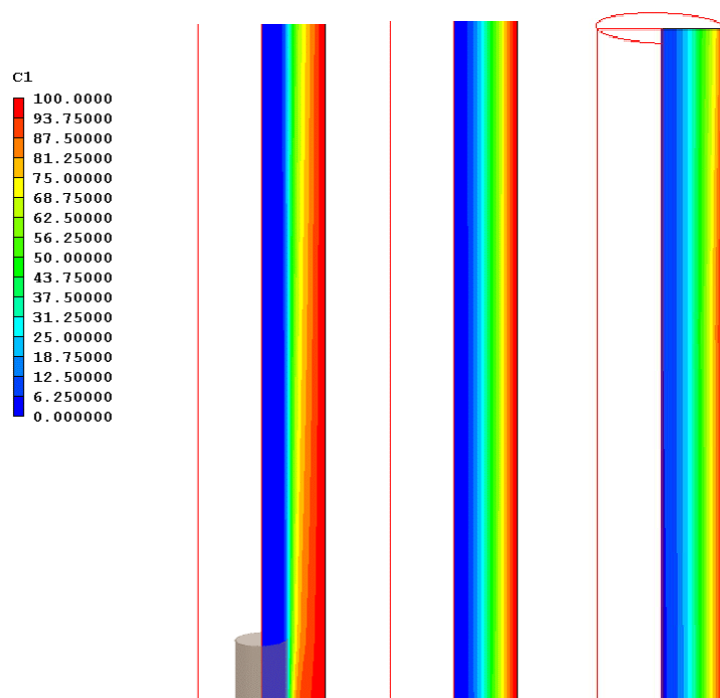


Figura 46 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de  $20,6 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ .

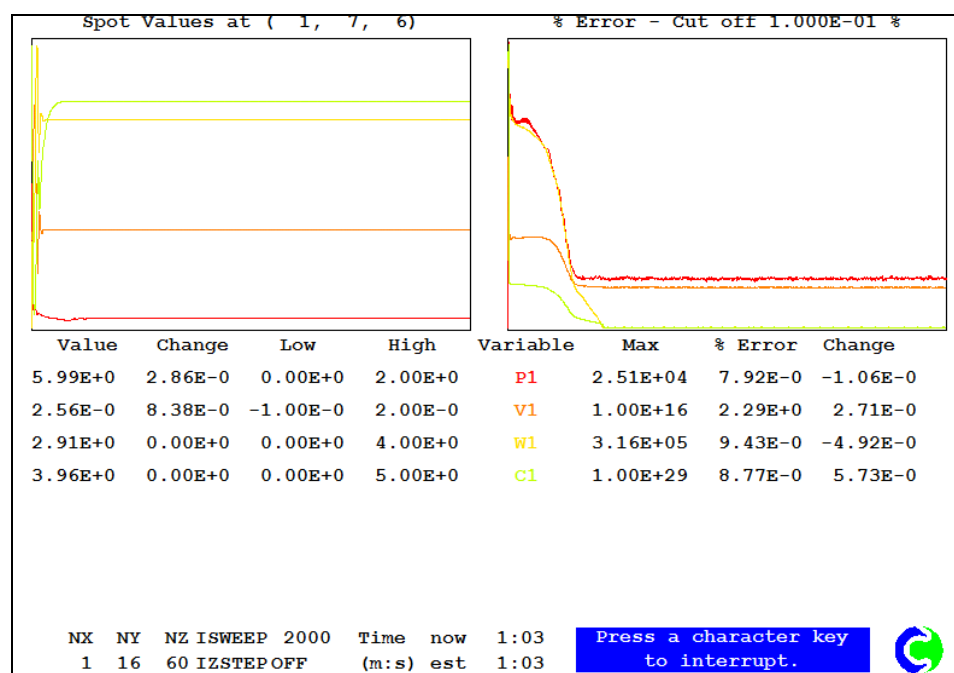


Figura 47 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu.

#### Experimento 4

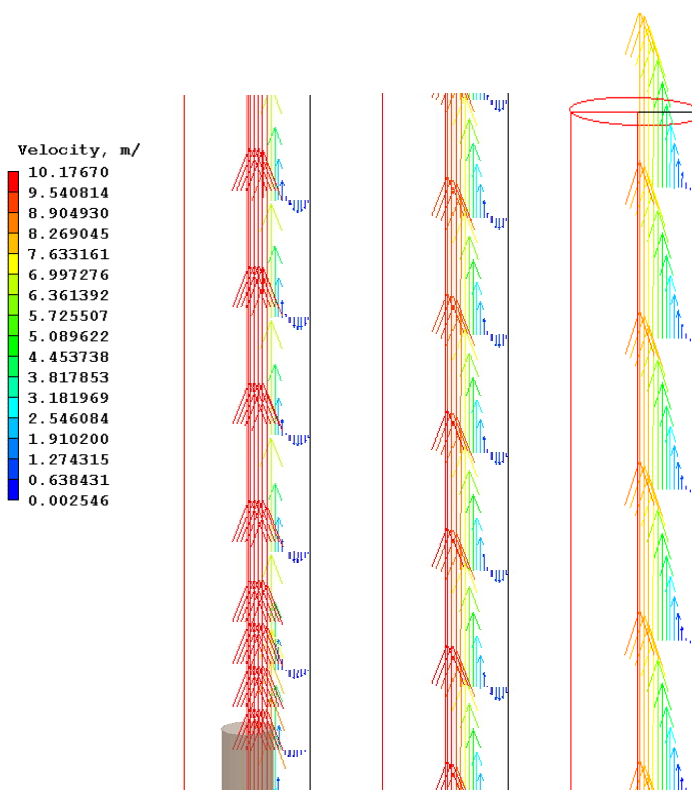


Figura 48 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de  $34,0 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,2 \text{ g.s}^{-1}$ .

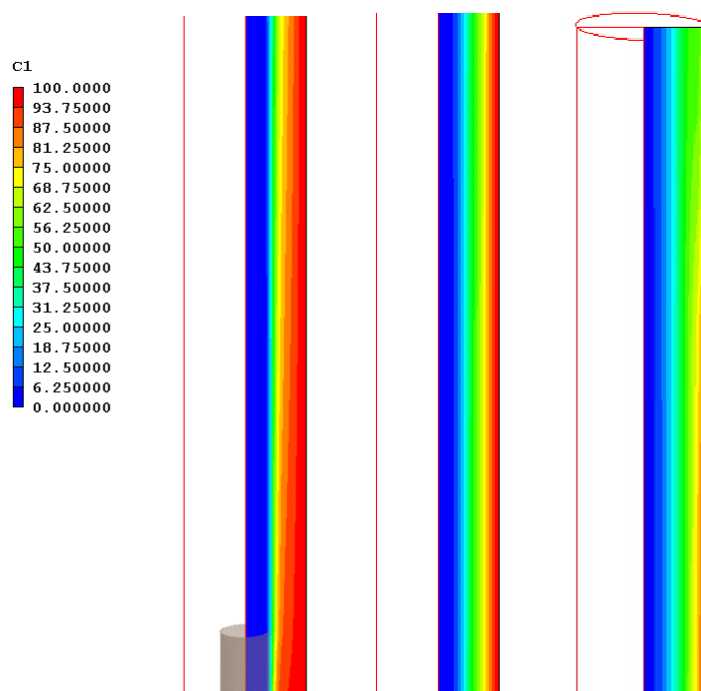


Figura 49 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 34,0 L.min<sup>-1</sup> e vazão de líquido de 1,2 g.s<sup>-1</sup>.

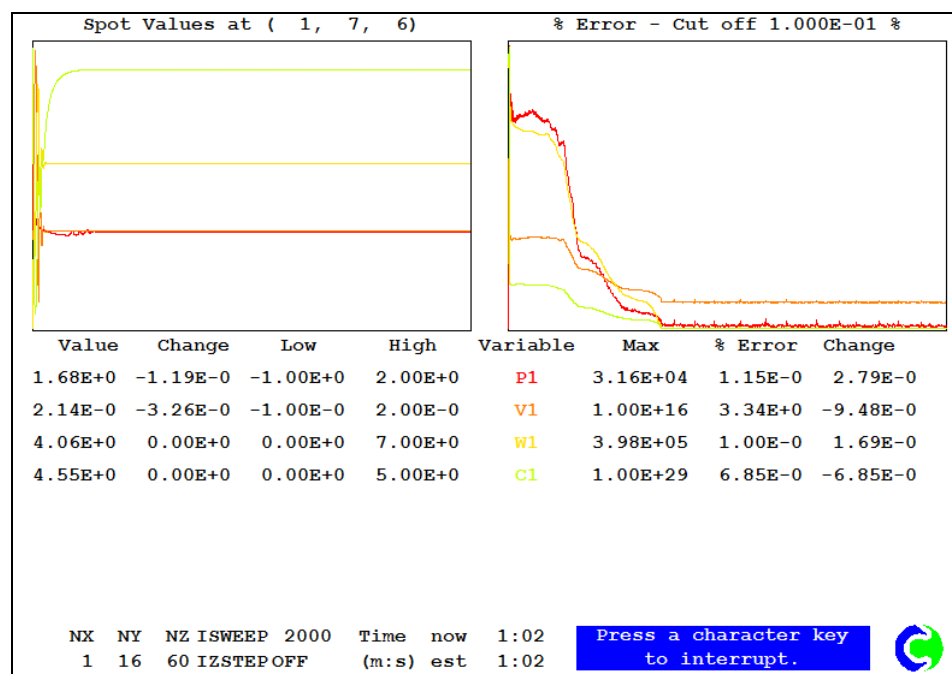


Figura 50 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu.

## Experimento 5

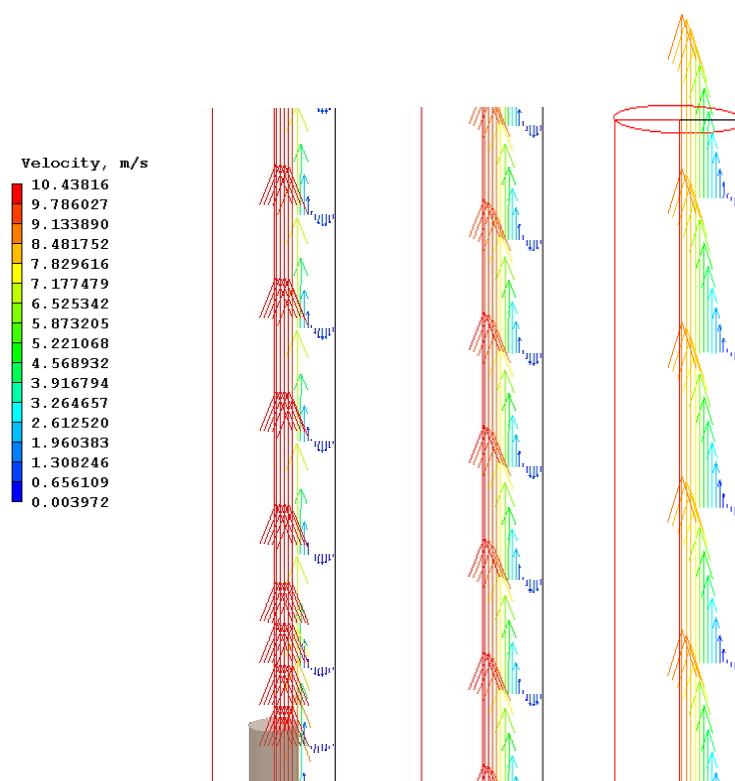


Figura 51 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de  $34,0 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,8 \text{ g.s}^{-1}$ .

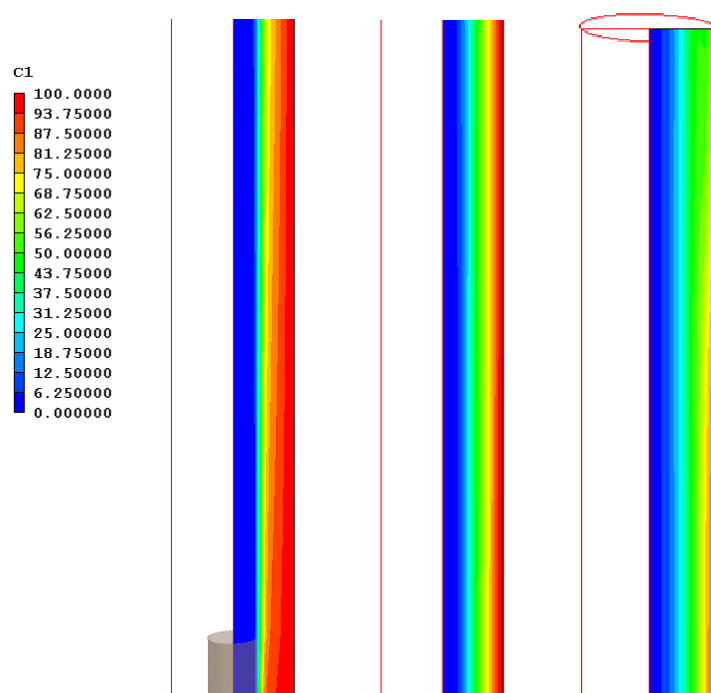


Figura 52 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de  $34,0 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $1,8 \text{ g.s}^{-1}$ .

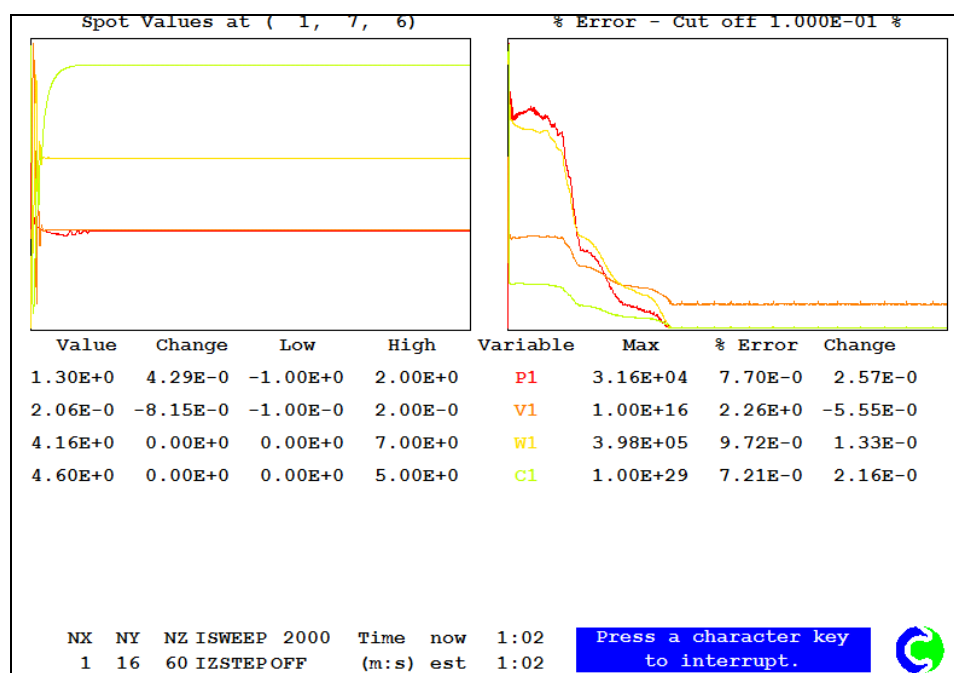


Figura 53 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu.

## Experimento 6

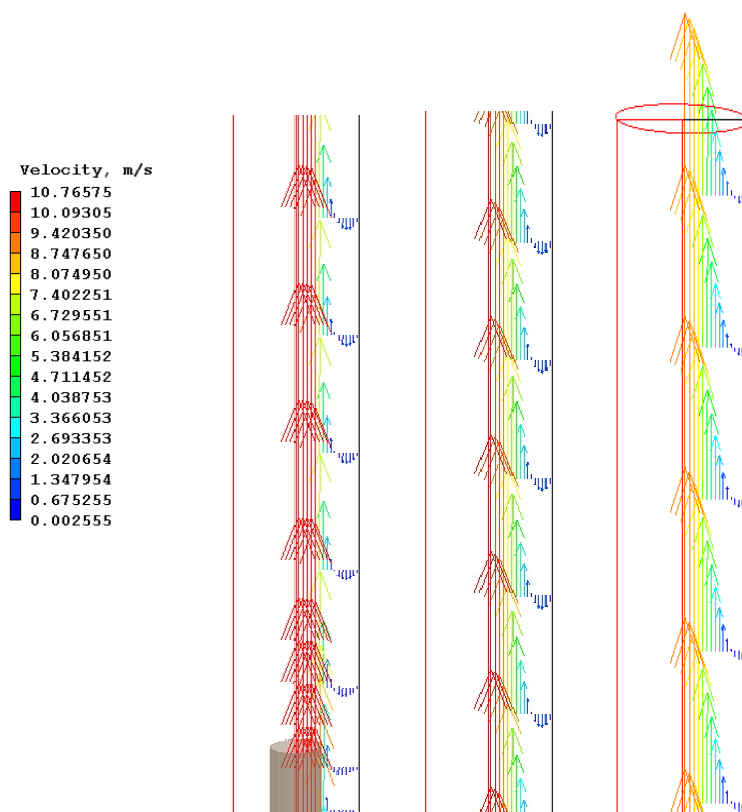


Figura 54 – Perfil de velocidades do gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de  $34,0 \text{ L.min}^{-1}$  e vazão de líquido de  $2,6 \text{ g.s}^{-1}$ .

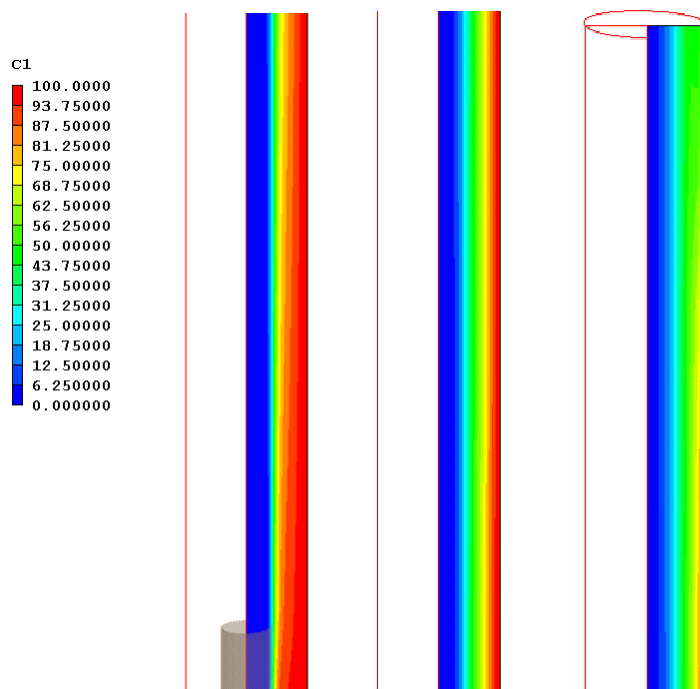


Figura 55 – Perfil de concentração no gás na entrada, na região intermediária e na saída da coluna, para a vazão de gás de 34,0 L.min<sup>-1</sup> e vazão de líquido de 2,6 g.s<sup>-1</sup>.

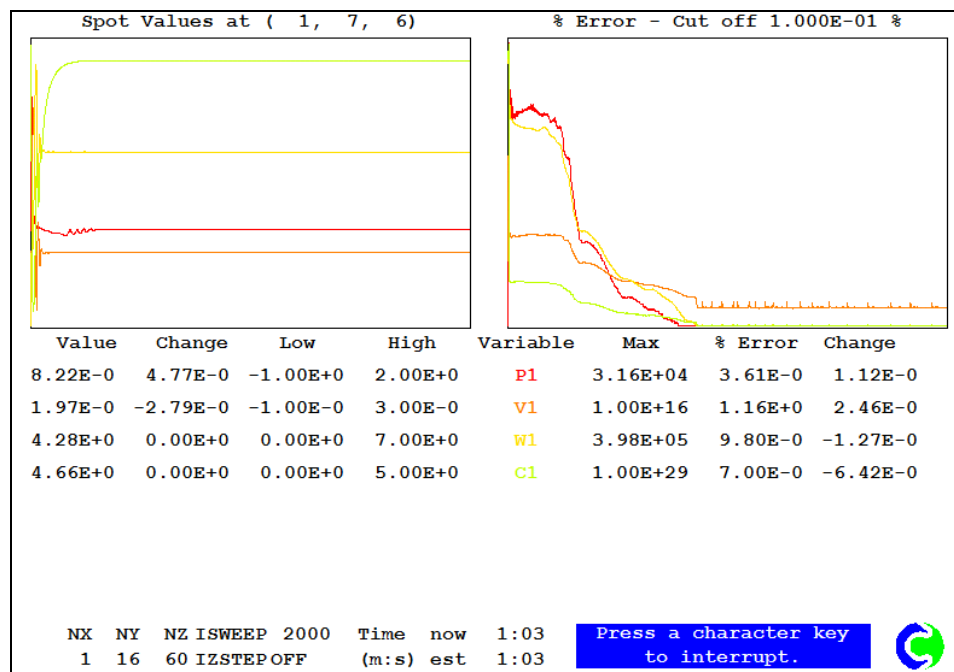


Figura 56 – Gráfico da simulação, mostrando que os erros tendem a zero e que os valores das variáveis não se alteram; ou seja, a simulação convergiu.

Para a análise dos resultados, foram calculadas a velocidade média do ar ( $V$ ) e a concentração bulk de etanol no ar na saída da coluna ( $C1_{\text{sai}}$ ), de acordo com as seguintes expressões:

$$V = \frac{1}{A} \iint \vec{v} \cdot d\vec{A} \quad (21)$$

$$C1_{\text{sai}} = \frac{1}{V} \iint \vec{v} \cdot C1 \cdot d\vec{A} \quad (22)$$

onde  $A$  é a área da seção transversal da coluna e

$$d\vec{A} = 2\pi r dr \quad (23)$$

As integrais duplas foram calculadas numericamente, calculando-se a soma dos valores de  $\vec{v} \cdot d\vec{A}$  e  $\vec{v} \cdot C1 \cdot d\vec{A}$  no centro de cada um dos 16 elementos da malha que discretiza a direção radial da coluna, sendo  $dr$  a largura (na direção radial) de cada elemento de volume. Apenas a componente axial do vetor velocidade  $\vec{v}$  é utilizada nos cálculos, já que a área utilizada para o cálculo da velocidade média é a área transversal, perpendicular à direção axial.

Calculado o valor de  $C1_{\text{sai}}$ , foi calculado o coeficiente de transporte de massa médio na coluna para a fase gasosa, pela expressão (10):

$$\bar{k}_G = -\frac{Q}{\pi DL} \ln \left( \frac{C1_{\text{int}} - C1_{\text{sai}}}{C1_{\text{int}}} \right)$$

onde  $C1_{\text{int}} = 100$  foi inserido como condição de contorno na simulação CFD através de um comando *InForm* para a coluna. Por se tratar de uma condição de contorno, insere-se na parede da coluna um comando *InForm* do tipo *Source* para a variável  $C1$ , com a condição de valor fixo (FIXV).

A Tabela 12 apresenta os resultados finais das simulações CFD.

**Tabela 12 – Resultados das simulações CFD.**

| Experimento | Velocidade bulk ( $\text{m.s}^{-1}$ ) | $C1_{\text{sai}}$ | $k_G$ ( $\text{m.s}^{-1}$ ) | $k_G \cdot a$ ( $\text{s}^{-1}$ ) |
|-------------|---------------------------------------|-------------------|-----------------------------|-----------------------------------|
| 1           | 1,05                                  | 31,0              | 0,00185                     | 0,336                             |
| 2           | 1,09                                  | 29,7              | 0,00183                     | 0,333                             |
| 3           | 1,15                                  | 28,2              | 0,00180                     | 0,328                             |
| 4           | 1,63                                  | 18,9              | 0,00162                     | 0,294                             |
| 5           | 1,67                                  | 18,3              | 0,00161                     | 0,292                             |
| 6           | 1,73                                  | 17,7              | 0,00160                     | 0,291                             |

## REFERÊNCIAS

CRAWFORD, M. E.; KAYS, W. M. **Convective Heat and Mass Transfer**. 3<sup>rd</sup> ed. McGraw-Hill, 1993, p. 83-84.

GREEN, D. W.; PERRY, R. H. **Perry's Chemical Engineers' Handbook**. 8<sup>th</sup> ed. McGraw-Hill, 2008.

HINES, A. L.; MADDIX, R. N. **Mass Transfer Fundamentals and Applications**. Prentice Hall, 1985.

KRETSCHMER, C.B.; WIEBE, R. **Liquid-Vapor Equilibrium of Ethanol-Toluene Solutions**. J. Am. Chem. Soc., 1949, 71, 1793-1797.

## **BIBLIOGRAFIA RECOMENDADA**

BENNETT, C. O.; MYERS, J. E. **Momentum, heat and mass transfer**. 3<sup>rd</sup> ed. McGraw-Hill, 1982.

MALISKA, C.R., **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2<sup>a</sup> ed. LTC, 2004.

PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Hemisphere Publishing Corp., 1980.

POLIS: PHOENICS On-Line Information System.

SKELLAND, A. H. P. **Diffusional Mass Transfer**. John Wiley & Sons, 1974.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. 2<sup>nd</sup> ed. Prentice Hall, 2007.