

**UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
BACHARELADO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**CAMILA MORES
FELIPE SELZER RAYMANN**

**ANÁLISE DO TEMPO DE RESIDÊNCIA EM FLUIDODINÂMICA
DE COLUNA BORBULHANTE PARA DIFERENTES PERFIS DE
ALIMENTAÇÃO**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

PONTA GROSSA

2014

**CAMILA MORES
FELIPE SELZER RAYMANN**

**ANÁLISE DO TEMPO DE RESIDÊNCIA EM FLUIDODINÂMICA
DE COLUNA BORBULHANTE PARA DIFERENTES PERFIS DE
ALIMENTAÇÃO**

Trabalho de conclusão de curso apresentado
como requisito parcial à obtenção de título de
Bacharel em Engenharia Química da
Universidade Tecnológica Federal do Paraná.

Orientadora: Prof^ª. Dr^ª. Elis Regina Duarte

PONTA GROSSA

2014



TERMO DE APROVAÇÃO

**ANÁLISE DO TEMPO DE RESIDÊNCIA EM FLUIDODINÂMICA DE COLUNA BORBULHANTE
PARA DIFERENTES PERFIS DE ALIMENTAÇÃO**

por

CAMILA MORES

FELIPE SELZER RAYMANN

Monografia apresentada no dia 21 de novembro de 2014 ao Curso de Engenharia Química da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Câmpus Ponta Grossa. O candidato foi arguido pela Banca Examinadora composta pelos professores abaixo assinados. Após deliberação, a Banca Examinadora considerou o trabalho APROVADO.

Prof^a. Dr^a. Juliana Martins Teixeira de Abreu Pietrobelli
(UTFPR)

Prof. Dr. Everton Moraes Matos
(UTFPR)

Prof^a. Dr^a. Elis Regina Duarte
(UTFPR)
Orientador

Prof^a. Dra. Juliana Martins Teixeira de Abreu Pietrobelli
Responsável pelo TCC do Curso de Engenharia Química

A Folha de Aprovação assinada encontra-se na Coordenação do Curso.

Dedicamos este trabalho primeiramente a Deus, por ser essencial em nossas vidas, autor de nossos destinos, e às nossas famílias que, com muito carinho e apoio, não mediram esforços para que nós chegássemos até esta etapa de nossas vidas.

Agradecimentos

Primeiramente a Deus que permitiu que tudo isso acontecesse, ao longo de nossas vidas, e não somente nestes anos como universitários, mas que em todos os momentos é o maior mestre que alguém pode conhecer.

A esta universidade, seu corpo docente, direção e administração que oportunizaram a janela que hoje vislumbramos um horizonte superior.

Agradecemos a todos os professores por nos proporcionar o conhecimento não apenas racional, mas a manifestação do caráter e afetividade da educação no processo de formação profissional, por tanto que se dedicaram a nós, não somente por terem nos ensinado, mas por terem nos feito aprender. A palavra mestre, nunca fará justiça aos professores dedicados aos quais sem nominar terão os nossos eternos agradecimentos.

Ao Prof. Dr. Everton Moraes de Matos e a Prof. Dr.^a Elis Regina Duarte pela orientação, apoio e confiança.

Aos nossos pais, pelo amor, incentivo e apoio incondicional.

Nossos agradecimentos aos amigos, companheiros de trabalhos e irmãos na amizade que fizeram parte da nossa caminhada e que vão continuar presentes em nossas vidas com certeza.

A todos que direta ou indiretamente fizeram parte da nossa formação, o nosso muito obrigado.

Resumo

MORES, Camila; RAYMANN, Felipe Selzer. **Análise do tempo de residência em fluidodinâmica de coluna borbulhante para diferentes perfis de alimentação.** 2014. 70 folhas. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Ponta Grossa, 2014.

O estudo da fluidodinâmica em colunas de bolhas é uma condição primordial para a otimização de tais equipamentos. O seu aperfeiçoamento garante que sejam alcançadas maiores taxas de conversão em reatores desse tipo, o que garante um produto com melhores especificações e com maior valor de mercado. Uma interpretação do escoamento multifásico com alimentação na forma de pulsos é avaliada utilizando a técnica da fluidodinâmica computacional, na qual foram conduzidas simulações tridimensionais, transientes, turbulentas e bifásicas. Os parâmetros que foram utilizados para análise fluidodinâmica foram a distribuição da fração volumétrica de ar ao longo da coluna e a distribuição do tempo de residência, este determinado pela injeção de um traçador inerte. Foram conduzidas quatro simulações, dentre as quais três correspondem a alimentação com vazão variável e uma com alimentação contínua. O uso da alimentação em forma de pulsos garantiu que vórtices fossem criados entre os fluidos, condição que pode aumentar ou diminuir a distribuição do tempo de residência de acordo com os resultados encontrados. O trabalho proporciona uma importante via para a otimização de colunas borbulhante, sem que seja necessário grandes modificações, o que amplia a utilização dessa técnica também para dispositivos já em operação.

Palavras-chave: coluna de bolhas, fluidodinâmica computacional, distribuição do tempo de residência, otimização de equipamentos.

Abstract

MORES, Camila; RAYMANN, Felipe Selzer. **Analysis of residence time in fluid dynamic of bubble column for different feed flow**. 2014. 70 sheets. Final Project (Bachelor in Chemical Engineering) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Ponta Grossa, 2014.

The study of fluid dynamics in bubble columns is an essential condition to the optimization of these equipments. Its improvement ensures that higher conversion rates are achieved in reactors of this type, which ensures a product with better specifications and increased market value. An interpretation of multiphase flow with feed in the form of pulses is evaluated using the technique of computational fluid dynamics, in which three-dimensional, transient, and turbulent two-phase simulations were conducted. Parameters that were used for fluid dynamics analysis were the volume fraction distribution of air throughout the column and the distribution of the residence time, determined by this injection of an inert tracer. Four simulations are conducted, among which three correspond to variable feed flow and one with continuous feeding. The use of feed in the form of pulses ensured that vortices to be created between the fluids, a condition that can increase or decrease the residence time distribution according to the results. The work provides an important avenue for the optimization of bubbling columns, without major modifications, which expands the use of this technique also for devices already in operation.

Keywords: bubble column, computational fluid dynamics, residence time distribution, equipment optimization.

Lista de Figuras

Figura 2. 1 – Fração volumétrica de gás em função de sua velocidade superficial. .	20
Figura 2. 2 – Regimes de escoamento de bolhas	21
Figura 2. 3 – Regimes de fluxos gasosos.....	22
Figura 2. 4 – Formas de bolhas	23
Figura 2. 5 – Regimes de formas geométricas de bolhas.....	24
Figura 2. 6 – Representação de tipos de injeção de traçador.....	28
Figura 2. 7 – Representação de um estímulo tipo pulso e a respectiva curva resposta.	29
Figura 3. 1 – Volume de controle para coordenadas cilíndricas	36
Figura 3. 2 – Coordenadas cilíndricas	37
Figura 3. 3 – Representação de volumes de controle	44
Figura 4. 1 – Geometria da coluna borbulhante	45
Figura 4. 2 – Malha numérica, vista da coluna e entrada da coluna	47
Figura 5. 1 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 0,5 m para o Caso 1	55
Figura 5. 2 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 2,5 m para o Caso 1	55
Figura 5. 3 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 4 m para o Caso 1	56
Figura 5. 4 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 0,5 m para o Caso 2	57
Figura 5. 5 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 2,5 m para o Caso 2	58
Figura 5. 6 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 4 m para o Caso 2	58
Figura 5. 7 – Comparação entre Fração volumétrica de ar em 4 m e 20 s para os Casos 1 e 2.....	59

Figura 5. 8 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 0,5 m para o Caso 3	60
Figura 5. 9 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 2,5 m para o Caso 3	61
Figura 5. 10 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 4 m para o Caso 3	61
Figura 5. 11 – Comparação entre Fração volumétrica de ar em 2,5 m e 50 s para os Casos 2 e 3	62
Figura 5. 12 – Comparação entre Fração volumétrica de ar em 4 m e 50 s para os Casos 2 e 3	62
Figura 5. 13 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 0,5 m para o Caso 4	63
Figura 5. 14 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 2,5 m para o Caso 4	64
Figura 5. 15 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 4 m para o Caso 4	64

Lista de Gráficos

Gráfico 4. 1 – Vazão de alimentação constante para o Caso 1.....	48
Gráfico 4. 2 – Vazão de alimentação variável para o Caso 2	49
Gráfico 4. 3 – Vazão de alimentação variável para o Caso 3	49
Gráfico 4. 4 – Vazão de alimentação variável para o Caso 4	49
Gráfico 4. 5 – Velocidade de ar em função do raio para os diferentes tamanhos de malha	52
Gráfico 5. 1 – Distribuição do tempo de residência para os Casos 1 e 3.....	66
Gráfico 5. 2 – Distribuição do tempo de residência para diferentes pulsos.....	67

Lista de Tabelas

Tabela 4. 1– Propriedades físicas dos fluidos	50
Tabela 4. 2 – Descrição das malhas utilizadas.....	52

Lista de Símbolos

u_g	Velocidade superficial do gás
α_g	Fração volumétrica de gás
Re_b	Número de Reynolds da bolha
μ_l	Viscosidade dinâmica do líquido
ρ_l	Massa específica do líquido
u_l	Velocidade superficial do líquido
d_b	Diâmetro da bolha
σ	Tensão superficial entre o líquido e o gás
EO	Número de Eötvös
g	Aceleração da gravidade
t	Tempo
$c(t)$	Concentração
V_{fluido}	Volume do fluido
Q_{fluido}	Vazão volumétrica do fluido
$t_{méd}$	Tempo médio de residência
$t_{mín}$	Tempo Mínimo de residência
t_{pico}	Tempo de pico
\vec{F}	Vetor força
m	Massa
\vec{a}	Vetor aceleração
\vec{v}	Vetor velocidade
Δt	Varição do tempo
τ_T	Tensão total
A	Área
θ	Ângulo
r	Raio do cilindro
\vec{n}	Vetor ortogonal

u_r	Velocidade superficial na direção r
u_z	Velocidade superficial na direção z
u_θ	Velocidade superficial na direção θ
V_l	Volume do líquido
α_l	Fração volumétrica de líquido
$C_{D,lg(esfera)}$	Coefficiente de arraste para bolha tipo esfera
$C_{D,lg(touca)}$	Coefficiente de arraste para bolha tipo touca
ϕ	Variável genérica transportada
Γ	Difusividade
x_L	Dimensões do volume de controle
φ	Concentração de traçador
μ_T	Viscosidade turbulenta do fluido
σ_T	Número e Schmidt turbulento
Q_l	Vazão volumétrica do líquido

Sumário

<i>Capítulo 1</i>	15
<i>Introdução</i>	15
1.1. Problema	16
1.2. Objetivo geral	16
1.3. Objetivos específicos	16
1.4. Justificativa	17
1.5. Estrutura do trabalho	17
<i>Capítulo 2</i>	18
<i>Referencial Teórico</i>	18
2.1. Reator de coluna borbulhante	18
2.2. Fluidodinâmica de reatores de coluna borbulhante	19
2.3. Fatores que influenciam o rendimento da reação em reatores de coluna borbulhante	24
2.4. Fundamentos do Escoamento não Ideal	26
2.5. Distribuição do Tempo de Residência (DTR)	27
2.5.1. Traçadores	29
2.5.2. Tempos de residência característicos	30
2.6. Fluidodinâmica Computacional	30
<i>Capítulo 3</i>	33
<i>Modelagem Matemática e Método Numérico</i>	33
3.1. Fundamentação	33
3.2. Modelagem matemática	34
3.3. Força de arraste	40
3.4. Turbulência	42
3.5. Método Numérico	42
3.5.1. Método dos Volumes Finitos	43
<i>Capítulo 4</i>	45
<i>Simulações e Métodos</i>	45
4.1. Geometria e Malha Numérica	45
4.2. Condições de Contorno	48
4.3. Propriedades dos fluidos	50

4.4. Condições iniciais e numéricas da simulação	50
4.5. Determinação do Tempo de Residência	50
4.6. Teste de malha	51
<i>Capítulo 5</i>	54
<i>Resultados e Discussão</i>	54
5.1. Comparação entre vazão de alimentação constante e vazão de alimentação variável.....	54
5.1.1. Caso 1	54
5.1.2. Caso 2.....	56
5.1.3. Caso 3.....	59
5.1.4. Caso 4.....	62
5.1.5. Comparação entre as distribuições de tempo de residência.....	65
5.2. Panorama geral sobre os resultados.....	67
<i>Capítulo 6</i>	69
<i>Conclusões</i>	69
6.1 Sugestões para trabalhos futuros.....	71
<i>Referências Bibliográficas</i>	72

Capítulo 1

Introdução

Os reatores de coluna borbulhante vem sendo utilizados em várias aplicações nas indústrias químicas, seu uso é registrado principalmente em processos que envolvem reações de oxidação e hidrogenação, as quais na indústria petroquímica são também conhecidas como reações de hidrotratamento (HDT) (GUANG LI, 2009; KANTARCI, 2005).

Tais reações consistem em um processo do refino de petróleo onde há inserção de gás hidrogênio nas correntes de hidrocarbonetos com grandes cadeias para a sua conversão em moléculas de menor massa molecular, as quais possuem um maior valor econômico. Este tipo de reação converte moléculas grandes e menos valorosas, como é o caso do asfalto, em moléculas pequenas e mais valorosas, como é o caso da gasolina e lubrificantes.

Apesar dos reatores de coluna borbulhante serem de fácil concepção, estes sofrem influência de uma série de fatores, como é o caso da geometria, forma de alimentação e parâmetros operacionais, as quais podem ser otimizadas visando garantir um aumento no nível de conversão da reação e conseqüentemente um aumento no rendimento da reação, garantindo um produto com melhores especificações.

Quando se trata do aumento do rendimento de uma reação, avalia-se não somente o lucro obtido pelo alcance de uma maior quantidade de produtos com um maior valor econômico, mas também a redução com o tratamento de subprodutos da reação que teriam que ser tratados antes de se efetuar um possível descarte.

Com a finalidade de buscar um melhor entendimento de como os parâmetros geométricos afetam o escoamento no interior de coluna de bolhas, alguns estudos envolvendo a fluidodinâmica computacional vem sendo aplicado, como apresentam Law e colaboradores (2008) e Kantarci e colaboradores (2005). A possibilidade de se

realizar pequenas alterações em reatores já em operação, que resultarão em um aumento no rendimento das reações, justificam uma série de estudos com tal finalidade.

A avaliação da forma de alimentação nesse tipo de reator procura demonstrar a possibilidade de um método que permita o aumento das taxas de transferência de calor e massa, o que se obtém por meio da ampliação da área de troca térmica, como ocorre na alimentação em forma de pulsos. Neste tipo de alimentação, a formação de bolhas de menor diâmetro proporciona maior contato entre fases, pois haverá maior área de contato do gás reagindo com o fluido, embora mantendo-se a mesma vazão de ambos.

Com base em tal contextualização a problemática que se apresenta é a seguinte:

1.1. Problema

Alterando a forma de alimentação de um reagente em reatores de coluna borbulhante é possível aumentar o nível de conversão da reação aumentando o tempo de residência?

1.2. Objetivo geral

Analisar a influência da forma de alimentação em pulsos em reatores de coluna borbulhante a fim de aumentar o rendimento da reação aumentando o tempo de residência.

1.3. Objetivos específicos

- Fazer a geometria;
- Desenvolvimento de um modelo matemático que se adapte ao problema proposto;
- Simular o modelo proposto utilizando o *software* CFX 14.0;
- Avaliar as possibilidades da alteração na vazão e suas consequências a fim de verificar modificações na conversão.

1.4. Justificativa

Uma solução para a problemática é aumentar o número de vórtices presentes na fase líquida, dentro da coluna. Isto é possível ao ser alimentando o líquido na forma de pulsos, que criam uma zona de alta pressão na frente e uma zona de baixa pressão atrás.

A avaliação do aumento do tempo de residência através dos pulsos permitirá analisar se houve aumento no grau de avanço de reação, contribuindo para a formação de produtos de maior interesse econômico, além de evitar a formação de subprodutos.

1.5. Estrutura do trabalho

Este Trabalho de Conclusão de Curso é composto por seis capítulos organizados conforme a estrutura a seguir:

- Capítulo 1 – Introdução
- Capítulo 2 – Referencial Teórico
- Capítulo 3 – Modelagem Matemática e Método Numérico
- Capítulo 4 – Simulação e Métodos
- Capítulo 5 – Resultados e Discussão
- Capítulo 6 – Conclusões

Capítulo 2

Referencial Teórico

2.1. Reator de coluna borbulhante

Reações do tipo gás-líquido são frequentemente utilizadas na produção de produtos químicos e bioquímicos (BHATT, 2010; KANTARCI, 2005). Neste tipo de reação, o gás é disperso no líquido em tanques agitados ou mais comumente em reatores de coluna de bolhas, a qual é empregada em diversos campos da indústria tais como: reações de oxidação como a do cumeno, tolueno, butano, xileno (DECKWER, 1992), alquilação, polimerização e hidrogenação (KANTARCI, 2005), tratamento de efluentes, liquefação de carvão, reações biológicas como a de fermentação (LAW et al., 2008), produção de enzimas, proteínas e antibióticos (KANTARCI, 2005), na separação de CH_4 , do isobutano proveniente do craqueamento, produção de dicloroetano, produção de ácido acético a partir da carbonização do metanol (DECKWER, 1992), na indústria nuclear.

Os reatores de coluna borbulhante, também conhecidos como reatores coluna de lama borbulhante, são vasos cilíndricos verticais dotados de um distribuidor de gás em sua base, com relação de altura/diâmetro entre 1,5 e 20. Esses valores são dependentes de qual a aplicação do reator, na indústria é recorrente encontrar aplicações com valores de no mínimo 5, enquanto que em reatores bioquímicos este valor é menor, no intervalo de 2 a 5 (KANTARCI, 2005). A possibilidade de se ter um diâmetro maior está diretamente relacionada a maiores quantidades de gás injetado no sistema. Reatores com amplas alturas permitem que o contato entre os reagente aconteça por um tempo maior, aumentando a taxa de conversão da reação, porém colunas altas tornam-se operacionalmente inviáveis de se manusear. Logo, para se realizar um bom projeto de coluna borbulhante o caminho é encontrar o equilíbrio entre estas duas variáveis geométricas do sistema.

Colunas borbulhantes podem operar em batelada, semi-batelada ou de modo contínuo. À medida que ocorre a alimentação do gás e este entra em contato com a fase líquida, as bolhas adquirem um comportamento ascendente, sendo que o tamanho destas depende principalmente da taxa de fluxo de gás e das propriedades físicas do líquido (HARRIOTT, 2003).

As altas taxas de transferência de calor e massa, a baixa necessidade de manutenção e os baixos custos de operação devido ao baixo número de peças móveis são vantagens que justificam a ampla gama de aplicações deste tipo de reator em relação a outros tipos de reatores (KANTARCI, 2005).

Em geral, o projeto de um reator de coluna borbulhante depende de três fatores principais: as características da transferência de calor e massa, as características da mistura e a cinética química (GUANG LI, 2009).

Pesquisas recentes envolvendo reatores de coluna de bolha normalmente abordam tópicos sobre *hold up* do gás, o qual corresponde a fração de volume da fase gasosa ocupada pelas bolhas, características da bolha, coeficientes de transferência de calor e massa relacionando-os com a fluidodinâmica computacional (CFD), os efeitos da velocidade de alimentação do gás, propriedades do líquido, condições de operação, dimensões e geometria da coluna bem como do distribuidor de gás.

2.2. Fluidodinâmica de reatores de coluna borbulhante

Reatores de coluna de bolhas operam em vários regimes de escoamento multifásico, os quais afetam a performance desses equipamentos. Dessa forma, a caracterização fluidodinâmica tem um efeito significativo em reatores desse tipo, onde seus regimes são classificados de acordo com a velocidade superficial do gás utilizado na coluna. São três os principais tipos de regimes de escoamento: homogêneo, heterogêneo e *slug* (KANTARCI, 2005).

A Figura 2.1 demonstra a relação entre fração volumétrica global do gás e sua velocidade superficial. Esta relação é bastante utilizada na identificação do regime de operação da coluna.

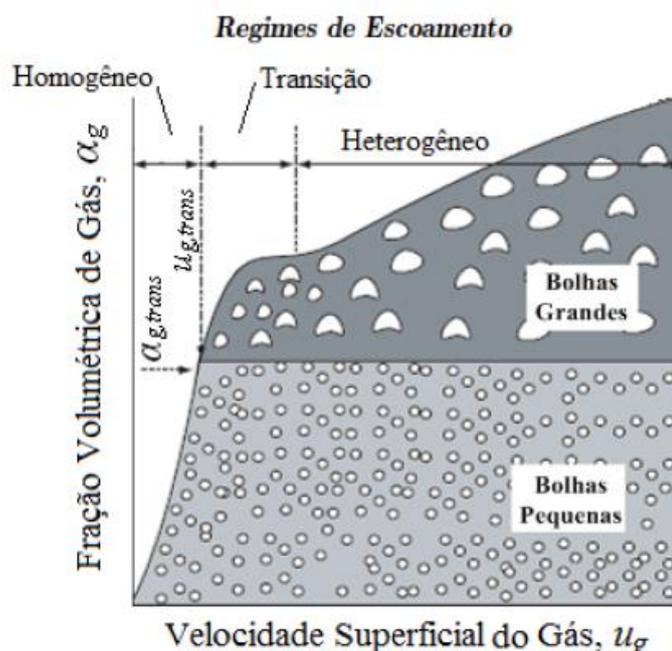


Figura 2.1 – Fração volumétrica de gás em função de sua velocidade superficial.
Fonte: Adaptado de KRISHNA, 2000

O regime de escoamento homogêneo, também conhecido como borbulhante, ocorre com baixas velocidade do gás, tendo assim uma menor velocidade de ascensão, caracterizando-se por bolhas pequenas e com comportamento uniforme, sem que haja coalescência ou quebra destas ao longo do reator, ou seja, o tamanho das bolhas depende somente da forma de alimentação do gás. Neste regime a velocidade superficial do gás normalmente é inferior a 5 cm/s. O *hold up* do gás aumenta em razão linear ao aumento da velocidade superficial gasosa, como observado na Figura 2.1, permanecendo constante em relação a sua posição radial, dependendo do distribuidor utilizado (KANTARCI, 2005).

No entanto, o aumento da velocidade do gás, provoca o aparecimento de interações não lineares entre as bolhas, conseqüentemente a relação perde sua linearidade, e a curva sofre uma mudança em sua inclinação, sendo esta, identificada como o ponto de transição entre os regimes. A fração volumétrica do gás, onde se inicia a transição entre os regimes, é conhecida também por fração volumétrica crítica do gás. Em alguns casos, a mudança de inclinação na curva α_g versus a velocidade superficial do gás é muito suave, dificultando a definição do ponto de transição, nestes casos, outros métodos, como por exemplo, o modelo drift-flux de Zuber e Findlay

(1969) ou Wallis (1969), podem ser utilizados na investigação dos regimes de operação.

O regime heterogêneo, turbulento ou *churn-turbulent* é mantido com velocidades do gás maiores que do escoamento borbulhante, ou seja, acima de 5 cm/s. Observa-se a formação de bolhas grandes, com tempo de residência curto e padrões de fluxo instáveis, que acarretam num aumento da turbulência e da taxa de recirculação da fase líquida na coluna, e em virtude disso a ocorrência de fenômenos de coalescência e quebra das bolhas.

O regime *slug* é observado em colunas de diâmetros menores (até 15 cm), normalmente em escala laboratorial com altas taxas de fluxo de gás.

A Figura 2.2 apresenta um desenho esquemático dos diferentes regimes que operam em reatores de coluna borbulhante.

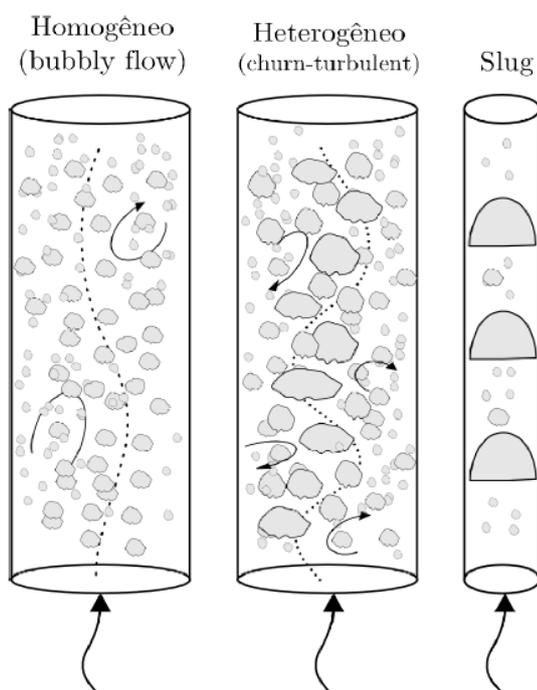


Figura 2. 2 – Regimes de escoamento de bolhas
Fonte: KANTARCI, 2005

A medida que a transição entre os regimes ocorre, algumas mudanças significativas são observadas no comportamento fluidodinâmico do sistema. Existe um início de circulação de líquido para cima, no centro da coluna e de circulação de líquido para baixo, perto da parede da coluna. Este fato resulta em uma maior entrada de gás no centro, levando a não uniformidade de *hold up* do gás na coluna.

A Figura 2.3 apresenta uma associação dos regimes de escoamento e suas relação entre a velocidade do gás e o diâmetro da coluna. Nota-se que independentemente do diâmetro da coluna, a baixas velocidades superficiais de gás, o regime estabelecido na coluna de bolhas é o homogêneo. Conforme se aumenta a velocidade da fase gasosa, dois regimes podem ocorrer: para colunas de diâmetros pequenos, o regime pistonado se desenvolve na coluna. Enquanto que para diâmetros maiores, o regime heterogêneo se estabelece na coluna de bolhas.

Uma característica adicional extraída do gráfico, consiste na região de transição recorrente no sistema quando há a passagem de um regime de escoamento para outro. Além disso, é notável a existência de uma faixa de diâmetro de coluna de bolhas, para a qual o aumento na velocidade superficial de gás acarreta na passagem do regime homogêneo à região de transição e a partir de então, o regime de escoamento na coluna permanece sempre na região de transição.

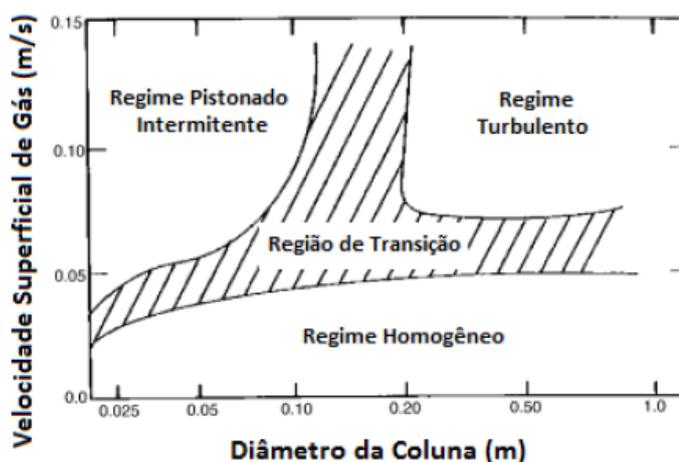


Figura 2. 3 – Regimes de fluxos gasosos
Fonte: KANTARCI, 2005

Outra importante característica do escoamento em colunas de bolhas está no fato da diversidade de formas que as bolhas possuem, onde a interação entre elas ocorre de maneira diferente para cada forma. De acordo com Clift e colaboradores (1978) as formas mais comuns são apresentadas na Figura 2.4:

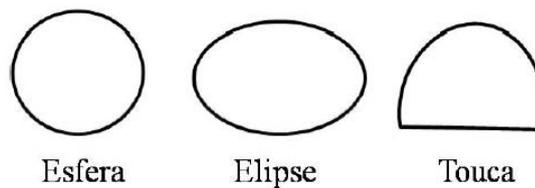


Figura 2. 4 – Formas de bolhas
Fonte: KANTARCI, 2005

- Esféricas: pode-se considerar bolhas em formato esférico aquelas que apresentam razão entre o eixo menor e o eixo maior até 0,9. Habitualmente tais bolhas apresentam nessa forma quando as forças de tensão ou viscosas são mais relevantes que as forças inerciais.
- Elipse: são consideradas bolhas com forma de elipse aquelas que apresentam seus polos achatados, estas sofrem dilatações periódicas, dificultando a caracterização de sua forma.
- Touca: a forma touca é atribuída quando as bolhas grandes que adquiriram uma base chata, remetendo às formas esféricas e elipsoidal que sofreram um corte transversal.

A caracterização do regime de bolhas pode ser realizado por meio da relação entre alguns números adimensionais, representados pelas equações 2.1 e 2.2.

- a) Número de Reynolds é um parâmetro muito utilizado na engenharia para descrever o escoamento, o número de Reynolds da bolha é dado por:

$$Re_b = \frac{\rho_l \cdot |u_l - u_g| \cdot d_b}{\mu_l} \quad (2.1)$$

- b) Número de Eötvös é um adimensional utilizado na modelagem de colunas de bolhas, quando estas assumem papel relevante no escoamento:

$$Eo = \frac{g \cdot |\rho_l - \rho_g| \cdot d_b^2}{\sigma} \quad (2.2)$$

em que d_b é o diâmetro da bolha e σ a tensão superficial entre o líquido e o gás.

A Figura 2.5 representa graficamente a correlação entre os parâmetros adimensionais citados anteriormente para a determinação da geometria da bolha predominante no escoamento. É notório que quando o regime é laminar e os efeitos

viscosos são relevantes, onde o número de Reynolds é baixo, a geometria da bolha é esférica. Conforme o número de Reynolds e o número de Eötvös aumentam, os efeitos de forma começam a exercer maior influência na geometria da bolha que os efeitos viscosos, fazendo com que a bolha sofra distorções em sua geometria.

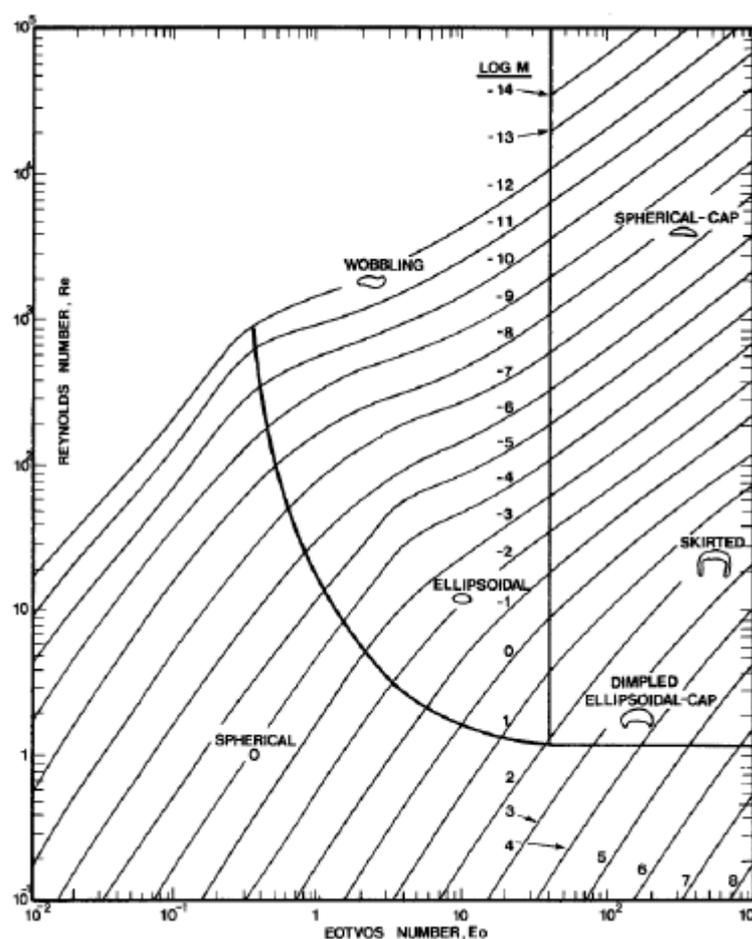


Figura 2. 5 – Regimes de formas geométricas de bolhas
Fonte: CLIFT, GRACE e WEBER, 1978 *apud* MORI, 2012

2.3. Fatores que influenciam o rendimento da reação em reatores de coluna borbulhante

Embora a construção de colunas de bolhas seja relativamente simples quando comparada com outros reatores, o projeto deve levar em conta características fluidodinâmicas e alguns parâmetro de projeto a fim de aumentar o rendimento da reação (KANTARCI, 2005).

Pode-se destacar como fatores que influenciam o rendimento da reação em reatores de coluna borbulhante o *hold up* do gás, velocidade superficial do gás e a geometria do reator.

Um dos fatores de grande influência em reatores borbulhantes é a velocidade superficial do gás que corresponde a velocidade média do gás que é injetado na coluna, expresso pela razão entre a vazão volumétrica e a área transversal da coluna. O aumento da velocidade do gás está diretamente relacionado com o *hold up* do gás.

O *hold up* do gás corresponde a um parâmetro adimensional que caracteriza os fenômenos de transporte em sistemas de coluna de bolha. É definido como o volume de fração de fase gasosa ocupada pelas bolhas, o qual tem influência sobre a recirculação do líquido dentro do reator, exercendo um papel importante na mistura e transferência de calor e massa entre as fases. Há vários métodos para se quantificar esta variável, desde uma simples medição da diferença de altura do líquido antes e depois da injeção de gás, até técnicas mais aprimoradas, como o método de diferença de pressão em diferentes pontos da coluna, ou por tomografia computadorizada (CT - *Computer Tomography*), técnica utilizada por Chen e colaboradores (1998) e Sanyal et al. (1999).

A variação do *hold up* do gás ao longo da coluna depende da velocidade superficial do gás, diâmetro da coluna, das propriedades físicas do sistema, dimensões da coluna e das condições de funcionamento.

A diferença de densidade entre as fases dispersa e contínua, através da injeção da fase gasosa no sistema, faz com que o movimento das bolhas sejam predominantemente ascendente, fazendo com que o líquido se movimente no mesmo sentido. Conforme as bolhas atravessam o leito, a fase líquida sofre deslocamento lateral, ocasionando a inversão no sentido do escoamento, ou seja, causando o surgimento de vórtices em regiões próximas a parede da coluna. Este fenômeno é conhecido como recirculação da fase contínua.

Deckwer (1992) afirma que mesmo que a injeção de gás na coluna seja feita uniformemente, irão existir gradientes de fração volumétrica de gás e de velocidade da fase líquida formados ao longo da seção transversal do leito. Este fato é devido ao comportamento das bolhas, as quais tendem a se concentrar na região central do sistema, com movimentação ascendente e arraste da fase contínua, além disso, bolhas grandes tendem a se dirigirem para tal região, devido a efeitos gravitacionais.

As propriedades da fase líquida também exercem um papel na formação e coalescência das bolhas. Com o aumento da viscosidade do líquido, percebe-se um crescente aumento das bolhas com um menor *hold up* de gás. A presença de tensoativos ou eletrólitos no líquido aumentam o *hold up* principalmente para gases com maiores densidades.

Condições de operação também tem influência sobre o rendimento da reação. Para pressões mais altas, tem-se na maioria das vezes uma elevação no *hold up* do gás. Já para a temperatura, seu efeito não corresponde a um aumento significativo.

2.4. Fundamentos do Escoamento não Ideal

Há dois tipos de escoamento ideais de um fluido no interior de um reator: o escoamento pistonado e o escoamento com mistura perfeita. Apesar de proporcionarem comportamentos muito diferentes, a maioria dos projetos de equipamentos utiliza um dos dois tipos de escoamento, principalmente porque são considerados ideais e simples no tratamento matemático (LEVENSPIEL, 1972). O escoamento pistonado ocorre quando a velocidade do fluido é uniforme em toda a seção transversal do equipamento e, portanto, cada porção do fluido que alimenta o vaso escoam sem misturar-se com outras porções de fluido que foram admitidas antes ou depois. Ao contrário do escoamento pistonado, na mistura perfeita assume-se que o conteúdo do vaso é completamente homogêneo, em escala molecular, ou seja, não há diferenças entre as várias partes do reator e as propriedades da corrente de saída são idênticas às propriedades do fluido no seu interior.

Os modelos não ideais incorporam desvios da idealidade ocasionados por fenômenos de escoamento que podem ocorrer no interior dos equipamentos. Alguns fenômenos são:

- a) Escoamento preferencial – ocorre quando grandes quantidades de elementos do fluido escoam através do equipamento em tempo menor que outros;
- b) Zonas mortas – são regiões do equipamento isoladas ou inacessíveis, onde o fluido nelas aprisionados não interage com as regiões ativas. Ou seja, não há troca de matéria entre as regiões mortas e a fração ativa do equipamento;

- c) Zonas estagnantes – são regiões do equipamento onde o fluido aprisionado interage fracamente com a região ativa. A troca de matéria entre estas regiões ocorre lentamente;
- d) Reciclo – ocorre quando parcelas do fluido são recirculadas para a entrada ou ao interior do equipamento;
- e) Retromistura - ocorre quando parcelas do fluido apresentam movimento na direção contrária ao fluxo principal.

2.5. Distribuição do Tempo de Residência (DTR)

Tempo de residência é a quantidade média de tempo que uma partícula reside em um sistema em particular, ou seja, o tempo de residência de um reator é a caracterização ou medida do fluxo padrão das moléculas e quão elas demoram para percorrê-lo (RAWLING e EKERDT, 2002). O tempo de residência inicia a partir do momento em que uma partícula de uma determinada substância entra no sistema e termina no momento em que a mesma partícula de substância sai do sistema.

Concentração das substâncias, fluxo de entrada e saída e geometria do sistema são fatores relevantes na distribuição do tempo de residência deste mesmo sistema.

A distribuição do tempo de residência mede características dos fluxos, ideais ou não ideais, associados com os padrões de fluxo de massa em um reator ou outro equipamento de processo. Experimentos analisando o tempo de residência tem sido utilizados para explorar a fluidodinâmica de diversos processos químicos, incluindo reatores de leito fixo, reatores de bolhas, colunas de cromatografia, tanques agitados, colunas de destilação e de absorção (PAUL et. al, 2004).

O uso mais importante da teoria do tempo de residência é a sua aplicação aos equipamentos que já estão construídos e em funcionamento. A distribuição do tempo de residência é medido e, em seguida, analisado para entender o desempenho do sistema.

A técnica utilizada para analisar a DTR de um fluido num equipamento é a de estímulo-resposta, a qual consiste na injeção de uma substância quimicamente inerte, com características físicas semelhantes a um dos componentes da mistura que circula pelo sistema, denominado de traçador na entrada do dispositivo e observa-lo, em

forma de concentração, nas amostras coletadas na saída deste dispositivo. A injeção é feita de maneira conhecida, que pode ser na forma de pulso, degrau, aleatória, entre outras (FOGLER, 2002). Tais métodos estão ilustrados na Figura 2.6.

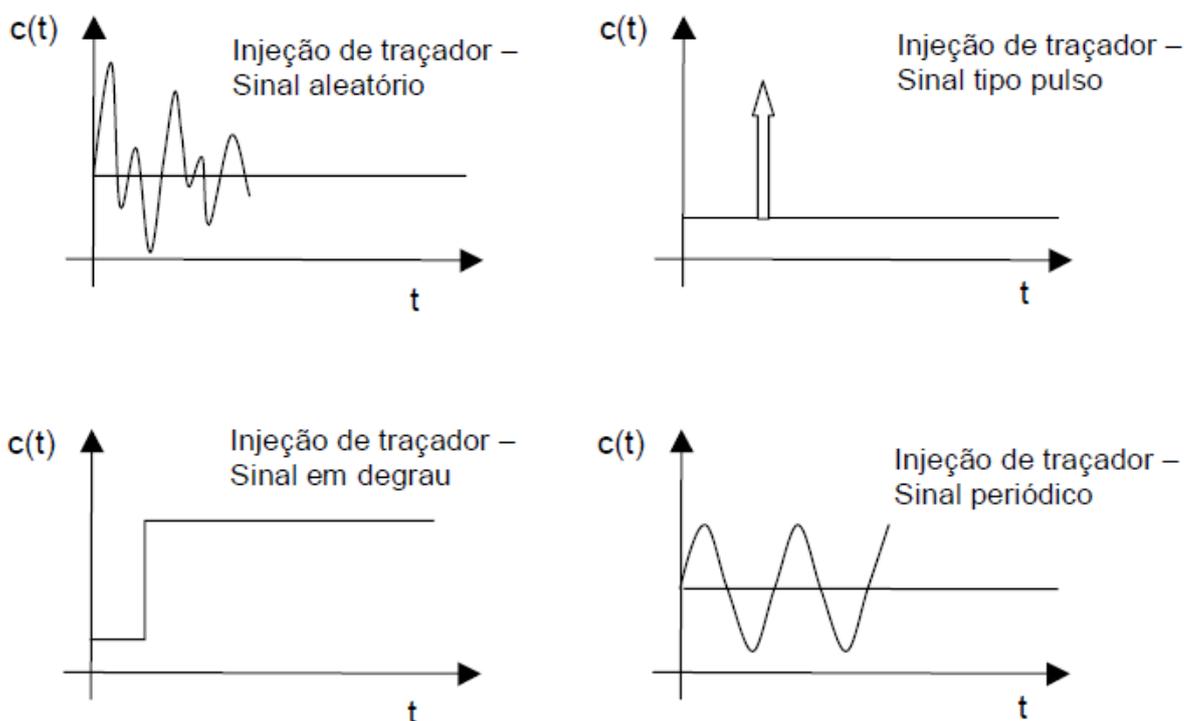


Figura 2. 6 – Representação de tipos de injeção de traçador.
Fonte: SASSAKI, 2005

Entre as substâncias utilizadas como traçador, as quais devem apresentar propriedades que facilitem sua detecção, aquelas de marcação por técnicas nucleares (radioativas) têm-se destacado por permitirem que sua concentração seja monitorada através das espessas paredes que compõem as colunas comerciais. Contudo, o planejamento dos experimentos necessários à utilização desse tipo de traçador deve envolver preparativo especial, visando à exatidão das medidas associada à segurança requerida (SANTOS e DANTAS, 2003).

As formas mais utilizadas de injeção do traçador são o de entrada do tipo degrau e de entrada tipo pulso. No tipo degrau, a injeção de traçador é contínua, na corrente de alimentação do reator. Já o segundo tipo de injeção, o tipo pulso, o traçador é injetado de uma única vez, em um tempo tão curto quanto possível. As interpretações dos comportamentos da concentração do traçador em função do

tempo, na entrada e na saída do reator, são necessárias à determinação da função DRT (SASSAKI, 2005).

A Figura 2.7 representa esquematicamente o estímulo tipo pulso aplicado à entrada de um tanque ou reator e a resposta obtida à sua saída.

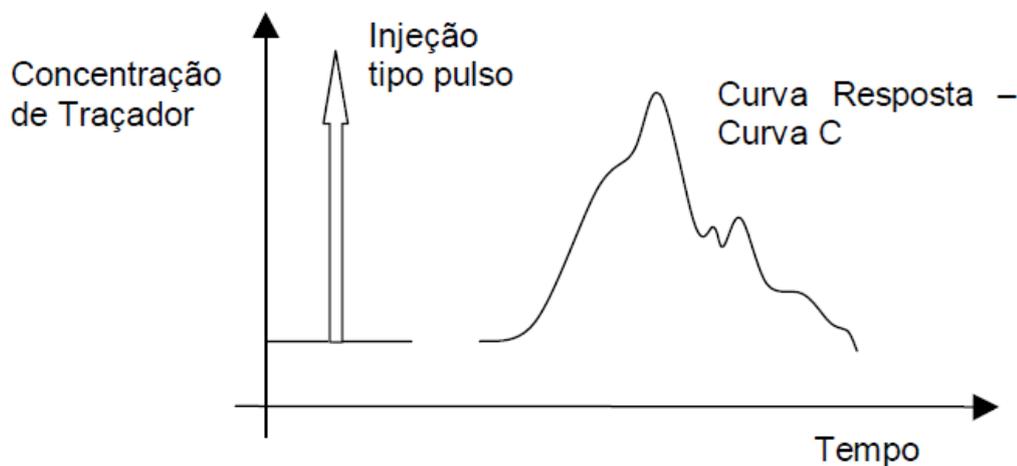


Figura 2.7 – Representação de um estímulo tipo pulso e a respectiva curva resposta.
Fonte: SASSAKI, 2005

2.5.1. Traçadores

O traçador é qualquer produto, que quando incorporado na massa de uma substância, permite que o comportamento de um determinado processo seja investigado. Estes produtos são usados para marcarem fluidos, sendo uma ferramenta importante na obtenção de modelos que representem o escoamento. Um traçador ideal deve apresentar as seguintes características:

- a) Comportamento hidrodinâmico igual ao da substância estudada;
- b) Possuir uma característica que permita diferenciá-lo da substância que pretende estudar, como por exemplo fluorescência;
- c) O traçador ou esta característica que o distingue não deve existir no meio em que o traçador será empregado;
- d) O método de detecção e de medição do traçador deve ser fácil, de alta eficiência;
- e) O traçador deve ser conservativo.

2.5.2. Tempos de residência característicos

a) Tempo teórico de residência (t)

É definido pela razão entre o volume ocupado pelo fluido no interior do distribuidor, V_{fluido} , e a vazão volumétrica de operação do equipamento, Q_{fluido} . Importante notar que esse tempo independe da curva de concentração. Está simplesmente relacionado às características geométricas e operacionais do sistema (SASSAKI, 2002);

$$t = \frac{V_{fluido}}{Q_{fluido}} \quad (3.3)$$

b) Tempo médio de residência ($t_{méd}$)

Representa a média dos tempos de residência de todo o fluido no interior do distribuidor (SASSAKI, 2002);

c) Tempo mínimo de residência (t_{min})

Representa o tempo em que as primeiras concentrações do traçador começam a aparecer nos veios de saída. No presente estudo é considerado como o tempo necessário para que 2% da massa de traçador saia do distribuidor (SASSAKI, 2002);

d) Tempo de pico (t_{pico})

Representa o tempo correspondente à máxima concentração detectada no meio (SASSAKI, 2002).

2.6. Fluidodinâmica Computacional

A realização de projetos de sistemas de engenharia e a capacidade de prognosticar sua performance é dependente da disponibilidade de dados experimentais e modelos conceituais que possam descrever um processo físico de maneira confiável. Esta abordagem, somente por meio de dados empíricos acarretam em um alto custo para o projeto. Este fato faz com que aumente cada vez mais a

necessidade de se utilizar simulações computacionais na análises preliminares destes processos (LOPES, 2008).

Processos envolvendo escoamento de fluidos, em sua maioria, resultam em dificuldades no projeto, principalmente para aqueles problemas que não possuem soluções analíticas.

As equações que governam os fluidos são as equações da continuidade (conservação de massa), a equação de Navier-Stokes (conservação da quantidade de movimento), e a equação da energia. Estas equações dão forma a um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares acopladas (PDEs). Por causa dos termos não-lineares nestas PDEs, métodos analíticos podem render poucas soluções. Nestes casos, faz-se necessário o uso de métodos numéricos de solução (DIONÍSIO, 2008).

Atualmente devido ao avanço dos métodos numéricos juntamente com o avanço das ciências da computação é possível que problemas de escoamento de fluidos com transferência de calor e massa, turbulentos e multifásicos, possam ser resolvidos de maneira mais facilitada, integrando ferramenta de mecânica dos fluidos computacional aos procedimentos de projeto e análise de escoamentos nas mais diversas áreas de aplicação, como aerodinâmica, automotiva, ambiental, petrolífera e química por exemplo (MALISKA, 2004).

A Fluidodinâmica Computacional CFD (*Computational Fluid Dynamics*) veio como um forte instrumento no campo da engenharia, fornecendo informações importantes da distribuição temporal e espacial de variáveis específicas de escoamento.

Ainda que métodos computacionais proporcionem vantagens como redução do tempo e dos custos, capacidade de análise de sistemas onde experimentos são muito difíceis e obtenção de um resultado com alto grau de detalhamento, o emprego das técnicas experimentais é de suma importância. Afirma-se isto devido ao fato de mesmo que um caso que passou por um processo de simulação tenha um resultado coerente do ponto de vista numérico, pode-se obter um resultado inconsistente com a realidade, ou mesmo que implique em resultados corretos do ponto de vista qualitativo, pode apresentar divergências quantitativas, as quais só podem ser detectadas quando comparados com resultados experimentais (ROSA, 2008).

Há algum tempo tem-se tentado modelar a fluidodinâmica de colunas de bolhas, a qual apresenta um alto grau de complexidade, e mesmo com o avanço computacional atual, ainda há dificuldade em estabelecer um modelo robusto.

Resolver um problema particular utilizando CFD consiste em, primeiramente, discretizar o domínio físico em que ocorre o escoamento, como por exemplo, o interior de uma coluna de bolhas, um ciclone ou um forno queimador. Os métodos de discretização mais empregados em CFD são o método dos volumes finitos e o método dos elementos finitos (DIONÍSIO, 2008).

Para cada elemento da malha gerada são associadas geralmente entre 3 a 20 variáveis, tais como pressão, três componentes de velocidade, densidade, temperatura, entre outras. Além disso, a fim de se descrever importantes fenômenos físicos, tais como turbulência, é necessário trabalhar com malhas bastante refinadas dentro do domínio (DIONÍSIO, 2008).

Capítulo 3

Modelagem Matemática e Método Numérico

3.1 Fundamentação

Na fluidodinâmica computacional as simulações fundamentam-se nas equações de balanço de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, estas são tratadas em sua forma diferencial e resolvidas numericamente pela ferramenta computacional.

O caso em análise trata-se de um sistema isotérmico, onde os efeitos da transferência de calor são desprezíveis, desconsiderando-se assim a equação da conservação de energia na modelagem matemática do problema. Para as condições consideradas, assume-se que a transferência de massa entre as fases do sistema é pouco significativa pois no sistema em estudo não há reações químicas, fazendo-se desnecessário o balanço das espécies envolvidas (MORI, 2012).

As propriedades do fluido são consideradas como sendo função do espaço e do tempo em um referencial inercial, fazendo com que a modelagem matemática fosse abordada com uma perspectiva Euleriana. Nela, as fases são consideradas meios contínuos, podendo se negligenciar as características moleculares da matéria, o que permite adotar a possibilidade de fases distintas ocuparem uma mesma região do espaço em um determinado instante. Desta maneira, as propriedades médias de transporte de cada fase pode ser determinada dentro de um domínio espacial contínuo, por meio de uma média volumétrica (MORI, 2012). Porém, quando se representa as equações de conservação Eulerianas em sua forma média há um reflexo no número de variáveis do sistema, o qual sofre um aumento uma vez que introduzida uma fração volumétrica média no conjunto de equações. Esta fração é definida como sendo a probabilidade de uma fase estar presente em determinado ponto no tempo e no espaço (RUSHE, 2002).

De acordo com os pressupostos físicos da situação problema, é possível estabelecer um modelo matemático que servirá de base para a conexão da fundamentação teórica com a técnica de fluidodinâmica computacional.

3.2 Modelagem matemática

Com base nos parâmetros físicos envolvidos na situação problema, um modelo matemático é desenvolvido levando em conta parâmetros da conservação de massa e movimento, bem como conceitos que relacionam a transferência de calor e massa dentro do reator.

A segunda lei de Newton pode ser considerada a definição do conceito de força na mecânica; define-se em termos do efeito que produz sobre os corpos em que atua e é dada por:

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a} \quad (3.1)$$

Sendo que,

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (3.2)$$

Logo,

$$\vec{F} = m \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (3.3)$$

Multiplicando a equação (3.3) por dt tem-se

$$\vec{F} \cdot dt = m \cdot d\vec{v} \quad (3.4)$$

A equação (3.4) representa o teorema no momentum, o qual é fundamental para o estudo do tempo de residência em reatores do tipo borbulhante.

Supondo que a força \vec{F} atue em uma direção x , integra-se a equação (3.4) e obtém-se:

$$\int_{t1}^{t2} \vec{F}_x \cdot dt = \int_{vt1}^{vt2} m \cdot d\vec{v}_x \quad (3.5)$$

$$\vec{F}_x \cdot \Delta t = m \cdot (v_{xt2} - v_{xt1}) \quad (3.6)$$

Com $\Delta t = (t_2 - t_1)$ e \vec{F}_x e m constantes, deduz-se que:

$$\vec{F}.dt = m.d\vec{v} \quad (3.7)$$

Reescrevendo a equação (3.7),

$$\vec{F}.dt = d(m.\vec{v}) \quad (3.8)$$

$$\sum \vec{F} = \frac{d(m.\vec{v})}{dt} \quad (3.9)$$

Substituindo a força \vec{F} por uma tensão tem-se:

$$\sum (\tau_T.A) = \frac{d(m.\vec{v})}{dt} \quad (3.10)$$

onde τ_T representa a tensão total que atua na área A. Sendo:

$$TENSÃO = \frac{FORÇA}{ÁREA} \quad (3.11)$$

Realizando a divisão da equação (3.10) por dV , tem-se:

$$\frac{1}{dV} \cdot \sum (\tau_T.A) = \frac{1}{dV} \cdot \frac{d(m.\vec{v})}{dt} \quad (3.12)$$

Como trata-se de um reator de coluna borbulhante, a modelagem deve ser descrita em coordenadas cilíndricas, sendo que as tensões que atuam em um volume de controle cilíndrico estão ilustradas na Figura 3.1.

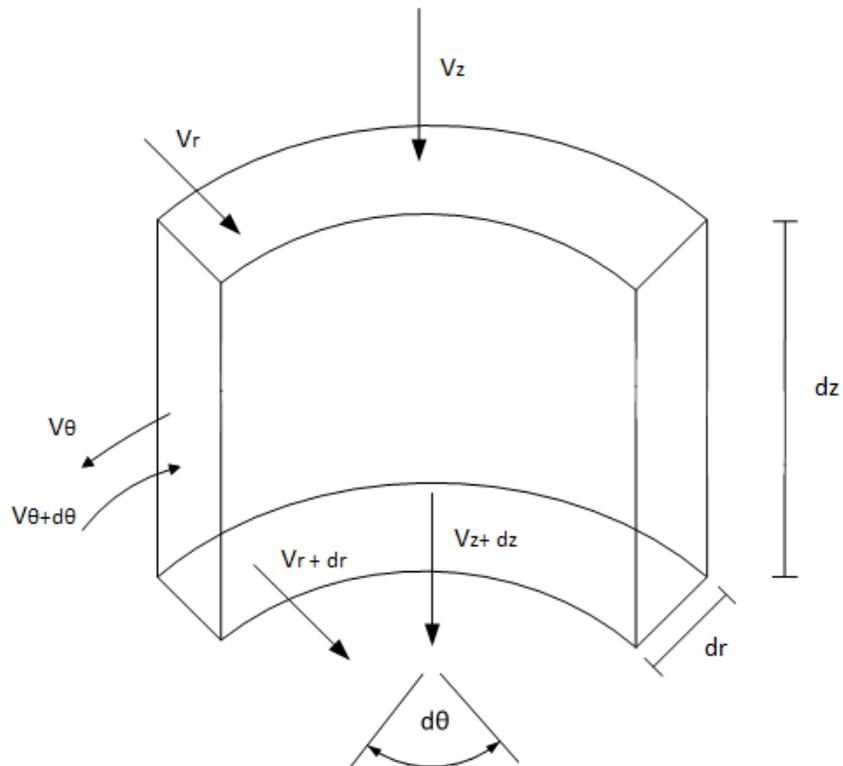


Figura 3. 1 – Volume de controle para coordenadas cilíndricas

Aplicando limite na equação (3.13), com $dV \rightarrow \infty$

$$\lim_{dV \rightarrow \infty} \frac{1}{dV} \cdot \sum (\tau_T \cdot A) = \lim_{dV \rightarrow \infty} \frac{1}{dV} \cdot \frac{d(m \cdot \vec{v})}{dt} \quad (3.13)$$

O primeiro termo da equação (3.13) representa a definição de divergente de um tensor ($\nabla \tau_T$), logo:

$$\nabla \tau_T = \lim_{dV \rightarrow \infty} \frac{1}{dV} \cdot \int_A (\tau_T \cdot \vec{n}) \cdot dA \quad (3.14)$$

Onde o vetor \vec{n} representa um vetor ortogonal a área A e aponta para fora do volume de controle.

Em coordenadas cilíndricas, o vetor gradiente é expresso como:

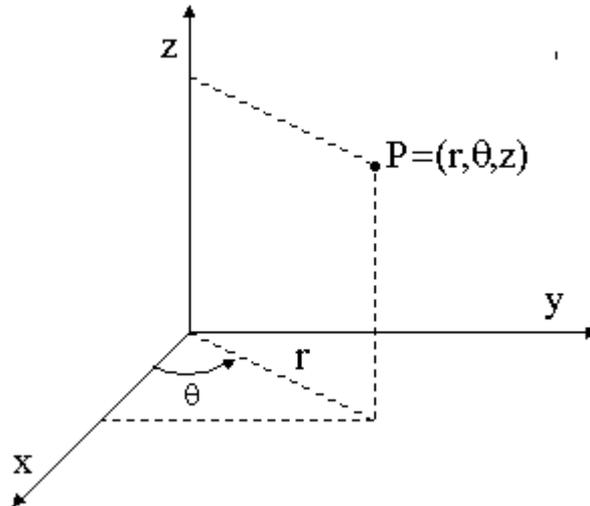


Figura 3. 2 – Coordenadas cilíndricas

$$\nabla(m) = \frac{\partial(m)}{\partial r} \cdot \vec{l}_r + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial(m)}{\partial \theta} \cdot \vec{l}_\theta + \frac{\partial(m)}{\partial z} \cdot \vec{l}_z \quad (3.15)$$

Isto se deve ao fato de que:

- O elemento de comprimento na direção de r é dr ;
- O elemento de comprimento na direção de z é dz ;
- O elemento de comprimento na direção de θ é $d\theta$.

Realizando um ajuste matemático que relaciona os termos calculados com os vetores, obtém-se as equações de Navier-Stokes para um fluido incompressível com escoamento turbulento.

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{u_\theta^2}{r} \right) \\ & = - \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - \frac{u_r}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right] \\ & + \rho g_r \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned}
\rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} - \frac{u_r u_\theta}{r} \right) & \quad (3.17) \\
= -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r^2} \right] \\
+ \rho g_\theta
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) & \quad (3.18) \\
= -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right] + \rho g_z
\end{aligned}$$

Até então deduziu-se as equações de Navier-Stokes para um sistema monofásico, porém, trata-se de um sistema bifásico, envolvendo líquido e gás. Para transformar estas equações em um sistema com as características requeridas é necessário inserir na modelagem o *hold up* das fases e a força de atrito entre elas.

Para inserir o *hold up* das fases nas equações inicialmente deve-se identificar a fração de área ocupada por cada uma das fases no volume de controle. Considera-se dA_{zl} a fração de área que o líquido ocupa na entrada do volume de controle, o restante é utilizada pelo gás.

$$dA_{zl} = \frac{dV_l}{dz} \quad (3.19)$$

Sendo então, o *hold up* do líquido (α_l) a fração do volume, ocupada pelo líquido, em um volume de controle, dada por:

$$\alpha_l = \frac{dV_l}{dV} \quad (3.20)$$

Logo,

$$dA_{zl} = \frac{\alpha_l dV}{dz} = \alpha_l dA_z \quad (3.21)$$

Com isto, escreve-se uma equação para o líquido simplesmente substituindo todo o dA por $\alpha_l dA$. E o mesmo considera-se para a fase gasosa, onde escreve-se o dA por $\alpha_g dA$, sendo α_g o *hold up* do gás.

Para a fase líquida, as equações ficam:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u_r \alpha_L}{\partial t} + \left[\rho u_z \frac{\partial u_r \alpha_L}{\partial z} + \rho u_r \frac{\partial u_r \alpha_L}{\partial r} + \rho \frac{u_\theta}{r} \left[\frac{\partial u_r \alpha_L}{\partial \theta} - u_\theta \right] \right] & \quad (3.22) \\ = \alpha_L \rho \vec{g}_r + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rr} \alpha_L) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta r} \alpha_L}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{zr} \alpha_L}{\partial z} - \frac{\tau_{\theta\theta} \alpha_L}{r} \right] \\ - \frac{\partial(P) \alpha_L}{\partial r} + C_W \alpha_G \alpha_L (\mu_{(rG)} - \mu_{(rL)}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u_\theta \alpha_L}{\partial t} + \left[\rho u_z \frac{\partial u_\theta \alpha_L}{\partial z} + \rho u_r \frac{\partial u_\theta \alpha_L}{\partial r} + \rho \frac{u_\alpha}{r} \left[\frac{\partial u_\theta \alpha_L}{\partial \theta} - v_r \right] \right] & \quad (3.23) \\ = \alpha_L \rho \vec{g}_\theta + \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\theta} \alpha_L) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta\theta} \alpha_L}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{z\theta} \alpha_L}{\partial z} \right] \\ - \frac{1}{r} \frac{\partial(P) \alpha_L}{\partial \theta} \vec{e}_\theta + C_W \alpha_G \alpha_L (\mu_{(\theta G)} - \mu_{(\theta L)}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u_z \alpha_L}{\partial t} + \left[\rho u_z \frac{\partial u_z \alpha_L}{\partial z} + \rho u_r \frac{\partial u_z \alpha_L}{\partial r} + \rho \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z \alpha_L}{\partial \theta} \right] & \quad (3.24) \\ = \alpha_L \rho \vec{g}_z + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rz} \alpha_L) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha z} \alpha_L}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{zz} \alpha_L}{\partial z} \right] - \frac{\partial(P) \alpha_L}{\partial z} \\ + C_W \alpha_G \alpha_L (\mu_{(zG)} - \mu_{(zL)}) \end{aligned}$$

Para a fase gasosa as equações ficam:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u \alpha_G}{\partial t} + \left[\rho u_z \frac{\partial u_r \alpha_G}{\partial z} + \rho u_r \frac{\partial u_r \alpha_G}{\partial r} + \rho \frac{u_\alpha}{r} \left[\frac{\partial u_r \alpha_G}{\partial \theta} - u_\theta \right] \right] & \quad (3.25) \\ = \alpha_G \rho \vec{g}_r + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rr} \alpha_G) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta r} \alpha_G}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{zr} \alpha_G}{\partial z} - \frac{\tau_{\theta\theta} \alpha_G}{r} \right] \\ - \frac{\partial(P) \alpha_G}{\partial r} + C_W \alpha_G \alpha_L (\mu_{(rG)} - \mu_{(rL)}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rho \frac{\partial u_\theta \alpha_G}{\partial t} + \left[\rho u_z \frac{\partial u_\theta \alpha_G}{\partial z} + \rho u_r \frac{\partial u_\theta \alpha_G}{\partial r} + \rho \frac{u_\theta}{r} \left[\frac{\partial u_\theta \alpha}{\partial \theta} - u_r \right] \right] & \quad (3.26) \\
= \alpha_G \rho \vec{g}_\theta + \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\theta} \alpha_G) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta\theta} \alpha_G}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{z\theta} \alpha_G}{\partial z} \right] \\
- \frac{1}{r} \frac{\partial (P)}{\partial \theta} \alpha_G \vec{e}_\theta + C_W \alpha_G \alpha_L (\mu_{(\theta G)} - \mu_{(\theta L)})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rho \frac{\partial u_z \alpha_G}{\partial t} + \left[\rho u_z \frac{\partial u_z \alpha_G}{\partial z} + \rho u_r \frac{\partial u_z \alpha_G}{\partial r} + \rho \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z \alpha_G}{\partial \theta} \right] & \quad (3.27) \\
= \alpha_G \rho \vec{g}_z + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rz} \alpha_G) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta z} \alpha_G}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{zz} \alpha_G}{\partial z} \right] - \frac{\partial (P) \alpha_G}{\partial z} \\
+ C_W \alpha_G \alpha_L (\mu_{(zG)} - \mu_{(zL)})
\end{aligned}$$

Ressaltando que a soma dos *hold up* das fases deve ser igual a 1.

Quando se trata da força de atrito existente entre as fases do sistema, considera-se que a velocidade do gás é bem maior que a velocidade do líquido, logo, supõe-se que o líquido recebe momentum do gás.

3.3 Força de arraste

No estudo com colunas de bolhas a quantidade de movimento existente no sistema é fornecida pela ascensão da fase dispersa (gás) que ao subir, devido à força de empuxo, fornece energia para a fase contínua (líquida). A força com que a fase dispersa age sobre a fase contínua é denominada de força de arraste (LOPES, 2012). Além disso, há o arraste de forma, diretamente relacionado ao tamanho e à forma da partícula, sendo gerado pela distribuição desigual de pressão ao redor da bolha em movimento (MORI 2012).

Em geral, correlações existentes na literatura para o cálculo do coeficiente de arraste são apresentados em função do número de Reynolds da bolha e/ou do número de Eötvös. Quando a fase dispersa não é deformável, é o número de Reynolds que serve como base para o equacionamento do coeficiente de arraste, mostrando uma certa consistência teórica, já que o parâmetro adimensional referido representa uma razão entre as forças inerciais e viscosas, ambas relevantes para o regime viscoso. Já o número de Eötvös, que é uma relação entre forças de empuxo e de tensão

superficial, aparece na modelagem do coeficiente de arraste quando o escoamento se encontra em regime de partículas distorcidas e a forma da bolha assume um papel relevante no escoamento (MORI, 2012).

– Modelo de Grace (1978)

O modelo de Grace foi desenvolvido a partir de dados de um sistema ar-água, para uma única bolha em escoamento. Clift, Grace e Weber (1978) *apud* Mori (2012) afirmam que quando uma partícula possui geometria elipsoidal, uma correlação para determinar o coeficiente de arraste é utilizada, o modelo pode ser aplicado também para bolhas esféricas (regimes viscoso) e bolhas em touca esféricas (regimes inercial).

Este modelo está disponível apenas quando um empuxo é especificado e um coeficiente de tensão superficial foi definido. Os valores do coeficiente de arraste são admitidos conforme o tamanho das bolhas e sua diluição na fase contínua. Quando o ar encontra-se diluído na água, padroniza-se levar o valor a zero. Para bolhas pequenas, as quais tem a tendência de subir mais lentamente em regiões de vácuo devido a um aumento na viscosidade, para capturar esse efeito valores negativos de coeficiente de arraste deve ser usado. Por outro lado, bolhas maiores tendem a subir mais rapidamente em regiões de vácuo, pois elas são arrastadas juntamente às outras bolhas, este efeito pode ser modelado usando um coeficiente de arraste positivo (ANSYS CFX[®], 2009).

As equações que regem este modelo de força de arraste estão representadas a seguir.

$$C_{D,lg(esfera)} = \frac{24}{Re_b} \cdot (1 + 0,15 \cdot Re_b^{0,687}) \quad (3.28)$$

$$C_{D,lg(touca)} = \frac{8}{3} \quad (3.29)$$

3.4 Turbulência

A turbulência caracteriza escoamentos de fluidos em que as partículas misturam-se de forma não linear ou caótica. A avaliação de um escoamento é feita utilizando-se o número de Reynolds, o qual é um número adimensional que expressa a razão entre as forças inerciais e viscosas e que permite caracterizar o regime de escoamento de um fluido em laminar ou turbulento (LOPES, 2012).

Joshi et al., (2008) em seus estudos avaliaram vários modelos de turbulência em colunas de bolhas. Os autores concluíram que ao contrário do que se esperava o modelo de turbulência $k-\epsilon$ apresentou melhores resultados para o perfil de velocidade média axial da fase contínua do que os outros modelos e concluíram que tal modelo é o mais indicado para o estudo em colunas de bolhas.

O modelo de turbulência $k-\epsilon$ consiste num modelo de turbulência de duas equações. Neste modelo, a velocidade da turbulência é calculada a partir da energia cinética turbulenta a qual vem da respectiva equação de transporte (LOPES, 2012).

3.5 Método Numérico

Diversos tipos de problemas físicos que são encontrados nas ciências e nas engenharias são descritos matematicamente na forma de equações diferenciais ordinárias e parciais. A solução exata usualmente é fruto de um método de solução analítica encontrado através de métodos algébricos e diferenciais aplicados a geometrias e condições de contorno particulares; a aplicação generalizada dos métodos analíticos para diferentes geometrias e condições de contorno torna impraticável ou até mesmo impossível a obtenção de soluções analíticas exatas

Dentre os métodos numéricos para resolução de problemas de engenharia disponíveis há o Método dos Elementos Finitos (MEF) e o Método dos Volumes Finitos (MVF).

O Método dos Elementos Finitos (MEF) consiste em diferentes métodos numéricos que aproximam a solução de problemas de valor de fronteira descritos tanto por equações diferenciais ordinárias quanto por equações diferenciais parciais através da subdivisão da geometria do problema em elementos menores, chamados elementos finitos, nos quais a aproximação da solução exata pode ser obtida por

interpolação de uma solução aproximada. Atualmente o MEF encontra aplicação em praticamente todas as áreas de engenharia, como na análise de tensões e deformações, transferência de calor, mecânica dos fluidos e reologia, eletromagnetismo, inclusive recebendo designações específicas como na mecânica dos fluidos computacionais (CFD) e no eletromagnetismo computacional (CEM).

O Método dos Volumes Finitos também resolve numericamente sistemas de equações diferenciais parciais, baseado na resolução de balanços de massa, energia e quantidade de movimento em um determinado volume de controle. É derivado do Método das Diferenças Finitas e, adicionalmente a este método, fornece uma melhor interpretação física, através das equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento. Nas simulações apresentadas neste trabalho, foi utilizado o Método dos Volumes Finitos, implementado no pacote computacional CFX.

3.5.1 Método dos Volumes Finitos

O Método dos Volumes Finitos é uma forma de discretização que usa como princípio a forma integral das equações de conservação. O domínio de solução é subdividido em um número finito de volumes de controle, e as equações de conservação são aplicadas a cada volume. No centroide de cada volume de controle localiza-se um nó computacional, no qual são calculados os valores das variáveis, sendo os valores das variáveis nas superfícies dos volumes de controle obtidos por interpolação em função dos valores nodais. Integrais de superfície e de volume são aproximadas usando formulações apropriadas. Como resultado, obtém-se um sistema de equações algébricas para cada alcance dos valores de uma variável em todos os volumes de controle.

O MVF pode ser aplicado a qualquer tipo de malha, por isso adapta-se a geometrias complexas. A malha define apenas as fronteiras do volume de controle e não necessita estar relacionada com um sistema de coordenadas.

O método é inerentemente conservativo, contando que os integrais de superfície sejam os mesmos em faces partilhadas por volumes de controle. Todos os termos que precisam ser aproximados possuem significado físico. A Figura 3.3 mostra a representação de um volume de controle (nomeado “P”), e a nomenclatura dos

pontos nodais vizinhos – W, E, S e N para malhas bidimensionais, acrescentando B e T para malhas tridimensionais (ROSA, 2008).

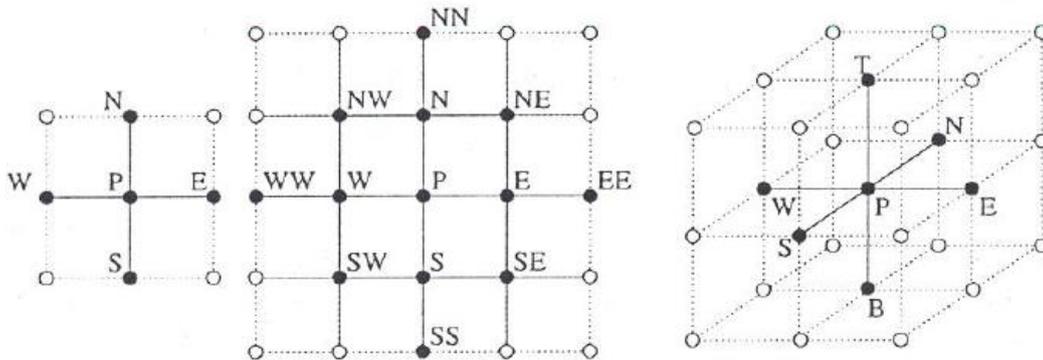


Figura 3. 3 – Representação de volumes de controle
Fonte: ROSA, 2008

Considerando apenas a equação de conservação genérica para a variável ϕ e assumindo que o campo de velocidades e todas as propriedades do fluido são conhecidas, o método dos volumes finitos parte da forma integral da equação de conservação. O domínio de solução é subdividido em uma malha de pequenos volumes de controle. Na equação genérica para as equações de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\phi u - \Gamma\phi\nabla\phi) = S\phi \quad (3.30)$$

onde $\Gamma\phi$ é a difusividade de ϕ , a variável genérica transportada; ϕ deve ser conservada em cada um dos volumes de controle da geometria discretizada. Discretizando essa equação para um volume de controle, obtendo-se

$$\frac{\delta}{\delta t}(\rho\phi) + \frac{\delta}{\delta x_L} \cdot \left(\rho\phi u_L - \Gamma\phi \frac{\delta\phi}{\delta x_L} \right) = S\phi \quad (3.31)$$

onde x_L são as dimensões do volume de controle, e δt é o passo no tempo da iteração (para o caso de um problema transiente).

As simulações deste trabalho foram conduzidas no *software* comercial ANSYS CFX 14.0 que utiliza o MVF para obter a resolução do problema proposto.

Capítulo 4

Simulações e Métodos

4.1. Geometria e Malha Numérica

Ao se realizar simulações, a primeira etapa consiste na construção da geometria do equipamento em estudo e na construção de uma malha numérica, sem que exija um grande esforço computacional na solução da problemática proposta. A geometria da coluna de bolhas e sua respectiva malha numérica foram construídas utilizando o *software* ANSYS ICEM 14.0.

A geometria adotada foi uma coluna com 30 cm de diâmetro e 4 m de altura, com entrada de gás distribuída em toda a área da base, sem a utilização de aspersores de gás, conforme observado na Figura 4.1. As dimensões utilizadas seguiram os padrões apresentados na revisão bibliográfica.



Figura 4. 1 – Geometria da coluna borbulhante

Em uma segunda etapa, o volume de cálculo da coluna delimitado pela geometria foi discretizado por meio de uma malha tetraédrica. Durante a execução da malha alguns parâmetros de qualidade devem ser verificados (determinantes, ângulo entre os volumes de controle, razão de crescimento) a fim de garantir a convergência da solução numérica.

Após a definição do tipo de malha utilizada, fez-se necessário determinar o número de volumes de controle que seriam alocados ao longo da coluna, este processo é denominado refinamento de malha numérica e representa uma etapa bastante relevante para estudos em CFD devido a sensibilidade das variações em função da quantidade de tetraedros contidos no volume do cálculo.

Os volumes de controle compõem a malha computacional, que pode ser estruturada ou não estruturada. Segundo Rosa, (2008) malhas estruturadas são definidas como sendo aquelas que podem ser ordenadas, indexadas de uma maneira simples. Malhas não estruturadas não possuem essa característica, e por isso podem ser aplicadas a quaisquer geometrias, mesmo as mais complexas – as quais, de outra maneira, só poderiam ser elaboradas com o uso de várias malhas estruturadas entre si. Este trabalho utilizou volumes de controle estruturados.

O tamanho da malha em estudo foi determinada a partir do teste de independência de malha e número de Courant, definidos e descritos ao longo deste capítulo. A título de ilustração, tem-se a Figura 4.2 que representa a malha numérica final com uma visão geral da coluna e em detalhe a entrada da mesma.

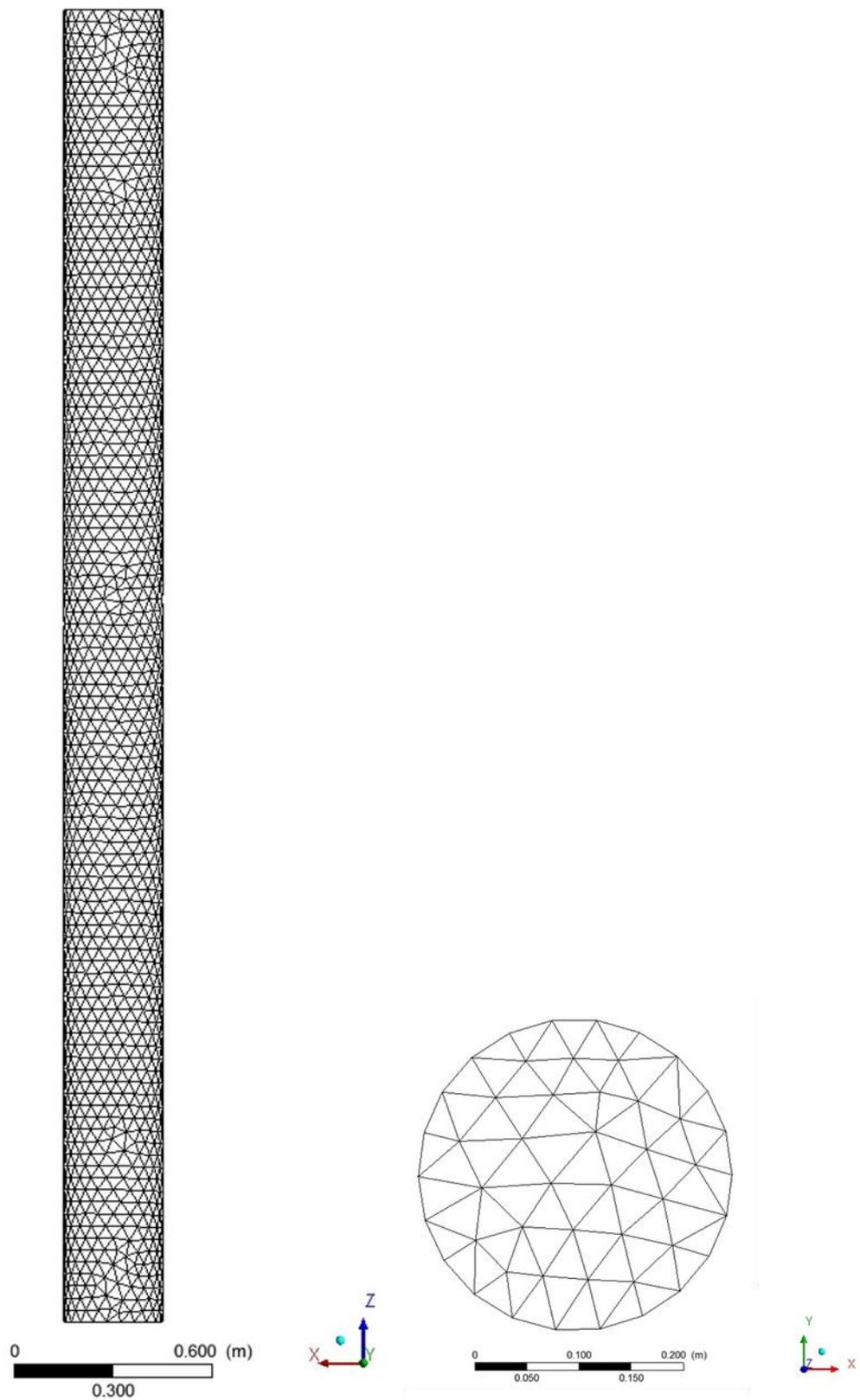


Figura 4. 2 – Malha numérica, vista da coluna e entrada da coluna

4.2. Condições de Contorno

Na entrada da coluna, considera-se uma mistura de 75% de água e 25% de ar sendo injetada no sistema. Nas paredes, utilizam-se condições de não escorregamento (*no slip wall*) para a fase líquida e livre deslizamento (*free slip wall*) para a fase gasosa. Tais condições de contorno seguiram padrões de simulações em colunas de bolhas, as quais foram obtidas dos tutoriais do *software* utilizado.

Todas as simulações foram conduzidas com uma velocidade de entrada do gás na base da coluna sendo 0,08 m/s distribuído uniformemente, variando a velocidade e o perfil de alimentação do líquido. Sendo elas:

- a) Caso 1: vazão de alimentação constante com velocidade de 0,02 m/s;
- b) Caso 2: vazão de alimentação variável com velocidade igual a $0,02 \cdot \text{sen}(2 \cdot t) + 0,02$;
- c) Caso 3: vazão de alimentação variável com velocidade igual a $0,02 \cdot \text{sen}(10 \cdot t) + 0,02$;
- d) Caso 4: vazão de alimentação variável com velocidade igual a $\frac{0,0319}{1 + (e^{-30 \cdot \text{sen}(\frac{t}{0,3})})} + 0,003$.

Os Gráficos 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4 ilustram graficamente o comportamento da vazão de alimentação da água para os casos 1, 2, 3 e 4 respectivamente.

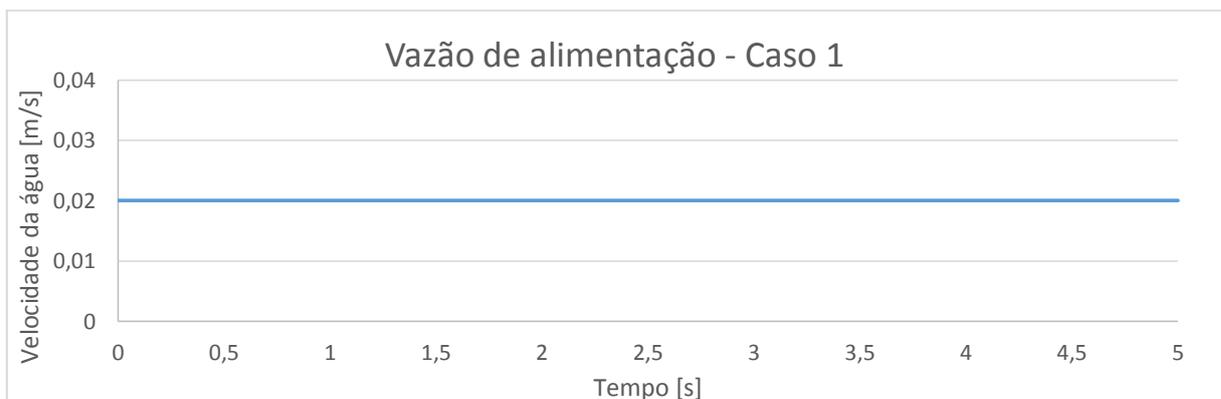


Gráfico 4. 1 – Vazão de alimentação constante para o Caso 1.

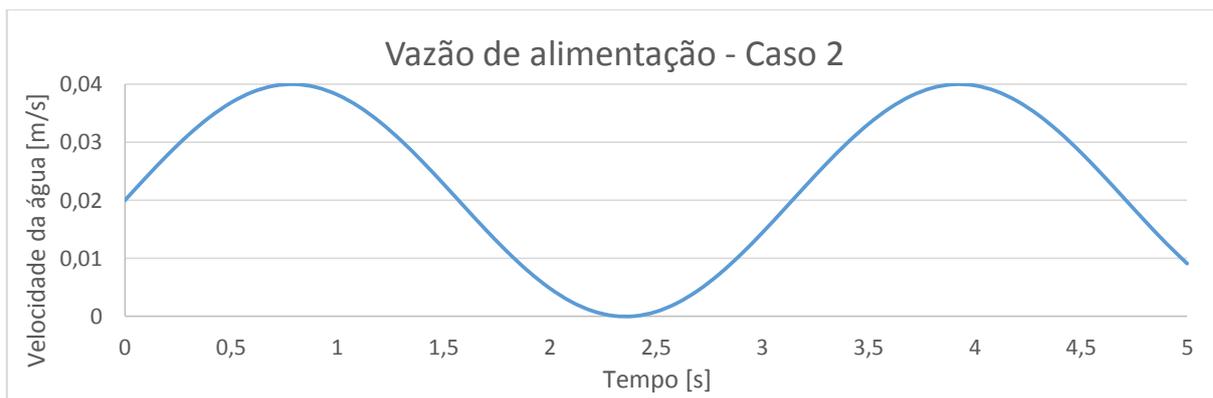


Gráfico 4. 2 – Vazão de alimentação variável para o Caso 2

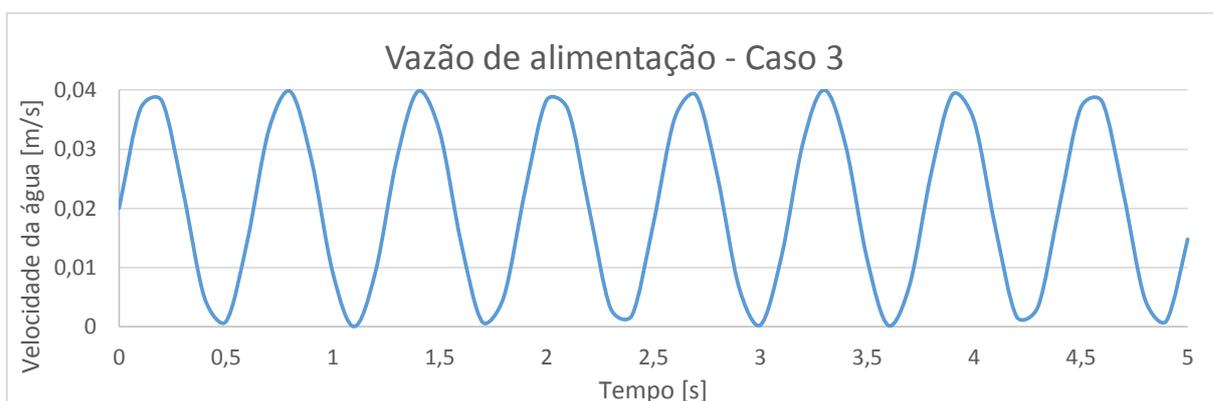


Gráfico 4. 3 – Vazão de alimentação variável para o Caso 3

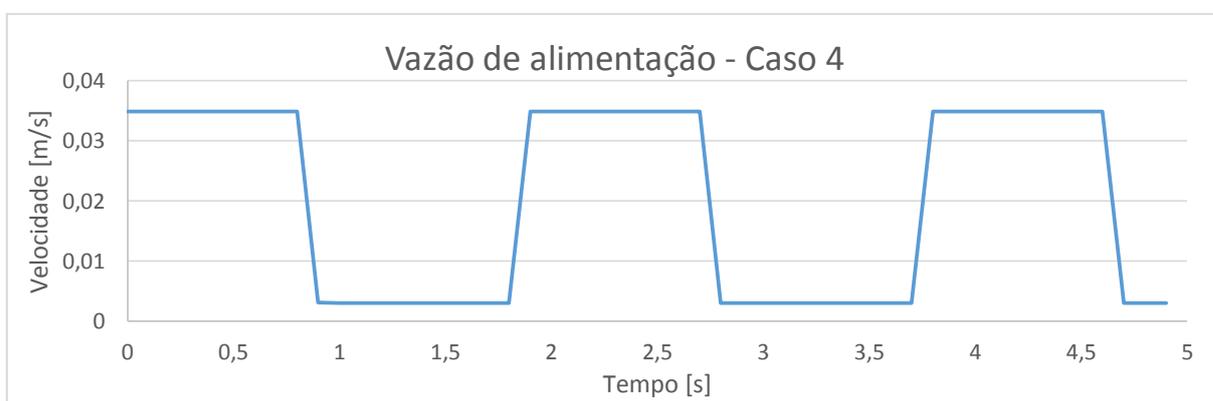


Gráfico 4. 4 – Vazão de alimentação variável para o Caso 4

A saída da coluna é considerada fechada, com pressão relativa de 0 atm.

4.3. Propriedades dos fluidos

Os fluidos de trabalho empregados foram a água e o ar a 25°C. As propriedades físicas dos fluidos estão apresentadas na Tabela 4.1.

Tabela 4. 1– Propriedades físicas dos fluidos

Propriedade	Água	Ar
Massa específica (ρ)	997 kg/m ³	1,185 kg/m ³
Viscosidade Dinâmica (μ)	8,899.10 ⁻⁴ kg/m.s	1,831.10 ⁻⁵ kg/m.s
Hold up de entrada (α)	0,75	0,25

4.4. Condições iniciais e numéricas da simulação

Inicialmente a coluna encontra-se preenchida com água, estagnada. O início do processo ocorre com a entrada de uma mistura de 25% de ar e 75% água no sistema, o que faz com que o escoamento comece a se desenvolver ao longo da coluna.

As condições numéricas da simulação, foram baseadas em padrões de simulação para colunas de bolhas estabelecidos nos manuais do *software* utilizado, estão enumeradas a seguir:

- Tamanho de bolhas: considera-se como 6 mm o tamanho único de bolha;
- Passo de tempo: 0,005 s até 10 s de simulação e 0,01 s a partir deste tempo;
- Critério de convergência: RMS 1x10⁻⁴;
- Tempo total de simulação: 200 s;
- Interpolação do termo adjectivo: *High Resolution*

4.5. Determinação do Tempo de Residência

A determinação da distribuição do tempo de residência utilizando traçadores baseia-se na técnica de estímulo-resposta, na qual uma quantidade conhecida de traçador é adicionada, e sua concentração é medida no final da coluna durante períodos regulares de tempo. Assim, é possível obter como resposta a concentração do traçador no efluente em função do tempo.

A injeção de traçador no modelo matemático ocorre de forma semelhante ao realizado experimentalmente. Ela é realizada por meio de um pulso no qual determinada concentração de traçador é injetada.

Nas simulações realizadas a injeção é realizada através da seguinte função:

$$\text{Concentração traçador} = \text{if}(t > 20 [s], \text{if}(t < 20,025 [s], 100, 0), 0) \quad (4.1)$$

Tal função basicamente diz que 100 g/cm³ entram no sistema aos 20 segundos de operação da coluna, quando o ar já chegou no topo da coluna, durante 0,025 segundos.

Uma vez que a adição do traçador não altera as propriedades do fluido nem a sua fluidodinâmica, não se faz necessário a resolução das equações de momento, continuidade e turbulência para um terceiro fluido, ao invés disso, utiliza-se a técnica de um escalar passivo.

Esta técnica foi validada e utilizada com sucesso por KRUGER (2010).

O transporte do escalar passivo está determinado pela Equação 4.2 (MONTANTE *et al.*, 2005), a qual considera somente os efeitos do transporte por convecção e os efeitos de turbulência, já que estes são predominantes no escoamento.

$$\frac{\partial(\rho \cdot \varphi)}{\partial t} + \nabla(\rho \cdot u \cdot \varphi) = \nabla \left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} \cdot \nabla \varphi \right) \quad (4.2)$$

onde φ corresponde a concentração de traçador, μ_T a viscosidade turbulenta do fluido e σ_T é o número de Schmidt turbulento (aproximadamente 1).

Para a estimativa do tempo de residência utilizou-se traçadores passivos, os quais são monitorados durante a simulação até que a sua concentração na saída atinja valores próximos a zero.

4.6. Teste de malha

O teste de malha é realizado para verificar a influência do tamanho da malha nos resultados. A independência de malha é obtida quando resultados obtidos para uma simulação efetuada em uma certa malha não variam significativamente de outra

simulação efetuada em uma malha com maior refino; ou seja, quando um refino na malha empregada não representar significativas mudanças nos resultados.

Testaram-se três diferentes tamanhos de malha, os quais estão descritos na Tabela 4.2.

Malha	Volumes de Controle	Nós
Malha A	25164	5525
Malha B	50042	10438
Malha C	75321	15031

O teste avalia um parâmetro local e possibilita a comparação entre os valores numéricos obtidos. O parâmetro local considerado foi a velocidade do ar em função do raio da coluna, o plano de interesse encontra-se a 4 m de altura do dispositivo a um tempo de simulação de 70 s.

O Gráfico 4.5 apresenta os resultados do teste de malha.

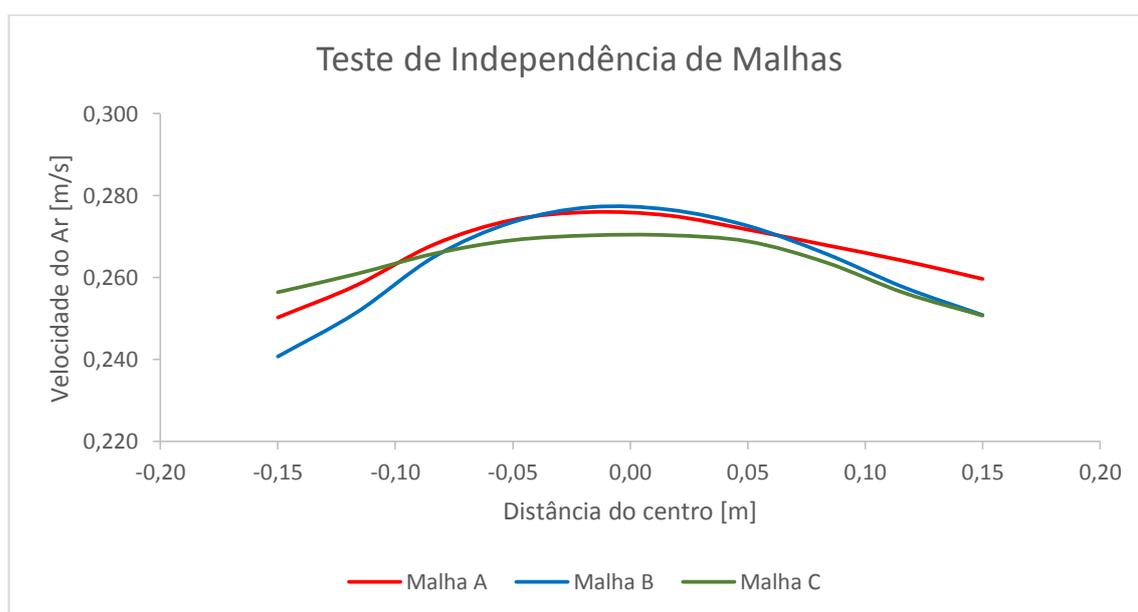


Gráfico 4. 5 – Velocidade de ar em função do raio para os diferentes tamanhos de malha

Analisando comparativamente os resultados numéricos, conclui-se que é possível utilizar a Malha A para as demais simulações do presente estudo já que os perfis de velocidade se mostraram semelhantes.

Outro ponto analisado em relação a qualidade da malha numérica utilizada é o Número de Courant que ela representa, o qual refere-se a uma grandeza adimensional que representa, então, por meio de uma razão de distâncias, o fluxo advectivo que atravessa os volumes da malha em um dado intervalo de tempo. Se supormos uma malha e uma velocidade uniformes numa região do domínio, o Número de Courant local torna-se o número de volumes da malha atravessados por uma perturbação naquele passo de tempo. Para este parâmetro os valores em todos os volumes de controle da malha foram inferiores a 0,01, satisfazendo critérios de confiabilidade.

Capítulo 5

Resultados e Discussão

Os resultados numéricos obtidos com as simulações estão aqui reunidos e discutidos. O capítulo começa apresentando os resultados da evolução temporal da fração volumétrica de ar ao longo da coluna para cada caso citado no capítulo anterior e comparando os diferentes comportamentos. Posteriormente apresentam-se as curvas de distribuição do tempo de residência, onde são comparados os diferentes perfis de alimentação de líquido empregados neste trabalho.

5.1. Comparação entre vazão de alimentação constante e vazão de alimentação variável

Para esta etapa da análise, faz-se variar unicamente a forma de alimentação da fase líquida, todas as demais condições de simulação descritas anteriormente são mantidas.

5.1.1. Caso 1

A primeira simulação, denominada Caso 1, corresponde a uma coluna borbulhante, inicialmente completa de água, com a alimentação de água e ar constantes, em sua base, com velocidades superficiais de 0,02 m/s e 0,08 m/s, respectivamente.

Os critérios analisados para avaliar o comportamento fluidodinâmico dos componentes presentes na coluna foram fração volumétrica de ar e distribuição do tempo de residência.

As Figuras 5.1, 5.2 e 5.3 apresentam a evolução temporal da fração volumétrica de ar em três diferentes alturas da coluna, sendo 0,5 m, 2,5 m e 4 m, respectivamente.

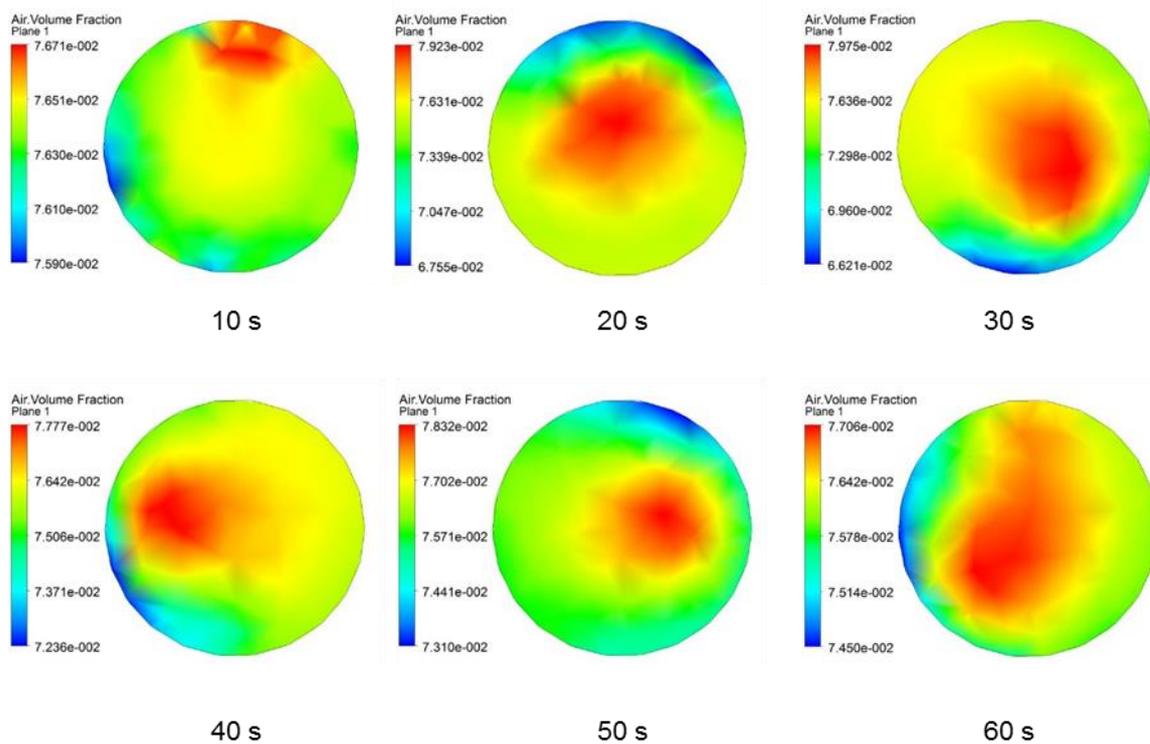


Figura 5. 1 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 0,5 m para o Caso 1

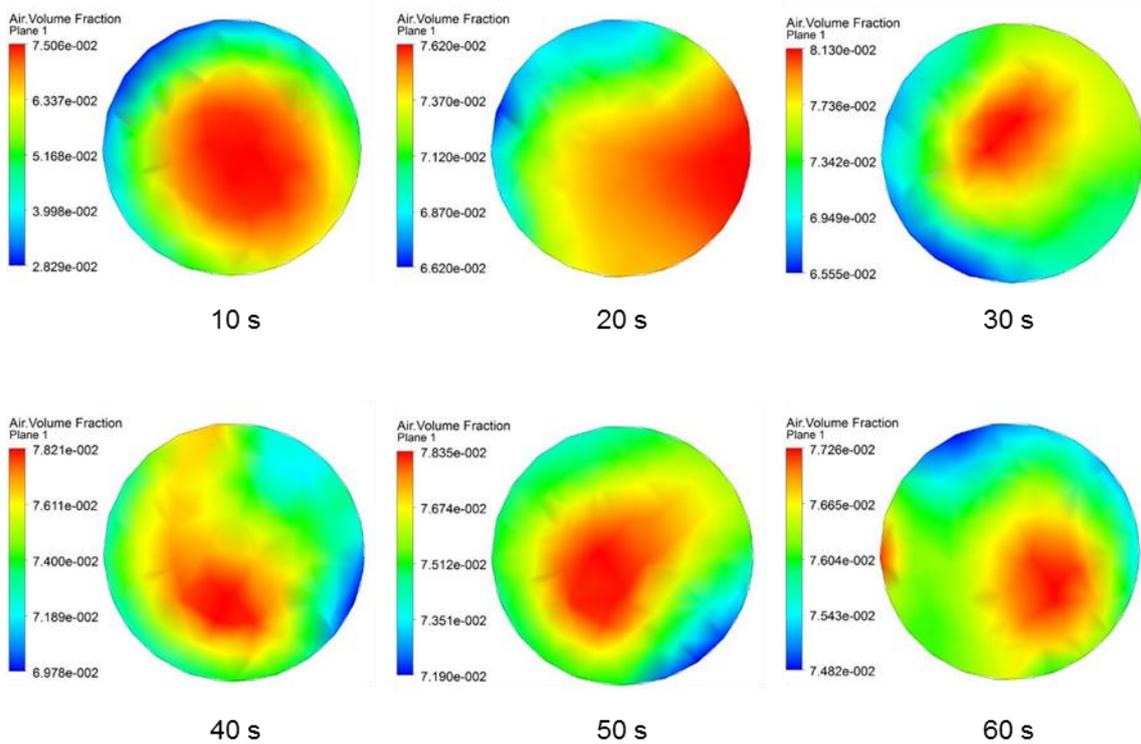


Figura 5. 2 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 2,5 m para o Caso 1

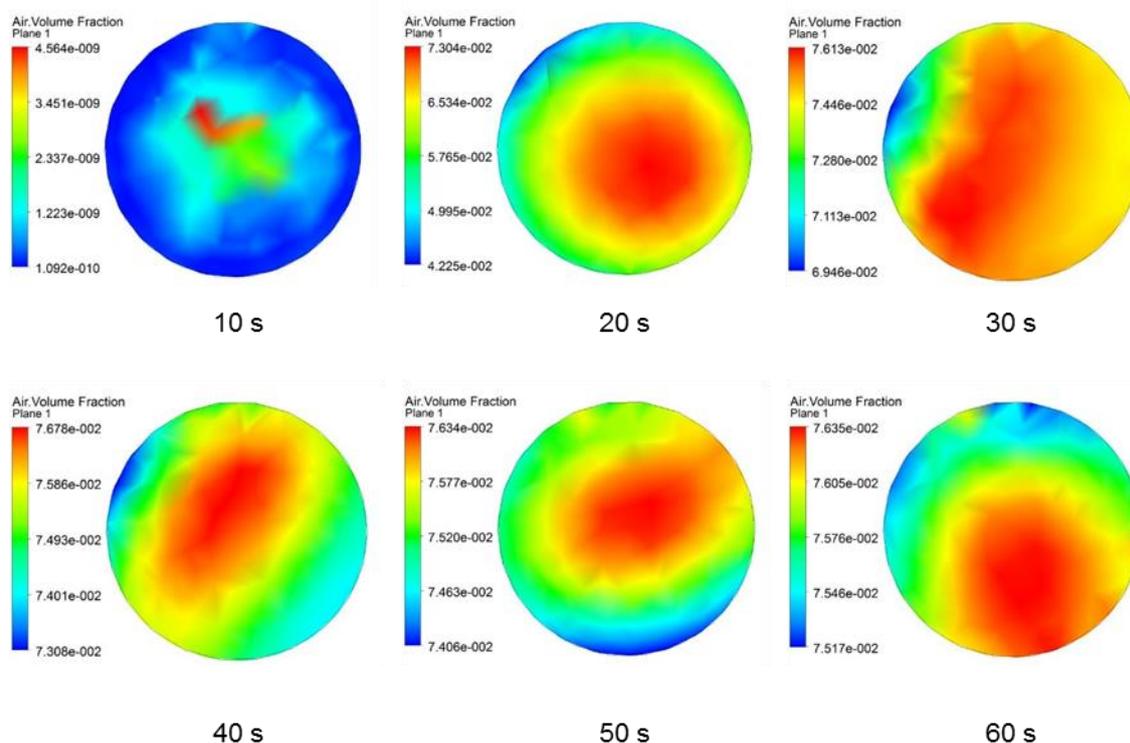


Figura 5. 3 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 4 m para o Caso 1

Analisando os resultados de fração volumétrica de ar ao longo da coluna, percebe-se que há formação de caminhos preferenciais ao longo do percurso, evidenciado pela diferença de concentração de ar nas seções consideradas e localizado na região central das mesmas seções.

Observa-se que, em geral, não há homogeneidade da distribuição de ar quando aplica-se uma vazão constante de água, nem ao longo do tempo nem ao longo da coluna. Porém, existem pontos em que essa situação não se aplica, como analisado em 2,5 m e 20 s e 4 m e 30 s, onde há uma tendência em estabelecer uma uniformidade na fração volumétrica de ar naquela região, o que se busca em aplicações deste tipo de equipamento.

5.1.2. Caso 2

Nesta etapa das simulações, mantiveram-se todas as condições iniciais de simulação do Caso 1, alterando-se somente a vazão de alimentação da água, agora em forma de pulsos, intitulado Caso 2 e que obedece a Equação 5.1.

$$Q_t = 0,02 \cdot \text{sen}(2 \cdot t) + 0,02 \quad (5.1)$$

Utilizaram-se os mesmos critérios de avaliação do Caso 1 para a análise desta situação. As Figuras 5.4, 5.5 e 5.6 apresentam a evolução temporal da fração volumétrica de ar em três diferentes alturas da coluna, sendo 0,5 m, 2,5 m e 4 m.

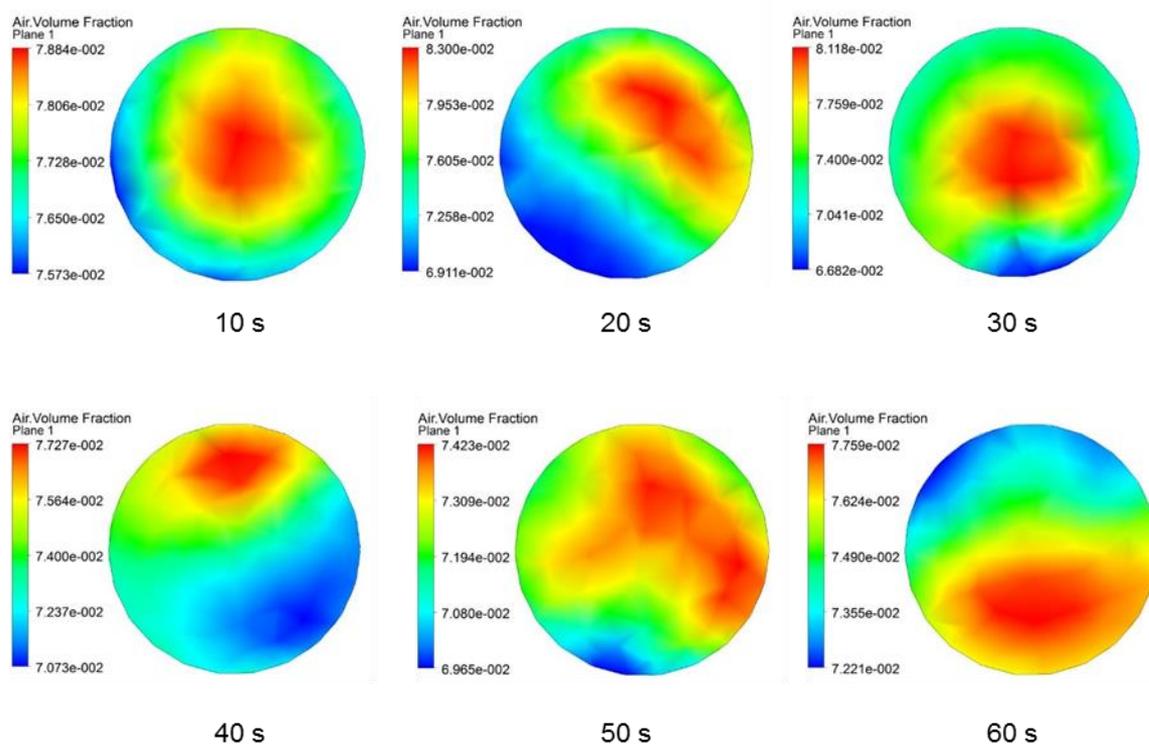


Figura 5. 4 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 0,5 m para o Caso 2

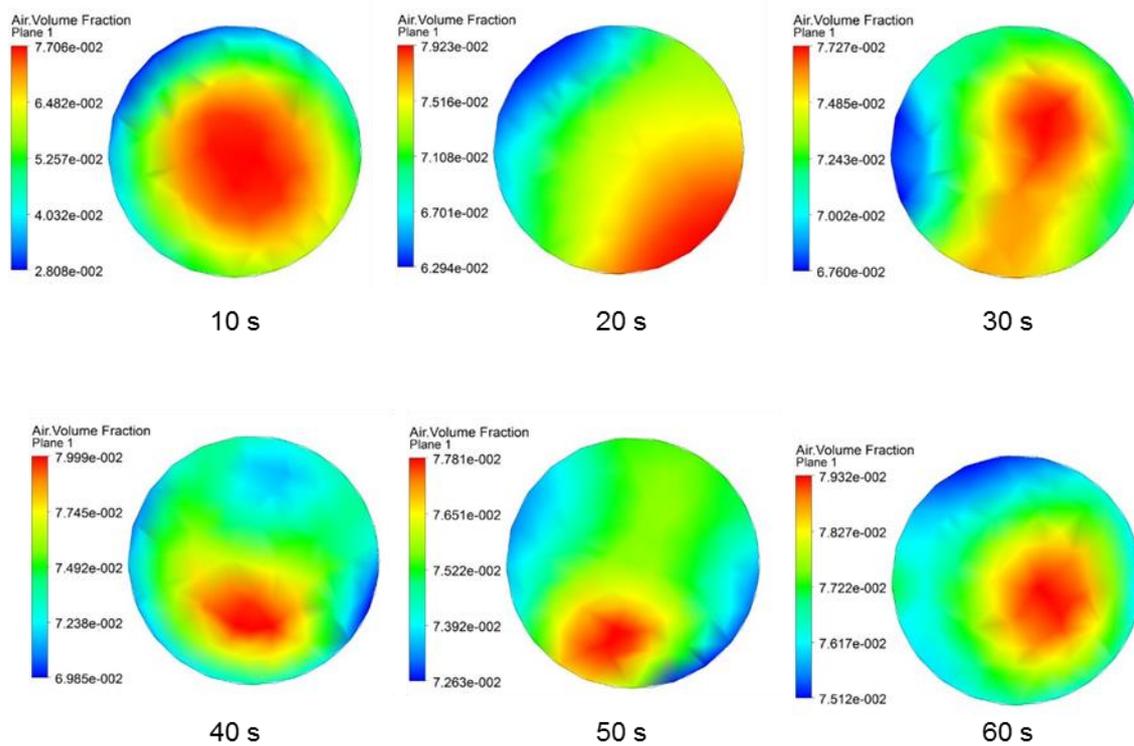


Figura 5. 5 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 2,5 m para o Caso 2

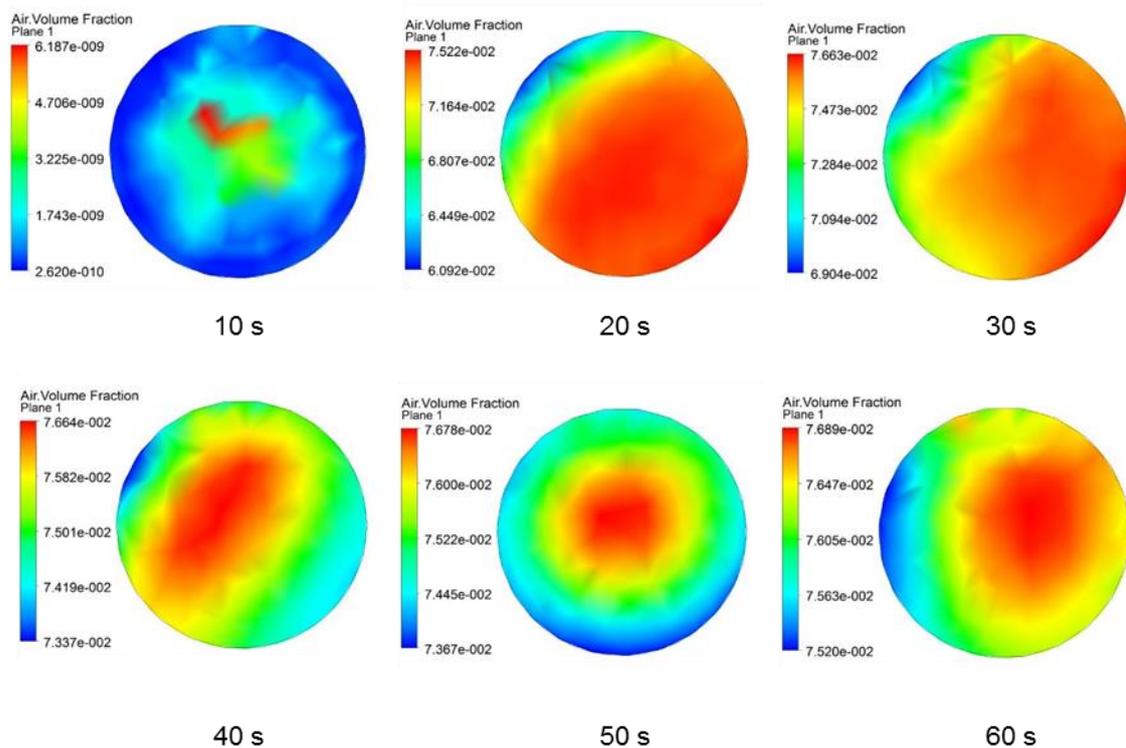


Figura 5. 6 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 4 m para o Caso 2

Pelos resultados obtidos nesta simulação, percebe-se que a utilização de uma perturbação suave na alimentação impacta positivamente no sistema, sem que haja uma alteração demasiada nas demais condições de operação.

As imagens demonstram que ainda há a formação de caminhos preferenciais no decorrer da coluna, porém, com menor intensidade e aumentando a homogeneidade de forma bastante sutil. Como observado no topo da coluna, 4 m, em 20 e 30 s. Isto se deve ao fato do pulso proporcionar uma zona de alta pressão acima e baixa pressão abaixo, fazendo com que haja uma recirculação de líquido no sistema.

Quando se compara o ponto 4 m e 20 s, dos Casos 1 e 2, observa-se que há uma melhor distribuição de ar na seção transversal, evidenciado pela diminuição do gradiente de fração volumétrica de ar nestes pontos, como mostra a Figura 5.7.

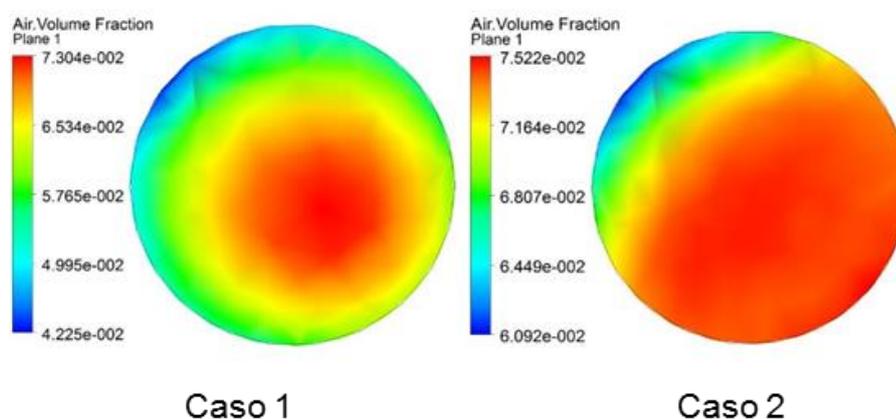


Figura 5. 7 – Comparação entre Fração volumétrica de ar em 4 m e 20 s para os Casos 1 e 2

5.1.3. Caso 3

Para esta etapa das análises, variou-se apenas o comportamento da alimentação em pulsos, onde a frequência de ciclos de injeção de água é intensificada quando comparada ao Caso 2, como ilustrado nas Figuras 4.4 e 4.5. A equação que rege a conduta da vazão de alimentação neste caso é descrita abaixo e as demais condições de simulação foram mantidas.

$$Q_l = 0,02 \cdot \text{sen}(10 \cdot t) + 0,02 \quad (5.2)$$

A fração volumétrica de ar e a distribuição do tempo de residência foram os parâmetros utilizados para análise. A fração volumétrica de ar em diferentes tempos e alturas da coluna estão ilustrados nas Figuras 5.8, 5.9 e 5.10.

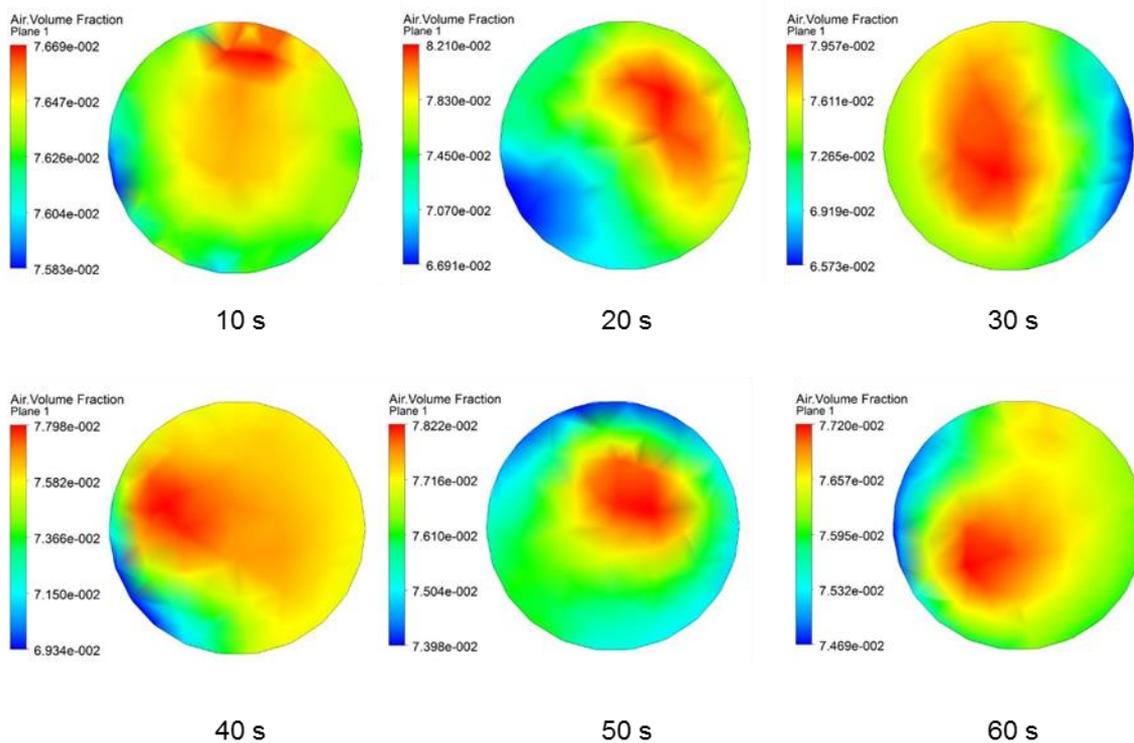


Figura 5. 8 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 0,5 m para o Caso 3

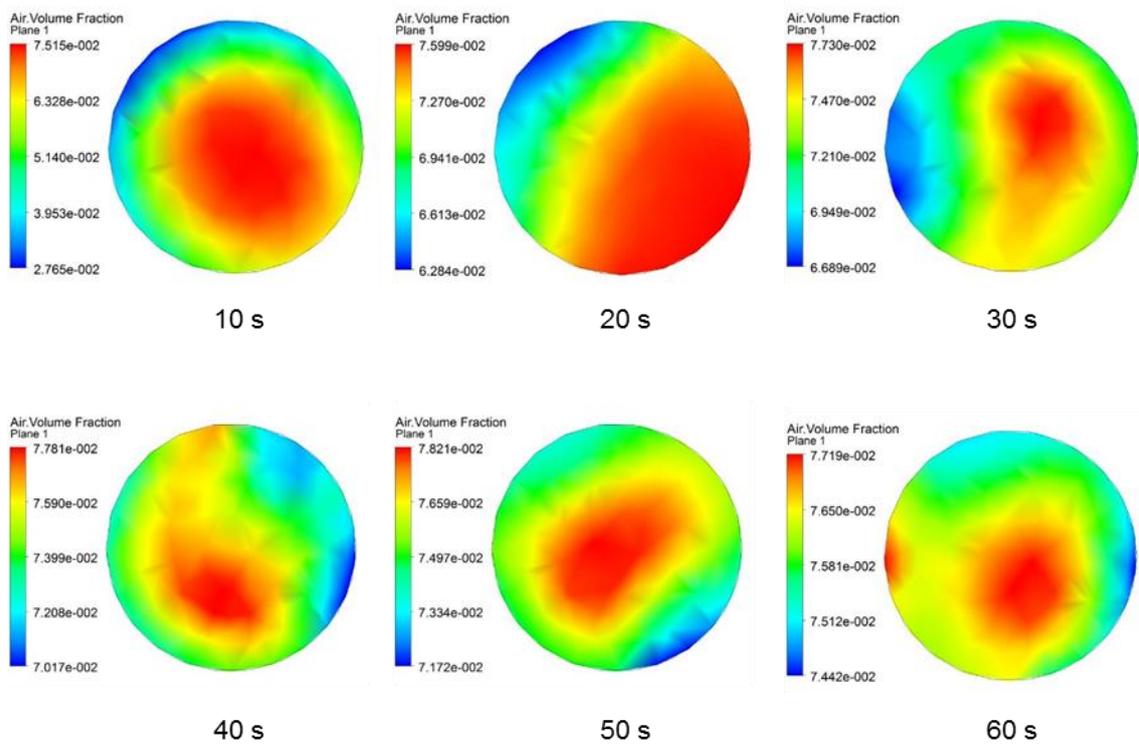


Figura 5. 9 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 2,5 m para o Caso 3

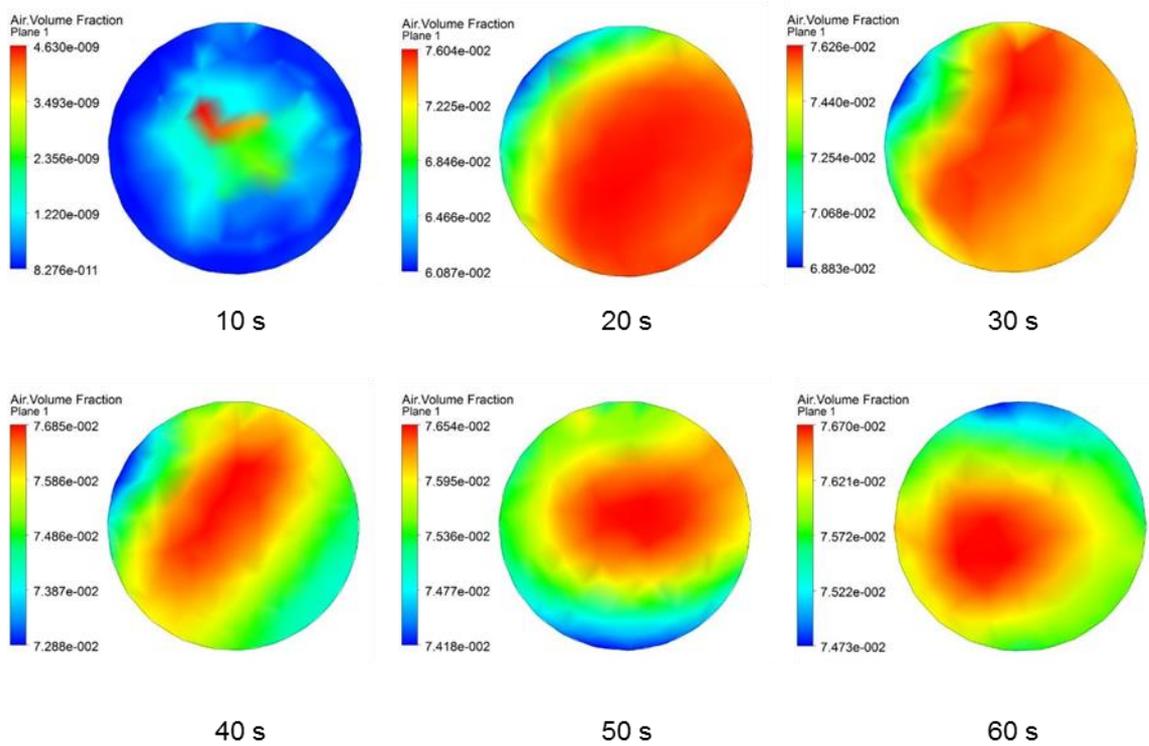


Figura 5. 10 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 4 m para o Caso 3

Da mesma forma como observado no Caso 2, o Caso 3 apresenta regiões de maior homogeneidade quando comparado com a simulação de alimentação contínua, Caso 1.

Entretanto observa-se pontos onde a homogeneização da fração volumétrica de ar é melhor que a observada no Caso 2, em 2,5 m em 50 s e no topo da coluna em 50 s. Isto é pontuado pela observação de uma área maior de regiões mais pobre em gás no Caso 2 do que no Caso 3, como mostra a Figura 5.11 e 5.12.

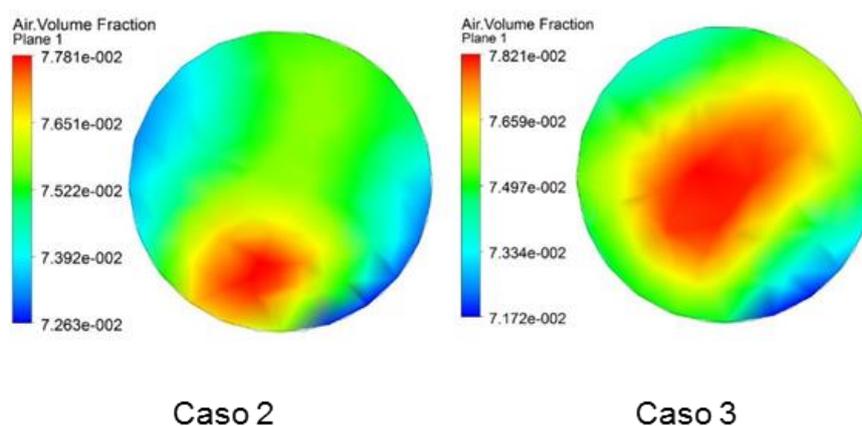


Figura 5. 11 – Comparação entre Fração volumétrica de ar em 2,5 m e 50 s para os Casos 2 e 3

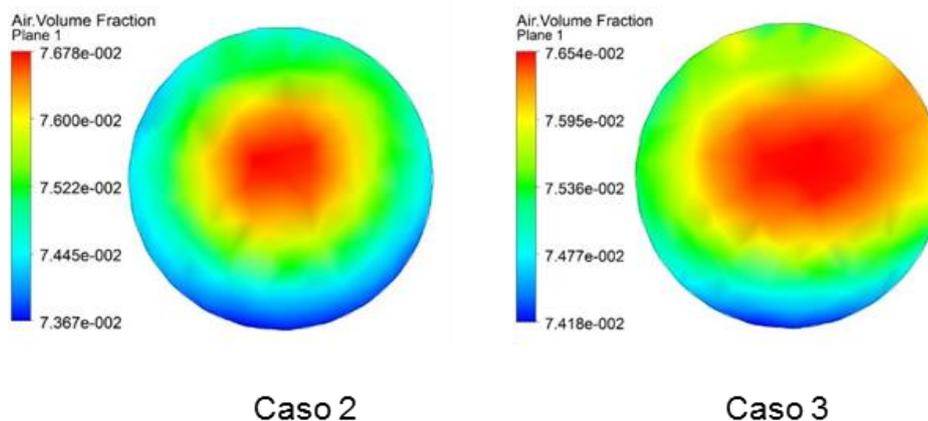


Figura 5. 12 – Comparação entre Fração volumétrica de ar em 4 m e 50 s para os Casos 2 e 3

5.1.4. Caso 4

No Caso 4, manteve-se todas as condições iniciais de simulação como nos demais casos, variando-se mais uma vez a forma de alimentação do líquido na coluna, desta vez não obedecendo a um comportamento senoidal, mas sim com uma

característica semelhante a vários degraus não acumulativos, como ilustra a Figura 4.6 e a equação (5.3).

$$Q_l = \frac{0,0319}{1+(e^{-(30.\text{sen}(\frac{t}{0,3}))})} + 0,003. \quad (5.3)$$

Os critérios analisados para avaliar o comportamento fluidodinâmico dos componentes presentes na coluna foram fração volumétrica de ar e distribuição do tempo de residência.

As Figuras 5.13, 5.14 e 5.15 apresenta a evolução temporal da fração volumétrica de ar em três diferentes alturas da coluna, sendo 0,5 m, 2,5 m e 4 m.

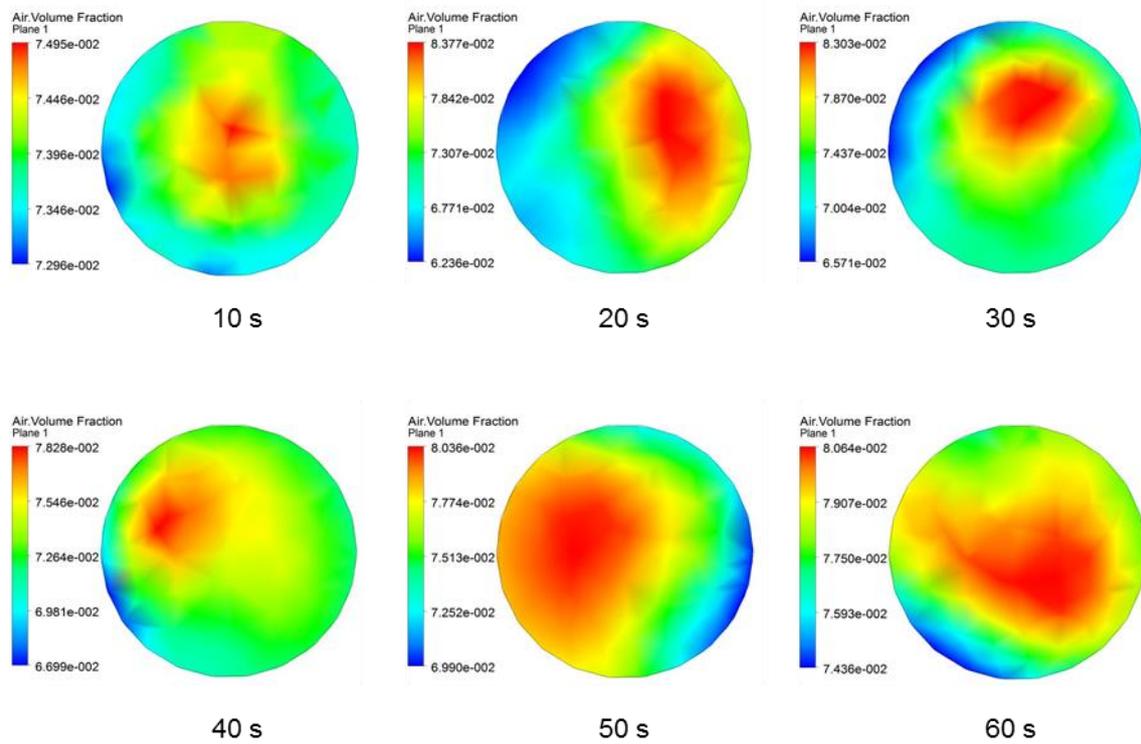


Figura 5. 13 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 0,5 m para o Caso 4

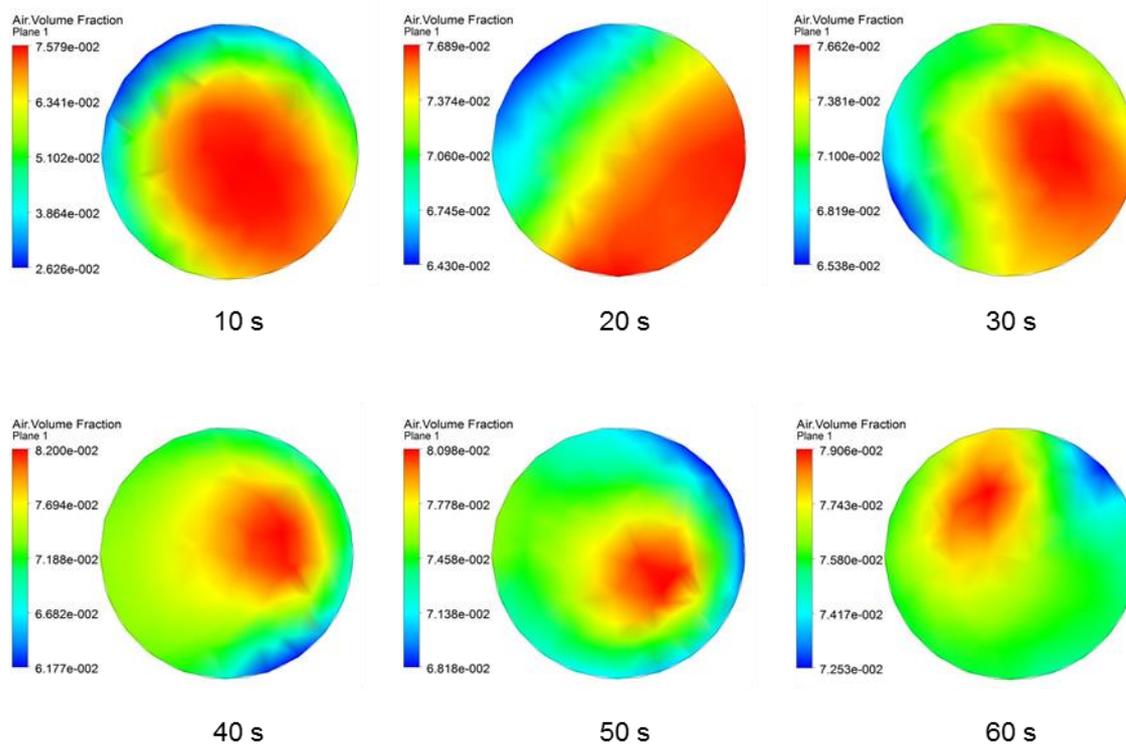


Figura 5. 14 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 2,5 m para o Caso 4

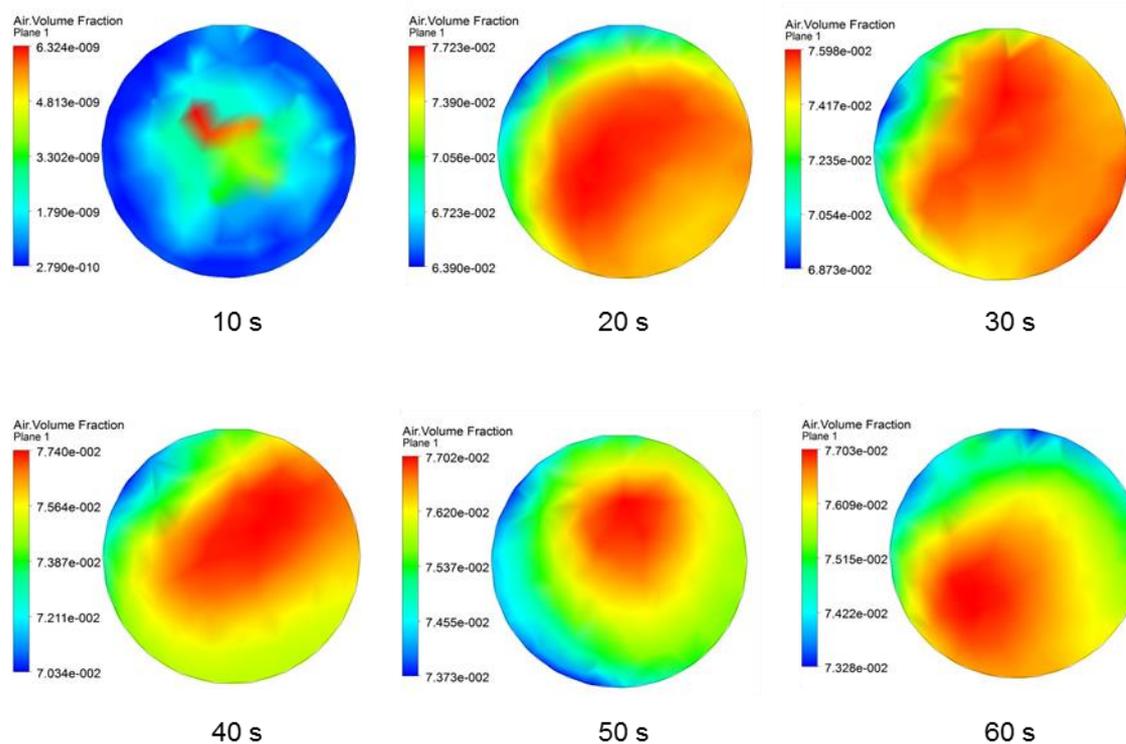


Figura 5. 15 – Evolução temporal da fração volumétrica de ar em 4 m para o Caso 4

Como forma de avaliar um pulso alternativo, os resultados mostraram que o pulso em forma de degraus comporta-se de forma semelhante ao pulso senoidal de menor frequência, tendo as regiões de homogeneização em pontos muito semelhantes e com características próximas.

5.1.5. Comparação entre as distribuições de tempo de residência

Para avaliar a distribuição do tempo de residência e a influência do perfil de alimentação na fluidodinâmica de coluna de bolhas, realizou-se a injeção de um escalar passivo no sistema, denominado traçador, e avaliou-se o seu comportamento em um ponto do sistema. Neste estudo determinou-se o 1,0 m de altura da coluna como ponto de análise.

O Gráfico 5.1 apresenta a distribuição do tempo de residência para os Casos 1 e 3, vazão de alimentação constante e vazão de alimentação senoidal com alta frequência.

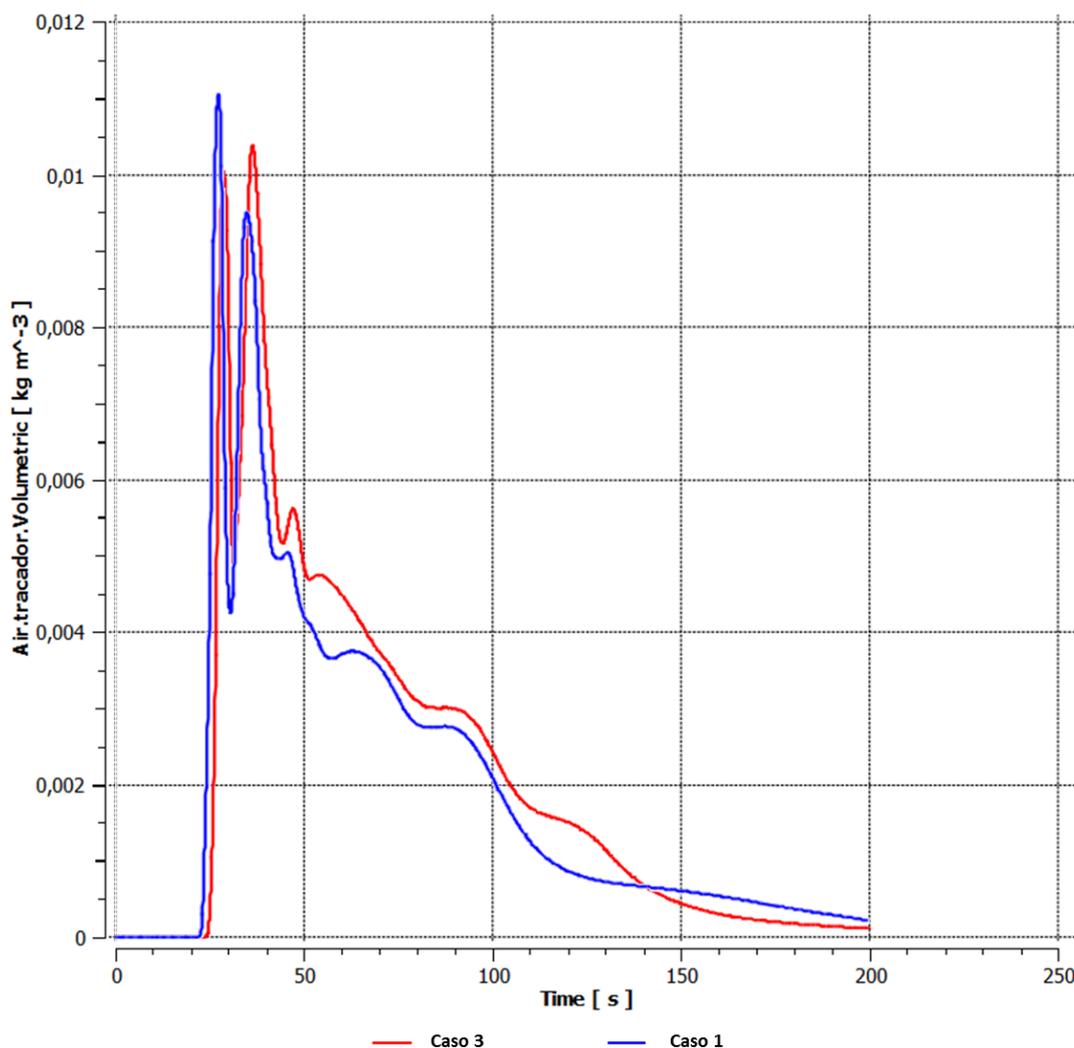


Gráfico 5. 1 – Distribuição do tempo de residência para os Casos 1 e 3

Percebe-se que a aplicação de uma perturbação na vazão de alimentação do líquido em coluna de bolhas influencia a distribuição do tempo de residência. Isso é notado pelo deslocamento da curva quando comparado com a alimentação contínua. Além disso, o tempo de pico entre os dois casos são distintos, o Caso 3 demora mais para atingir seu pico quando comparado ao Caso 1, o que caracteriza uma maior permanência dos fluidos dentro da coluna.

Em termos de fluidodinâmica esta alteração é sutil, porém, quando se trata de reação química, tal diferença pode ser mais significativa, uma vez que ocorre a transferência de calor e massa e a conversão dos produtos pode aumentar.

Após perceber que a alteração na vazão de alimentação realmente influencia na distribuição do tempo de residência, foi também analisado o impacto dos diferentes tipos pulsos na DTR. O Gráfico 5.2 ilustra esta comparação.

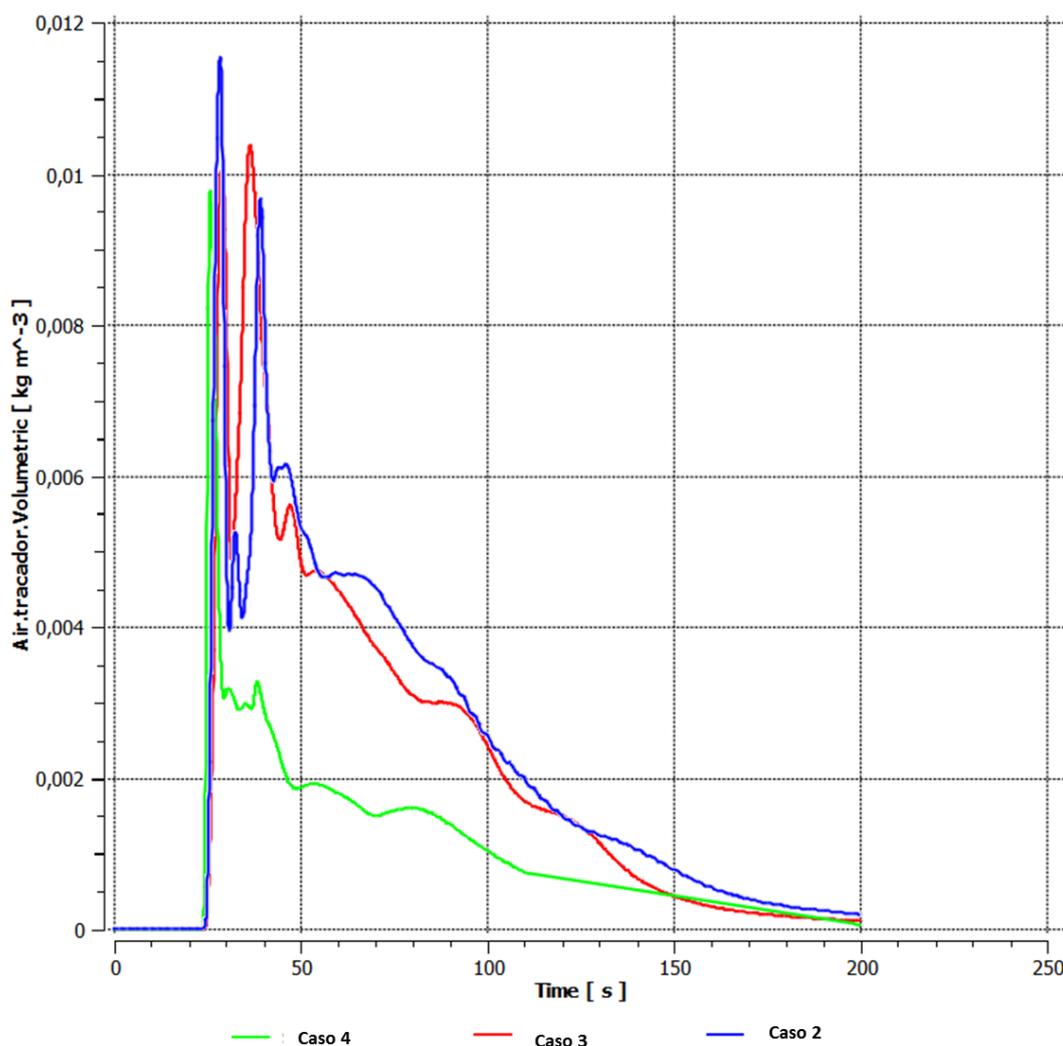


Gráfico 5.2 – Distribuição do tempo de residência para diferentes pulsos

Analisando as diferentes curvas de DTR, percebeu-se que as perturbações aplicadas a vazão de alimentação do líquido tiveram a capacidade de adiantar ou atrasar a curva, podendo ser utilizado tanto para aumentar ou diminuir a permanência dos fluidos na coluna.

5.2. Panorama geral sobre os resultados

Os resultados de homogeneização dentro da coluna, mostraram que os pulsos auxiliam nesse processo através de uma redução do gradiente de concentração, e através de um aumento no tempo em que os fluidos permanecem nessa condição.

Entretanto, não se pode afirmar com clareza qual entre os três pulsos teve o melhor resultado, afinal todos os pulsos apresentaram melhoras significativas quando comparados as simulações sem pulso, além de apresentarem diferentes pontos de homogeneidade em diferentes pontos.

Com base nisso, pode-se dizer que uma mescla entre os pulsos pode representar os melhores resultados neste quesito, fator que poderá ser estudado em trabalhos futuros.

Quanto a avaliação do tempo de residência, percebe-se que é possível alterá-lo tanto para mais quanto para menos.

Uma diminuição da distribuição do tempo de residência pode ser utilizada quando há interesse em produtos intermediários da reação, fato muito utilizado na produção de intermediários de petróleo.

Atualmente a tecnologia utilizada para a manipulação do tempo de residência envolve o uso de diferentes catalisadores. Por exemplo, em reações de alquilação, é o comum o uso de ácido sulfúrico e de ácido fluorídrico, para aumentar e diminuir o tempo de residência, respectivamente.

Essa técnica por mais que seja aplicada com sucesso nesse tipo de reação, acarreta num aumento dos custos envolvidos, pois há um maior gasto com catalisadores e diferenças nas condições de operação.

Ainda sobre reações de alquilação em colunas de bolhas, quando se utiliza o ácido sulfúrico como catalisador, a pressão utilizada fica entre 2 e 3 kgf/cm², enquanto que com o ácido fluorídrico a pressão utilizada é de 14 kgf/cm². Essa diferença nas condições de operação, além de dificultar as condições de projeto dos novos equipamentos, acarreta também em maiores custos de construção e de manutenção.

Tal dificuldade não é encontrada quando se utilizam pulsos para a obtenção dos produtos intermediários, pois uma simples modificação na forma de alimentação já se mostra suficiente para alterar a fluidodinâmica dentro da coluna de bolhas e alterar o tempo de permanência dos fluidos.

Já o aumento no tempo de residência pode ser aplicado tanto para diminuir o tamanho dos novos equipamentos quanto para aumentar a conversão em equipamentos já existentes. Com essa técnica também é possível ter uma redução na quantidade de subprodutos, ou produtos indesejados formados durante a reação.

Capítulo 6

Conclusões

Uma interpretação das simulações de escoamento multifásico gás-líquido em uma coluna de bolhas permitiu chegar a uma abordagem capaz de avaliar a influência da alimentação em forma de pulsos nesse tipo de equipamento. Foram testados quatro modelos de perfis de alimentação de líquido, sendo um com alimentação constante e os outros três com vazão de alimentação variável.

As simulações corroboraram o enfoque de que uma alteração no perfil da vazão de alimentação do líquido em colunas borbulhantes acarreta em uma alteração na distribuição no tempo de residência e na homogeneização da fração volumétrica de ar ao longo do equipamento.

O Caso 1 mostrou-se muito passível de aperfeiçoamento, pois em várias regiões da coluna observou-se uma heterogeneidade na distribuição da concentração de ar, o que acarreta em uma baixa eficiência dos fenômenos de transporte que ocorrem em dispositivos com esta finalidade, reatores por exemplo.

O segundo Caso demonstrou que uma perturbação suave na alimentação pode contribuir positivamente para a homogeneização da fração, sem que haja uma alteração demasiada nas condições de operação.

Com o terceiro Caso, procurou-se avaliar a influência da frequência dos pulsos. Nesta situação, na curva de distribuição do tempo de residência não houveram alterações significativas quando comparado ao Caso 2, salvo pela diminuição do pico de concentração do traçador, o que pode ser uma característica de pulsos mais frequentes, situação que poderá ser melhor avaliada em trabalhos futuros. Entretanto, esta forma de pulso resultou em uma homogeneização da fração volumétrica de ar por um período de tempo mais prolongado, situação desejada uma vez que a existência de caminhos preferenciais por ser controlada.

Já o Caso 4 não demonstrou boas características de homogeneização, entretanto através desse perfil de alimentação, foi possível demonstrar que a

distribuição do tempo de residência também pode ser retardada, fator que pode ser utilizado quando se há interesse nos produtos intermediários da reação.

Dessa forma, pode-se dizer que a manipulação dos diferentes pulsos em uma mesma coluna garante que esta seja utilizada para diferentes fins, tanto para o aumento quanto diminuição do tempo de residência dos fluidos.

Dentre os Casos estudados, pode-se concluir que o pulso senoidal com maior frequência, Caso 3, apresentou o maior impacto referente a homogeneidade do *hold up* de gás ao longo da coluna. No que se refere a curva de distribuição do tempo de residência, os resultados mostraram-se muito semelhantes ao observados no Caso 2, onde ambos os pulsos deslocam positivamente a curva.

Assim sendo, a aplicação dos pulsos de forma correta pode auxiliar na homogeneização da coluna e no aumento do tempo de residência. Tais fatores resultam em um aumento da conversão em reações químicas.

Quando se avalia a influência da forma de alimentação em aspectos fluidodinâmicos, as contribuições podem não ser tão representativas, porém quando tais mudanças são conciliadas como parâmetros de reações químicas, os resultados podem ser mais expressivos, fato que também pode ser melhor avaliado em trabalhos futuros.

Os pulsos que foram analisados neste trabalho são apenas um indicativo de que o tempo de residência em colunas borbulhantes pode ser manipulado a fim de garantir um produto com melhores especificações, o que não significa que os perfis de alimentação aqui estudados são os melhores, pois estes ainda estão passíveis de adaptações.

6.1 Sugestões para trabalhos futuros

Para estudos futuros sugere-se:

- Combinação de pulsos a fim de se obter um perfil de alimentação que otimize a distribuição do ar no interior da coluna;
- Mudanças na amplitude dos pulsos;
- Determinação dos melhores pulsos para aumentar e diminuir a distribuição do tempo de residência;
- Medição da concentração do traçador em pontos mais acima da coluna;
- Simulações com fluidos mais viscosos ou mais densos;
- Simulações envolvendo reações químicas, com uma avaliação da concentração dos produtos no topo da coluna.

Referências Bibliográficas

ANSYS CFX®. **ANSYS CFX-Solver Theory Guide**. Release 12.0. Chapter 2: turbulence and wall function. Abril, 2009.

BHATT, Nirav; AMRHEIN, Michael; BONVIN, Dominique. Extents of reaction, mass transfer and flow for gas-liquid reaction systems. **Ind. Eng. Chem. Res**, v. 49, p. 7704-7717, 2010.

CHEN, J.; GUPTA, P.; DEGALEESAN, S.; AL-DAHMAN, M. H.; DUDUKOVIC, M. P.; TOSELAND, B. A. Gas hold up distributions in large-diameter bubble columns measured by computed tomography. **Flow Measurement and Instrumentation**, v.9, p.91–101, 1998

CLIFT, R., GRACE, J. R., WEBER, M. E. **Bubbles, Drops and Particles**. San Diego, EUA; Academic Press Inc., 1978.

DECKWER, W.D. **Bubble Column Reactors**. Chichester: John Wiley & Sons Ltd., p.532, 1992.

DIONÍSIO, R. P. **Simulação tridimensional de uma coluna de bolhas – Diferentes abordagens geométricas e modelagem**. 2008. 79f. Dissertação de Mestrado – Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas, 2008.

FOGLER, S. H.; **Elementos de engenharia das reações químicas**. Rio de Janeiro: Editora LTC, 2002, 890 p.

GUANG LI; YANG, Xiaogang; DAI, GANCE. CFD simulation of effects of the configuration of gas distributors on gas-liquid flow and mixing in a bubble column. **Chemical Engineering Science**. v. 64, p. 5104-5116, 2009.

HARRIOTT, Peter. **Chemical reactor design**. New York: Marcel Dekker, p.429. 2003.

JOSHI, J.B., TABIB, M.V., ROY, S.A. CFD simulation of bubble column – An analysis of interphase forces and turbulence models. **Chemical Engineering Journal**, v.139, p. 589-614, 2008.

KANTARCI, N.; BORAK, F.; ULGEN, K. O. Review Bubble column reactors, **Process Biochemistry** v.40, p.2263–2283, 2005.

KRISHNA, R.; van BATEN, J. M.; URSEANU, M. I. Three-phase Eulerian simulations of bubble column reactors operating in the churn-turbulent regime: a scale-up strategy. **Chemical Engineering Science**, v. 55, p. 3275-3286, 2000.

KRUGER, M. **Desenvolvimento de um procedimento computacional para estudo do escoamento no interior de distribuidores de lingotamento contínuo**. 2010. 105f. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC, Florianópolis, 2010.

KULKARNI, A.A.; EKAMBARA, K.; JOSHI, J.B. On the development of flow pattern in a bubblecolumn reactor: Experiments and CFD. **Chemical Engineering Science**, v. 62, p. 1049-1072, 2009.

LAW, D., BATTAGLIA, F., HEINDEL, T. Model Validation for Low and High Superficial Gas Velocity Bubble Column Flows. **Chemical Engineering Science**, v. 63, p. 4605-4616, 2008.

LOPES, G. C. **Desenvolvimento de Modelo Numérico Tridimensional e Elíptico para o Estudo de Escoamentos no Interior de Dutos Cilíndricos**. 2008. Dissertação de Mestrado – Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas, 2008.

LOPES, M. F. M.; **Simulação tridimensional de uma coluna de bolhas cilíndrica – Análise em sistema bifásico por técnica de velocimetria por imagem de partícula (PIV), Shadow Imaging e Simulação**. 2012. Dissertação de Mestrado – Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas, 2012.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. Rio de Janeiro, Brasil: 2a Edição; LTC Editora, 2004.

MONTANE, G. MOSTEK, M., JAHODA, M., MAGELLI, F. CFD simulations and experimental validation of homogenisation curves and mixing time in stirred Newtonian and pseudoplastic liquids. **Chemical Engineering Science**, v.60, p.2427-2437, 2005.

MORI, E. D.; **Simulação de coluna de bolhas em leito de lama por técnicas da fluidodinâmica computacional**. 2012. Dissertação de Mestrado – Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 2012.

PAUL, Edward L.; ATIEMO-OBENG, V.; KRESTA, Suzanne M. **Handbook of industrial mixing: Science and practice**. 1. ed. New Jersey: Wiley Interscience, p.1432, 2004.

RAWLINGS, James B.; Ekerdt, John G. **Chemical reactor analysis and design fundamentals**. 1. ed. Nob Hill Publishing, p.664, 2002.

ROSA, L. M. **Aplicação de Técnicas CFD para o Cálculo de Escoamento em Meio Reativo em Riser**. 2008. 56f. Tese de Doutorado – Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas, 2008.

RUSCHE, R. **Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions**. 2002. Tese de Doutorado – Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, Technology & Medicine, Londres, 2002.

SANTOS, V. A.; DANTAS, C. C.; Comparação entre método de cálculo de tempo de trânsito no riser de um modelo a frio e uma unidade de FCC. **Revista Química & Tecnologia**, v. 2, p. 19-24, 2003.

SANYAL, J.; SERGIO, V.; ROY, S.; DUDUKOVIC, M.P. Numerical simulation of gas-liquid dynamics in cylindrical bubble column reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 5071-5083, 1999.

SASSAKI, R. A.; **Distribuição de tempos de residência em sistemas alimentados com vazão variável**. 2005. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2002.

WALLIS, G.B. **One-dimensional two-phase flow**. McGraw-Hill, New York, NY, USA, 1969.

ZUBER, N.; FINDLAY, J.A. Average volumetric concentration in two phase flow systems. **Journal of Heat Transfer**, v. 87, p. 453-468, 1969.