

Camila da Silva Gonçalves

**SIMULAÇÃO DE PELÍCULAS LÍQUIDAS DESCENDENTES
EM GEOMETRIA AXISSIMÉTRICA COM E SEM
EVAPORAÇÃO**

Dissertação submetida ao Programa de Pós Graduação da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Marinho Bastos Quadri.

Florianópolis
2015

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

Gonçalves, Camila da Silva
Simulação de películas líquidas descendentes em geometria
axissimétrica com e sem evaporação / Camila da Silva
Gonçalves ; orientador, Marinho Bastos Quadri -
Florianópolis, SC, 2015.
163 p.

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

Inclui referências

1. Engenharia Química. 2. Escoamento multifásico. 3.
Coluna de parede molhada. 4. Filme descendente. 5.
Evaporação. I. Bastos Quadri, Marinho. II. Universidade
Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Química. III. Título.

Camila da Silva Gonçalves

**SIMULAÇÃO DE PELÍCULAS LÍQUIDAS DESCENDENTES
EM GEOMETRIA AXISSIMÉTRICA COM E SEM
EVAPORAÇÃO**

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de “Mestre em Engenharia Química”, e aprovada em sua forma final pelo Programa Pós Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina.

Florianópolis, 13 de março de 2015.

Prof. Dr. Ricardo Antônio Francisco Machado
Coordenador do Curso

Banca examinadora:

Professor Dr. Marinho Bastos Quadri
Orientador
Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

Dr. Agenor Furigo Junior
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC

Dr. Carlos Alberto Claumann
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC

Dr. Ivan Carlos Georg
Universidade Regional de Blumenau – FURB

Dedico este trabalho aos meus queridos pais, Marlene e Albani.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, à Deus, por ter me permitido chegar até aqui;

À Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) pelo apoio fornecido na forma do Programa de Recursos Humanos PRH 34 ANP/MCT;

Ao meu orientador professor Dr. Marinho Bastos Quadri, pela orientação assídua e dedicada, pois sem a mesma, não seria possível desenvolver este trabalho;

Ao Departamento de Engenharia Química e de Alimentos (EQA) por toda prestatividade;

Ao Dr. Carlos Alberto Claumann pela valiosa ajuda e disposição;

Ao professor Dr. Ivan Carlos Georg por todo conhecimento compartilhado;

Ao professor Dr. Agenor Furigo Junior, por sua contribuição;

Ao Edevilson da Silva, secretário da pós-graduação de Engenharia Química, por todo trabalho realizado a favor dos alunos;

Aos meus colegas de laboratório, Deise, Taysnara, Fábio, Ianto, Seldis, Débora, Stéphanie, Rafael, Diego, Rodrigo, Valdir, Andressa, Carina, Vivian e Vanderlei por terem tornado este período mais doce;

Aos meus pais, Marlene Teixeira e Albani Gonçalves e aos meus irmãos, Lucas, Vanessa e Roger, pela torcida e apoio durante esta caminhada;

Ao meu noivo, Renato Paranaguá da Silva, pela ajuda, estímulo e por sempre acreditar em mim;

Aos meus demais familiares, por todo carinho, que foi fundamental nesta jornada;

A todos aqueles que contribuíram de alguma forma para a realização deste trabalho e a todos aqueles que torceram/torcem por mim.

"Seja você quem for, seja qual for a posição social que você tenha na vida, a mais alta ou a mais baixa, tenha sempre como meta muita força, muita determinação e sempre faça tudo com muito amor e com muita fé em Deus, que um dia você chega lá. De alguma maneira você chega lá." (Ayrton Senna)

RESUMO

No intuito de aprimorar a técnica de destilação convencional, foi criada a nova técnica de destilação por película descendente, cuja operação envolve a obtenção de uma película uniforme e estável ao longo da coluna. Esta tecnologia destaca-se pela utilização de pequena quantidade de fluido atrelada conseqüentemente à redução da energia necessária para a destilação. Como primeiros passos para aprofundar conhecimentos desse tipo de sistema, é necessário o estudo detalhado dos fenômenos de transferência que ocorrem na coluna durante a consolidação do filme sobre a parede e do processo de evaporação parcial do mesmo. Diante desta motivação, neste trabalho, considerando-se diferentes fluidos, procurou-se simular o desenvolvimento de filmes líquidos descendentes sobre a parede interna de uma coluna cilíndrica, na condição isotérmica e com aquecimento da parede, gerando neste caso situações de vaporização parcial do líquido. Para a representação desta situação física, utilizou-se de uma ferramenta CFD (Fluidodinâmica Computacional), no caso o *Comsol Multiphysics*[®], em geometria 2D axissimétrica. Além das equações de Navier-Stokes, da equação da conservação da massa e das equações de transferência de calor com mudança de fase, utiliza-se equações adicionais para o acompanhamento da interface líquido/gás/vapor, provenientes do método *phase field* para escoamentos bifásicos. Para a resolução das equações diferenciais, o *software* em questão se utiliza do método dos elementos finitos. Assim, foi possível estudar padrões de comportamento fluidodinâmico e de transferência de calor no desenvolvimento dessa operação. Para representar os escoamentos, foram testados três fluidos de diferentes viscosidades e massa específicas, a fim de avaliar a influência destas propriedades sobre alguns aspectos e parâmetros do processo, como espessura do filme, perfis de velocidade das fases e vazão de alimentação. Para representar os fluidos viscosos, foram utilizados óleo de soja e óleo Spindura, sendo o primeiro o mais viscoso. O fluido menos viscoso foi representado pela água. Pôde-se verificar que os fluidos mais viscosos apresentaram maiores espessuras e menores velocidades da fase líquida e gasosa. Diante do objetivo de se estudar o fenômeno de transferência de calor com mudança de fase, neste caso somente para a água, foi imposta a condição de aquecimento da parede da coluna e os resultados obtidos foram comparados com o escoamento da água à temperatura ambiente. Para estudar este fenômeno, foram aplicadas temperaturas de 110°C, 120°C, 130°C e 140°C, assumindo um valor uniforme de temperatura na parede da coluna. Constatou-se que, quanto maior a temperatura da

parede, menor a espessura do filme descendente, maior o fluxo de calor e consequentemente maior a taxa de evaporação. Em relação à evaporação do filme descendente, para a menor temperatura aplicada (110°C), obteve-se 0,25% de vapor e para a maior temperatura aplicada (140°C), a quantidade de vapor gerado foi de 17,50% em relação à massa de líquido injetada. Frente aos resultados obtidos, conclui-se que o modelo utilizado para simular a coluna de película descendente com e sem transferência de calor e mudança de fase, mostrou-se apto a reproduzir a realidade física do sistema, podendo se constituir em valiosa ferramenta para o projeto e condução das operações afins.

Palavras-chave: Escoamento multifásico. Coluna de parede molhada. Filme descendente. Mudança de fase. Evaporação.

ABSTRACT

In order to improve the conventional distillation technique, it was created a new falling film distillation technique which operation involves obtaining a stable and uniform film along the column. This technology is distinguished by the use of small amount of fluid linked therefore to the reduction of energy required for distillation. As first steps to deepen knowledge of this type of system, we need a detailed study of transfer phenomena that occur in the column during the consolidation of the film on the wall and the process of partial evaporation of the same. In face of this motivation and considering different fluids, in this work we tried to simulate the development of falling liquid film on the inner wall of a cylindrical column in the isothermal condition and heating wall, creating situations of partial vaporization of the liquid. For the physical representation of this situation, we used a CFD (Computational Fluid Dynamics) tool, the Comsol Multiphysics®, with a 2D axisymmetric geometry. In addition to the Navier-Stokes equations, the equation of conservation of mass and heat transfer equations with phase change, additional equations are used for monitoring the liquid/gas interface/vapor from the phase field method for two-phase flows. For the resolution of differential equations, the software uses the finite element method. Thus, it was possible to study patterns of fluid dynamic behavior and heat transfer in the development of this operation. Three fluids of different viscosities and specific mass were tested to represent the flows in order to evaluate the influence of these properties of some aspects and process parameters such as film thickness, the phase velocity profiles and feed flow rate. To represent the viscous fluid, soybean oil and Spindura oil were used, the first being the more viscous. The less viscous fluid was represented by water. It was verified that the most viscous fluids showed a thicker pattern and slower speeds of liquid and gas phase. Given the objective of studying the phenomenon of heat transfer by phase change, in this case only for water, the condition of heating of the wall was imposed and the results were compared with the flow of water at room temperature. To study this phenomenon, temperatures of 110°C, 120°C, 130°C and 140°C were applied, assuming a uniform temperature value on the wall of the column. It was found that the higher the temperature of the wall, the smaller the thickness of the falling film, the greater the heat flow and a consequently increasing of the evaporation rate was observed. In relation to the falling film evaporation, for the lower temperature applied (110°C) were obtained 0.25% of steam and for the higher temperature applied (140°C), the amount of steam generated was 17.50% in relation

to mass of injected liquid. Based on the results obtained, it is concluded that the model used to simulate the falling film column with and without heat transfer and phase change, proved able to reproduce the physical reality of the system, which may constitute a valuable tool for design and conduct of related operations.

Keywords: Multiphase flow. Wetted column. Falling film. Phase change. Evaporation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Variação da temperatura e entalpia durante a mudança de fase	40
Figura 2 - Curva de ebulição da água à pressão atmosférica.....	42
Figura 3 - Imagem da coluna de destilação.	47
Figura 4 - Desenho esquemático da coluna de destilação por película descendente.	47
Figura 5 - Diagrama esquemático do protótipo de destilação dimensões reduzidas.	48
Figura 6 - Padrão de escoamento em dutos horizontais ou inclinados. .	52
Figura 7 - Padrão de escoamento em tubulações verticais.	53
Figura 8 - Perfil de velocidade médio para os escoamentos laminar e turbulento.	55
Figura 9 - Fluxograma para a resolução de um problema utilizando CFD.	57
Figura 10 - Parte superior da coluna (cone de distribuição da alimentação) em 3D.	61
Figura 11 - Geometria da coluna em 2D axissimétrico.	62
Figura 12 - Geometria da coluna em 3D.	62
Figura 13 - Malha estruturada.	69
Figura 14 - Malha não estruturada – elementos triangulares.....	69
Figura 15 - Malha adaptativa no primeiro passo (a) e no último passo de sua formação (b).....	69
Figura 16 - Malha mista – elementos triangulares com elementos retangulares na parede, para os casos de turbulência.	70
Figura 17 - Malha estruturada.	83
Figura 18 - Malha triangular para escoamento turbulento.	84
Figura 19 - Malha triangular para escoamento laminar.....	85
Figura 20 - Qualidade da malha triangular.....	86
Figura 21 - Qualidade da malha estruturada.....	86
Figura 22 - Filme líquido descendente para a vazão de 25 kg/h.	88
Figura 23 - Filme líquido descendente para a vazão de 12,5 kg/h.	89
Figura 24 - Espessura do filme de óleo de soja para a vazão de 25 kg/h.	90
Figura 25 - Espessura do filme de óleo de soja para a vazão de 12,5 kg/h.....	91

Figura 26 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa para a vazão de 25 kg/h em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna.....	92
Figura 27 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa para a vazão de 12,5 kg/h em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna.....	93
Figura 28 - Comparação entre os perfis de velocidade para o óleo de soja: Teórico frente ao simulado.....	94
Figura 29 - Filme líquido descendente para a vazão de 25 kg/h.....	96
Figura 30 - Filme líquido descendente para a vazão de 12,5 kg/h.....	97
Figura 31 - Espessura da película para a vazão de 25 kg/h.....	98
Figura 32 - Espessura da película para a vazão de 12,5 kg/h.....	98
Figura 33 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa para a vazão de 25 kg/h em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna.....	100
Figura 34 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa para a vazão de 12,5 kg/h em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna.....	101
Figura 35 - Comparação entre os perfis de velocidade para o óleo Spindura: Teórico frente ao simulado.....	101
Figura 36 - Película descendente de água em condição isotérmica. ...	103
Figura 37 - Perfil do filme descendente próximo à saída da coluna...	104
Figura 38 - Espessura do filme descendente de água.....	105
Figura 39 - Perfil de velocidade na fase líquida e gasosa para o tempo final de simulação em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna.....	106
Figura 40 - Comparação entre os perfis de velocidade para a água a 25°C: Teórico frente ao simulado.....	107
Figura 41 - Balanço de massa na coluna.....	108
Figura 42 - Desenvolvimento do filme submetido a uma temperatura de 110°C na parede da coluna.....	109
Figura 43 - Perfil do filme descendente próximo à saída da coluna, a 110°C.....	110
Figura 44 - Desenvolvimento do filme submetido a uma temperatura de 120°C na parede da coluna.....	111
Figura 45 - Perfil do filme descendente próximo à saída da coluna, a 120°C.....	112

Figura 46 - Desenvolvimento do filme submetido a uma temperatura de 130°C na parede da coluna.	112
Figura 47 - Perfil do filme descendente próximo à saída da coluna, a 130°C.....	113
Figura 48 - Desenvolvimento do filme submetido a uma temperatura de 140°C na parede da coluna.	113
Figura 49 - Perfil do filme descendente próximo à saída da coluna, a 140°C.....	114
Figura 50 - Espessura do filme de água a 110°C.....	115
Figura 51 - Espessura do filme de água a 120°C.....	116
Figura 52 - Espessura do filme descendente de água a 130°C.	117
Figura 53 - Espessura do filme descendente de água a 140°C.	118
Figura 54 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna para uma temperatura de 110°C na parede, no tempo final de simulação.....	119
Figura 55 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna para uma temperatura de 120°C na parede, no tempo final de simulação.....	120
Figura 56 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna para uma temperatura de 130°C na parede, no tempo final de simulação.....	121
Figura 57 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna para uma temperatura de 140°C na parede, no tempo final de simulação.....	121
Figura 58 - Comparação entre os perfis de velocidade para a água sob aquecimento: Teórico frente ao simulado.	122
Figura 59 – Distribuição da temperatura na coluna para 110°C na parede.	123
Figura 60 - Distribuição da temperatura na coluna para 120°C na parede.	124
Figura 61 – Distribuição da temperatura na coluna para 130°C na parede.	125
Figura 62 – Distribuição da temperatura na coluna para 140°C na parede.	125

Figura 63 - Temperatura na parede da coluna, a 110°C.	127
Figura 64 - Temperatura na parede da coluna, a 120°C.	127
Figura 65 - Temperatura da parede da coluna, a 130°C.	128
Figura 66 - Temperatura da parede da coluna, a 140°C.	128
Figura 67 - Variação da temperatura no centro da coluna para: (A) 110°C, (B) 120°C, (C) 130°C e (D) 140°C.	130
Figura 68 - Variação da massa específica do vapor d'água para o tempo final de simulação para: (A) 110°C, (B) 120°C, (C) 130°C e (D) 140°C.	131
Figura 69 - Fluxo de calor total na parede da coluna, em direção ao raio para: (A) 110°C, (B) 120°C, (C) 130°C e (D) 140°C nos tempos de 1s a 10s.	133
Figura 70 - Coeficiente convectivo de transferência de calor simulado para as temperaturas de 110°C, 120°C, 130°C e 140°C.	134
Figura 71 - Coeficiente convectivo de transferência de calor teórico para as temperaturas de 110°C, 120°C, 130°C e 140°C.	135
Figura 72 - Balanço de massa na coluna a 110°C.	136
Figura 73 - Balanço de massa na coluna a 120°C.	137
Figura 74 - Balanço de massa na coluna a 130°C.	138
Figura 75 - Balanço de massa na coluna a 140°C.	138
Figura 76 - Relação entre o percentual de evaporação e a temperatura fornecida à parede.	139
Figura 77 - Escoamento do filme descendente de água a 230°C na parede da coluna.	141
Figura 78 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna para uma temperatura de 230°C na parede, no tempo final de simulação.	142
Figura 79 - Variação da temperatura no centro da coluna.	143
Figura 80 - Distribuição da temperatura na coluna.	144
Figura 81 - Variação da massa específica do vapor.	145
Figura 82 - Fluxo de calor total na parede da coluna, na direção r.	145
Figura 83 - Espessura do filme líquido descendente.	146
Figura 84 - Balanço de massa na coluna, a 230°C na parede.	147
Figura 85 - Comparação entre a curva de ebulição da água à pressão atmosférica com os resultados simulados.	148

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Condições de contorno para o escoamento isotérmico da água (sistema água/vapor d'água).....	64
Tabela 2 - Condições de contorno para o escoamento com transferência de calor e mudança de fase para o sistema água/vapor d'água.	64
Tabela 3 - Condições de contorno para o escoamento dos óleos de soja e Spindura (sistema óleo/ar).....	65
Tabela 4 - Propriedades físicas do óleo de soja.....	65
Tabela 5 - Propriedades físicas do óleo Spindura.	66
Tabela 6 - Propriedades físicas da água para a temperatura de 25°C e para a condição não isotérmica*.	66
Tabela 7 - Propriedades físicas do vapor d'água a 100°C.....	67
Tabela 8 - Resultados obtidos para o escoamento dos óleos.....	102
Tabela 9 - Comparação entre os principais parâmetros com e sem adição de calor.....	140

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descrição	Unidade (S.I)
ρ	Massa específica	kg/m ³
C_p	Capacidade de Calor específico	J/(kg.K)
T	Temperatura	K
t	Tempo	s
T_w	Temperatura da parede	K
u	Campo de velocidade	m/s
k	Condutividade térmica	W/(m.K)
Q	Fonte de calor	W/m ³
Q_{vd}	Fonte de calor viscoso	W/m ³
W_p	Trabalho total no sistema	W
p ou P	Pressão	Pa
I	Matriz identidade	Adimensional
μ	Viscosidade dinâmica	Pa.s
g	Aceleração da gravidade	m/s ²
F_{st}	Força de tensão superficial	N/m ³
F	Termo força do corpo	N/m ³
μ_i^α	Potencial químico da fase α	J/mol
μ_i^β	Potencial químico da fase β	J/mol
y_i	Fração mássica da fase vapor	Adimensional
x_i	Fração mássica da fase líquida	Adimensional
p^{sat}	Pressão de saturação	Pa
H_i	Constante de Henry	Adimensional
Re	Número de Reynolds	Adimensional
Γ	Vazão mássica por unidade de perímetro do tubo	Kg/(m.s)
\dot{m}	Vazão mássica	Kg/s

Símbolo	Descrição	Unidade (S.I)
δ	Espessura do filme	m
δ^+	Espessura da película adimensional	Adimensional
Vf1	Fração líquida	Adimensional
Vf2	Fração de vapor	Adimensional
c	Concentração	mol/m ³
D	Coefficiente de difusão	m ² /s
R	Produção ou taxa de consumo	mol/(m ³ .s)
μ_T	Viscosidade dinâmica turbulenta	Pa.s
κ	Energia cinética turbulenta	m ² /s ²
σ_k	Parâmetro do modelo turbulento	Adimensional
P _k	Termo fonte da energia cinética turbulenta	W/s ³
ε	Taxa de dissipação tubulenta	m ² /s ³
σ_ε	Parâmetro do modelo turbulento	Adimensional
C _{ε1}	Parâmetro do modelo turbulento	Adimensional
C _{ε2}	Parâmetro do modelo turbulento	Adimensional
C _{μ}	Parâmetro do modelo turbulento	Adimensional
ϕ	Variável de campo de fase (phase field)	Adimensional
γ	Parâmetro de mobilidade	m ³ .s/kg
λ	Massa específica de energia de mistura	N
ε_{pf}	Parâmetro que controla a espessura as interface	m
Ψ	Variável de auxílio phase field	Adimensional

Símbolo	Descrição	Unidade (S.I)
χ	Parâmetro de ajuste de mobilidade	(m.s)/kg
σ	Coefficiente de tensão superficial	N/m
τ	Tensor viscoso	Pa
q	Fluxo de calor por condução	W/m ²
S	Tensor da velocidade de carregamento	1/s
u_{int}	Velocidade na interface	m/s
u_L	Velocidade da fase líquida	m/s
n	Vetor unitário normal	Adimensional
u_v	Velocidade da fase vapor	m/s
M_w	Peso molecular do vapor	kg/kmol
H_{VL}	Entalpia de vaporização do líquido	J/mol
κ_v	Condutividade térmica do vapor	W/(m.K)
f_{tot}	Massa específica total da energia livre do sistema	J/m ³
U	Velocidade máxima do escoamento	m/s

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	29
1.1 OBJETIVOS	30
1.1.1 Objetivo Geral.....	30
1.1.2 Objetivos Específicos	30
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	33
2.1 DESTILAÇÃO.....	33
2.1.1 Transferência de calor e quantidade de movimento	34
2.1.2 Equilíbrio Termodinâmico.....	37
2.2 TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM MUDANÇA DE FASE	39
2.3 COLUNA DE PAREDE MOLHADA.....	43
2.3.1 Destilação/evaporação por filme descendente	44
2.4 ESCOAMENTO MULTIFÁSICO.....	51
2.4.1 escoamento laminar e turbulento.....	54
2.5 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD).....	56
3.1.2 Hipóteses simplificadoras e condições de contorno.....	63
3.1.3 Propriedades físicas dos materiais.....	65
Fonte: Autora, 2015.	67
3.2 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS.....	68
3.3 SIMULAÇÕES	70
3.3.1 Discretização das interfaces	71
3.3.2 Termo convectivo	72
3.3.3 Shape Function (Função de Forma)	72
3.4 MODELO TURBULENTO <i>TWO-PHASE FLOW, PHASE FIELD</i>	73
3.5 MODELO LAMINAR <i>TWO-PHASE FLOW, PHASE FIELD</i> ..	74
3.6 TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM FLUIDOS.....	75

3.7 MODELO DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM MUDANÇA DE FASE.....	77
3.8 MÉTODO <i>PHASE FIELD</i>	80
3.9 ESTUDO DA MALHA	82
3.9.1 Escoamento de filme descendente de água	83
3.9.2 Escoamento do filme descendente dos óleos de soja e Spindura	85
3.9.3 Qualidade da malha.....	85
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES	87
4.1 ANÁLISE FLUIDODINÂMICA DA FORMAÇÃO DA PELÍCULA DESCENTE DO ÓLEO DE SOJA E DO ÓLEO SPINDURA	87
4.1.1 Óleo de soja	87
4.1.2 Óleo Spindura	94
4.2 ANÁLISE FLUIDODINÂMICA DA FORMAÇÃO DA PELÍCULA DESCENDENTE DE ÁGUA NA CONDIÇÃO ISOTÉRMICA	102
4.2.1 Regime de escoamento.....	103
4.2.2 Formação da película líquida descendente	103
4.2.3 Espessura da película	105
4.2.4 Perfil de velocidade do filme líquido descendente	106
4.2.5 Balanço de massa para o líquido	107
4.3 ANÁLISE DOS EFEITOS DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR NO PROCESSO DE EVAPORAÇÃO DA PELÍCULA DESCENDENTE DE ÁGUA.....	109
4.3.1 Análise das fluidodinâmicas dos escoamentos da película	109
4.3.2 Análise das espessuras dos filmes descendentes de água	114

4.3.3	Análise dos perfis de velocidade dos filmes líquidos descendentes	119
4.3.4	Análise da distribuição da temperatura na coluna	122
4.3.5	Análise do coeficiente convectivo de transferência de calor: Comparação entre o valor teórico e o simulado	134
4.3.6	Balço de massa para o líquido	136
4.4	ANÁLISE DOS EFEITOS DA APLICAÇÃO DE TEMPERATURA NA PAREDE DA COLUNA ACIMA DO PONTO DE LEIDENFROST	140
4.5	COMPARAÇÃO ENTRE A CURVA DE EBULIÇÃO DA ÁGUA À PRESSÃO ATMOSFÉRICA COM OS RESULTADOS SIMULADOS	148
5	CONCLUSÕES	149
6	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	153
	REFERÊNCIAS	155

1 INTRODUÇÃO

O Brasil possui um largo campo de exploração de petróleo e, conseqüentemente, a necessidade por técnicas alternativas que ofereçam melhorias, não só operacionais e financeiras, mas também que reduza os impactos ambientais torna-se crescente.

O petróleo é extraído, no Brasil, do fundo dos oceanos e, antes de ser utilizado para qualquer fim energético, é necessário separar seus componentes através de uma operação unitária chamada destilação. A destilação ocorre através do fornecimento de calor e resulta na separação do petróleo em diversos produtos finais, como vapores e líquidos. Hoje em dia, o método mais utilizado é a coluna de destilação fracionada, que utiliza pratos por toda a extensão da coluna. Porém, apesar de eficiente, esta operação implica alguns problemas, como a altura excessiva das torres e a grande quantidade energética para realizar a evaporação do petróleo. Em contra partida, estudos sobre uma técnica alternativa que visa melhorar estes problemas das torres estão em andamento, como a destilação por filme descendente, que também pode ser chamada de coluna de parede molhada. Esta foi projetada especificamente para operar com menor quantidade de fluido, que conseqüentemente gera uma redução considerável nas dimensões da coluna, de 3 a 10 vezes, e que necessita de menor energia para promover a evaporação.

Tendo em vista tal necessidade, os estudos realizados poderão mostrar se estas colunas são capazes de oferecer estas possíveis melhorias, buscando o equilíbrio entre eficiência e benefícios. No campo das aplicações industriais, o escoamento de um líquido em superfície livre encontra sua principal utilização em trocadores com transferência de calor e massa (PINTO, PADILHA e SCALON, 2003). A principal vantagem desse tipo de dispositivo são as altas taxas de transferência de calor e massa obtidas com um pequeno fluxo de líquido (BATISTELA *apud* TELEKEN, 2013).

Conforme cita Spedding (1988), colunas de parede molhada têm sido amplamente utilizadas no estudo de transferência de massa entre gás e líquido. O líquido flui de forma a formar uma película que descende a superfície interior de um tubo vertical, com o gás que flui através do centro do tubo, de forma ascendente.

No intuito de avaliar a utilização deste tipo de destilação, realizaram-se estudos em torno de uma coluna de parede molhada utilizando água e óleos de Spindura e de soja como fluidos de alimentação. Para a água, analisou-se o comportamento fluidodinâmico e de transferência de calor a fim de verificar a quantidade de água

evaporada no sistema, a espessura e outros fatores que influenciam no desenvolvimento da película. Para os óleos analisou-se somente o comportamento fluidodinâmico, como velocidade na fase gasosa e na fase líquida, além da espessura da película e a relação da mesma com a viscosidade. Os três fluidos testados apresentam viscosidades diferentes, e a influência desta propriedade física no processo também foi avaliada.

A fim de se estudar e compreender os fenômenos deste tipo de sistema, simulou-se o modelo utilizado em experimentos no Laboratório de Controle de Processos da UFSC, onde o *software* utilizado detalhou o comportamento fluidodinâmico dos filmes e também o fenômeno de transferência de calor. O estudo destes fenômenos de transporte tornou possível a compreensão do sistema num todo. No caso da evaporação da água, a transferência de calor é dependente do fenômeno de transferência de quantidade de movimento.

Para o estudo da simulação numérica que representa o sistema de operação por película descendente, utilizou-se o *software* COMSOL *Multiphysics*®. O método de solução das equações de transferência de massa, quantidade de movimento e energia utilizado pelo COMSOL é o Método dos Elementos Finitos.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo Geral

Estudar a fluidodinâmica de películas líquidas descendentes, com e sem transferência de calor com mudança de fase, em coluna cilíndrica de parede molhada, com o objetivo de aprofundar conhecimentos e dar maior subsídio teórico às operações da engenharia química baseadas nesse tipo de sistema.

1.1.2 Objetivos Específicos

- Avaliar os efeitos da viscosidade e da vazão de alimentação na formação da película descendente;
- Analisar a espessura do filme descendente para os diferentes fluidos testados sem e com o efeito da transferência de calor e mudança de fase;
- Verificar o perfil de velocidades do escoamento, para a fase líquida e vapor/gasosa, para os diferentes fluidos testados, sendo

que para a água sem e com o efeito de transferência de calor e mudança de fase;

- Averiguar, para a água, os efeitos causados no escoamento/mudança de fase devido à aplicação de diferentes temperaturas na parede da coluna;
- Avaliar o fluxo de calor fornecido através da parede, para cada temperatura aplicada, e identificar a região onde ocorre a mudança de fase com maior intensidade;
- Verificar a distribuição da temperatura na coluna, identificando os pontos em que esta alcança seu valor máximo e mínimo;
- Analisar e relacionar a taxa de evaporação da água de acordo com a temperatura aplicada na parede;
- Comprovar a coerência do modelo utilizado para calcular os efeitos de transferência de calor com mudança de fase aplicando uma temperatura elevada na parede da coluna, a fim de verificar uma possível evaporação total do filme líquido.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A maior parte dos processos químicos necessita de separação de uma fase sólida, líquida ou gasosa, em seus componentes. Estas separações ocorrem mediante contato de uma fase com outra, de certa maneira que possibilita a transferência de parte de um componente de uma fase para outra. Posteriormente, cada fase é separada e tratada particularmente. Para realizar estas separações, faz-se uso de operações unitárias. As operações unitárias são operações físicas a que os materiais envolvidos no processo são submetidas, a fim de separar componentes de misturas, reduzir o tamanho de sólidos, aquecer, resfriar, etc. A destilação é a operação unitária mais utilizada nas indústrias químicas e petroquímicas.

Será exposta uma breve revisão bibliográfica sobre o tema deste trabalho, que se trata em estudar os efeitos de transferência de calor com mudança de fase, juntamente com a análise fluidodinâmica de um sistema de escoamento multifásico vertical descendente pela parede interna de uma coluna, formando um filme líquido. A principal e mais importante aplicação deste sistema é na destilação, cujo estudo está voltado totalmente para uma possível aplicação na tecnologia de destilação por película descendente, um tipo não convencional de destilação.

2.1 DESTILAÇÃO

Conforme Geankoplis (1998), a operação unitária de destilação é um método utilizado para separar os componentes de uma mistura líquida e depende da distribuição dos componentes entre a fase vapor e a fase líquida. Ambos os componentes estão presentes nas duas fases. A fase vapor é proveniente da fase líquida por vaporização no ponto de ebulição.

Outra definição deste tipo de operação é dada por Moussa (2001), que afirma que “a destilação é uma técnica de separação que consiste na ebulição preferencial dos componentes voláteis de uma mistura, separando-a em dois ou mais produtos de diferentes pontos de ebulição”.

A destilação é uma operação unitária que envolve os fenômenos de transferência de massa, calor e quantidade de movimento. Além de envolver conhecimento em fenômenos de transporte, a destilação também exige conhecimento de conceitos da termodinâmica, como o equilíbrio de fases e, sem os estudos destes, fica praticamente impossível concluir qualquer ideia que se deseje desenvolver sobre o assunto.

Há diversos métodos de destilação, cada um desenvolvido de acordo com a natureza do processo que se deseja operar. Será abordada de maneira sucinta a destilação por película descendente, um método de destilação não convencional e que será o foco de aplicação do tema em estudo neste trabalho.

2.1.1 Transferência de calor e quantidade de movimento

Como mencionado, a destilação é uma operação unitária que envolve especialmente os fenômenos de transferência de calor, massa e quantidade de movimento. Conforme Geankoplis (1998), cada molécula de um sistema tem certa quantidade de massa, quantidade de movimento e calor e, quando existe uma diferença na concentração de qualquer uma destas propriedades, há transferência destas do meio mais concentrado para o meio menos concentrado.

Segundo Welty *et al.* (2007), “há três modos de transferência de energia: condução, convecção e radiação. Todos os processos de transferência de calor envolvem um ou mais destes”. “Todos os modos de transferência de calor requerem a existência de uma diferença de temperatura, e todos os modos ocorrem a partir do meio de alta temperatura para uma temperatura inferior” (ÇENGEL e GHAJAR, 2014). Em relação à transferência de quantidade de movimento, conforme Welty *et al.* (2007), quando um fluido se encontra em movimento, as quantidades associadas com o estado e o movimento do fluido, como pressão, temperatura, massa específica, velocidade e campos de tensão, podem variar de ponto para ponto.

Quando em um ambiente existe um gradiente de concentração de qualquer uma destas grandezas, há o transporte das mesmas de um ponto para o outro. Pelo fato do transporte de moléculas exigirem uma migração, a velocidade do transporte de massa nos gases é maior que nos líquidos.

O foco deste trabalho é estudar os fenômenos de transferência de calor com mudança de fase e a fluidodinâmica do processo presente em uma coluna de parede molhada. O estudo do transporte de massa não será realizado pelo fato de serem utilizadas substâncias puras. Apesar de haver mudança de fase e a mesma ser um processo de transferência de massa, do ponto de vista fenomenológico, segundo Welty *et al.* (2007), quando um sistema contém dois ou mais componentes cuja concentração pode variar de ponto para ponto, existe uma tendência natural para a massa ser transferida, minimizando as diferenças de concentração no interior do sistema. O transporte de um componente de uma região de maior

concentração para uma de concentração mais baixa é chamada de transferência de massa. No estudo do caso água líquida/vapor d'água, ou seja, um sistema monocomponente, não há no sentido conceitual transferência de massa.

2.1.1.1 Transferência de calor

Sabe-se que o transporte de matéria ocorre de uma região mais concentrada para uma menos concentrada. Com o calor não é diferente. “Quanto mais elevada a temperatura de um sistema, maior é a concentração da energia térmica. Portanto, o calor será transportado da região de temperatura mais alta para a região de temperatura mais baixa” (FOUST et. al, 1980).

Conforme Welty *et al.* (2007), a transferência de calor por condução se dá de duas maneiras. O primeiro mecanismo é o de interação molecular, em que o maior movimento de uma molécula a um nível de energia mais elevado (temperatura) transmite energia para as moléculas adjacentes em níveis de energia mais baixos. Este tipo de transferência está presente, em algum grau, em todos os sistemas em que existe um gradiente de temperatura e em que as moléculas de um sólido, líquido, ou gás estão presentes. O segundo mecanismo de transferência de calor por condução é por elétrons livres. Este mecanismo é significativo principalmente em sólidos puros-metálico para ligas e torna-se muito baixa para os sólidos não metálicos.

Quanto à transferência de calor por convecção, Çengel e Ghajar (2014) afirmam que convecção é o modo de transferência de energia entre uma superfície sólida e o líquido ou gás adjacente que se encontra em movimento, e que envolve os efeitos combinados de condução e de movimento de fluido. Quanto mais rápido o movimento do fluido, maior a transferência de calor por convecção. Na ausência de qualquer movimento do fluido, a transferência de calor entre uma superfície sólida e o líquido adjacente é por condução pura.

Ainda conforme Çengel e Ghajar (2014), a radiação é emitida pela matéria sob a forma de ondas eletromagnéticas como resultado das alterações nas configurações eletrônicas dos átomos ou moléculas. Ao contrário de condução e convecção, a transferência de calor por radiação não requer a presença de um meio intermediário. A transferência de calor por radiação é mais rápida e não sofre atenuação no vácuo.

Para calcular a transferência de calor, simulada no *software* comercial COMSOL *multiphysics*[®], utilizou-se uma equação de

equilíbrio de energia aplicada ao domínio da coluna, que considera a transferência de calor por condução:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p u \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q + Q_{vd} + W_p \quad (1)$$

O primeiro termo do lado esquerdo representa o acúmulo no sistema e está relacionado com a evolução da variável dependente (T) com o tempo (t). O segundo termo do lado esquerdo da equação representa a transferência de calor por advecção. Já o primeiro termo do lado direito da equação reflete a condição de transferência de calor por condução de acordo com a lei de Fourier, enquanto os outros termos representam a fonte de calor, fonte calor viscoso e fonte de trabalho do sistema, respectivamente.

O termo de fonte de calor viscoso é muito relevante para fluidos viscosos, como no caso dos óleos.

2.1.1.2 Transferência de quantidade de movimento

O transporte de quantidade de movimento ocorre nos gases e líquidos em escoamento. Conforme Bird, Stewart e Lightfoot (1960), a transferência de quantidade de movimentos ocorre a partir de uma região de alta velocidade para uma região de baixa velocidade. O gradiente de velocidade pode ser considerada como uma força motriz para o transporte de quantidade de movimento.

Segundo Welty *et al.* (2007) a transferência de quantidade de movimento em um fluido envolve o estudo do movimento dos fluidos e das forças que produzem esses movimentos. A partir da segunda lei do movimento de Newton, sabe-se que a força está diretamente relacionada com a taxa de variação da quantidade de movimento de um sistema.

Conforme Geankoplis (1998), o comportamento do fluxo de fluidos é de grande importância em muitos processos de operações unitárias da engenharia. O fluxo de fluidos está presente em muitas aplicações da engenharia química e processamento.

No modelo de escoamento do Comsol Multiphysics, os cálculos da quantidade de movimento dos fluídos são baseadas nas equações de Navier-Stokes, que são equações de derivadas parciais que permitem determinar os campos de velocidade e de pressão num escoamento. Estas equações são representadas pela Equação da continuidade (2) e pelas Equações de quantidade de movimento para o regime laminar (3) e para

o regime turbulento (4):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \nabla \cdot \left(-p \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \right) + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_{st} + \mathbf{F} \quad (3)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot \left[-p \mathbf{I} + (\mu + \mu_T) (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \right] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_{st} + \mathbf{F} \quad (4)$$

As Equações 3 e 4 são equações vetoriais e representam a conservação do quantidade de movimento, onde a variação da velocidade em relação a variação do tempo é acoplada a massa específica do fluido, tratando também da pressão no sistema e da tensão de cisalhamento com a viscosidade e um vetor de força de volume.

O transporte de quantidade de movimento é fracamente dependente do transporte de energia e massa, através das propriedades do material.

2.1.2 Equilíbrio Termodinâmico

A destilação ou evaporação é uma operação que possui como característica o contato entre duas fases que não estão em equilíbrio. A velocidade com que uma espécie química é transferida para uma outra fase depende do grau de afastamento do sistema em relação ao equilíbrio, e por isso, o tratamento quantitativo destes processos de transferência exige o conhecimento dos estados de equilíbrio do sistema (CUSTÓDIO, 2003).

Os critérios termodinâmicos do equilíbrio entre as fases são expressos através de propriedades especiais, as quais se relacionam por meio de equações termodinâmicas às composições das fases, à temperatura e à pressão.

Smith e Van Ness (1980) afirmam que o equilíbrio implica numa situação em que não ocorrem modificações macroscópicas em relação ao tempo. Isto significa que, com o passar do tempo, não ocorrem modificações nas propriedades das substâncias. Na realidade, é possível

que nunca se atinja um verdadeiro estado de equilíbrio, em virtude de modificações incessantes nas vizinhanças e de resistências retardadoras.

Como afirmado por Smith e Van Ness (1980), o equilíbrio exige a anulação de todos os potenciais que possam provocar a modificação. No entanto, a velocidade da modificação é proporcional à diferença entre o valor do potencial no estado do sistema e o valor no estado de equilíbrio. Por isso, a velocidade de modificação se torna muito pequena à medida que se aproxima do equilíbrio. Na prática admite-se que haja equilíbrio quando os dispositivos disponíveis de medida deixam de detectar alterações das propriedades.

Seguindo a ideia exposta por Smith e Van Ness (1980), o equilíbrio a nível macroscópico é estático (temperatura, pressão, potenciais constantes). Entretanto, num nível microscópico, as condições não são estáticas. As moléculas de uma certa fase, num dado instante, não são as mesmas que estarão nesta fase num instante posterior. As moléculas que possuem velocidades elevadas em comparação com o valor médio e que estão próximas da fronteira entre as fases podem passar para a outra fase. No entanto, a taxa média de passagem das moléculas é a mesma em ambas as direções, tal que não há transferência líquida entre as fases.

Quando há vaporização de uma substância pura nas condições de equilíbrio, a temperatura e a pressão são uniformes, nas fases líquida e vapor. O critério de equilíbrio é a temperatura e pressão uniformes em todo o sistema. Para sistemas multicomponentes multifásicos, as restrições adicionais foram impostas pela primeira vez por J. W. Gibbs. Tomando-se um sistema fechado contendo duas fases em equilíbrio, pode-se, então, escrever para cada uma das fases:

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta \quad (5)$$

Ou seja, as duas fases encontram-se em equilíbrio de potencial químico.

2.1.2.1 Equilíbrio Líquido-Vapor

McCabe e Julian (1981) afirmam que, para um sistema de equilíbrio líquido-vapor, se deve usar o conceito de pressão parcial. Segundo Smith e Van Ness (1980), os dois modelos mais simples que representam o equilíbrio de sistemas líquido-vapor são a Lei de Raoult e a Lei de Henry.

A Lei de Raoult postula que, para ser válida, a fase líquida deve ser considerada como uma solução ideal e a fase vapor como um gás ideal.

Isto também implica que a mesma se aplica a sistemas com pressões baixas a moderadas e sistemas com propriedades químicas similares.

$$y_i \cdot P = x_i \cdot P^{\text{sat}} \quad (6)$$

Onde:

y_i = Fração mássica da fase vapor;
 P = Pressão do sistema;
 x_i = Fração mássica da fase líquida;
 P^{sat} = Pressão de saturação do sistema.

Devido às limitações da Lei de Raoult, surgiu a Lei de Henry, aplicada para pressões pequenas o suficiente para que a fase vapor seja considerada um gás ideal. Esta explica a solubilidade de um gás em um líquido. A lei de Henry aplica-se somente quando a concentração do soluto e a sua pressão parcial são baixas, ou seja, quando o gás e sua solução são essencialmente ideais, e quando o soluto não interage fortemente de nenhuma maneira com o solvente.

$$y_i \cdot P = x_i \cdot H_i \quad (7)$$

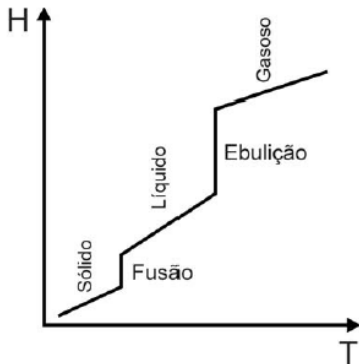
onde H é uma constante de proporcionalidade chamada de constante da Lei de Henry e depende do par soluto-solvente, da temperatura e da pressão.

2.2 TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM MUDANÇA DE FASE

Segundo Tsui *et al.* (2014) o escoamento de líquido-vapor pode ser encontrado em muitos processos industriais e naturais. Uma característica distinta deste escoamento de duas fases é a existência de uma interface entre as fases diferentes através da qual as forças que atuam sobre os fluidos estão em equilíbrio. Uma certa quantidade de líquido é transferido de uma fase para a outra, quando o campo de temperatura é não uniforme e os fluidos estão saturados na interface. Junto com a transferência de massa, grandes quantidades de energia na forma de calor latente são liberados na mudança de fase. Para um fluido sofrer uma mudança de fase, energia deve ser fornecida para as moléculas do fluido quando elas passam do estado sólido para o líquido, do estado líquido para o gasoso ou do estado sólido para o gasoso. Por outro lado, energia deve ser

removida das moléculas do fluido quando elas fazem o caminho inverso. Esta energia que deve ser fornecida ou retirada das moléculas do fluido é conhecida como calor latente e é geralmente bem maior do que a energia que deve ser fornecida ou retirada das moléculas do fluido quando este está sendo aquecido ou resfriado sem que haja mudança de estado (energia conhecida como calor sensível). Durante a mudança de estado, conforme energia vai sendo fornecida para as moléculas a entalpia do sistema aumenta, porém a temperatura do fluido permanece constante, como ilustrado na Figura 1.

Figura 1 - Variação da temperatura e entalpia durante a mudança de fase



Fonte: FERNANDES, PIZZO e MORAES, 2006.

Sob condições de equilíbrio, a temperatura permanece constante durante um processo de mudança de fase, a uma pressão fixa, grandes quantidades de calor (devido ao grande calor de vaporização latente liberado ou absorvido) podem ser transferidos durante a ebulição e condensação à temperatura essencialmente constante. Na prática, no entanto, é necessário manter certa diferença entre a temperatura da superfície e a temperatura de saturação para uma transferência de calor eficaz. Os coeficientes de transferência de calor h associados com a ebulição e condensação são tipicamente muito maior do que as encontradas em outras formas de processos de convecção, que envolvem uma única fase. (ÇENGEL e GHAJAR, 2014).

A temperatura do fluido só voltará a aumentar quando todas as moléculas do fluido tiverem mudado de estado (FERNANDES, PIZZO e MORAES, 2006).

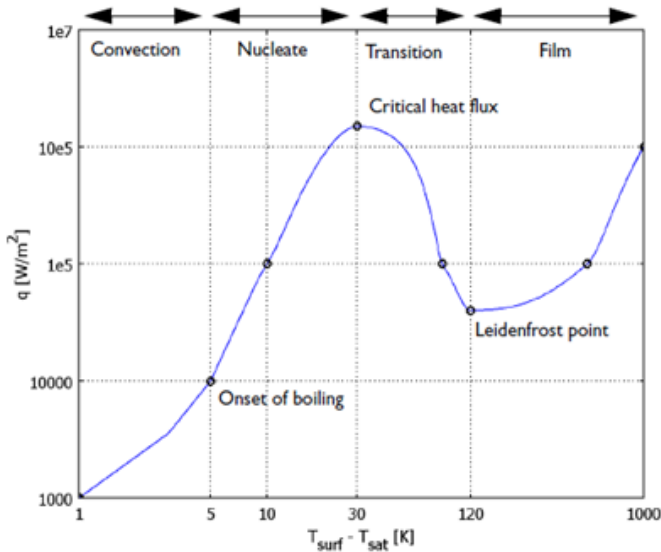
Conforme Welty *et al.* (2007), os processos de transferência de energia associados ao fenômeno da ebulição e condensação podem obter taxas relativamente altas de transferência de calor. Os fenômenos, associados à mudança de fase entre um líquido e vapor são mais complexos em relação aos processos de transferência de calor sem mudança de fase. Este fato deve-se às considerações adicionais de tensão superficial, de calor latente de vaporização, das características de superfície e outras propriedades do sistemas de duas fases que não estão envolvidos no processo de transferência de calor sem mudança de fase.

A Figura 2 representa a curva de ebulição da água à pressão atmosférica. Segundo Welty *et al.* (2007), embora a Figura 2 represente a água, a forma geral da curva de ebulição permanece o mesmo para diferentes fluidos. A forma específica da curva depende dos materiais da superfície de aquecimento e da combinação de fluido e pressão, mas que é praticamente independente da geometria da superfície de aquecimento.

Para sustentar a película de ebulição, o excesso de temperatura e fluxo de calor aplicado deve ser maior do que o ponto de Leidenfrost. Para a água à pressão atmosférica, estes valores correspondem a um fluxo de calor de cerca de 4×10^4 W/m² e uma temperatura em excesso de cerca de 120°C. Para além do ponto de Leidenfrost, um aumento do fluxo de calor aplicado resulta diretamente em um aumento no excesso de temperatura. A temperaturas muito elevadas, a condução não é o único mecanismo de transferência de calor a partir da superfície quente para o líquido, e os efeitos da radiação devem ser considerados.

Acima do ponto de Leidenfrost há uma região chamada de filme de ebulição. Çengel e Ghajar (2014) afirmam que nesta região, a superfície do aquecedor é completamente coberta por uma película de vapor contínuo e estável. A presença de uma película de vapor entre a superfície de aquecimento e o líquido é responsável pelas baixas taxas de transferência de calor na região do filme em ebulição, porque o vapor age como um isolante térmico, impedindo a transferência de calor da superfície para o fluido.

Figura 2 - Curva de ebulição da água à pressão atmosférica.



Fonte: BERGMANN, LAVINE e INCROPERA, 2002.

Ainda conforme Çengel e Ghajar (2014), a evaporação ocorre na interface líquido-vapor quando a pressão do vapor é inferior à pressão de saturação do líquido numa dada temperatura. A diferença de pressão entre o líquido e o vapor é equilibrada pela tensão superficial na interface.

Vale lembrar que a ebulição é a fase que antecede a evaporação. A partir do momento em que as bolhas se formam e sobem à superfície do líquido, há evaporação. No caso de películas líquidas extremamente finas, é imperceptível o fenômeno de ebulição, visto que praticamente toda a espessura do filme está em contato com a superfície.

A curva exposta na Figura 2 se aplica a situações que necessitam de grande massa de água, como a evaporação da água em uma panela, por exemplo. Para este caso, a quantidade de calor e a diferença de temperatura entre a superfície e a saturação devem ser superiores ao ponto de Leidenfrost. Para filme de água, por apresentar uma fina camada de líquido, temperaturas inferiores a este ponto são suficientes para causar evaporação. No escoamento anular o filme líquido na parede torna-se muito fino e a ebulição nucleada é suprimida. O calor é removido através da evaporação do líquido na interface do filme.

2.3 COLUNA DE PAREDE MOLHADA

A coluna de parede molhada há anos vem sendo estudada em suas mais diversas formas de utilização. Há trabalhos datados de 1954 que já discutiam este tipo de operação. Nielsen *et al.* (1997) afirmaram que a taxa de transferência de massa em colunas de parede molhada tem sido amplamente investigada, pois este tipo de equipamento é simples na sua concepção e o filme líquido descendente assume uma área interfacial fixa e conhecida. Há inúmeros trabalhos que investigam taxas de transferência de massa e calor em colunas de parede molhada.

A coluna de parede molhada é usada em muitas aplicações industriais diferentes, como na transferência de massa entre fluidos, por exemplo, a sulfonação dos produtos biológicos, limpeza de gases de combustão, entre outros (Elvers *et al.*, 1992 *apud* Nielsen *et al.*, 1997).

Em 1987 Jones e Spedding publicaram um artigo sobre transferência de calor e massa em colunas de parede molhada em que a taxa de transferência de massa foi calculada a partir da análise do gás e do líquido que entravam e saíam da coluna de parede molhada. Estes avaliaram o efeito da umidificação do ar através da evaporação da água, testando este experimento para colunas de várias alturas. Jones e Spedding verificaram que a altura da coluna não exerceu influência alguma nas taxas de transferência de calor e massa da película descendente.

Dribika e Sandall (1979) estudaram a transferência simultânea de calor e massa para uma destilação multicomponente em uma coluna de parede molhada. Avaliaram a taxa de transferência de massa individual de três hidrocarbonetos e compararam com valores experimentais. Os resultados apresentaram excelente concordância com o experimental.

Portalski e Clegg (1970) avaliaram o aumento da área interfacial no escoamento de um filme com ondulações na superfície, em coluna de parede molhada. Os autores concluíram que o aumento da área interfacial em filmes descendentes depende não somente da taxa de líquido, mas também da amplitude e comprimento da ondulação do filme, e que também a mesma é uma função da altura da parede molhada. O aumento da área interfacial permaneceu pequeno, com fluxo contracorrente e em concorrente de ar a velocidade moderadas.

Cairns e Roper (1954) estudaram a transferência de calor e massa em umidades elevadas numa coluna de parede molhada em um fluxo contracorrente de ar e água. Ambos chegaram a conclusão que os coeficientes de calor e massa diminuem com o aumento da umidade do

meio, fato este que as equações de Colburn e Drew utilizadas, com base na teoria do filme, não puderam explicar.

Videla, Solá e Lema (1986) simularam a dinâmica de uma coluna de parede molhada no escoamento ar-água e compararam os resultados experimentais com os numéricos. O objetivo do trabalho desenvolvido pelos autores foi apresentar um método computacional para determinar os coeficientes de transferência de calor e massa do sistema ar-água, a fim de simular o comportamento deste sistema em condições estáveis e instáveis. Os autores concluíram que o modelo de simulação utilizado para determinar as temperaturas dinâmicas, os perfis de entalpia e as taxas de transferência de massa em uma coluna de parede molhada produz desvios relativamente mínimos em comparação com os dados experimentais.

Wilson (1974) realizou um estudo a fim de estimar a espessura mínima à qual a película permanece intacta e a área das zonas secas quando se encontram presentes. Quando o filme é suficientemente espesso, manchas secas não aparecem; quando é suficientemente estável manchas secas (ou seja, permanente) finas aparecem. O autor também concluiu que tanto o ângulo de contato (do fluido com a superfície) como a tensão superficial são os fatores decisivos na manutenção do filme e, além disso, o filme, a uma vazão mínima de molhabilidade, mantém-se estável e sem ruptura até a uma altura de 1,2 m de comprimento da coluna. Em uma altura de 0,3 m, o filme apresenta-se mais estável.

Wilson (1974) considera a coluna de parede molhada de grande importância para a engenharia química, pois está presente em qualquer situação em que o gás e o líquido estejam em contato, tal como nas colunas de destilação e permutadores de calor. A ruptura do filme é indesejável, pois pode levar à redução da eficiência e superaquecimento ou corrosão da área seca.

Como visto, trabalhos envolvendo coluna de parede molhada vem sendo desenvolvidos a um bom tempo, e a maioria deles trouxeram excelentes contribuições para trabalhos afins. A coluna de parede molhada vem ganhando destaque na indústria, justamente por seus excelentes resultados e também por sua facilidade de operação.

2.3.1 Destilação/evaporação por filme descendente

A destilação por filme líquido descendente é um processo com baixo tempo de residência e estrutura simples quando comparado à destilação convencional. Consiste basicamente de um tubo vertical por onde o líquido flui descendente formando uma película nas paredes

do tubo. Além disso, é possível obter altas taxas de transferência de massa e calor (Batistella, 1999 *apud* Teleken, 2013). Também pode ser considerada como uma coluna de parede molhada.

Conforme Wang *et al.* (2010), o uso de filmes líquidos finos é amplamente encontrado em equipamentos de processos industriais comuns, onde os fenômenos de transferência de calor e massa ocorrem, tais como bomba de absorção de calor, evaporador, entre outros. Baixa resistência térmica e grande superfície de contato em pequenas vazões específicas de líquido tornam o filme um meio eficaz na intensificação da transferência de calor e massa na interfase. É amplamente utilizado na petroquímica, refrigeração, processamento de alimentos e geração de energia de calor residual.

O desempenho deste tipo de equipamento é fortemente afetado pela distribuição dos líquidos e da estabilidade do filme, fatores estes que são críticos e decisivos no transporte de massa e na transferência de calor. Sem a estabilidade do filme, estas taxas ficariam aquém do esperado. Conforme Pinto, Padilha e Scalon (2003), em dispositivos deste tipo a diferença de temperatura entre o fluxo de vapor e o filme líquido deve ser mantida a menor possível.

A literatura apresenta um vasto conteúdo sobre este tema e cada um dos trabalhos encontrados possui uma diferente aplicação.

Haelssig *et al.* (2010), apresentaram uma simulação numérica direta da transferência de calor e massa nos fluxos multicomponentes líquido-vapor. Dois casos de simulação foram apresentados para validação do modelo. O primeiro caso comparou os dados experimentais e as correlações empíricas com os resultados da simulação para a transferência de massa durante o contato com a parede molhada em um canal estreito. O segundo caso, que se destina a fornecer uma validação mais detalhada para a simulação da transferência de massa e da fase de vapor, estudou o fluxo de vapor sobre um líquido estacionário. Os resultados apresentaram-se em concordância entre as previsões numéricas e correlações da literatura.

Pinto, Padilha e Scalon (2003), simularam os processos de transferência de calor e massa que ocorrem em uma película de líquido descendente ao longo da parede interna de um tubo cilíndrico aquecido, para estimar, através de métodos numéricos, a taxa de evaporação de uma substância pura em um trocador de calor compacto em função dos parâmetros de projeto. Os resultados obtidos, para diversas intensidades do processo de transferência de calor e massa, através da variação do Bi , mostrou resultados consistentes com a expectativa do seu comportamento físico.

Mascarenhas e Mudawar (2013) estudaram o coeficiente de difusão e o coeficiente de transferência de calor para filmes líquidos turbulentos em queda livre submetido a um aquecimento sensível. O modelo é usado para explorar as influências de ondas e vórtices turbulentos sobre o escoamento de fluidos e na transferência de calor. Concluíram que as ondulações turbulentas na superfície do filme tornam-se maiores conforme aumenta o número de Reynolds.

Zhang *et al.* (2008) avaliaram a distribuição de temperatura de filmes líquidos descendentes aquecidos sobre superfícies aquecidas. Realizaram testes com água, etanol, soluções aromáticas e soluções aquosas de glicerol com obtenção dos dados de temperatura. O modelo desenvolvido descreveu adequadamente a distribuição da temperatura do filme de líquido descendente.

Drosos, Paras e Karabelas (2006) estudaram a influência do número de Reynolds sobre as características do escoamento de um filme líquido descendente com um fluxo multifásico e contracorrente (gás-líquido). Demonstraram que os efeitos, tanto da vazão de líquido como de vapor, possuem influência nas características do escoamento.

Feddaoui, Mir e Belahmidi (2003) estudaram a transferência de calor e massa convectivo em um filme descendente de água sob regime turbulento e concorrente em um tubo aquecido. Neste estudo, os autores assumiram um fluxo de calor uniforme na parede e a interface ar-água foi assumida lisa e sem quaisquer ondas na superfície da película de água. Com este trabalho, puderam concluir que a temperatura e a concentração de vapor de água interfacial é maior para uma menor taxa de fluxo líquido de entrada e quanto menor o número de Reynolds, maior é a taxa de evaporação.

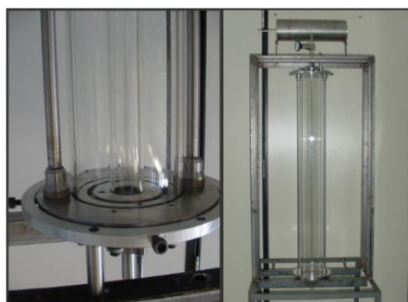
Hassanvand e Hashenabadi (2011) publicaram um artigo sobre simulação numérica direta de transferência de massa na interface em sistemas multifásicos gás-líquido. Este trabalho utilizou dois métodos de simulação numérica para o estudo de dois mecanismos de transferência de massa comuns, difusão através de filme estagnado e difusão equimolar. Os dois métodos utilizados mostraram resultados precisos.

Desde que esta tecnologia foi patenteada e publicada por Saifutdinov e outros em 1999, inúmeros estudos vem sendo publicados. A diversidade de aplicações e de estudos específicos vem promovendo o potencial desta nova técnica de destilação.

A tecnologia do filme descendente é utilizada em uma variedade de aplicações industriais onde são desejadas grandes taxas de transferência de calor ou de massa (ALBERT, MARSCHALL e BOTHE,2013).

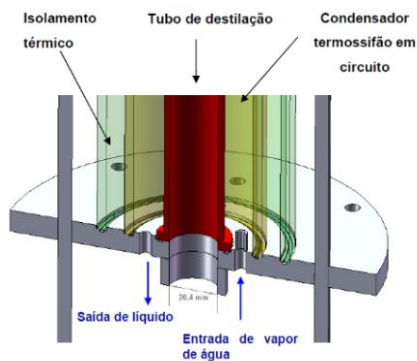
A Figura 3 e a Figura 4 ilustram um modelo esquemático de uma coluna de destilação por película descendente. Na Figura 4, o primeiro tubo é onde ocorre a formação do filme, a evaporação e a condensação. No segundo tubo encontra-se o fluido transportador de energia para promover a evaporação do filme, ou seja, água pressurizada a 10 bar. A função do terceiro tubo é isolar termicamente a coluna. O vapor é condensado e recolhido no topo da coluna, enquanto o líquido sai na parte inferior da coluna. A Figura 5 representa o modelo esquemático do protótipo utilizado no sistema de destilação por filme descendente.

Figura 3 - Imagem da coluna de destilação.



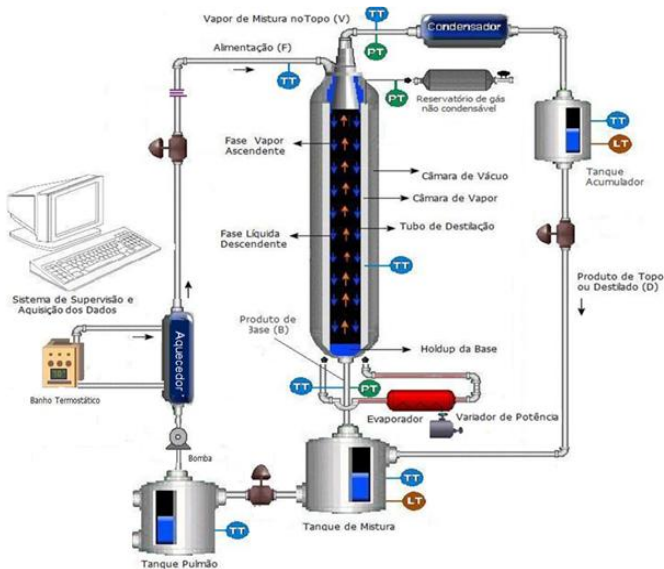
Fonte: TAVAREZ et. al., 2008.

Figura 4 - Desenho esquemático da coluna de destilação por película descendente.



Fonte: Fonte: TAVAREZ et. al., 2008.

Figura 5 - Diagrama esquemático do protótipo de destilação dimensões reduzidas.



Fonte: TAVAREZ *et al.*, 2008.

Segundo Teleken (2013), a formação e escoamento do filme líquido nas paredes do tubo de destilação deve ser homogêneo e distribuído por toda área disponível da superfície evaporante, a fim de garantir a utilização da maior área superficial para evaporação do filme descendente.

A velocidade superficial da fase líquida descendente deve ser alta o suficiente para assegurar que o filme líquido molhe completamente a parede da coluna, evitando a formação de pontos secos e sua eventual ruptura. Por outro lado, a velocidade superficial do filme deve ser baixa o suficiente para evitar que o mesmo se desprenda da parede, pois a velocidades muito altas, o filme não se mantém estável e sua aderência à parede fica comprometida.

A velocidade superficial do filme se altera para cada fluido e para cada geometria utilizada. Fluidos mais viscosos tendem a formar filmes mais estáveis enquanto que os menos viscosos desenvolvem maiores velocidades e películas mais delgadas e suscetíveis a rupturas.

2.3.1.1 Cálculo do número de Reynolds, espessura da película e do coeficiente convectivo de transferência de calor

Conforme Padilha, Scalon e Scalippe. (2000), Prata (2012), Nusselt (1916) *apud* Teleken (2013), Sinot (2005), Alhusseini, Tuzia e Chen. (1998), Weise e Scholl (2009) e Perry e Green (2008), a caracterização do regime de escoamento de uma película líquida é melhor representada pelo número de Reynolds que é definido como:

$$\text{Re} = \frac{4\Gamma}{\mu} \quad (8)$$

Onde:

Γ = Vazão mássica por unidade de perímetro do tubo (kg/s.m);

μ = Viscosidade dinâmica do fluido(kg/s.m).

A vazão mássica por unidade de perímetro do tubo pode ser calculada, de acordo com Ticono (2003) *apud* Teleken (2013) por:

$$\Gamma = \frac{\dot{m}}{\pi.D} \quad (9)$$

Onde:

\dot{m} = Vazão mássica (kg/s);

D = Diâmetro do tubo (m).

Dependendo do número de Reynolds, o escoamento pode ser classificado em:

1 - Regime laminar, se $\text{Re} \leq 20$;

2 – Regime de transição $20 < \text{Re} \leq 4000$; e

3 - Completamente turbulento, se $\text{Re} \geq 4000$;

Nusselt (1916) *apud* Ponce(2011) avaliou o valor da espessura do filme líquido, em regime turbulento, a partir de um balanço de forças viscosas e gravitacionais, conforme equação 10 (para $\text{Re} > 1600$):

$$\delta = \left((0,137)^2 \cdot \frac{\mu^2}{\rho^2 \cdot g} \right)^{1/3} \cdot \text{Re}^{1/3} \quad (10)$$

Para o cálculo da espessura do filme em regime turbulento, existem outras correlações presentes na literatura, como a correlação de Brauer, utilizada por Alhusseine *et al.* (1997):

$$\delta^+ = 0,0946\text{Re}^{0,8} \quad (11)$$

Onde:

δ^+ = Espessura da película adimensional.

Para regime laminar, de acordo com Nusselt (1916) *apud* Teleken (2013), a espessura do filme líquido se dá pela equação (para $\text{Re} < 1600$):

$$\delta = \left(\frac{3 \cdot \mu^2}{4 \cdot \rho^2 \cdot g} \right)^{1/3} \cdot \text{Re}^{1/3} \quad (12)$$

O coeficiente de película externo de trocador de calor foi estudado por Chun e Seban, conforme cita Alhusseini *et al.* (1997). O trabalho dos autores foi referente a correlações de evaporação de filmes líquidos descendentes. Seus experimentos avaliaram água evaporando em um tubo aquecido por resistências elétricas. A correlação abrange vários regimes de escoamento desde laminar até turbulento com número de Reynolds variando entre 320 até 21000 e com números de Prandtl variando de 1,77-5,7. As correlações correspondentes para regime laminar-ondulatório (equação 13) e regime turbulento (equação 14) apresentadas por Chun e Seban (1971), são respectivamente:

$$h^* = 0,821 \cdot \text{Re}^{-0,22} \quad (13)$$

$\text{Re} < \text{Re}_c$ (região laminar-ondulatória)

$$h^* = 0,0038 \text{Re}^{0,4} \cdot \text{Pr}^{0,65} \quad (14)$$

$\text{Re} > \text{Re}_c$ (região totalmente turbulenta)

Onde h^* apresentado acima é adimensional. Para obter resultados dimensionais, utiliza-se a equação (x):

$$h^* = h \left(\frac{v^2}{g} \right)^{1/3} \cdot \frac{1}{k} \quad (15)$$

O cálculo do coeficiente convectivo simulado seguiu a equação 16:

$$q = h \cdot (T_w - T) \quad (16)$$

A fim de comparar os resultados simulados com os da literatura, comparou-se o coeficiente convectivo de transferência de calor calculado pela equação 16 (simulado) com o calculado pela equação 15 (teórico).

2.4 ESCOAMENTO MULTIFÁSICO

Escoamentos multifásicos podem ser encontrados em diversas áreas de conhecimento, tais como, na indústria química, alimentícia e de petróleo. O conhecimento das propriedades relacionadas a este tipo de escoamento é fundamental para o planejamento e dimensionamento adequado de métodos e equipamentos utilizados nesses setores (PACHECO *et al.*, 2007).

Conforme Marinho, Pinto e Nogueira (2014), os escoamentos multifásicos são aqueles que apresentam uma interface definida entre duas ou mais fases que se deslocam com velocidade relativa entre si. As fases podem ser contínuas ou dispersas. Essa classe de escoamento normalmente é descrita em termos de valores médios para as fases contínuas e de distribuições de tamanho para os sistemas dispersos. Conforme Paladino (2005) o escoamento multifásico é definido como uma região do espaço onde coexistem dois ou mais fluídos imiscíveis separados por uma interface, podendo ser esta conexa ou desconexa ou uma combinação de ambos casos onde a mesma fase pode aparecer em forma contínua ou dispersa (padrão anular com gotas, por exemplo).

A definição de fase não é relativa ao estado da matéria, mas sim ao número de interfaces presentes num escoamento multifásico (HELOUI, 2008).

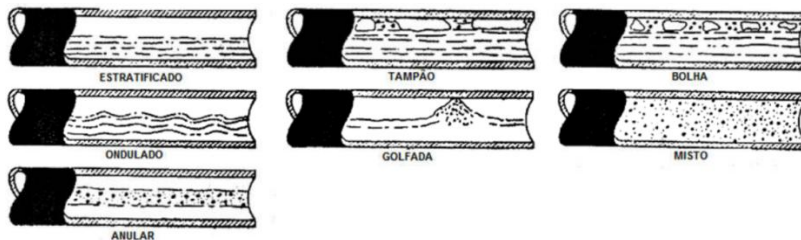
Escoamentos simultâneos de gás e líquido estão presentes não somente na produção de petróleo, mas em inúmeros processos de interesse da engenharia, como a destilação, por exemplo. Na destilação há coexistência de duas fases bem definidas, com propriedades físicas diferentes e separadas por uma interface.

Conforme França (2008), o escoamento multifásico é um fenômeno de análise complexa devido aos seguintes fatos:

- 1- Inicialmente, há presença de mais de uma fase no escoamento, exigindo um número adicional de equações para o fechamento dos modelos matemáticos que expressam o fenômeno físico;
- 2 - No escoamento multifásico geralmente há uma distribuição espacial das fases. A distribuição espacial das fases não deixa de ser um fenômeno de difícil quantificação. Em muitos casos a interface gás-líquido que separa as fases tem forma complicada, além de apresentar movimento aleatório;
- 3 - Há mudanças de padrões de escoamento que dependem de características físicas e operacionais do sistema. Estes padrões por sua vez alteram ou determinam os fenômenos de transferência interfacial, isto é, os processos de transferência de massa, de quantidade de movimento e energia entre as fases;
- 4 - Na medida em que há grande influência do escoamento de cada uma das fases no escoamento da outra, a realidade mostra que as variáveis locais de cada fase, como a velocidade, a pressão e outros, podem flutuar no tempo com amplitude considerável. Consequentemente, definir, ou calcular ou mesmo medir o valor médio de uma variável em escoamento bifásico, requer procedimentos mais complexos que aqueles aplicados às variáveis de escoamentos monofásicos.

O escoamento multifásico está presente tanto em tubulações horizontais (mais comum) quanto em verticais. Nas tubulações horizontais, há padrões de escoamentos definidos. Conforme cita Paladino (2001), em dutos horizontais e inclinados, a determinação de um regime de escoamento é mais complexa devido à assimetria do escoamento causada pela ação da gravidade. A Figura 6 ilustra os padrões de escoamento em dutos horizontais ou inclinados:

Figura 6 - Padrão de escoamento em dutos horizontais ou inclinados.



Fonte: Fonte: Mukherjee e Brill, 1999.

Definições, conforme Nascimento (2013):

Padrão estratificado: Fluido de massa específica menor flutua sobre o fluido de maior massa específica;

Padrão tampão: é marcado pela coalescência das bolhas de gás;

Padrão bolha: bolhas dispersas em direção ao topo da tubulação;

Padrão ondulado: total separação de fase;

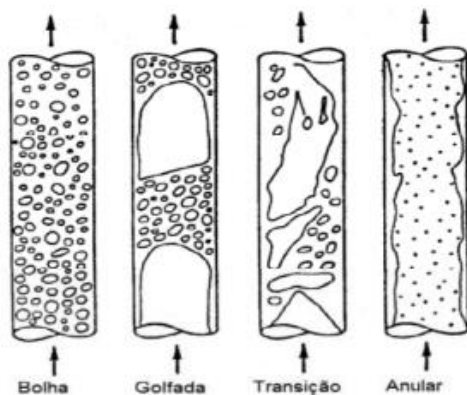
Padrão golfada: as ondas ocupam toda a seção transversal da tubulação;

Padrão misto: bolhas dispersas na outra fase;

Padrão anular: o gás escoo pelo centro do duto enquanto o líquido escoo pela parede.

Para o padrão de escoamento multifásico vertical, há também quatro tipos de comportamento. A Figura 7 ilustra os tipos de escoamento em dutos verticais.

Figura 7 - Padrão de escoamento em tubulações verticais.



Fonte: Mukherjee e Brill, 1999.

Definições, conforme Nascimento (2013):

Padrão bolha: dispersão da fase gasosa na fase líquida em forma de bolhas;

Padrão golfadas: escoamento do gás sob forma de uma série de bolsões ou golfadas com diâmetro similar ao da coluna;

Padrão de transição: movimento oscilatório de líquido para cima e para baixo dentro da coluna.

Padrão anular: fase contínua de gás escoo pelo centro do duto. O gás é separado das paredes do duto por uma pequena camada de líquido.

Para o processo de destilação, o padrão de escoamento predominante é semelhante ao anular, visto que a parede do tubo é coberta com um filme líquido e a fase gasosa predomina a parte central do duto.

Quanto ao equacionamento dos sistemas multifásicos, as equações utilizadas são as de conservação da massa e de quantidade de movimento.

A modelagem e simulação de um escoamento multifásico não é uma tarefa simples, conforme Rosa (2012), um escoamento isotérmico com duas fases requer o dobro de variáveis requeridas pelo escoamento monofásico, o dobro de equações constitutivas para o fechamento do conjunto de equações e o dobro do conhecimento da viscosidade e massa específica das fases, do diâmetro e inclinação da tubulação e das vazões mássicas das fases.

Segundo Souza (2010), um importante requisito para a modelagem fenomenológica do escoamento multifásico é o conhecimento do regime de escoamento.

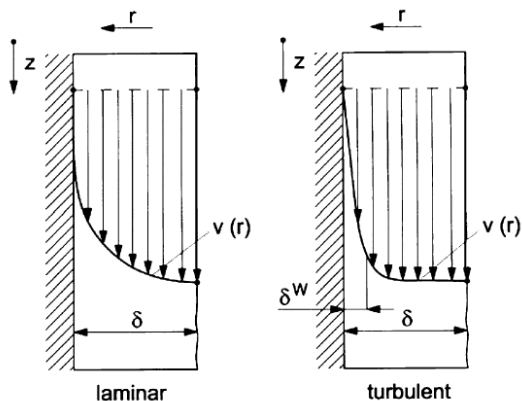
2.4.1 Escoamento laminar e turbulento

Todo escoamento apresenta uma natureza, um comportamento, podendo este ser classificado como laminar, transição ou turbulento. O conhecimento do tipo de escoamento é fundamental para realizar estudos sobre sua dinâmica. Velocidade, viscosidade e a geometria influenciam na natureza deste.

Por definição simples, escoamento laminar é aquele no qual o fluido se move em camadas, ou lâminas, uma camada escorregando sobre a outra havendo somente troca de quantidade de movimento molecular. Escoamento turbulento é aquele que apresenta irregularidade no escoamento, onde as partículas apresentam movimento desordenado e macroscópico.

Tratando-se de filme descendente, os escoamentos laminar e turbulentos apresentam perfis de velocidade conforme ilustrado na Figura 8.

Figura 8 - Perfil de velocidade médio para os escoamentos laminar e turbulento.



Fonte: WEISE e SCHOLL (2009).

É comum durante o escoamento haver formação de ondas (wave) na superfície do filme. As ondas permanecem pequenas e regulares até números de Reynolds de aproximadamente 400. Para número de Reynolds turbulento ($Re > 400$), ondas maiores e irregulares surgem e, adicionalmente, os elementos de fluido pode desenvolver um movimento transversal irregular, perpendicular à direção da queda. Nessas condições, o filme é "totalmente turbulento" e leva a uma melhoria significativa das taxas de transferência de calor, massa e quantidade de movimento (WEISE e SCHOLL, 2009).

O perfil de velocidade para o regime laminar, conforme Nusselt *apud* Karimi (1998) e Welty *et al.* (2007) é representado pela equação 17:

$$u(y) = \frac{\rho \cdot g \cdot \delta^2}{3\mu} \cdot \left[\frac{y}{\delta} - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{y}{\delta} \right)^2 \right] \quad (17)$$

Esta equação implica em um perfil parabólico de escoamento, em que a velocidade máxima se encontra na superfície do filme e a velocidade mínima na parede.

Para o regime turbulento, o perfil de velocidade assume a forma descrita pela equação 18, conforme Çengel e Cimbala (2007):

$$\frac{u}{U} = \left(\frac{y}{\delta}\right)^{\frac{1}{7}} \quad (18)$$

Onde U é a velocidade máxima.

Esta equação trata de uma aproximação empírica comum para o perfil de velocidade médio no tempo, de uma camada limite turbulenta sobre a placa plana, pela lei da potência um sétimo.

Este perfil de velocidade turbulento pode ser aplicado para o cálculo do perfil de velocidade turbulento em uma parede molhada, assumindo a parede como uma placa plana.

2.5 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)

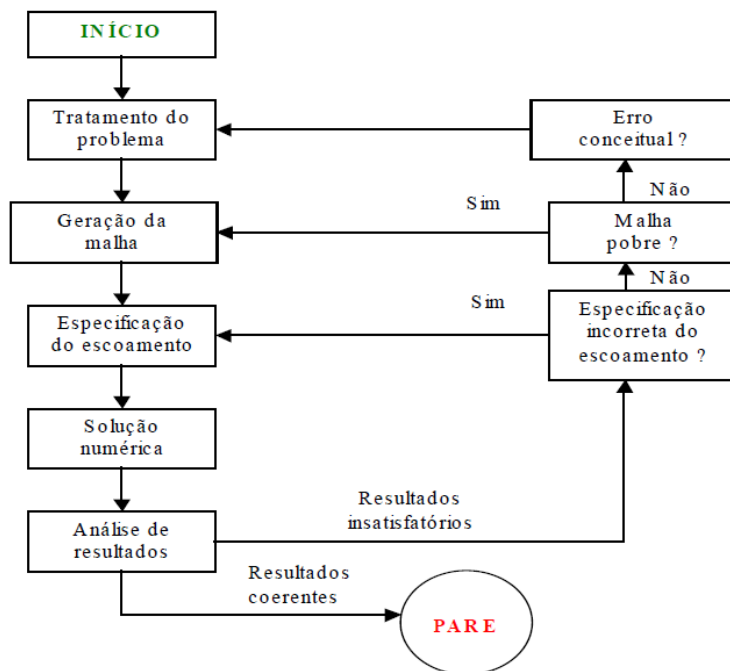
A fluidodinâmica computacional (CFD) é uma excelente ferramenta que torna possível a realização de trabalhos mais complexos, principalmente na área das engenharias. Suas vantagens estão relacionadas ao fato de que ela permite investigar o escoamento de fluidos dentro dos equipamentos empregados em processos químicos, sem as desvantagens de custo e tempo relacionadas à realização de experimentos laboratoriais (SANTOS e MEDRONHO, 2007).

Conforme Versteeg e Malalasekera, 2007 a fluidodinâmica computacional ou CFD é a análise de sistemas que envolvem fluxo de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados, tais como reações químicas por meio de simulação computacional. A técnica é muito poderosa e abrange um amplo leque de áreas de aplicação industriais e não-industriais.

Segundo Porciúncula, (2007), atualmente existe uma variedade de programas e pacotes computacionais desenvolvidos por grandes companhias que são usados na resolução de uma grande quantidade de problemas. Apesar de haver diferenças entre os programas, todos eles são baseados nos mesmos princípios físicos e matemáticos, e o que muda, muitas vezes, de um para o outro, é a forma de implementação numérica e o tratamento gráfico das soluções.

Ainda conforme Porciúncula, (2007), o processo de solução de um problema físico usando CFD pode ser resumido conforme o fluxograma da Figura 9, proposto por Shaw (1992), onde se tem um conjunto de passos a serem seguidos até a obtenção da solução.

Figura 9 - Fluxograma para a resolução de um problema utilizando CFD.



Fonte: PORCIÚNCULA, 2007.

O trabalho de Haelssig *et al.* (2010) já citado, é um exemplo de utilização de CFD para representar o escoamento multifásico no processo de destilação por película descendente.

Oliveira *et al.* (2012) publicaram um artigo técnico sobre o crescimento do uso de fluidodinâmica computacional (CFD) nas tecnologias de destilação, FCC e coqueamento retardado na engenharia básica de abastecimento da Petrobras. Os autores consideram o CFD uma excelente ferramenta, pois simula casos na indústria do petróleo como: avaliação de bocais de carga, análise de transferência de calor e massa em seções de vazios, estudo fluidodinâmico de painéis coletoras, separadores ciclônicos e a influência do vortex core no escoamento, resfriamento do efluente do tambor de coqueamento, e a entrada de carga e chicanas em fracionadoras de unidades de coqueamento retardado.

Pinto, Padilha e Scalon. (2003), também já citado, publicaram um artigo sobre simulação da transferência de calor e massa de uma película

líquida descendente ao longo da parede vertical interna de um tubo cilíndrico e utilizaram a técnica CFD para representar o sistema.

Chen, Zhang e Niu (2014) utilizaram a técnica CFD para o fluxo de água e ar para representar o padrão de película descendente de um feixe de tubos horizontal, a fim de criar um modelo de transferência de calor e massa com precisão.

Raach e Motrovic (2005) utilizaram a técnica de CFD para estudar a evaporação do filme de água do mar em placas verticais aquecidas com traços de turbulência.

Além destes, há inúmeros outros trabalhos que poderiam ser citados, pois o ramo de aplicação CFD vai muito além das engenharias. A medicina é uma ciência que também utiliza bastante esta técnica. Outra área que utiliza a CFD como ferramenta de projeto é a área aeroespacial, na construção de aviões. A CFD permite prever questões como sustentação, arraste e turbulência antes que o aparelho seja construído.

A técnica CFD foi aplicada para estudar os fenômenos de transferência de calor com mudança de fase e transferência de quantidade de movimento em um sistema de escoamento multifásico. Tal sistema compreende o escoamento de um filme líquido descendente pela parede interna de uma coluna vertical.

A técnica de CFD foi desenvolvida no *software* COMSOL *Multyphysics*[®], que utiliza o Método dos Elementos Finitos.

3. METODOLOGIA

Será exposto, primeiramente, a definição do problema a ser tratado com suas respectivas condições de contorno e hipóteses simplificadoras. Posteriormente, será abordada a metodologia utilizada pelo *software* COMSOL *Multyphysics*[®] para a resolução dos problemas de transferência de calor e fluidodinâmica do problema em estudo.

As informações mais específicas sobre a metodologia, tais como discretização das interfaces, termo convectivo, *shape function*, método de acompanhamento da interface, transferência de calor em fluidos e método *phase field* foram extraídas, traduzidas e adaptadas da documentação do *software*.

3.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA: GEOMETRIA, CONDIÇÕES DE CONTORNO, HIPÓTESES SIMPLIFICADORAS E PROPRIEDADES FÍSICAS DOS MATERIAIS

O problema a ser estudado consiste em um escoamento multifásico entre a água em contracorrente com vapor d'água, sendo este classificado como regime turbulento e também o escoamento entre os óleos de soja e óleo Spindura em contracorrente com o ar, sendo estes classificados como regime de escoamento laminar.

Os líquidos escoam de forma descendente pela parede interna de uma coluna vertical enquanto a fase gasosa/vapor escoam ascendente pelo centro do tubo.

Para o escoamento da água, foram estudados os fenômenos de transferência de quantidade de movimento e de transferência de calor com mudança de fase. Foram avaliados os efeitos de ambas as transferências nas variáveis do processo, como a velocidade das fases, a espessura da película, o fluxo de calor, o perfil de temperatura, entre outros.

Para o escoamento dos óleos, foi estudado somente o fenômeno de transferência de quantidade de movimento e suas consequências nas variáveis do processo como velocidade das fases e espessura do filme.

A alimentação de fluido na coluna, uma das principais variáveis, foi definida de acordo com informações disponíveis na literatura.

Para o escoamento dos óleos, a vazão de alimentação foi definida de acordo com os trabalhos de Batistella (1999) *apud* Teleken (2013), que trabalhou com vazões de 500 kg/h a 3 kg/h para a destilação do óleo de Palma; e de Teleken (2013), que trabalhou com a vazão de 25 kg/h para avaliar o escoamento de um fluido viscoso, sob condição isotérmica. A partir destas informações, definiu-se então valores de alimentação nesta

faixa, sendo a principal 25 kg/h. Foi também utilizada uma alimentação de 12,5 kg/h a fim de avaliar os efeitos da mesma no comportamento fluidodinâmico.

No caso da água, devido à baixa viscosidade, há maior dificuldade em manter a coluna com a parede totalmente molhada. Para os óleos, uma vazão mínima de 12,5 kg/h foi o suficiente para este feito, porém, no caso da água, a vazão mínima necessária para manter a parede totalmente coberta, ou seja, sem rupturas na película e sem formação de pontos secos, foi de 140 kg/h, que corresponde a uma velocidade de entrada de 0,1 m/s. Sosnowski, Petronio e Armenio (2013) utilizaram uma velocidade de entrada de 0,13 m/s para avaliar a evaporação da água em um canal vertical. No caso deste trabalho, uma velocidade de 0,1 m/s foi suficiente para representar o escoamento.

Em relação à transferência de calor, na unidade de destilação por filme líquido descendente existem duas maneiras distintas de operação no que diz respeito ao perfil de temperatura na parede de destilação para evaporação do filme líquido descendente. Uma maneira é a manutenção radial e longitudinal da temperatura da parede do tubo de destilação, chamada de condição de operação com perfil de temperatura isotérmico. A outra maneira é assumir um perfil de temperatura não isotérmico na parede da coluna (TELEKEN, 2013).

Para este trabalho, em princípio, simulou-se um perfil de temperatura isotérmico a fim de avaliar as consequências da transferência de calor sob o filme.

As temperaturas a serem aplicadas na parede para efetivar uma transferência de calor suficiente para evaporar a película, foram escolhidas de acordo com Tsui *et al.* (2014), onde o autor utilizou as diferenças de temperaturas de 10°C, 20°C, 30°C e 40°C entre a temperatura de saturação e a temperatura da parede. O autor utilizou estas temperaturas a fim de investigar a evaporação da água em uma placa horizontal. Como um estudo extra, avaliou-se os efeitos causados à película quando a parede é aquecida acima do ponto de Leidenfrost. A análise deste caso foi realizada em um item a parte, com o principal objetivo de comprovar a adequação do modelo proposto.

A temperatura de alimentação, de 351,15 K foi definida de acordo com os trabalhos de Marangoni (2005), Werle (2007) e Teleken (2103).

A vazão de alimentação foi definida de acordo com a teoria de que, a vazão mínima a ser trabalhada é aquela em que proporciona 100% da área evaporante coberta pelo filme, sem apresentar pontos secos ou

rupturas. Esta corresponde a uma vazão mássica de 140 kg/h, ou a uma velocidade de entrada de 0,1 m/s.

O modelo representado na Figura 11 foi baseado em relatórios técnicos sobre DESTUBCAL (destilação por tubo de calor) desenvolvidos no departamento de Engenharia Química e Engenharia de alimentos, no laboratório de Controle de Processos; e no departamento de Engenharia Mecânica, no laboratório de tubos de calor. Os parâmetros assim como o modelo da geometria foram extraídos destes relatórios, segundo as referências Tavares *et al.* (2008).

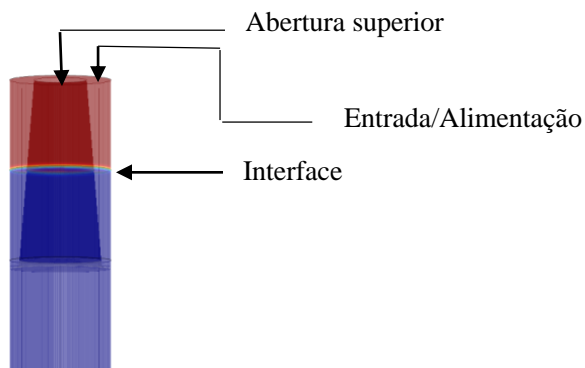
3.1.1 Geometria

A geometria da coluna de parede molhada consiste em uma coluna com 30 cm de comprimento, 26 mm de diâmetro e um cone localizado na parte superior da coluna, cuja finalidade é distribuir a película de líquido. As dimensões do cone são: 46,5 mm de comprimento, 6,75 mm o raio menor e 10,5 mm o raio maior.

Há uma entrada de líquido na parte superior do cone e a interface líquido-vapor localiza-se logo abaixo da entrada.

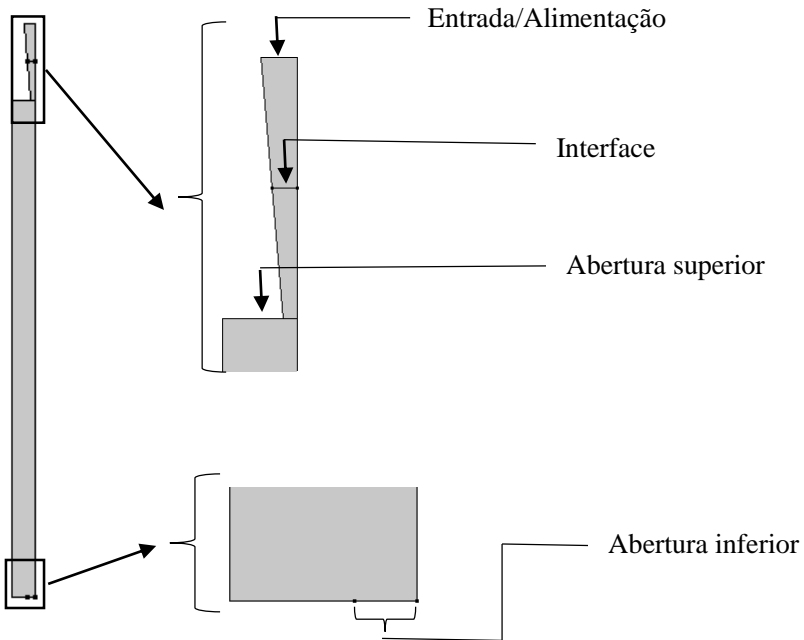
Há duas aberturas, uma localizada na parte superior da coluna (ou centro do cone de distribuição) e outra na parte inferior. A abertura inferior é considerada a saída do sistema e limita-se a um pequeno espaço, sendo este suficiente somente para a passagem de líquido e o mesmo corresponde a $1/3$ do raio, ou seja, a 4,33 mm, como ilustrado na Figura 11. A Figura 10 e a Figura 12 permitem uma visão da geometria, em 3D.

Figura 10 - Parte superior da coluna (cone de distribuição da alimentação) em 3D.



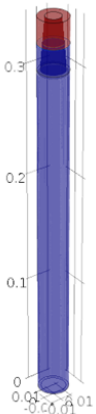
Fonte: Autora, 2015.

Figura 11 - Geometria da coluna em 2D axissimétrico.



Fonte: Autora, 2015.

Figura 12 - Geometria da coluna em 3D.



Fonte: Autora, 2015.

3.1.2 Hipóteses simplificadoras e condições de contorno

A seguir, serão listadas as hipóteses simplificadoras e serão expostas em tabela as condições de contorno utilizadas para a resolução do problema proposto.

3.1.2.1 Hipóteses simplificadoras

Para o escoamento isotérmico da água, no sistema água e vapor d'água, foram assumidas as seguintes hipóteses:

- 1 – Escoamento turbulento;
- 2 – Coordenadas cilíndricas;
- 3 – Parede impermeável;
- 4 – Fluxo unidirecional (para o líquido);
- 5 – Propriedades físicas dos materiais constantes;
- 6 – Escoamento sob pressão atmosférica;
- 7 – Vapor d'água considerado gás ideal.

Para o escoamento da água sob o efeito de transferência de calor com mudança de fase:

- 1 – Escoamento turbulento;
- 2 – Coordenadas cilíndricas;
- 3 – Parede impermeável;
- 4 – Fluxo unidirecional (para o líquido);
- 5 – Propriedades físicas dos materiais dependentes da temperatura, exceto a massa específica, que foi mantida a um valor constante;
- 6 – Escoamento sob pressão atmosférica;
- 7 – Vapor d'água considerado gás ideal;
- 8 – Calor latente de mudança de fase adicionado no domínio;
- 9 – Válida a Lei de Fourier.

Para o escoamento dos óleos de soja e Spindura:

- 1 – Escoamento laminar;
- 2 – Coordenadas cilíndricas;
- 3 – Parede impermeável;
- 4 – Fluxo unidirecional (para o líquido);
- 5 – Propriedades físicas dos materiais constantes;
- 6 – Escoamento sob pressão atmosférica.

3.1.2.2 Condições de contorno

A Tabela 1 reúne as condições de contorno utilizadas na simulação do escoamento multifásico entre a água e o vapor d'água para a condição isotérmica.

Tabela 1 - Condições de contorno para o escoamento isotérmico da água (sistema água/vapor d'água).

Posição	Condição	Situação
Entrada de líquido	$u = 0,1 \text{ m.s}^{-1}$	Constante
Abertura superior	$P = 0 \text{ Pa}$	Constante
Abertura inferior	$P = 0 \text{ Pa}$	Constante
Parede	Wall function	Constante

Fonte: Autora, 2015.

A Tabela 2 exibe as condições de contorno utilizadas na simulação do escoamento multifásico entre a água e o vapor d'água para a condição não isotérmica.

Tabela 2 - Condições de contorno para o escoamento com transferência de calor e mudança de fase para o sistema água/vapor d'água.

Posição	Condição	Situação
Entrada de líquido	$u = 0,1 \text{ m.s}^{-1}$	Constante
Abertura superior	$P = 0 \text{ Pa}$	Constante
Abertura inferior	$P = 0 \text{ Pa}$	Constante
Parede	Wall function	Constante
Temperatura de entrada do líquido	78°C	Constante
Temperatura inicial do domínio	100°C	Varia com o tempo
Temperatura da parede	$110^{\circ}\text{C}, 120^{\circ}\text{C}, 130^{\circ}\text{C}, 140^{\circ}\text{C}$ e 230°C	Constante
Temperatura das aberturas	100°C	Constante

Fonte: Autora. 2015.

A tabela 2 refere-se às condições de contorno para o escoamento com transferência de calor e mudança de fase para a água. Para simular a transferência de calor, foram utilizadas cinco diferentes temperaturas na parede da coluna a fim de verificar o percentual de evaporação para cada caso. Na temperatura de 230°C na parede foi realizada uma simulação teste baseada na teoria do ponto de Leidenfrost, no intuito de estudar os efeitos sob o filme líquido diante de uma temperatura alta e também com a finalidade de se comprovar a adequação do modelo de transferência de calor com mudança de fase utilizado.

A Tabela 3 expõe as condições de contorno utilizadas nas simulações do escoamento multifásico entre os óleos, de soja e Spindura, com o ar sob condição isotérmica.

Tabela 3 - Condições de contorno para o escoamento dos óleos de soja e Spindura (sistema óleo/ar).

Posição	Condição	Situação
Entrada de líquido	$u = 0,1 \text{ m.s}^{-1}$	Constante
Abertura superior	$P = 0 \text{ Pa}$	Constante
Abertura inferior	$P = 0 \text{ Pa}$	Constante
Parede	$u = 0$	Constante

Fonte: Autora, 2015.

3.1.3 Propriedades físicas dos materiais

Para as simulações do escoamento do óleo de soja, as propriedades físicas foram extraídas de Barros, Medeiros e Pereira (2013) e Almeida (2011), conforme Tabela 4:

Tabela 4 - Propriedades físicas do óleo de soja.

Propriedade	Valor	Unidade	Referência
Massa específica	920	kg/m^3	Barros <i>et al.</i> (2013)
Viscosidade	0.0621	Pa.s	Almeida <i>et al.</i> (2011)

Fonte: Autora, 2015.

As propriedades físicas do óleo Spindura foram extraídas de Simioni, Quadri e Bolzan (2014), conforme a Tabela 5:

Tabela 5 - Propriedades físicas do óleo Spindura.

Propriedade	Valor	Unidade	Referência
Massa específica	830	kg/m ³	Simioni, Quadri e Bolzan(2014)
Viscosidade	0.0175	Pa.s	Simioni, Quadri e Bolzan(2014)

Fonte: Autora, 2015.

As propriedades físicas da água foram extraídas do *software COMSOL Multiphysics*[®], tanto para a temperatura de 25°C quanto para a situação em que as mesmas variam com a temperatura. A Tabela 6 reúne as propriedades físicas da água para a condição isotérmica (25°C) e não isotérmica.

Tabela 6 - Propriedades físicas da água para a temperatura de 25°C e para a condição não isotérmica*.

Propriedade	Valor	Unidade	Referência
Massa específica (25°C)	997	kg/m ³	Perry (2008)
Viscosidade (25°C)	0,001	Pa.s	Perry (2008)
Massa específica*	975	kg/m ³	COMSOL [®]
Viscosidade*	μ	Pa.s	COMSOL [®]
Capacidade calorífica*	Cp	J/kg.K	COMSOL [®]
Condutividade térmica*	k	W/m.K	COMSOL [®]

Fonte: Autora, 2015.

As propriedades físicas viscosidade, capacidade calorífica e condutividade térmica são equações em função da temperatura, que varia ao longo da coluna. A massa específica não pode ser definida em forma

de equação, pois apresentava problemas de convergência. Definiu-se então uma massa específica média entre a temperatura de entrada do líquido e a temperatura de saturação.

As equações para as propriedades físicas listadas na tabela acima estão expressas abaixo:

$$\mu = 1,38 - 0,021T + 1,36 \cdot 10^{-4} \cdot T^2 - 4,64 \cdot 10^{-7} \cdot T^3 + 8,9 \cdot 10^{-10} \cdot T^4 - 9,1 \cdot 10^{-13} \cdot T^5 + 3,84 \cdot 10^{-16} \cdot T^6 \quad (19)$$

$$C_p = 1201015 - 80,41 \cdot T + 0,31 \cdot T^2 - 5,4 \cdot 10^{-4} \cdot T^3 + 3,62 \cdot 10^{-7} \cdot T^4 \quad (20)$$

$$k = -0,87 + 0,0089T - 1,6 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 + 7,97 \cdot 10^{-9} \cdot T^3 \quad (21)$$

As propriedades físicas do vapor d'água estão expostas na Tabela 7:

Tabela 7 - Propriedades físicas do vapor d'água a 100°C.

Propriedade	Valor	Unidade	Referência
Massa específica	rho*	kg/m ³	Comsol@
Viscosidade	4e-5	Pa.s	Comsol@
Capacidade Calorífica	0,02356	J/kg.K	Comsol@
Condutividade térmica	1840	W/m.K	Comsol@

Fonte: Autora, 2015.

Para a massa específica da fase vapor, a massa específica variou com a temperatura e pressão:

$$\rho = (p + p_0) \cdot \frac{M_w}{8,314T} \quad (22)$$

Onde p é a pressão do sistema, p₀ é a pressão de referência, M_w é a massa molecular da água e T é a temperatura do domínio.

3.2 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Conforme Lotti *et al.* (2006) o Método dos Elementos Finitos (MEF) é uma análise matemática que consiste na discretização de um meio contínuo em pequenos elementos, mantendo as mesmas propriedades do meio original. Esses elementos são descritos por equações diferenciais e resolvidos por modelos matemáticos, para que sejam obtidos os resultados desejados. Souza (2003) define que o Método dos Elementos Finitos (MEF) consiste em um método numérico aproximado para análise de diversos fenômenos físicos que ocorrem em meios contínuos, e que são descritos através de equações diferenciais parciais, com determinadas condições de contorno e possivelmente com condições iniciais.

Conforme Souza (2003), o modo de operação do Método dos Elementos Finitos consiste em dividir o domínio (meio contínuo) do problema em sub-regiões de geometria simples (formato triangular, quadrado, cúbico, etc) em 2 e 3 dimensões. Devido ao fato das sub-regiões apresentarem dimensões finitas, tais regiões são chamadas “elementos finitos”, em contraste com os elementos infinitesimais utilizados no cálculo diferencial e integral.

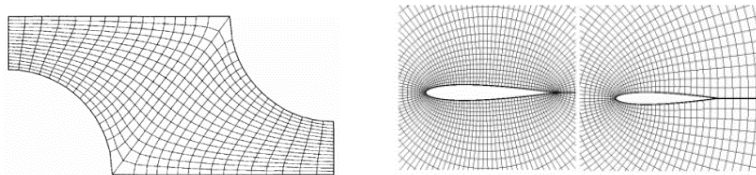
Segundo Rade (2011), o MEF é essencialmente um processo de discretização, que visa transformar um problema infinito-dimensional em um problema finito-dimensional, com número finito de incógnitas. O método consiste em dividir o domínio sobre o qual o problema é estudado em várias regiões interconectadas, denominadas elementos. Cada elemento dispõe de um certo número de pontos (interiores e/ou limítrofes), denominados nós ou pontos nodais. O conjunto de elementos utilizados na discretização é denominado malha.

Conforme Bortoli (2000), quanto à classificação das malhas, uma malha dita estruturada é quando cada volume interno tem sempre o mesmo número de vizinhos e a numeração dos mesmos tem uma sequência natural. E quando se diz que uma malha é não-estruturada, temos o número de vizinhos variando de volume para volume, ficando difícil estabelecer uma regra de ordenação

A malha a ser utilizada na geometria do problema tem de ser a mais adequada possível, ou seja, refinada o suficiente para minimizar os erros e espaçosa o suficiente para haver boa convergência (diminuir o custo computacional). Há malhas estruturadas, cujo usuário a refina conforme seu interesse (Figura 13), triangular (Figura 14), adaptativa (Figura 15), em que a mesma se adequa a geometria refinando a área de maior importância. Há também malhas de estrutura mista, podendo haver

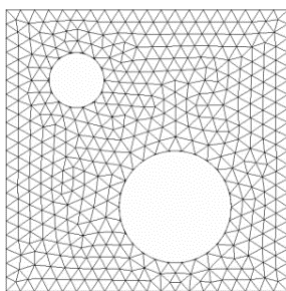
elementos retangulares (na parede, para casos de turbulência, como mostra a Figura 16) e triangulares no mesmo domínio.

Figura 13 - Malha estruturada.



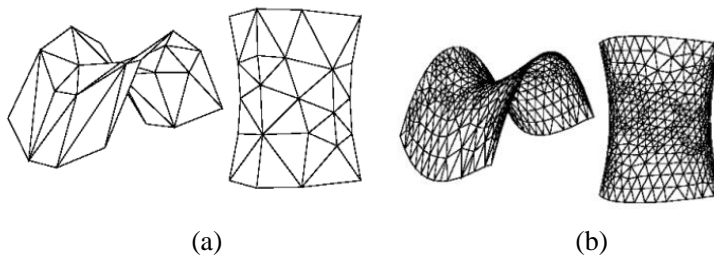
Fonte: GONÇALVES, 2007

Figura 14 - Malha não estruturada – elementos triangulares.



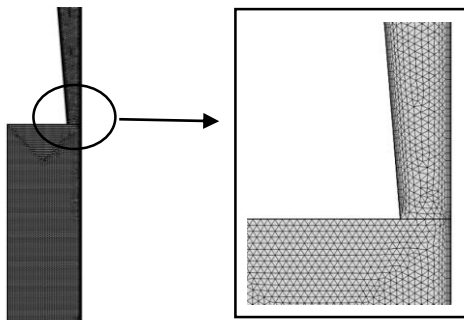
Fonte: GONÇALVES, 2007.

Figura 15 - Malha adaptativa no primeiro passo (a) e no último passo de sua formação (b).



Fonte: SOUZA, 2003.

Figura 16 - Malha mista – elementos triangulares com elementos retangulares na parede, para os casos de turbulência.



Fonte: Autora, 2015.

Segundo Gonçalves (2007), os pontos em que as variáveis são calculadas, são definidos pelas malhas numéricas as quais são, essencialmente, uma representação discretizada do domínio geométrico no qual o problema irá ser resolvido.

Dentro do método dos elementos finitos há inúmeras maneiras de se resolver o problema em questão. Para a física da coluna de parede molhada, envolvendo questões fluidodinâmicas e transferência de calor com mudança de fase, o *software* utilizou abordagens mais adequadas ao problema, as quais serão exploradas a seguir.

3.3 SIMULAÇÕES

As simulações foram realizadas através do *software* *COMSOL Multiphysics*[®], em um computador com processador Core i7, 4790, com 32 GB de memória RAM e placa de vídeo GTX 750 TI.

Para problemas de escoamento multifásicos é importante considerar nos cálculos os efeitos da interface, e para isso, no presente trabalho utilizou-se o método *phase field* (campo de fase ϕ). Este método utiliza um parâmetro de mobilidade χ , que determina o intervalo de tempo da difusão de Cahn-Hilliard e deve ser suficientemente grande para reter uma espessura interfacial constante, mas suficientemente pequeno para que os termos convectivos não sejam excessivamente amortecidos. O padrão a ser utilizado é 1. O parâmetro de mobilidade é uma função da espessura da interface. Para a espessura da interface a expressão padrão é

$pf.hmax/2$, o que significa que o valor é metade do tamanho máximo do elemento de malha na região através da qual a interface passa.

O contorno 0 da função *phase field* define a interface entre os fluidos. Em uma camada de transição próxima a interface, ϕ é suavizado de -1 até 1. A interface se move com o líquido a mesma velocidade, u .

Na interface de campo de fase, as frações de volume dos fluidos individuais são:

$$Vf1 = \frac{1 - \phi}{2} \quad (23)$$

$$Vf2 = \frac{1 + \phi}{2} \quad (24)$$

Onde $Vf1$ é a fração líquida e $Vf2$ é a fração de vapor.

Abaixo serão expostos, resumidamente, as particularidades dos métodos utilizados pelo *software* para a resolução do problema. Estas informações foram extraídas, traduzidas e adaptadas da ferramenta de ajuda (help) do *software*.

3.3.1 Discretização das interfaces

As opções do *software* quanto a discretização utilizada nos cálculos, seguem abaixo:

- P1 + P1: significa elementos lineares para as componentes de velocidade e o campo de pressão. Elementos lineares são computacionalmente mais “baratos” do que elementos de ordem superior e também são menos propensas a introduzir oscilações espúrias, melhorando assim a robustez numérica.
- P2 + P1: significa elementos de segunda ordem para as componentes de velocidade e elementos lineares para o campo de pressão. Elementos de segunda ordem funcionam bem para baixas velocidades de fluxo.
- P3 + P2: significa elementos de terceira ordem para os componentes de velocidade e elementos de segunda ordem para o campo de pressão. Isto pode adicionar precisão adicional, mas também acrescenta graus de liberdade adicionais em comparação com elementos P2 + P1.

A discretização utilizada foi da ordem P2+P1, isto é, elementos de segunda ordem para a velocidade e de primeira ordem para a pressão.

3.3.2 Termo convectivo

Há duas maneiras de apresentar um balanço de massa, onde o transporte de espécies químicas ocorre através da difusão e advecção. Estas são as formulações não-conservativas e conservativas do termo convectivo, respectivamente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (D \nabla c) + R \quad (25)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}c) = \nabla \cdot (D \nabla c) + R \quad (26)$$

Cada caso é tratado de forma ligeiramente diferente pelos algoritmos do solver. Nestas equações c é a concentração (mol/m^3), D é o coeficiente de difusão (m^2/s), R é uma expressão produção ou a taxa de consumo ($\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$), \mathbf{u} é o campo de velocidade (m/s). O processo de difusão pode ser anisotrópica, caso em que D é um tensor.

A forma conservativa conserva a massa de cada fluido, mas o tempo de processamento é geralmente mais longo.

A forma não-conservativa permite a conservação numérica exata da integral da função de campo de fase e é mais adequada para cálculos numéricos, geralmente convergindo com mais facilidade. Isto é considerado suficiente para a maioria das aplicações.

A opção do termo convectivo utilizada foi a forma não conservativa, pois esta é mais vantajosa em termos de tempo e custo computacional.

3.3.3 Shape Function (Função de Forma)

Shape Function é uma função que interpola a solução entre os valores discretos obtidos com os nós da malha. Portanto, as funções apropriadas têm de ser utilizado e os polinômios de ordem inferior são tipicamente escolhidos como funções de forma. Na verdade, Shape Function pode ser qualquer equação matemática que interpola quando não há pontos para definir a malha e para diferentes funções de forma obtemos diferentes matrizes de elementos. Conforme Rade (2011), uma vez definidos os elementos e seus respectivos nós, no interior de cada elemento são admitidas soluções aproximadas para as variáveis de campo, expressas como funções arbitrárias dos valores que as incógnitas

assumem nos nós (valores nodais). Estas funções são denominadas funções de interpolação ou funções de forma.

Um elemento finito define uma série de variáveis, tipicamente uma variável dependente e seus derivados. Essas variáveis são chamadas de variáveis funções de forma, porque são calculadas diretamente a partir de funções de forma e dos graus de liberdade.

A ordem do elemento (ou, mais precisamente, a ordem da função forma) afeta diretamente o número de graus de liberdade na solução e a precisão da solução. Aumentando a ordem dos elementos corresponde aproximadamente a um refinamento da malha uniforme. A maioria das interfaces físicas utiliza elementos de Lagrange, que podem ser da ordem de 1 a 4 (em 3D) ou 5 (em 1D e 2D), com 2 sendo a ordem predefinida.

A Função de Forma oferece duas opções de resolução, uma por método de Lagrange e outra pelo método Lagrange descontínuo. O método descontínuo de Lagrange só pode ser definido em malhas triangulares em 2D ou malhas tetraédricas em 3D.

3.4 MODELO TURBULENTO *TWO-PHASE FLOW, PHASE FIELD*

Este modelo representa a física do sistema para a parte da fluidodinâmica, no qual se trata de um escoamento com fluxo turbulento e de duas fases (líquida e vapor).

O modelo turbulento *Two-Phase Flow, phase field* é usado para controlar a interface entre dois fluidos imiscíveis. Os fluidos podem ser incompressíveis ou compressíveis.

A interface física resolve equações de Navier-Stokes para a conservação da quantidade de movimento e uma equação de continuidade para a conservação da massa. A posição da interface é controlada através da resolução de duas equações de transporte adicionais, uma para a variável de campo de fase e outra para a massa específica de energia de mistura. Efeitos da turbulência são modelados utilizando o modelo padrão $k-\varepsilon$ de duas equações com restrições de capacidade de realização. Fluxo perto da parede é modelado usando funções de parede.

As equações abaixo descrevem o modelo turbulento *two-phase flow, phase field*, que é calculado para as duas fases:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot \left[-p\mathbf{I} + (\mu + \mu_T)(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \right] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_{st} + \mathbf{F} \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (27)$$

$$\rho \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \kappa = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \right) \nabla \kappa \right] + P_\kappa - \rho \varepsilon \quad (28)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_\kappa - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad (29)$$

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (30)$$

$$P_\kappa = \mu_T \left[\nabla \mathbf{u} : (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \right] \quad (31)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \frac{\gamma \lambda}{\varepsilon_{pf}^2} \nabla \psi, \phi = \text{phif} \quad (32)$$

$$\psi = -\nabla \cdot \varepsilon_{pf}^2 \nabla \phi + (\phi^2 - 1)\phi + \frac{\varepsilon_{pf}^2}{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \phi}, \psi = \text{psi} \quad (33)$$

$$\lambda = \frac{3\varepsilon_{pf}\sigma}{\sqrt{8}}, \gamma = \chi \varepsilon_{pf}^2 \quad (34)$$

As variáveis dependentes deste modelo são: campo de velocidade, pressão, taxa de dissipação turbulenta, energia cinética turbulenta, variável *phase field* e distância inicial equivalente da interface.

As equações phase field (22, 23 e 24) serão explicadas adiante, ainda neste capítulo.

O modelo utiliza como método de cálculo a forma não conservativa e a discretização P2+P1.

3.5 MODELO LAMINAR *TWO-PHASE FLOW, PHASE FIELD*

Para o escoamento dos óleos de soja e Spindura, foi considerado regime laminar, com base no cálculo do número de Reynolds.

O modelo laminar também resolve equações de Navier-Stokes para a conservação da quantidade de movimento e a equação da continuidade

para a conservação da massa. A posição da interface é controlada através da resolução de duas equações de transporte adicionais, uma para a variável de campo de fase e outra a massa específica de energia de mistura. O movimento da superfície é determinada por minimização de energia livre.

As equações utilizadas como método de resolução para o regime laminar são:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot \left[-p \mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \right] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_{st} + \mathbf{F} \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (27)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \frac{\gamma \cdot \lambda}{\varepsilon_{pf}^2} \nabla \psi, \phi = \text{phif} \quad (35)$$

$$\psi = -\nabla \cdot \varepsilon_{pf}^2 \nabla \phi + (\phi^2 - 1)\phi + \frac{\varepsilon_{pf}^2}{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \phi}, \psi = \text{psi} \quad (36)$$

$$\lambda = \frac{3\varepsilon_{pf}\sigma}{\sqrt{8}}, \gamma = \chi\varepsilon_{pf}^2 \quad (37)$$

As equações do modelo laminar só diferem do modelo turbulento quanto aos parâmetros turbulentos adicionados nas equações 18 e 19, utilizando o modelo padrão k-ε de duas equações. Vale lembrar que estas equações são aplicadas tanto na fase líquida quanto na fase gasosa.

3.6 TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM FLUIDOS

A transferência de calor em fluidos é utilizada para modelar a transferência de calor por condução, convecção e radiação. A equação de temperatura definida nos domínios de fluido corresponde à equação de convecção-difusão que pode conter contribuições adicionais, tais como fontes de calor.

A lei fundamental que rege toda a transferência de calor é a primeira lei da termodinâmica, comumente referida como o princípio da conservação da energia. No entanto, a energia interna, U , é uma

quantidade bastante inconveniente para medir e usar em simulações. Portanto, a lei de base é normalmente reescrita em termos de temperatura, T . Para um fluido, a equação de calor resultante é:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T \right) = -(\nabla \cdot \mathbf{q}) + \tau : \mathbf{S} - \frac{T}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \bigg|_p \left(\frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) p \right) + Q \quad (38)$$

Sendo que \mathbf{S} é definido como:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \quad (39)$$

Para determinar a equação 28, foram utilizados uma série de relações termodinâmicas. Esta equação também assume que a massa é conservada, o que significa que a massa específica e a velocidade deve ser relacionado por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (40)$$

As interfaces de transferência de calor utiliza a lei de Fourier para condução de calor, que afirma que o fluxo de calor condutor, \mathbf{q} , é proporcional ao gradiente de temperatura:

$$\mathbf{q}_i = -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (40)$$

Inserindo a equação 30 na equação 28, reordenando os termos e ignorando aquecimento e pressão de trabalho viscoso, a equação do calor assume uma forma mais familiar:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (41)$$

A transferência de calor na interface de fluidos resolve esta equação para a temperatura, T . Se a velocidade é configurada para zero, a equação que regula a transferência de calor condutivo puramente é obtida:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (-k \nabla T) = Q \quad (42)$$

Este modelo utiliza como variável dependente a temperatura (T) e a função utilizada para o cálculo é do tipo Galerkin descontínuo.

3.7 MODELO DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM MUDANÇA DE FASE

Para a resolução do fenômeno de transferência de calor com mudança de fase, utilizou-se o submodelo “*Weak Contribution*” (contribuição fraca), sendo este inserido no modelo fluidodinâmico. Este submodelo tem a função de modificar a equação da continuidade para considerar a mudança de fase de líquido para vapor.

Son e Dhir (2007) apresentaram um método numérico para simulação do filme em ebulição em uma superfície sólida. As formulações apresentadas, tanto a da continuidade como a de Navier-Stokes e a do método *phase field* (campo de fase) foram modificadas no intuito de incluir o efeito de mudança de fase na interface líquido-vapor. A seguir serão apresentadas as equações estudadas por Son e Dhir (2007) e devidamente adaptadas para o método *phase field*, pois os autores formularam as mesmas para o método *level set*. A adaptação das equações foram extraídas da documentação do próprio *software COMSOL*, que consta de uma biblioteca com diversos exemplos para diversas situações. O exemplo utilizado para embasamento teórico é intitulado por *Boiling water*.

O campo de velocidade e de pressão para a fase líquida são descritas pelas equações de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis:

$$\rho_L \frac{\partial \mathbf{u}_L}{\partial t} + \rho_L (\mathbf{u}_L \cdot \nabla) \mathbf{u}_L = \nabla \cdot [-p_L \mathbf{I} + \mu_L (\nabla \mathbf{u}_L + (\nabla \mathbf{u}_L)^T)] + \rho_L \mathbf{g} \quad (43)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_L = 0 \quad (44)$$

Para a fase vapor, a equação de Navier-Stokes é resolvida, para fluidos compressíveis:

$$\rho_v \frac{\partial \mathbf{u}_v}{\partial t} + \rho_v (\mathbf{u}_v \cdot \nabla) \mathbf{u}_v = \nabla \cdot \left[-p_v \mathbf{I} + \eta_v (\nabla \mathbf{u}_v + (\nabla \mathbf{u}_v)^T) - \frac{2}{3} \mu_v (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] + \rho_v \mathbf{g} \quad (45)$$

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_v \cdot \mathbf{u}_v) = 0 \quad (46)$$

A equação de calor é resolvida tanto para a fase líquida quanto para a fase vapor, pois há gradiente de temperatura em ambas as fases:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla \cdot \kappa \nabla T \quad (47)$$

É importante saber que a velocidade da interface, a velocidade do líquido e a velocidade de vapor não são necessariamente iguais:

$$\mathbf{u}_{\text{int}} = \mathbf{u}_L - \frac{\dot{m}}{\rho_L} \mathbf{n} \quad (48)$$

Onde \mathbf{n} é o vetor unitário normal dirigido para a interface da fase líquida para a fase de vapor e \mathbf{u}_{int} é a velocidade na interface e \mathbf{u}_L é a velocidade da fase líquida.

A condição de contorno para a fase vapor na interface é:

$$\mathbf{n} \cdot \rho_v \mathbf{u}_v = \dot{m} \left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_L} \right) + (\mathbf{n} \cdot \rho_v \mathbf{u}_L) \quad (49)$$

Onde \dot{m} representa a taxa de vaporização ($\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$). Sabe-se que, se não houver mudança de fase, $\mathbf{u}_v = \mathbf{u}_L = \mathbf{u}_{\text{int}}$ e a velocidade é constante ao longo da interface. Além disso, se a massa específica da fase líquida e da fase vapor forem a mesma, o primeiro termo do lado direito será zero e a velocidade será constante ao longo do interface. Quando a mudança de fase acontece, e a massa específica do líquido não for igual à massa específica do vapor, o primeiro termo do lado direito será diferente de zero, e isto implica em uma velocidade de fluxo normal para dentro da interface.

Existem três forças que atuam sobre o líquido na interface e assim as condições de contorno para a fase líquida são:

$$\begin{aligned} n \cdot \left[-p\mathbf{I} + \mu_L (\nabla \mathbf{u}_L + (\nabla \mathbf{u})^T) \right] &= \dot{m}(\mathbf{u}_L - \mathbf{u}_v) + \sigma \kappa \mathbf{n} \\ + n \cdot \left[-p_v \mathbf{I} + \mu_v \nabla \mathbf{u}_v + (\nabla \mathbf{u}_v)^T - \frac{2}{3} \mu_v (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] & \end{aligned} \quad (50)$$

Esta equação resulta de um equilíbrio de forças na interface. O primeiro termo à direita representa uma força de reação, devido à aceleração do vapor para longe da superfície do líquido. Esta força é quase sempre insignificante. O segundo termo é a tensão superficial e o último termo do lado direito é a soma da pressão e forças viscosas que atuam sobre o líquido a partir do vapor. O fluxo de massa que deixa a superfície do líquido conduz a um aumento da pressão do vapor. A pressão exerce uma força sobre a superfície do líquido e a região de vapor começa a expandir. A presença da força de tensão superficial leva a uma descontinuidade de pressão através da interface.

O fluxo de massa que deixa a interface pode então ser avaliada a partir do fluxo de calor condutivo:

$$\dot{m} = - \left(\frac{M_w}{\Delta H_{VL}} \right) n \cdot \kappa_v \nabla T_v \quad (51)$$

onde M_w é o peso molecular do vapor (kg/mol) e H_{VL} é a entalpia de vaporização (J/mol).

Não diferente da equação da continuidade, a equação para a variável de campo de fase também é modificada para permitir a mudança de fase:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi - \dot{m} \delta \left(\frac{V_{f,v}}{\rho_v} + \frac{V_{f,L}}{\rho_L} \right) = \nabla \cdot \frac{\gamma \lambda}{\varepsilon^2} \nabla \psi \quad (52)$$

onde ϕ é o campo de fase adimensional que varia entre -1 e 1. A fração de volume da fase de vapor é $V_{f,v}$, e a fração de volume do líquido é $V_{f,L}$. A quantidade λ é a massa específica de energia de mistura (N) e ε é proporcional à espessura da interface (m). Estes dois parâmetros estão relacionados com o coeficiente de tensão superficial σ através:

$$\sigma = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\lambda}{\varepsilon} \quad (53)$$

e γ é a mobilidade ($\text{m}^3 \cdot \text{s} / \text{kg}$). A mobilidade determina o intervalo de tempo da difusão de Cahn-Hilliard e deve ser suficientemente grande para reter uma espessura constante interfacial, mas suficientemente pequeno para que os termos convectivos não sejam excessivamente amortecidos.

A equação da continuidade também sofre modificações para considerar os efeitos de mudança de fase de líquido para vapor:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \dot{m} \delta \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_L} \right) \quad (54)$$

onde δ é um temo ($1/\text{m}$) que representa a interface entre as duas fases.

O fluxo de massa ou taxa de evaporação pode ser aproximado pela seguinte expressão:

$$\dot{m} = - \left(\frac{M_w}{\Delta H_{vl}} \right) n \cdot \mathbf{k}_v \nabla T_v \cong C \rho_L \frac{(T - T_{\text{sat}})}{T_{\text{sat}}} \quad (55)$$

onde C é uma constante (m/s), T_{sat} é a temperatura de saturação e T é a variável. O fluxo de massa aparece na equação de energia como:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla \cdot \mathbf{k} \nabla T - \frac{m \delta \Delta H_{vl}}{M_w} \quad (56)$$

Praticamente, deve-se estimar o valor de C , e este deve ser grande o suficiente para que a temperatura na interface permaneça à temperatura de saturação mas não tão grande porque pode resultar instabilidade numérica.

3.8 MÉTODO *PHASE FIELD*

O método *phase field* é um dos métodos utilizados pelo *software* comercial *COMSOL Multiphysics*[®] e é mais tradicionalmente utilizado em situações de fluxo multifásico. Em vez de controlar diretamente a

interface entre dois fluidos, a camada interfacial é governada por um domínio variável de fase. A variável de campo de fase é governada pela equação de Cahn-Hilliard. A equação de Cahn-Hilliard é um modelo de campo de fase que permite simular a separação dos componentes de uma mistura bifásica. Os modelos de campo de fase constituem uma classe particular dos modelos de interface difusiva. Nesses modelos, as transições nas interfaces entre os diferentes fluidos ou materiais são substituídas por camadas delgadas nas quais as forças interfaciais são distribuídas suavemente.

Segundo Badalassi, Ceniceros e Banerjee (2003), os modelos baseados em campo de fase substituem as interfaces do fluido por regiões de transição de espessura fina, mas não zero, onde as forças interfaciais estão bem distribuídas. A idéia básica deste método é a introdução de um parâmetro de ordem ou campo fase que varia continuamente ao longo de finas camadas interfaciais tornando-se mais uniforme no interior das fases. O exemplo mais conhecido deste tipo de modelo é a equação de Cahn-Hilliard utilizada para a separação de fases de uma mistura bifásica. O parâmetro de relaxação (χ) corresponde a minimização da energia local e como resultado, as camadas da interface não deterioram facilmente.

Conforme Jacqmin (1999), a análise da precisão dos cálculos do campo de fase é complicada devido a três fatores: o espaçamento da malha, a espessura da interface e o parâmetro de mobilidade. A espessura da interface deve ser reduzida a um valor mais baixo do que o tamanho da malha, de modo a se obter uma estimativa das forças interfaciais mais precisa.

No contexto de problemas transientes e assumindo que os fluxos difusivos interfaciais são aproximadamente proporcionais ao potencial químico, a dinâmica do campo de fase é descrita pelas equações de Navier-Stokes (03 e 17) e de Cahn-Hilliard (25 – 27):

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_{st} + \mathbf{F} \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (27)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \frac{\gamma \cdot \lambda}{\varepsilon_{pf}^2} \nabla \psi, \phi = \text{phipf} \quad (35)$$

$$\psi = -\nabla \cdot \varepsilon_{pf}^2 \nabla \phi + (\phi^2 - 1)\phi + \frac{\varepsilon_{pf}^2}{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \phi}, \psi = \text{psi} \quad (36)$$

$$\lambda = \frac{3\varepsilon_{pf}\sigma}{\sqrt{8}}, \gamma = \chi\varepsilon_{pf}^2 \quad (37)$$

A mobilidade determina a escala de tempo de difusão Cahn-Hilliard e deve ser grande o suficiente para manter uma espessura interfacial constante, mas pequeno o suficiente para que os termos convectivos não sejam excessivamente amortecidos. No *COMSOL Multiphysics*[®] a mobilidade é determinada por um parâmetro de ajuste de mobilidade que é uma função da espessura da interface $\gamma = \chi\varepsilon^2$.

Pode-se considerar também a energia livre um parâmetro funcional do campo de fase adimensional ϕ :

$$F(\phi, \nabla\phi, T) = \int \left(\frac{1}{2} \varepsilon_{pf}^2 |\nabla\phi|^2 + f(\phi, T) \right) dV = \int f_{tot} dV \quad (57)$$

Onde ε_{pf} é uma medida da espessura da interface. A equação descreve a evolução do parâmetro de campo de fase:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\phi = \nabla \cdot \gamma \nabla \left(\frac{\partial f_{tot}}{\partial\phi} - \nabla \cdot \frac{\partial f_{tot}}{\partial \nabla\phi} \right) \quad (58)$$

O lado direito da equação (48) visa minimizar a energia total livre, com um tempo de relaxação controlada pelo parâmetro de mobilidade γ (unidade SI: $\text{m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$).

As forças da equação de Cahn-Hilliard assumem um valor entre 1 e -1, exceto numa região muito fina na interface fluido-fluido. No método *phase field*, a interface entre dois fluidos é tratada como uma fina camada de mistura, através da qual as propriedades físicas variam de forma contínua.

3.9 ESTUDO DA MALHA

O objetivo do estudo da malha é definir a melhor a ser utilizada no problema em estudo, isto é, escolher aquela que apresenta menor erro, maior precisão nos resultados, boa convergência e não menos importante, aquela que desenvolve um menor custo computacional (menor tempo e menor ocupação da memória física).

Primeiramente deve-se definir o regime do escoamento (laminar ou turbulento). O escoamento turbulento, por exemplo, possui limitações

quanto ao uso de malhas adaptativas, devido a seus elementos de parede. Portanto, não é qualquer tipo de malha que se pode utilizar em qualquer situação. Já o escoamento laminar aceita qualquer tipo de malha.

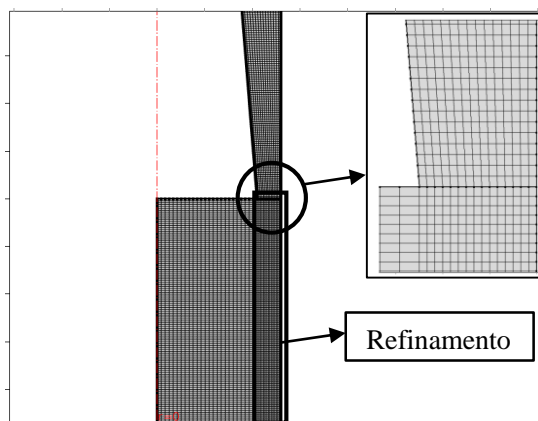
Cabe ao usuário definir qual a melhor malha a ser utilizada, isto é, aquela que apresenta os melhores resultados.

3.9.1 Escoamento de filme descendente de água

Os tipos de escoamentos das físicas representadas são laminar e turbulento e, portanto, testou-se três tipos de malha: a estruturada, a triangular com elementos retangulares na parede e a triangular sem elementos de parede (para o escoamento laminar).

A Figura 17 apresenta a malha estruturada utilizada:

Figura 17 - Malha estruturada.



Fonte: Autora, 2015.

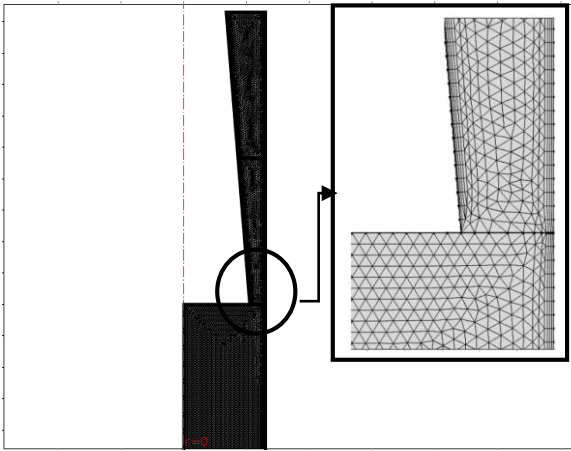
A Figura 17 representa a malha estruturada e nitidamente percebe-se que a mesma é composta por elementos retangulares, que podem ser refinados conforme a área de interesse. Neste caso, a área mais importante do escoamento é aquela em que há refinamento, pois é onde o filme esco.

A simulação com a utilização desta malha apresentou o resultado esperado (formação da película) e uma convergência razoável (ordem de 10^3). O tempo de simulação para a parte de escoamento durou em torno de 3 dias e 18 horas, utilizando uma memória física de 6,57 GB. Apesar de ter apresentado bons resultados para a parte de escoamento, este tipo

de malha não pôde atender ao modelo de transferência de calor, pois a mesma apresentou convergência elevada, não sendo possível prosseguir o tempo de simulação estipulado. Devido a este fato, não foi dada continuidade ao estudo com o uso de malha estruturada.

A Figura 18 ilustra o segundo tipo de malha testada e utilizada nas simulações:

Figura 18 - Malha triangular para escoamento turbulento.



Fonte: Autora, 2015.

A malha apresentada na Figura 18 apresenta um total de 82083 elementos, convergência na ordem de 10^2 , tempo de simulação para o escoamento de 8 horas e 13 minutos, utilizando uma memória física de 7,66 GB. Para a parte de calor, o tempo mínimo de simulação foi de 16 horas, utilizando uma memória física de 8,7 GB.

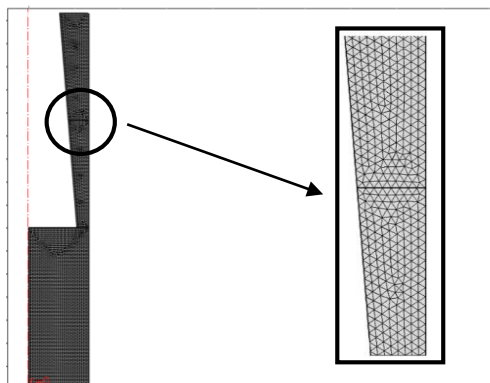
Percebe-se pela Figura 18 que há elementos retangulares na parede da coluna e do cone. Estes elementos tem a função de representar de maneira mais precisa o escoamento nesta região, visto que o escoamento é turbulento.

Considerando que a malha triangular representou bem a dinâmica do escoamento juntamente com a adição de calor, optou-se por utilizar esta malha.

3.9.2 Escoamento do filme descendente dos óleos de soja e Spindura

A Figura 19 mostra a distribuição da malha triangular para o escoamento laminar dos óleos:

Figura 19 - Malha triangular para escoamento laminar.



Fonte: Autora, 2015.

Para estes fluidos, o regime do escoamento é laminar, portanto a malha utilizada foi a triangular e sem elementos de parede. Além do excelente desempenho, optou-se também por utilizar esta malha para manter um padrão entre as simulações, visto que no caso do escoamento da água, somente a malha triangular apresentou melhor resolução.

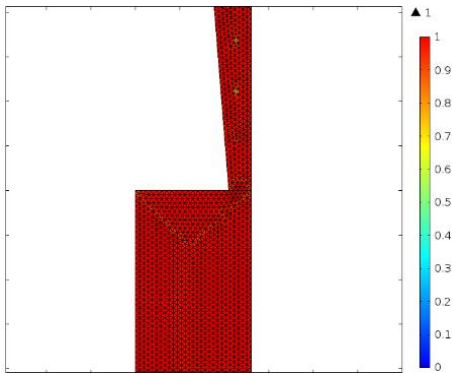
Esta malha contém 30342 elementos bem distribuídos, apresentou um tempo de simulação de 5 horas e 30 minutos, uma convergência na ordem de 10^{-1} .

3.9.3 Qualidade da malha

Como uma última justificativa para a escolha da malha, plotou-se um gráfico que avalia a qualidade da malha. A Figura 20 e a Figura 21 mostram a escala da qualidade da malha. Quanto mais próxima de 1, melhor é a qualidade.

A malha triangular apresentou ótima qualidade, sendo que seu valor pode ser considerado 1 em praticamente toda a coluna, com exceção de alguns pontos que apresentaram qualidade 0,9, mas ainda assim considerados bons.

Figura 20 - Qualidade da malha triangular.

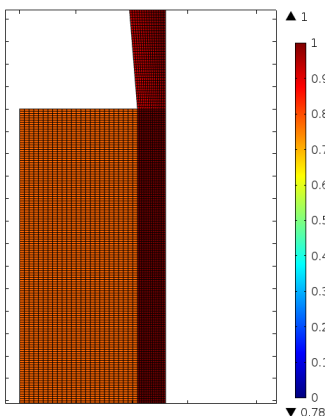


Fonte: Autora, 2015.

Como pode ser observado, na Figura 21 a qualidade da malha é inferior em relação a malha triangular, apresentando um valor de 0,75 na maior parte da coluna e valor 1 na parte mais refinada. Este fato explica a não convergência do modelo de transferência de calor e também o tempo maior para a resolução da parte do escoamento, em relação à malha triangular.

Esta última análise completou e validou a justificativa da escolha da malha.

Figura 21 - Qualidade da malha estruturada.



Fonte: Autora, 2015.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste item serão apresentados os resultados das simulações para a formação do filme descendente na coluna de destilação em quatro condições:

I - escoamento multifásico da água com vapor d'água;

II - escoamento multifásico entre óleo de soja e ar;

III - escoamento multifásico entre óleo Spindura com ar;

IV - escoamento da película de água seguida de transferência de calor.

Para as condições I, II e III serão analisadas as características da fluidodinâmica dos escoamentos, a espessura do filme e o perfil de velocidade da velocidade da fase líquida sem a transferência de calor.

Para a condição IV, além de analisar o exposto nas condições I, II e III, também serão estudados o processo de transferência de calor com mudança de fase, a distribuição da temperatura na coluna, o fluxo de calor total gerado e os percentuais de evaporação obtidos.

4.1 ANÁLISE FLUIDODINÂMICA DA FORMAÇÃO DA PELÍCULA DESCENTE DO ÓLEO DE SOJA E DO ÓLEO SPINDURA

4.1.1 Óleo de soja

Os resultados apresentados para o escoamento do óleo de soja são referentes as condições de escoamento isotérmico, realizados a 25°C.

4.1.1.1 Regime de escoamento

Para calcular o regime de escoamento de um filme líquido descende, considerando uma alimentação de 25kg/h, utilizaram-se as Equações (8) e (9) anteriormente apresentadas. Assumiram-se os valores:

$$\dot{m} = 0,00722 \text{ kg/s}$$

$$D = 0,013 \text{ m}$$

$$\Gamma = 0.1768 \text{ kg/s.m}$$

$$\mu = 0,0621 \text{ kg/s.m}$$

Tem-se um $Re = 11,4$, isto é, classificado como regime laminar ($Re < 20$).

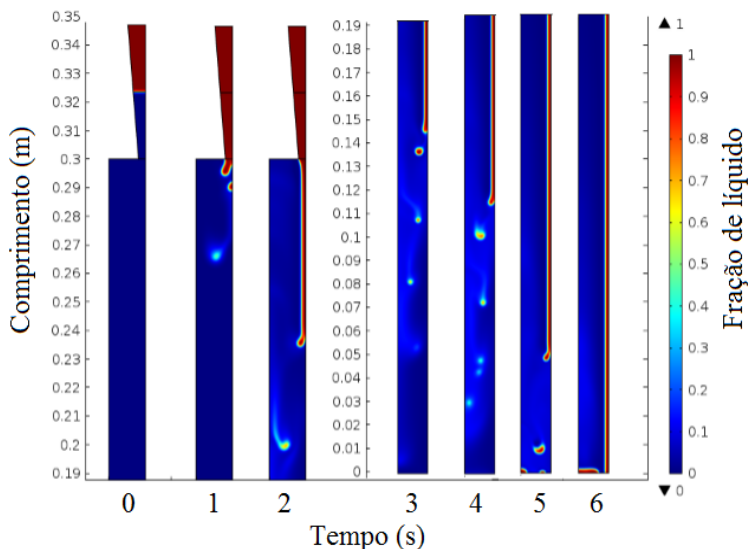
4.1.1.2 Formação da película líquida descendente

Conforme citado por Tavares *et al.* (2008), a determinação da vazão mínima de líquido na alimentação deverá ser de tal forma a promover o bom funcionamento da unidade. Esta análise visa evitar a formação de pontos secos, que são responsáveis por um baixo rendimento térmico.

A Figura 22 ilustra o desenvolvimento do filme descendente de óleo de soja ao longo da coluna. A mesma foi dividida em duas partes para facilitar a visualização do escoamento. Observa-se na coluna a formação de uma película longa, estável, sem rupturas ou pontos secos. Com a vazão mássica de 25 kg/h pode-se alcançar os pré-requisitos principais para a formação de um filme. Ainda observando a Figura 22, no tempo final de simulação, de 6 segundos, percebe-se que houve um pequeno acúmulo de óleo na saída. Este fato se deve ao desprendimento de uma gota no final do filme, como observado no tempo de 5 segundos.

Esta gota desprende-se da película, caindo no centro da coluna, causando o acúmulo observado. Com a película estabilizada e não apresenta mais formação de gotas, a tendência é desaparecer o excesso de óleo.

Figura 22 - Filme líquido descendente para a vazão de 25 kg/h.

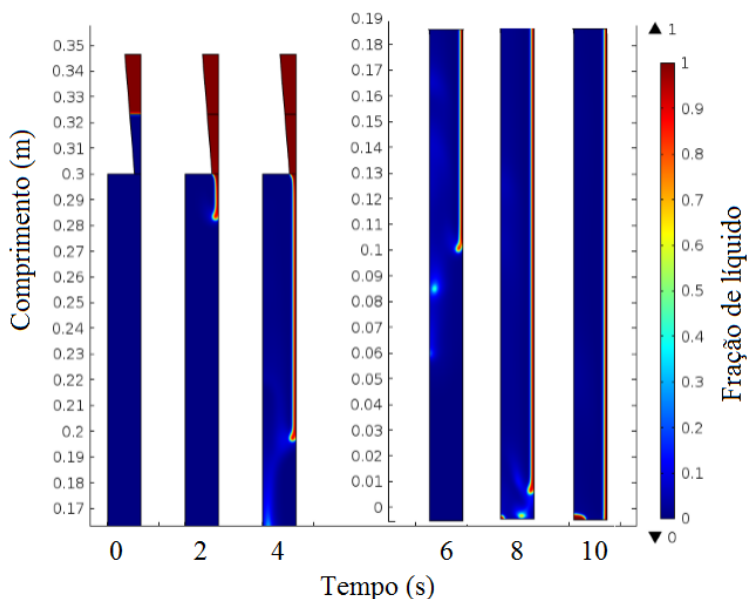


Fonte: Autora, 2015.

A Figura 23 representa o escoamento com a metade da alimentação introduzida no escoamento anterior. Com este valor reduzido, obteve-se as mesmas características ideais para a formação do filme, gerando igualmente um acúmulo na saída, porém em menor quantidade, devido a menor vazão.

Uma diferença importante entre as figuras é o tempo de residência na coluna. Com a vazão de 25 kg/h, o filme desenvolveu-se por completo em 6 segundos, enquanto a uma vazão de 12,5 kg/h, o tempo foi de 10 segundos. Calculando o tempo de residência com base na velocidade máxima do fluido e na altura da coluna, tem-se os valores de 2,50 s e 4,28 s para ambas as vazões, respectivamente. Do ponto de vista operacional, não é interessante um tempo de residência alto, devido à necessidade de produção. Quanto menor a vazão, menor será a quantidade de vapor produzido.

Figura 23 - Filme líquido descendente para a vazão de 12,5 kg/h.



Fonte: Autora, 2015.

4.1.1.3 Espessura da película

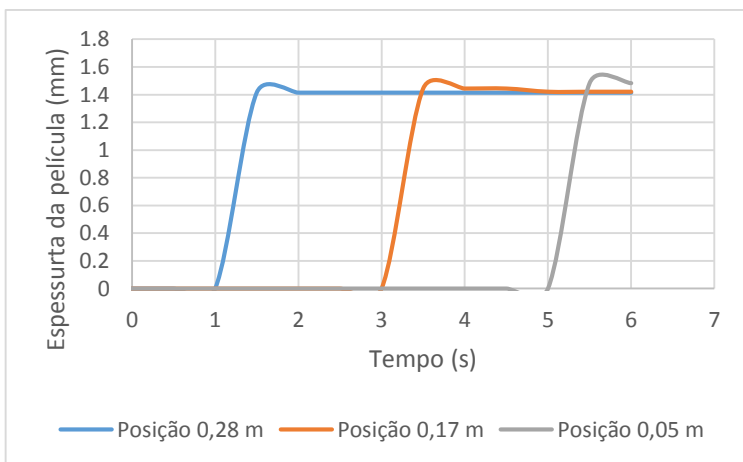
Teleken (2013) afirma que a espessura do filme líquido não pode ultrapassar os 3 mm, pois espessura acima deste valor prejudicaria a eficiência de transferência de calor e massa no processo.

A Figura 24 mostra o desenvolvimento da espessura do filme de óleo de soja, para a vazão de 25 kg/h. Para a medição da espessura, dividiu-se a coluna em três partes e analisou-se a mesma nas posições de 0,28 m, 0,17 m e 0,05 m. Lembrando que a coluna possui 0,3 m de altura, foi considerado um ponto próximo a entrada, um no meio e um próximo a saída.

A espessura do filme foi, em média, 1,400 mm, sofrendo pequenas variações (ondulações) devido ao transiente inicial em função da frente de passagem do filme.

Quanto ao valor da espessura, a mesma situa-se na faixa ideal, que é até 3 mm. Vale reforçar que, se há interesse em aumentar a espessura, basta aumentar a vazão de entrada. Esta espessura garante a boa eficiência do processo em termos de transferência de calor e massa.

Figura 24 - Espessura do filme de óleo de soja para a vazão de 25 kg/h.



Fonte: Autora, 2015.

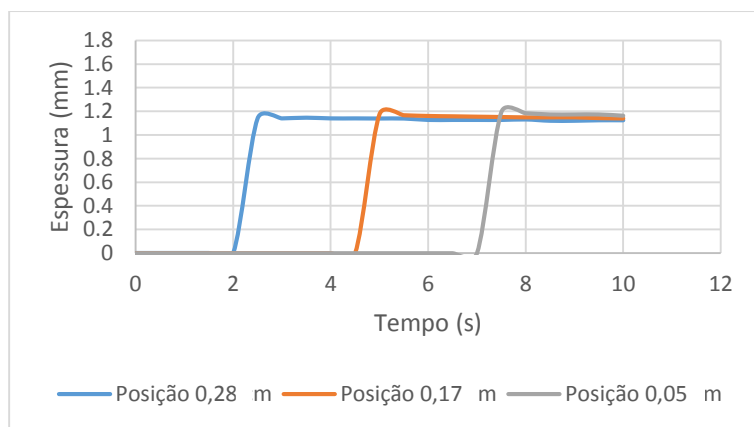
A Figura 25 mostra a evolução da espessura do filme em função do tempo e da posição, para a vazão de 12,5 kg/h. A espessura é

ligeiramente menor que 1,200 mm e ainda se enquadra dentro da faixa permitida.

É evidente perceber que quanto menor a vazão de fluido, menor é a espessura da película. Também neste caso, a interface do filme apresentou comportamento ondulatório ao longo da coluna, devido a passagem da frente do filme líquido.

Com este valor baixo de vazão também se obteve os requisitos necessários para um escoamento de filme descendente perfeito. Em ambos os casos houve a cobertura de 100% da parede da coluna e a espessura do filme situa-se na faixa ideal. Cabe às necessidades do processo decidir qual a melhor opção a ser utilizada, lembrando que o tempo de residência é consideravelmente maior quando se utiliza uma vazão mais baixa.

Figura 25 - Espessura do filme de óleo de soja para a vazão de 12,5 kg/h.



Fonte: Autora, 2015.

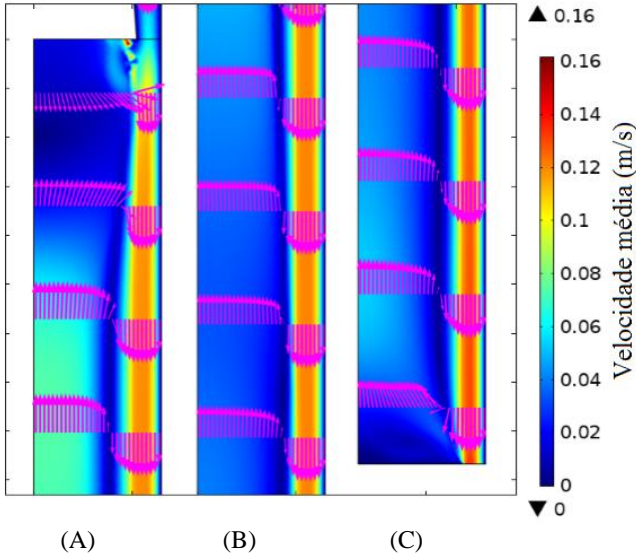
O líquido forma uma película plana dentro do regime laminar, o que é chamado "laminar suave". Sob estas condições dinâmicas de escoamento, o mesmo desenvolve o perfil de velocidade parabólico descrito pela teoria de Nusselt, como na Figura 8. Quando exceder o número de Reynolds crítico para a condição laminar ($Re > 4$) tipicamente primeiras ondas aparecem depois de uma pequena zona dinâmica de fluido (WEISE e SCHOLL, 2009).

4.1.1.4 Perfil de velocidade do filme líquido descendente

De acordo com a equação 17, o perfil de velocidade do regime laminar deve atender a um perfil parabólico, com a velocidade máxima do escoamento ocorrendo na superfície do filme.

Tanto a Figura 26 quanto a Figura 27 obedecem os quesitos de perfil de velocidade. Para a vazão de 25 kg/h, como ilustra a Figura 26, a velocidade máxima da película se mantém, do início ao fim, em 0,12 m/s enquanto a velocidade da fase gasosa sofre variações ao longo da coluna. Na primeira parte da coluna (A), a velocidade situa-se entre 0,02 m/s e 0,07 m/s. Na metade da coluna (B), a velocidade sofre uma queda de 0,07 m/s para 0,04 m/s e na última parte da coluna, a velocidade estabiliza-se em torno de 0,04 m/s. A velocidade de escoamento da película influencia na velocidade da fase gasosa. Para este caso, a velocidade de entrada foi fixada em 0,02 m/s, que corresponde aos 25 kg/h.

Figura 26 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa para a vazão de 25 kg/h em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna.

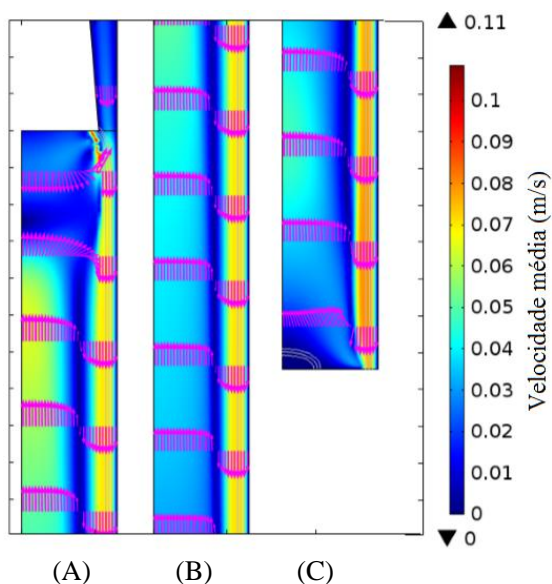


Fonte: Autora, 2015.

Para a vazão de 12,5 kg/h, como exposto na Figura 27, o perfil de escoamento tanto da fase líquida quanto da gasosa é semelhante ao caso anterior, pois ambas apresentam escoamento laminar. No entanto, a velocidade máxima da fase líquida se encontra em torno de 0,07 m/s e a velocidade da fase gasosa tem um mínimo de 0,01 m/s no início e no final da coluna e um máximo de 0,05 m/s na parte central.

Percebe-se também em ambas as Figuras que somente o líquido passa na saída inferior. O escoamento é em contracorrente, como o esperado, porém na abertura superior o ar possui velocidade de saída menor que a de entrada do fluido, então o ar é “arrastado” para baixo e impedido assim de sair, causando um efeito de recirculação na coluna. Efeitos de borda também podem ser considerados para explicar tal comportamento. Vale lembrar que estes resultados são para o tempo final de simulação, ou seja, o tempo em que a película se forma por completo e entra em estado estacionário.

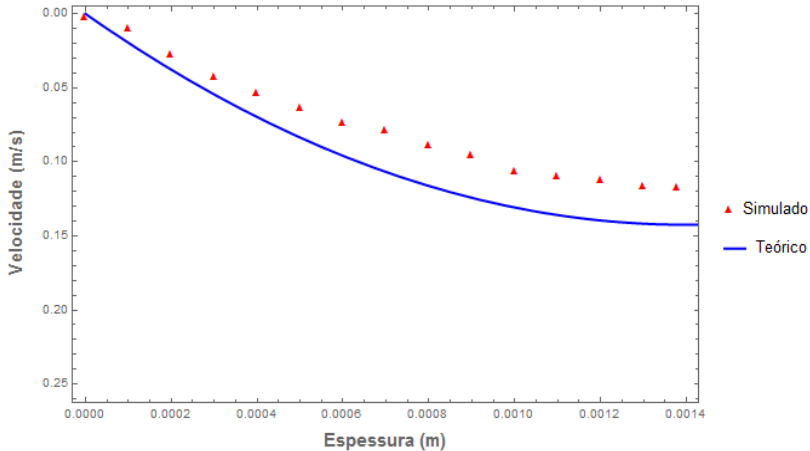
Figura 27 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa para a vazão de 12,5 kg/h em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna.



Fonte: Autora, 2015.

A Figura 28 mostra a comparação entre o perfil de velocidade teórico, calculado pela equação 17 e o perfil de velocidade simulado para a vazão de 25 kg/h de óleo de soja.

Figura 28 - Comparação entre os perfis de velocidade para o óleo de soja: Teórico frente ao simulado.



Fonte: Autora, 2015.

A Figura 28 comprova a equivalência do modelo teórico com os dados simulados. Os dados obtidos no *software* apresentaram uma disposição parabólica e apresentaram seu ponto de velocidade máxima na superfície do filme, ou seja, 0,12 m/s na espessura de 1,400 mm. O perfil teórico indica que a velocidade máxima na superfície do filme é de 0,14 m/s. Devido à proximidade dos valores, considera-se o resultado simulado satisfatório frente ao resultado teórico.

4.1.2 Óleo Spindura

Os resultados apresentados para o escoamento do óleo Spindura são referentes as condições de escoamento isotérmico, realizados a 25°C.

4.1.2.1 Regime de escoamento

Para calcular o regime de escoamento de um filme líquido descendente, considerando uma alimentação de 25 kg/h, utilizaram-se as Equações (8) e (9) já apresentadas. Assumiram-se os valores:

$$\dot{m} = 0,007 \text{ kg/s}$$

$$D = 0,013 \text{ m}$$

$$\Gamma = 0.1715 \text{ kg/s.m}$$

$$\mu = 0,0175 \text{ kg/s.m}$$

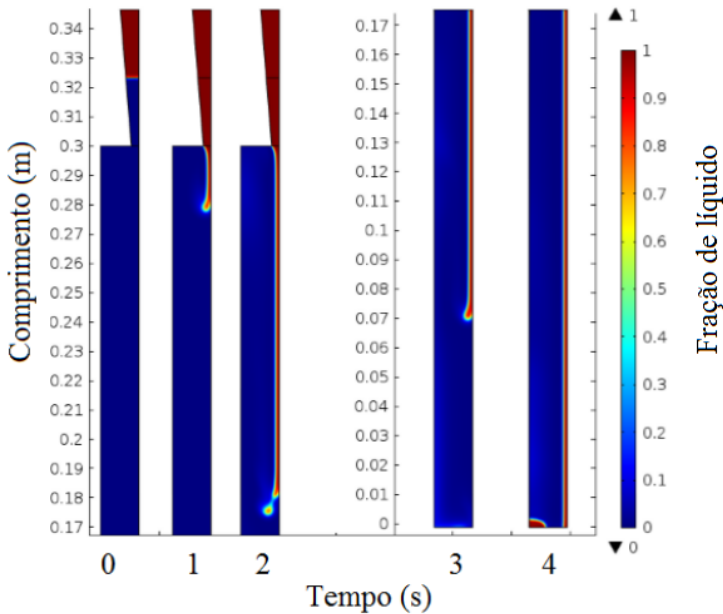
Tem-se um $Re = 39$, isto é, classificado como regime de transição, porém, por apresentar um Re baixo, considera-se o regime totalmente laminar.

4.1.2.2 Formação da película líquida descendente

Obedecendo as mesmas vazões de alimentação do óleo de soja, o escoamento com óleo Spindura também foi simulado com vazões de 25 kg/h e 12,5 kg/h, a fim de comparar os resultados entre ambos escoamentos. Em relação ao óleo de soja, o óleo Spindura é menos viscoso.

Observando a Figura 29 percebe-se a formação de uma película longa, estável, sem rupturas e sem formação de pontos secos. Com a vazão de 25 kg/h, o filme formou-se por completo em 4 segundos, enquanto o filme descendente de óleo de soja levou 6 segundos para formar-se por completo, na mesma vazão. Esta diferença justifica-se pela viscosidade, onde a do óleo de soja é maior que a do óleo Spindura. O comportamento fluidodinâmico assemelha-se em ambos os casos, inclusive o acúmulo de fluido no final da coluna.

Figura 29 - Filme líquido descendente para a vazão de 25 kg/h.



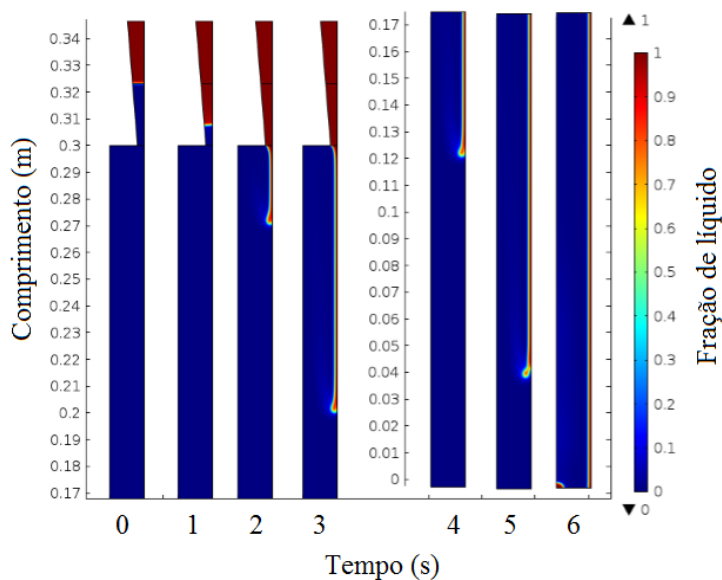
Fonte: Autora, 2015.

A Figura 29 coincide com a Figura 22, onde a mesma vazão mássica é utilizada. Enquanto que na Figura 30, exposta abaixo, o filme levou 6 segundos para formar-se por completo, na Figura 23, que representa o óleo de soja, o filme levou 10 segundos, por ser mais viscoso.

O tempo de residência para as vazões testadas, 25kg/h e 12,5 kg/h, foram de 1,58 s e 2,31 s, respectivamente.

Quanto às características fluidodinâmicas, todos os casos obedecem os critérios necessários para se aplicar em uma destilação. Cabe decidir a questão do tempo de residência. Quanto maior o tempo de residência, maior será o tempo em que o fluido ficará exposto ao processo de aquecimento, e conseqüentemente pode prejudicar as propriedades físicas do material. E também quanto maior este tempo, a quantidade produzida será menor.

Figura 30 - Filme líquido descendente para a vazão de 12,5 kg/h.

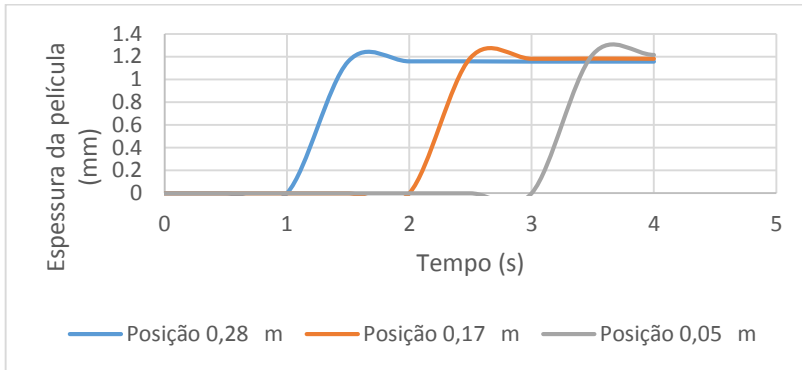


Fonte: Autora, 2015.

4.1.2.3 Espessura da película

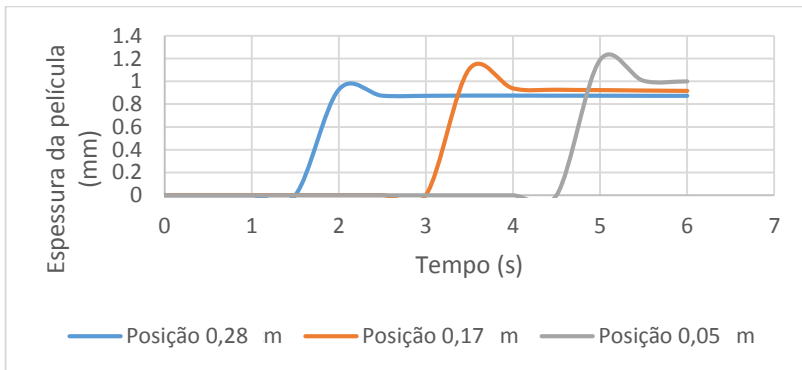
A Figura 31 e a Figura 32 representam o perfil de espessura da película para o óleo Spindura nas vazões de 25 kg/h e 12,5 kg/h, respectivamente. Ambas apresentaram um comportamento ondulatório, devido à passagem da frente do filme e a maior espessura obtida foi para a maior vazão testada, atingindo um valor em torno de 1,190 mm. Para a vazão menor, a espessura atingiu um valor em torno de 1,000 mm. Com estas espessuras ainda há garantia do bom funcionamento do processo, pois as mesmas não são finas o suficiente para secarem e assim inviabilizar o processo de transferência de calor e massa.

Figura 31 - Espessura da película para a vazão de 25 kg/h.



Fonte: Autora, 2015.

Figura 32 - Espessura da película para a vazão de 12,5 kg/h.



Fonte: Autora, 2015.

Observando e comparando as Figuras 24, 25, 31 e 32, o fluido mais viscoso (óleo de soja), atingiu maiores valores para a espessura do filme, sendo estes em torno de 1,400 mm e 1,200 mm para as vazões de 25 kg/h e 12,5 kg/h, respectivamente. O óleo Spindura, para as mesmas vazões, atingiu valores em torno de 1,190 mm e 1,000 mm, respectivamente.

Percebe-se que tanto a viscosidade quanto a vazão de entrada influenciam na espessura do filme descendente. Fluidos mais viscosos e vazões maiores contribuem para o aumento da espessura da película.

Quanto menor o valor da vazão de alimentação menor o valor espessura do filme líquido descendente (TELEKEN, 2013).

4.1.2.4 Perfil de velocidade do filme líquido descendente

Analisando a Figura 33 e a Figura 34 e comparando-as com as Figuras 26 e 27, percebe-se que ambas apresentam perfil de escoamento semelhante, ou seja, formato parabólico para o escoamento do fluido.

O escoamento com o óleo de soja apresentou velocidades de escoamento para ambas as fases inferiores em relação ao escoamento com óleo Spindura. Este efeito deve-se a viscosidade do fluido que, quanto maior, maior será a resistência oferecida ao escoamento e menor será a velocidade com que o mesmo irá avançar pela coluna.

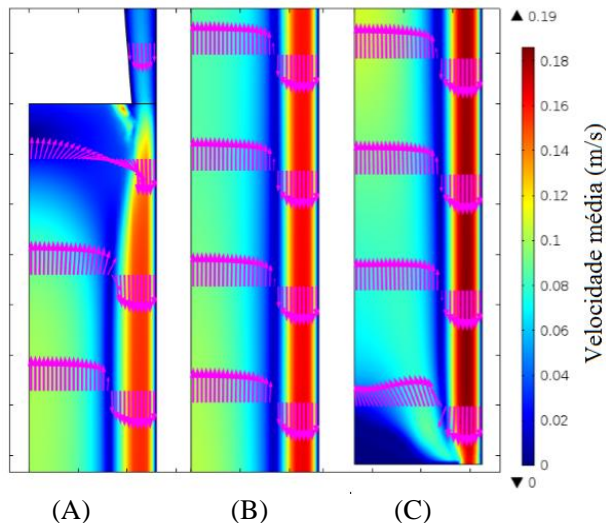
Para a vazão de 25 kg/h, representada pela Figura 33, a velocidade do filme atingiu um máximo de 0,15 m/s e a da fase gasosa variou entre 0,02 m/s (na abertura superior e na saída inferior) e 0,08 m/s (no restante da coluna).

Para a vazão de 12,5 kg/h, representada pela Figura 34, a velocidade da película descendente atingiu 0,11 m/s enquanto a fase gasosa apresentou uma velocidade variando entre 0,02 m/s (na abertura superior e na saída inferior) e 0,08 m/s (no restante da coluna). Quanto menor a vazão de alimentação, menor será a velocidade em ambas as fases.

Analisando-se a saída inferior observa-se que somente o líquido sai e a fase gasosa sobe, como o esperado. Na abertura superior, nota-se que parte do gás sai e parte retorna para a coluna. A parte que retorna sofre influência da velocidade de entrada, onde esta arrasta o ar para baixo. Este efeito ocorre somente na região logo abaixo do cone.

A comparação do perfil de velocidade teórico com o simulado está representada na Figura 35. O perfil simulado representa aquele com vazão de alimentação de 25 kg/h.

Figura 33 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa para a vazão de 25 kg/h em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna.

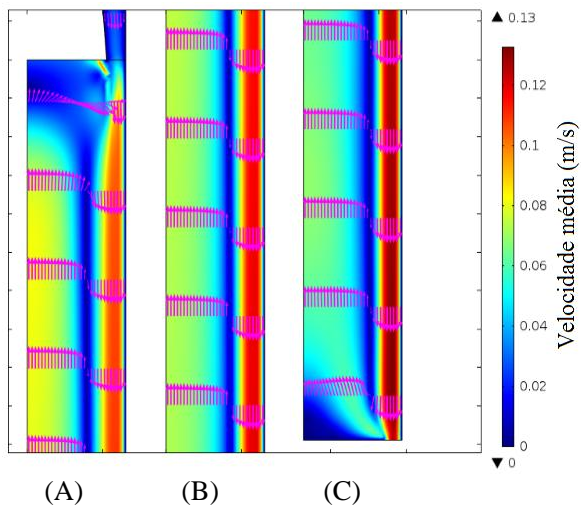


Fonte: Autora, 2015.

Teleken (2013) também avaliou em seu trabalho o campo de velocidade e a formação de película para um fluido viscoso. O autor utilizou uma mistura de hidrocarbonetos, a uma vazão de 25 kg/h sob condição isotérmica. A velocidade superficial do fluido atingiu no máximo 0,4 m/s. O mesmo afirma que este fato está diretamente ligado à viscosidade do fluido, pois este possui uma resistência maior ao escoamento.

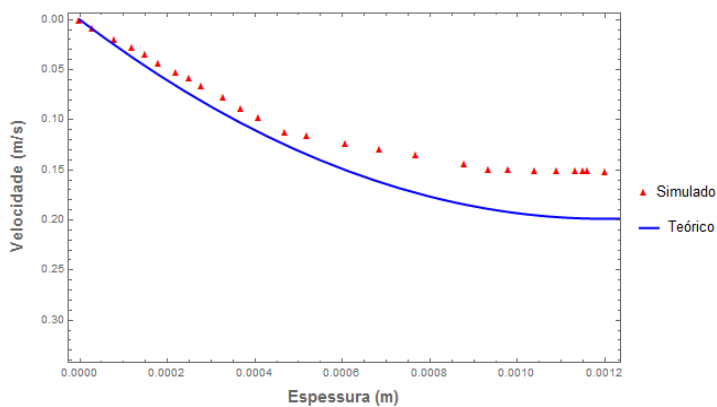
Apesar dos fluidos utilizados serem diferentes, o comportamento apresentado foi o mesmo que o encontrado por Teleken (2013), ou seja, quanto maior a viscosidade, menor a velocidade superficial do filme.

Figura 34 – Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa para a vazão de 12,5 kg/h em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna.



Fonte: Autora, 2015.

Figura 35 - Comparação entre os perfis de velocidade para o óleo Spindura: Teórico frente ao simulado.



Fonte: Autora, 2015.

A Figura 35 comprova a adequação dos dados simulados ao modelo parabólico teórico. Apesar da distância dos pontos simulados da curva teórica, o comportamento é o mesmo. Enquanto a velocidade máxima na superfície do filme é de 0,15 m/s para os dados simulados, o modelo teórico apresenta uma velocidade máxima de 0,20 m/s. Julga-se que os resultados simulados para o perfil de velocidade são satisfatórios frente ao comportamento previsto teoricamente.

A Tabela 8 resume os resultados obtidos com o escoamento dos óleos.

Tabela 8 - Resultados obtidos para o escoamento dos óleos.

Parâmetros	Soja (25 kg/h)	Soja (12,5 kg/h)	Spindura (25 kg/h)	Spindura (12,5 kg/h)
Espessura (mm)	1,400	1,200	1,190	1,000
Velocidade fase gasosa (m/s)	0,02 a 0,07	0,01 a 0,05	0,02 a 0,08	0,02 a 0,08
Velocidade máxima da fase líquida (m/s)	0,12	0,07	0,15	0,11
Tempo de residência (s)	2,50	4,28	1,58	2,31

Fonte: Autora, 2015.

4.2 ANÁLISE FLUIDODINÂMICA DA FORMAÇÃO DA PELÍCULA DESCENDENTE DE ÁGUA NA CONDIÇÃO ISOTÉRMICA

Após as análises das características fluidodinâmicas de dois fluidos viscosos, serão realizados estudos semelhantes para a água, também na condição isotérmica (a 25°C).

Para o caso da água, como o fluido é pouco viscoso, o regime de escoamento é turbulento, como demonstrado a seguir.

4.2.1 Regime de escoamento

De acordo com estes dados e utilizando as propriedades físicas da água a 25°C, foi calculado o número de Reynolds conforme as Equações (8) e (9) já apresentadas. Assumiram-se os valores:

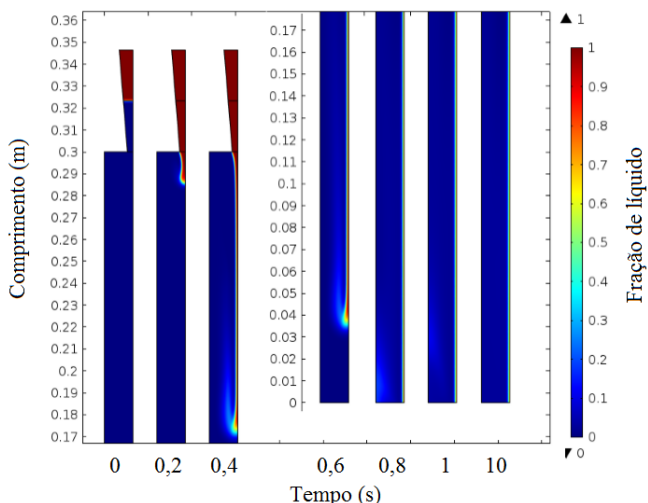
$$\begin{aligned}\dot{m} &= 0,0388 \text{ kg/s} \\ D &= 0,013 \text{ m} \\ \Gamma &= 0.9505 \text{ kg/s.m} \\ \mu &= 0,001 \text{ kg/s.m}\end{aligned}$$

Tem-se um $Re = 3802$, isto é, classificado como intermediário, porém, por apresentar um número de Reynolds elevado, considera-se o regime totalmente turbulento.

4.2.2 Formação da película líquida descendente

Independente do tipo de fluido, o comportamento fluidodinâmico no que diz respeito à formação de película, deve ser padrão, ou seja, garantir no mínimo que o filme não fragmente ao longo da coluna. A Figura 36 ilustra o desempenho do filme descendente de água sob condição isotérmica, ou seja, sob condição ambiente.

Figura 36 - Película descendente de água em condição isotérmica.



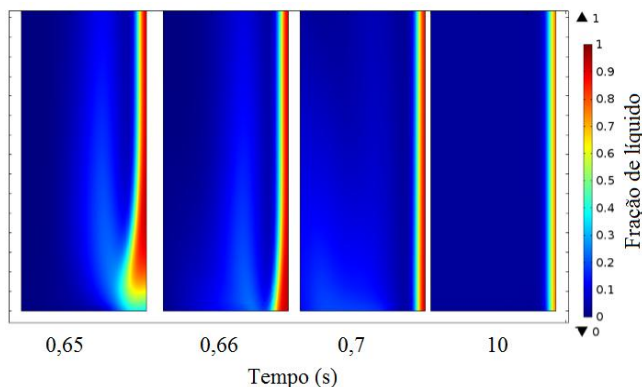
Fonte: Autora, 2015.

A Figura 36 remete a um filme estável, sem rupturas e sem formação de pontos secos. Em relação a fluidodinâmica, são estas as características essenciais que um filme líquido deve apresentar, antes de ser destinado a destilação/evaporação, como mencionado anteriormente.

Em 0,8 segundo se pôde observar o desenvolvimento completo do filme, correspondendo a um tempo de residência de 0,34 segundo. Este tempo de residência é consideravelmente inferior aos dos óleos, porém deve-se levar em consideração que a vazão de alimentação da água é 11,2 vezes maior em relação à vazão mínima (12,5kg/h) testada para os óleos e 5,6 vezes maior em relação a máxima (25 kg/h) testada.

A Figura 37 representa o instante em que o filme chega ao final da coluna e o comportamento do mesmo quando atinge estado estacionário. No instante de 0,65 segundo de simulação a película chega ao final da coluna, mas ainda não há saída de líquido. No instante seguinte, em 0,66 segundo, o filme inicia o processo de saída. Em 0,7 segundo tem-se a formação de uma película uniforme e estável e a partir deste momento o filme se mantém constante.

Figura 37 – Perfil do filme descendente próximo à saída da coluna.



Fonte: Autora, 2015.

Ainda analisando a figura 37, observa-se uma espessura constante, porém com uma pequena diminuição na fração de volume do líquido, no tempo final de simulação. É esperado um comportamento não uniforme em relação à manutenção do filme, isto é, a redução da fração volumétrica de líquido é consequência de uma instabilidade no decorrer do

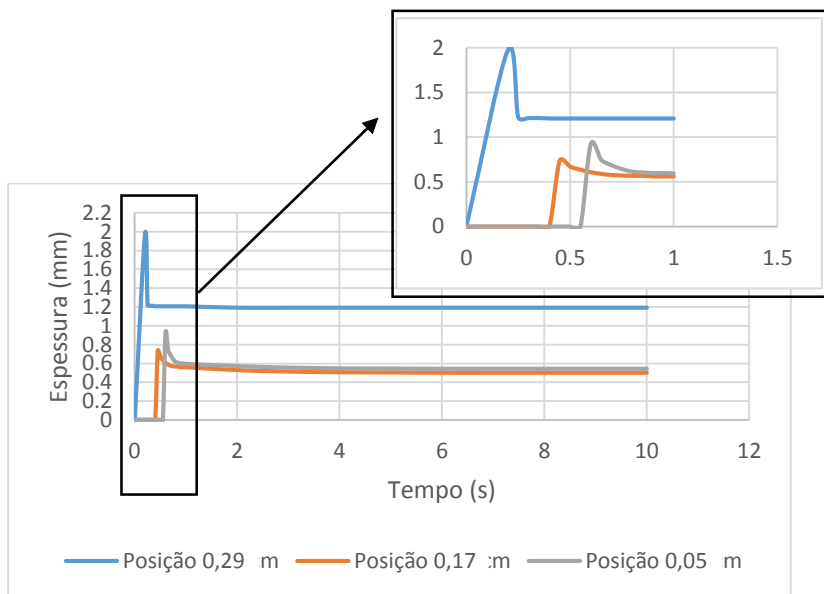
escoamento, sendo característica do próprio escoamento, mas isto não gera consequência alguma na transferência de calor e massa.

4.2.3 Espessura da película

Para o escoamento isotérmico (a 25°C) da água, a espessura máxima da película atingiu um valor de 2,000 mm, logo no início da coluna, na região abaixo ao sistema de distribuição de alimentação.

A Figura 38 representa a variação da espessura do filme nos 10 segundos de simulação. No primeiro segundo, conforme a região ampliada, houve maior variação na espessura e deste tempo em diante, a mesma manteve-se constante, para suas respectivas posições. Observa-se que a espessura é maior na posição de 0,29 m, próximo à entrada. No meio e no fim da coluna, a espessura se mantém praticamente a mesma, com um valor de aproximadamente 0,550 mm. A maior variação se deu no primeiro segundo porque este intervalo corresponde ao período de formação do filme, conforme pode ser observado na Figura 38.

Figura 38 - Espessura do filme descendente de água.



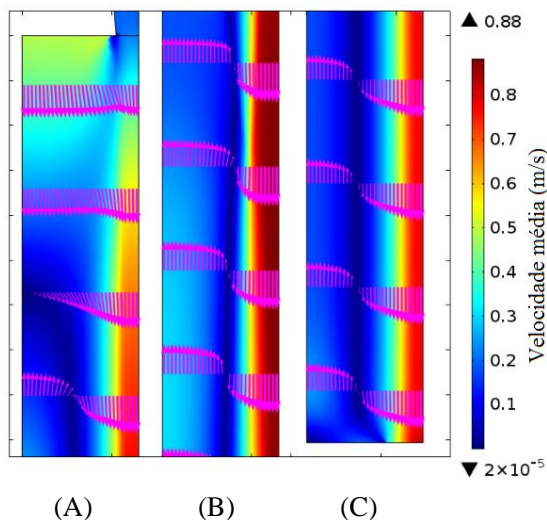
Fonte: Autora, 2015.

4.2.4 Perfil de velocidade do filme líquido descendente

Observando a Figura 39, para o tempo final de 10 segundos, a velocidade do filme se mantém em 0,88 m/s. Na fase gasosa, a velocidade do vapor é menor em relação a fase líquida, predominando um valor de 0,2 m/s na coluna inteira, com exceção da abertura superior, cuja velocidade é de aproximadamente 0,45 m/s, conforme mostra a Figura 39.

A fase vapor sofre um processo de recirculação na coluna, pois não há saída da mesma na região superior. Este efeito ocorre devido a influência do escoamento do filme, onde sua velocidade é consideravelmente superior em relação a velocidade do vapor. Pode-se também considerar que um efeito de borda influence o escoamento do vapor na parte superior.

Figura 39 - Perfil de velocidade na fase líquida e gasosa para o tempo final de simulação em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna.



Fonte: Autora, 2015.

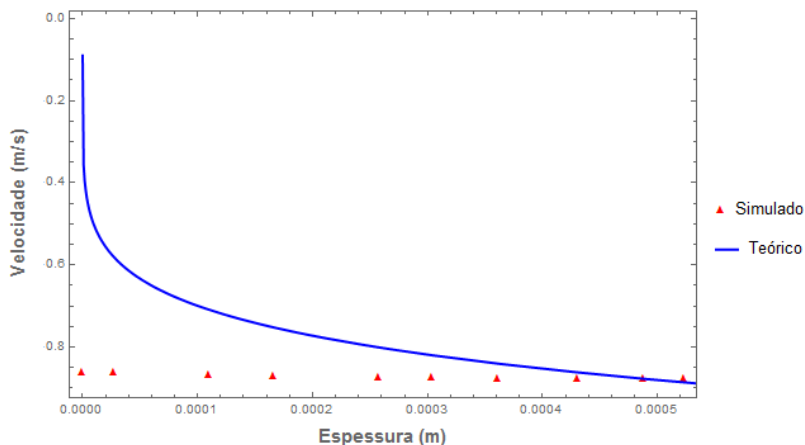
A Figura 40 compara o perfil de velocidade turbulento teórico com o perfil de velocidade turbulento simulado.

Observando a Figura 40, percebe-se que o perfil simulado na região da parede (espessura igual a zero) não é equivalente ao perfil

teórico. O perfil teórico indica que a velocidade mínima deve ser na parede e a máxima deve ser na superfície do filme. Entretanto, no perfil simulado a velocidade máxima persistiu da parede à superfície do filme.

Quanto ao formato, o perfil teórico apresenta-se semelhante a uma parábola achatada, porém o perfil simulado apresentou-se de forma linear na região da espessura do filme. Este comportamento é justificado pelo refinamento da malha, que não foi adequado o suficiente para representar o escoamento na região da parede. Quanto a velocidade máxima da superfície do filme, ambos os perfis concordaram com 0,88 m/s.

Figura 40 - Comparação entre os perfis de velocidade para a água a 25°C: Teórico frente ao simulado.



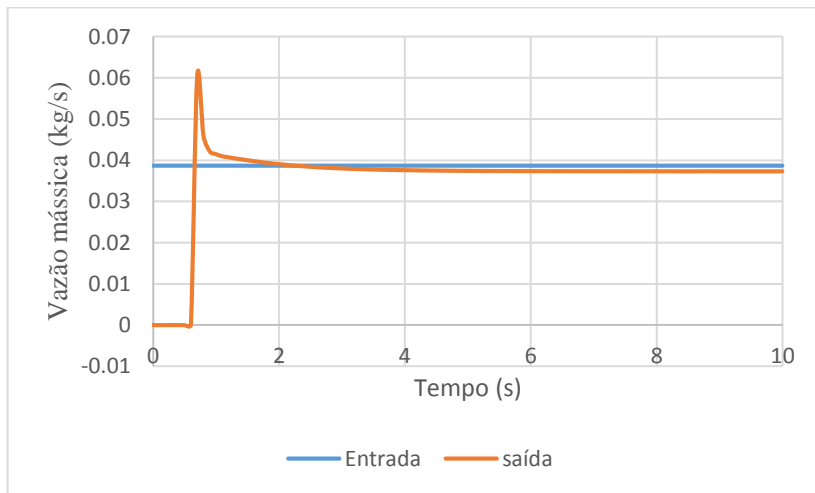
Fonte: Autora, 2015.

4.2.5 Balanço de massa para o líquido

Realizou-se um balanço de massa do líquido na coluna a fim de verificar se há acúmulo, geração ou consumo de massa do mesmo. Como o processo é isotérmico, espera-se que a vazão de entrada seja igual à de saída, sem gerar acúmulos ou perdas. Perda considerável de massa da fase líquida só é esperada quando o sistema estiver sob aquecimento, gerando evaporação. A Figura 41 apresenta a evolução da massa de líquido na fronteira de alimentação (entrada) e na base da coluna (saída). Naturalmente, a linha da alimentação não sofre variações, pois reflete a

condição de contorno de velocidade constante aplicada na entrada. Já a curva que corresponde à saída apresenta uma evolução relacionada à definição da interface líquido-vapor ($\phi = 0$) e sua passagem através da abertura na base da coluna. Deve-se considerar que uma pequena fração da fase líquida é perdida para a fase vapor devido à “degradação” da interface imposta pelo método numérico. A Figura 37 ilustra e deixa claro esse efeito, na medida em se compreende que uma certa fração de líquido inicialmente injetado na coluna deverá compor a parte da interface correspondente ao vapor com $\phi > 0$. Desta forma, e para o caso em estudo, depois da passagem da frente do filme líquido, representada pelo pico a 0,65 s, a curva evolui passando um pouco abaixo do valor correspondente à vazão mássica da alimentação. Desta forma, por uma questão puramente numérica, sem que isso tenha qualquer relação com transferência de calor, gera-se uma pequena fração de vapor oriundo do líquido injetado. O valor obtido para esse efeito de pseudo-evaporação estabiliza-se em 3,5% a partir de 6 s do início da alimentação.

Figura 41 - Balanço de massa na coluna.



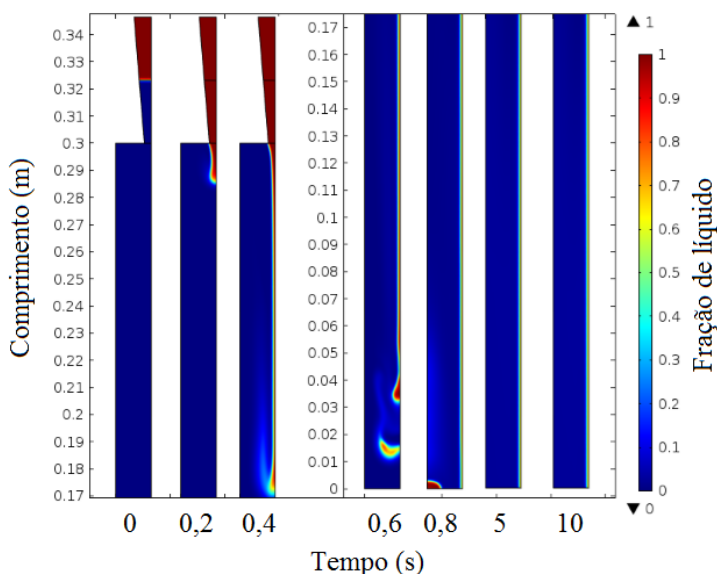
Fonte: Autora, 2015.

4.3 ANÁLISE DOS EFEITOS DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR NO PROCESSO DE EVAPORAÇÃO DA PELÍCULA DESCENDENTE DE ÁGUA

4.3.1 Análise das fluidodinâmicas dos escoamentos da película

No primeiro momento, faz-se uma análise do filme descendente formado sob a condição de aquecimento com um $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ entre a temperatura de saturação e a temperatura da parede. A Figura 42 demonstra o desenvolvimento do filme para o tempo de simulação de 10 segundos.

Figura 42 - Desenvolvimento do filme submetido a uma temperatura de 110°C na parede da coluna.



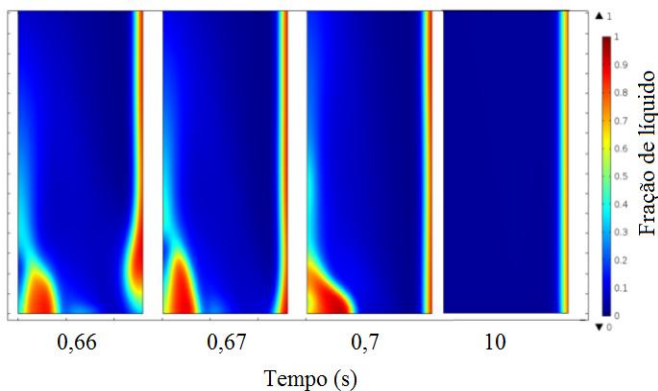
Fonte: Autora, 2015.

Os efeitos da adição de calor sob o desenvolvimento do filme já pôde ser notado ao se observar a Figura 42. Na parte final do escoamento, houve o rompimento do filme, ou seja, desprendeu-se uma gota, como se pode verificar no tempo 0,6 segundo, e posteriormente, a gota se desloca para o centro da coluna, provocando um acúmulo (tempo 0,8 s), que logo

sai da coluna. Devido ao processo de renovação do filme, pôde-se assegurar sua manutenção e assim garantir a eficiência do processo de transferência de calor. A fração mássica diminui com o passar do tempo, e percebe-se uma redução na espessura do filme.

A fim de verificar o instante em que a fração de água começa a desaparecer (evaporar), tem-se como auxílio a Figura 43, que é um aumento da parte final da coluna. Percebe-se claramente a redução de líquido (redução do vermelho para o amarelo), efeito este consequente da adição de calor ao sistema. Na Figura 37, que remete à situação isotérmica, para o tempo de 0,7 segundo, percebe-se uma fração de líquido bem maior em relação à Figura 43.

Figura 43 - Perfil do filme descendente próximo à saída da coluna, a 110°C.



Fonte: Autora, 2015.

A Figura 44, exibida a seguir, representa o escoamento do filme descende de água submetido a uma temperatura de 120°C na parede da coluna pela qual esco.

Em relação ao comportamento apresentado na Figura 42, esta se difere somente no desenvolvimento inicial do filme, o qual não apresentou formação de gota. A partir de 1 segundo, o comportamento é exatamente o mesmo.

A Figura 45 também se apresenta de forma semelhante à Figura 43, ou seja, no tempo de 0,7 segundo o filme inicia o processo de saída da coluna e a partir deste instante o mesmo atinge sua forma estável.

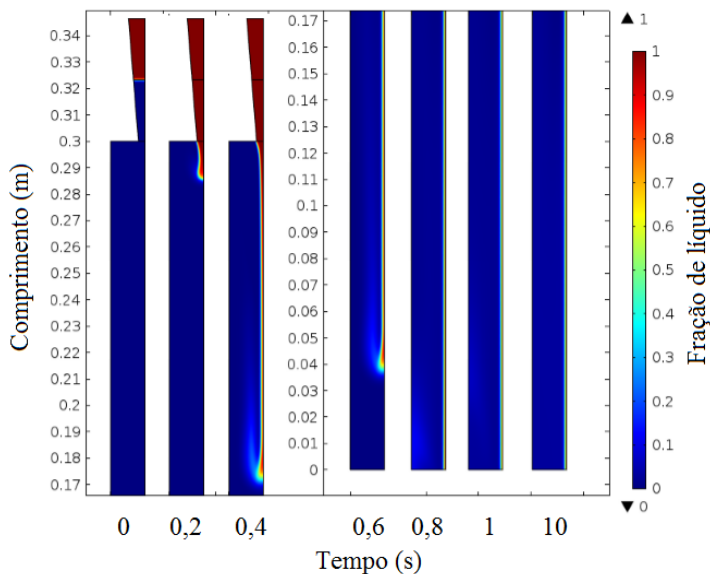
Para as temperatura de 130°C e 140°C na parede, tem-se os resultados do escoamento do filme nas Figuras 46 e 48, respectivamente.

As Figura 46 e 48 continuam idênticas às demais, inclusive o escoamento na seção final da coluna, como apresentado nas Figuras 47 e 49.

Todas as situações estudadas apresentaram a formação de uma película estável, uniforme e sem rupturas ao longo da coluna. Esta situação remete a uma boa eficiência do processo, podendo assegurar boa transferência de calor e massa.

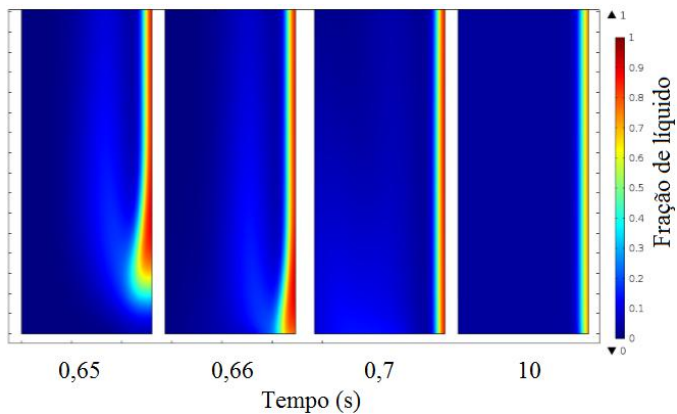
O tempo de residência calculado para todas as situações foi de 0,34 segundo, sendo este o mesmo que o calculado na situação isotérmica. A velocidade máxima da fase líquida é igual para todos os casos sob efeito de aquecimento e também para a condição isotérmica.

Figura 44 - Desenvolvimento do filme submetido a uma temperatura de 120°C na parede da coluna.



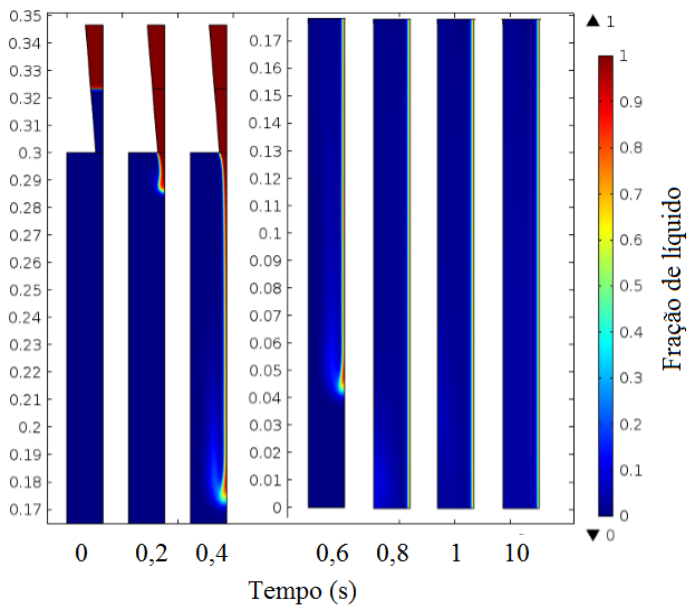
Fonte: Autora, 2015.

Figura 45 - Perfil do filme descendente próximo à saída da coluna, a 120°C.



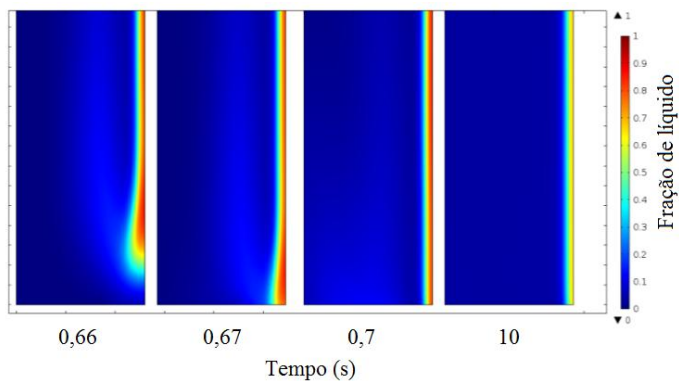
Fonte: Autora, 2015.

Figura 46 - Desenvolvimento do filme submetido a uma temperatura de 130°C na parede da coluna.



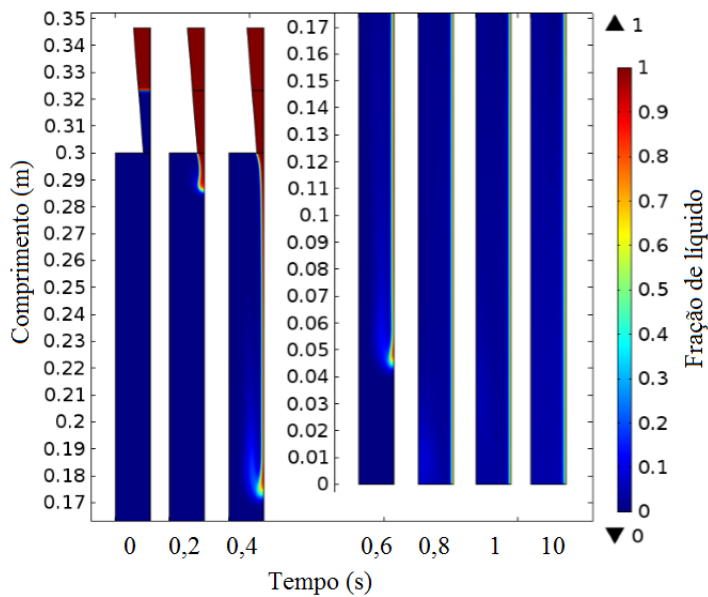
Fonte: Autora, 2015.

Figura 47 - Perfil do filme descendente próximo à saída da coluna, a 130°C.



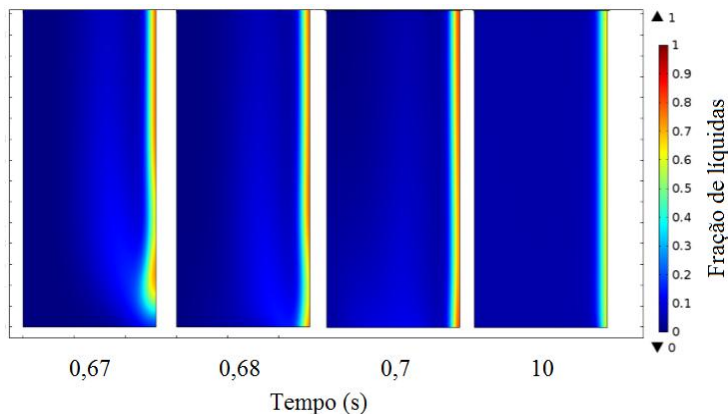
Fonte: autora, 2015.

Figura 48 - Desenvolvimento do filme submetido a uma temperatura de 140°C na parede da coluna.



Fonte: Autora, 2015.

Figura 49 - Perfil do filme descendente próximo à saída da coluna, a 140°C.



Fonte: Autora, 2015.

4.3.2 Análise das espessuras dos filmes descendentes de água

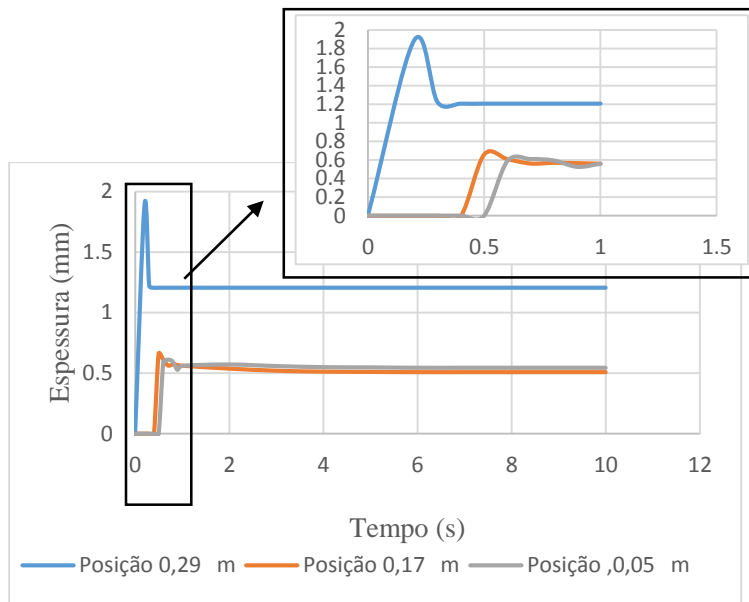
Seguindo a análise da influência da transferência de calor, verifica-se por seguinte a variação da espessura do filme, como demonstrado na Figura 50.

A medição da espessura se deu em três pontos da coluna: um ponto na posição 0,29 m (próximo a entrada), um ponto na posição 0,17 m (centro) e um ponto na posição 0,05 m (saída inferior).

Em relação à situação isotérmica, a espessura diminuiu consideravelmente, para todos os casos.

As Figuras 50, 51, 52 e 53 representam a variação da espessura do filme para os casos de 110°C, 120°C, 130°C e 140°C na parede da coluna, respectivamente.

Figura 50 - Espessura do filme de água a 110°C.



Fonte: Autora, 2015.

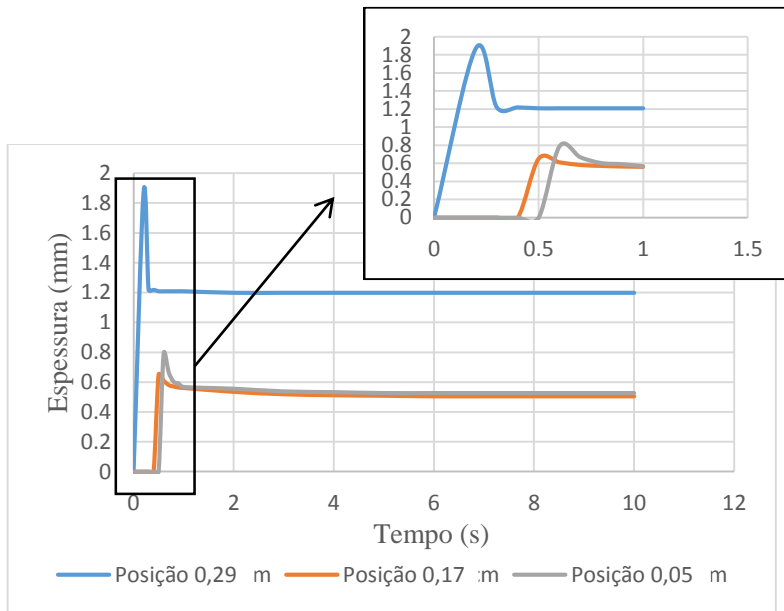
Em relação à situação isotérmica, a espessura diminuiu consideravelmente. O pico maior representa uma espessura de 1,900 mm na região da entrada. No restante da coluna (parte central e final) a espessura se mantém em torno de 0,508 mm.

A região ampliada do gráfico representa o primeiro segundo de simulação, e o comportamento do perfil da espessura é semelhante ao obtido na situação isotérmica. Há maior variação neste intervalo de tempo porque o mesmo corresponde à formação e instabilidade da película, ou seja, é instável porque não atingiu estado estacionário. Esta informação também é válida para todos os casos.

Ainda analisando a Figura 50, entende-se que, enquanto há formação do filme, há formação de pequenas ondulações na superfície. Este comportamento logo desaparece assim que o sistema atinge regime, ou seja, não há variações da espessura do filme quando o mesmo entra em estado estacionário, a partir de 2 segundos.

A Figura 51 exibe comportamento semelhante para o escoamento do filme a 120°C:

Figura 51 - Espessura do filme de água a 120°C.

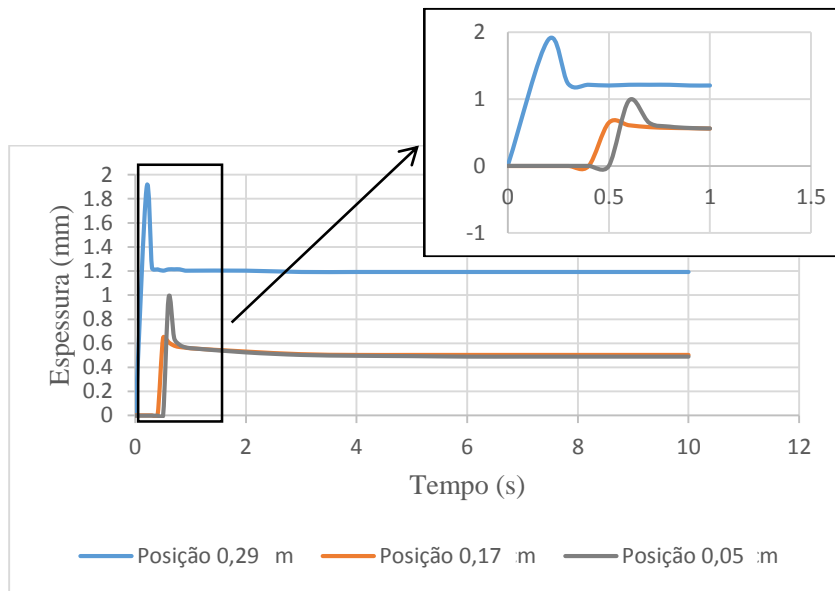


Fonte: Autora, 2015.

Para um aquecimento de 120°C a espessura máxima foi de 1,874 mm e a mínima de 0,505 mm. Como visto, a diferença é ínfima e, visualmente, é muito difícil perceber.

Não diferente do restante, as Figuras 52 e 53 apresentam o mesmo comportamento, porém valores diferentes para as espessuras:

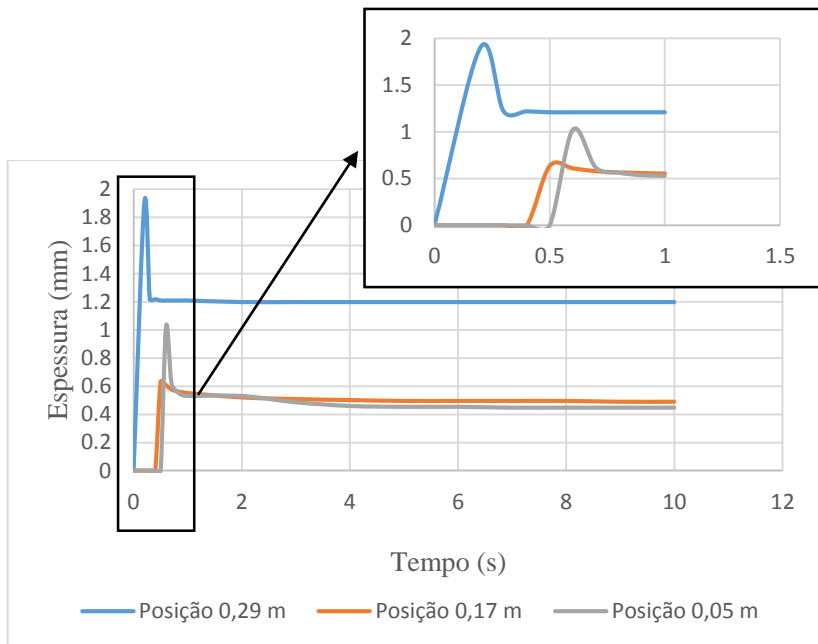
Figura 52 - Espessura do filme descendente de água a 130°C.



Fonte: Autora, 2015.

A espessura máxima do filme foi de 1,870 mm no início da coluna e a mínima foi de 0,490 mm, no final da coluna.

Figura 53 - Espessura do filme descendente de água a 140°C.



Fonte: Autora, 2015.

A 140°C a espessura máxima desenvolvida foi de 1,850 mm e a mínima foi de 0,447 mm.

A redução na espessura do filme é uma consequência da adição de calor no sistema. Quanto maior o calor fornecido, maior a redução na espessura, isto se a alimentação for constante.

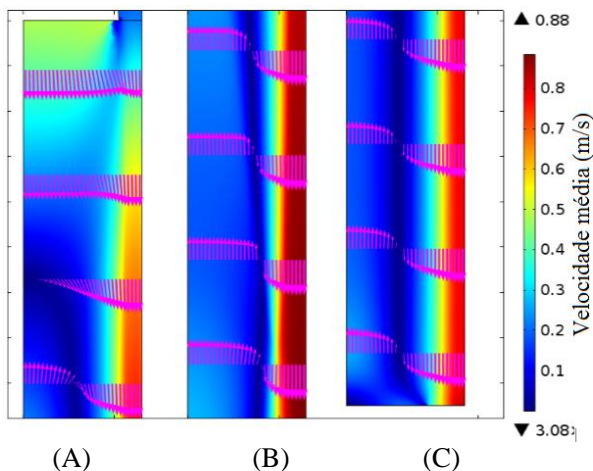
Um fato comum às situações apresentadas são os maiores valores da espessura na posição 0,29 m. Esta posição corresponde à entrada do fluido, logo abaixo do cone de alimentação e, nesta área, há maior acúmulo de líquido. Para as outras posições, a espessura reduz consideravelmente, mantendo os valores na mesma ordem de grandeza. Nestas posições mais afastadas da entrada o filme se encontra mais distribuído e menos acumulado, portanto, a espessura é menor.

Desde que haja formação de filme sem que o mesmo fragmente e cubra toda a superfície evaporante, a espessura não deve ultrapassar os 3 mm.

4.3.3 Análise dos perfis de velocidade dos filmes líquidos descendentes

Verificando agora o perfil de velocidade na coluna, tem-se a Figura 54 que representa o comportamento das fases envolvidas no processo, sob o aquecimento de 110°C. Para um processo de evaporação/destilação, o fluxo contracorrente deve predominar na coluna (se esta estiver sob pressão atmosférica), ou seja, o fluido mais denso escoo para baixo, influenciado pela força da gravidade e o fluido menos denso sobe, por ser mais leve que o ar.

Figura 54 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna para uma temperatura de 110°C na parede, no tempo final de simulação.



Fonte: Autora, 2015.

O escoamento segue a tendência contracorrente em grande parte da coluna, exceto na abertura superior. Esta situação, como demonstrada anteriormente, ocorre devido a efeitos de borda e também por influência da entrada do fluido, causando certa perturbação na região de saída do vapor. Este efeito acaba gerando uma recirculação da fase gasosa na coluna e, conseqüentemente, origina pontos mais aquecidos próximos à saída, devido a maior concentração de vapor. A Figura 54 (A) mostra uma situação de recirculação local da fase mais leve. O sentido do vapor é

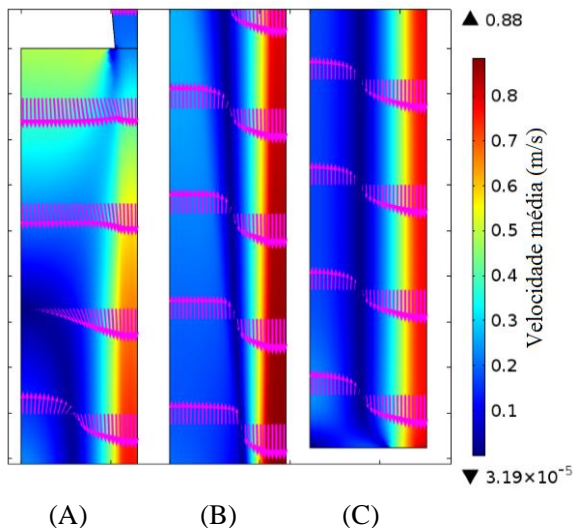
concorrente até a terceira parte do fluxo, como se pode observar. Na quarta parte o sentido do fluxo muda, causando um vórtice neste local. A velocidade da fase líquida se mantém a uma velocidade máxima de 0,88 m/s e a velocidade do vapor se mantém em 0,25 m/s na coluna, valor este dentro da faixa ideal.

Percebe-se também que há saída de pequena quantidade de vapor através da abertura inferior, juntamente com o filme líquido. Esta saída de vapor contribui para uma perda de calor do sistema, causando um resfriamento no domínio.

A situação exposta nas Figuras 55, 56 e 57 é idêntica à apresentada na Figura 54.

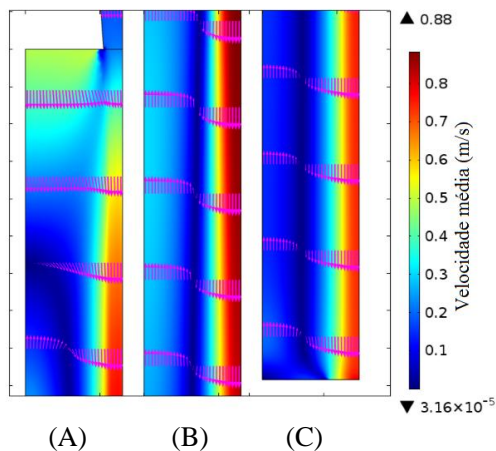
Para todos os casos, a velocidade do vapor se mantém em torno de 0,25 m/s e a velocidade da fase líquida em 0,88 m/s. Como a vazão é constante, espera-se um perfil de velocidade constante na coluna.

Figura 55 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna para uma temperatura de 120°C na parede, no tempo final de simulação.



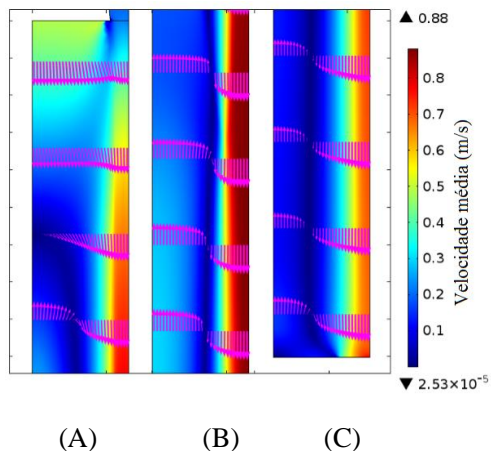
Fonte: Autora, 2015.

Figura 56 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna para uma temperatura de 130°C na parede, no tempo final de simulação.



Fonte: Autora, 2015.

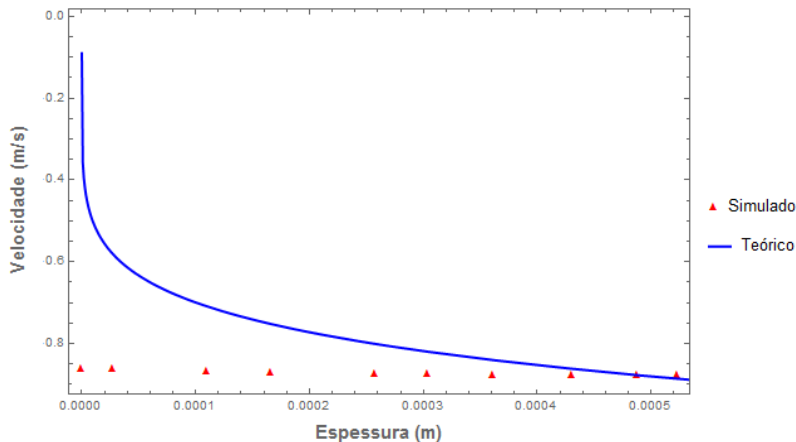
Figura 57 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna para uma temperatura de 140°C na parede, no tempo final de simulação.



Fonte: Autora, 2105.

O perfil de velocidade simulado foi comparado com o perfil de velocidade teórico. A comparação está exposta na Figura 58.

Figura 58 - Comparação entre os perfis de velocidade para a água sob aquecimento: Teórico frente ao simulado.



Fonte: Autora, 2015.

O perfil observado na Figura 58 é idêntico ao da Figura 40, para o caso de escoamento da água à temperatura de 25°C. O aumento da temperatura não influenciou no perfil, visto que o mesmo não depende de nenhuma propriedade física e nem da temperatura.

Como mencionado anteriormente o perfil simulado se difere do teórico devido a inadequação do refino da malha na região da parede, pois os escoamentos turbulentos são mais difíceis de representar nesta região.

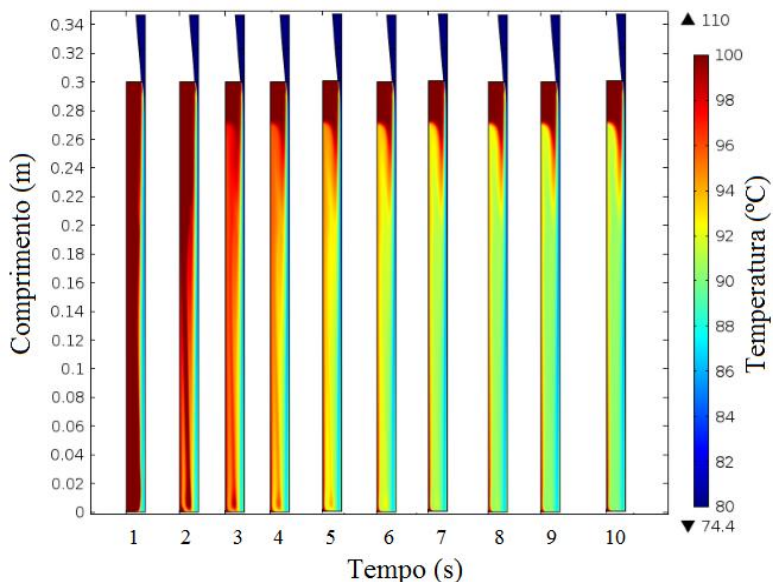
Quanto à velocidade máxima do filme, ambos os perfis calcularam um valor de 0,88 m/s.

4.3.4 Análise da distribuição da temperatura na coluna

As figuras que seguem ilustram as distribuições da temperatura na coluna, de acordo com o tempo e com a temperatura da parede.

Para a temperatura de 110°C fixada uniformemente na parede da coluna tem-se o cenário apresentado na Figura 59:

Figura 59 – Distribuição da temperatura na coluna para 110°C na parede.

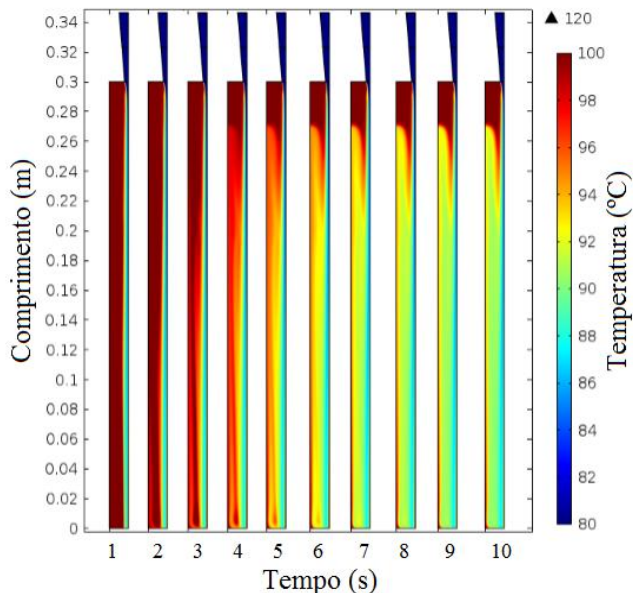


Fonte: Autora, 2015.

É notoriamente perceptível uma variação na distribuição da temperatura da coluna, de acordo com o tempo. Até o tempo de 3 segundos mantém-se uma temperatura do vapor na próxima aos 100°C no centro da coluna. A partir deste instante, há um resfriamento do vapor, decaindo a temperatura para 92°C. Este resfriamento também é consequência da saída de vapor através da abertura inferior, onde o meio pede calor para o exterior.

A Figura 60 exhibe o perfil de temperatura desenvolvido a 120°C:

Figura 60 - Distribuição da temperatura na coluna para 120°C na parede.



Fonte: Autora, 2015.

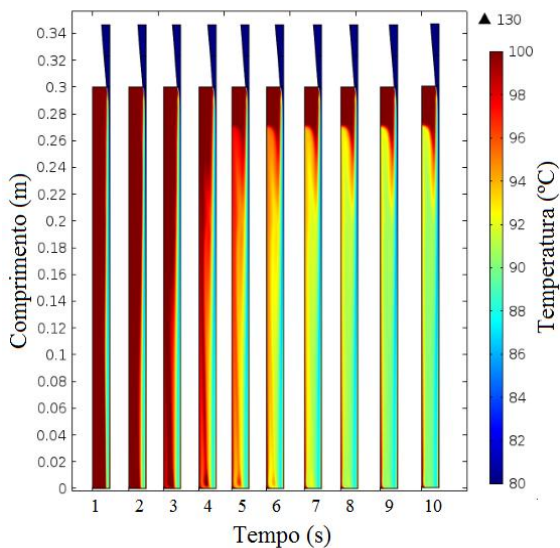
A 120°C na parede a coluna permanece por volta de 4 segundos com a temperatura do vapor próxima a 100°C. Para uma temperatura de 110°C, a coluna mantém a temperatura do vapor a 100°C por 3 segundos. Esta diferença é bastante significativa e implica, portanto, em um percentual de evaporação maior que o anterior.

Através das Figuras 61 e 62, verifica-se a distribuição da temperatura a 130°C e a 140°C na parede da coluna, respectivamente.

A Figura 61 permite observar que, até o tempo de 5 segundos a temperatura do vapor se manteve próxima aos 100°C, diferentemente dos casos de 110°C e 120°C, cujo tempo foi de 3 e 4 segundos, respectivamente. Também se observa o mesmo comportamento de acúmulo de calor na região superior da coluna.

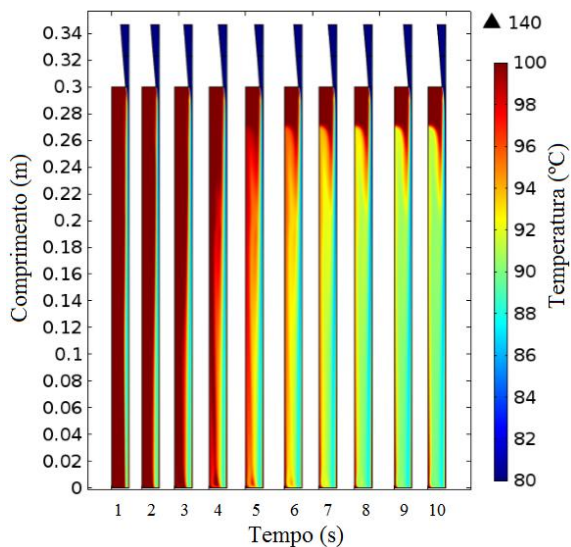
Já na Figura 62, percebe-se o mesmo desempenho de distribuição da temperatura observado na Figura 61, ou seja, à temperatura de 140°C na parede, a coluna também manteve por 5 segundos a temperatura do vapor próxima a 100°C.

Figura 61 – Distribuição da temperatura na coluna para 130°C na parede.



Fonte: Autora, 2015.

Figura 62 – Distribuição da temperatura na coluna para 140°C na parede.



Fonte: Autora, 2015.

Como se trata de um processo de mudança de fase e a mesma ocorre na interface líquido-vapor, é necessário que haja um fornecimento de energia para se tornar possível a evaporação do líquido. Tal energia é fornecida pela parede da coluna, que está a uma temperatura uniforme.

Vale ressaltar que, como condição inicial, foi fixado que há vapor a 100°C na coluna e que o mesmo é considerado como um gás ideal, e também que há uma fonte de calor latente em todo o domínio.

Para todas as situações apresentadas, observa-se um comportamento térmico semelhante na parte superior da coluna, isto é, uma área mais aquecida em relação ao restante. Nesta região há um acúmulo de calor devido à recirculação do vapor no local.

Sodnowski, Petronio e Armenio (2013) estudaram um modelo numérico para a evaporação e condensação do filme líquido de água em superfícies sólidas com sistema de transferência de calor conjugado. Os autores estudaram um caso de aplicação deste sistema em canais verticais e chegaram à conclusão de que, na presença da evaporação do filme, no caso de paredes com bom isolamento (ou seja, paredes que asseguram a transferência de calor), o processo de evaporação arrefece o vapor significativamente. Sem o reaquecimento a partir do limite exterior do sistema, isto é, sem um fornecimento de calor externo, o fluxo desenvolve zonas de recirculação. Este comportamento é exatamente ao observado nas figuras apresentadas.

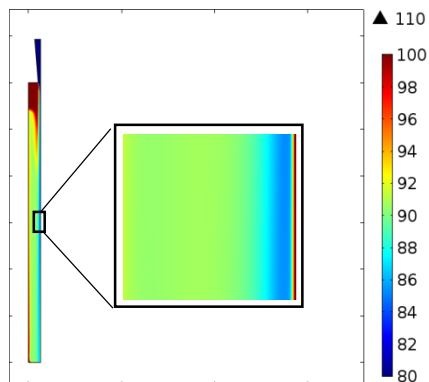
Nos casos expostos, a fonte de calor provém da parede, por condução, e também do próprio fluido aquecido por convecção. A medida que o fluido escoar, há transferência de calor por convecção.

As Figuras 63, 64, 65 e 66 mostram de forma ampliada a temperatura na parede da coluna, para cada situação, no tempo final de simulação.

Na Figura 63, a temperatura da parede foi fixada em 110°C e, conforme a imagem ampliada verifica-se que a parede se mantém a 110°C. A escala das Figuras compreende valores entre 80°C e a temperatura máxima do sistema, ou seja, a temperatura da parede. Para facilitar a interpretação, considera-se a temperatura da parede o valor máximo da escala. Analisando o filme, que entra a 78°C, percebe-se que houve um aquecimento de 10°C, na região da interface, atingindo esta a temperatura de 88°C. Como a vazão mássica de entrada é elevada e o tempo de residência do fluido na coluna é muito pequeno, que conforme calculado, é de 0,34 segundo, há um tempo de contato com a parede aquecida muito curto, evitando assim um maior aquecimento do filme. Sob consequência deste efeito, não se observa um aquecimento do filme

à temperatura de saturação, porém esta condição não prejudicou a evaporação parcial do filme.

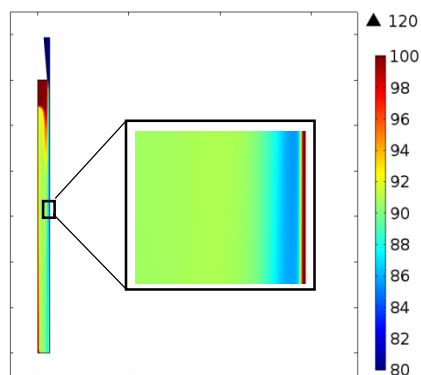
Figura 63 - Temperatura na parede da coluna, a 110°C.



Fonte: Autora, 2015.

De forma análoga, tem-se a exposição e a interpretação da Figura 64. Comparando as Figuras 63 e 64, a 110°C a temperatura do filme na região da interface atingiu os 88°C, enquanto que a 120°C, a temperatura da interface atingiu o mesmo valor.

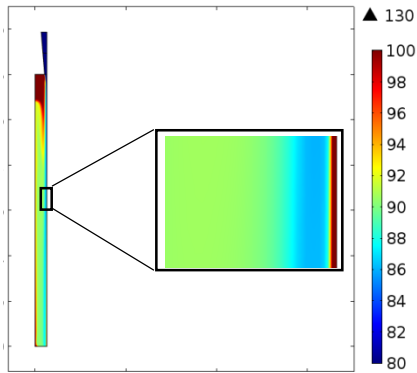
Figura 64 - Temperatura na parede da coluna, a 120°C.



Fonte: Autora, 2015.

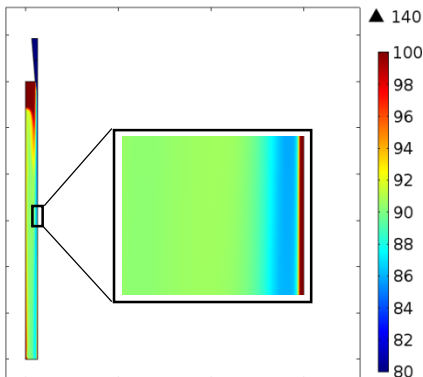
As Figuras 65 e 66, que representam as temperaturas de 130°C e 140°C, respectivamente, estão expostas abaixo:

Figura 65 - Temperatura da parede da coluna, a 130°C.



Fonte: Autora, 2015.

Figura 66 - Temperatura da parede da coluna, a 140°C.



Fonte: Autora, 2015.

As Figuras 65 e 66 mostram que a temperatura na interface também se mantém entre 88°C, como nos casos anteriores. Como a coluna atingiu sua temperatura mínima em 92°C para todos os casos, é natural que a

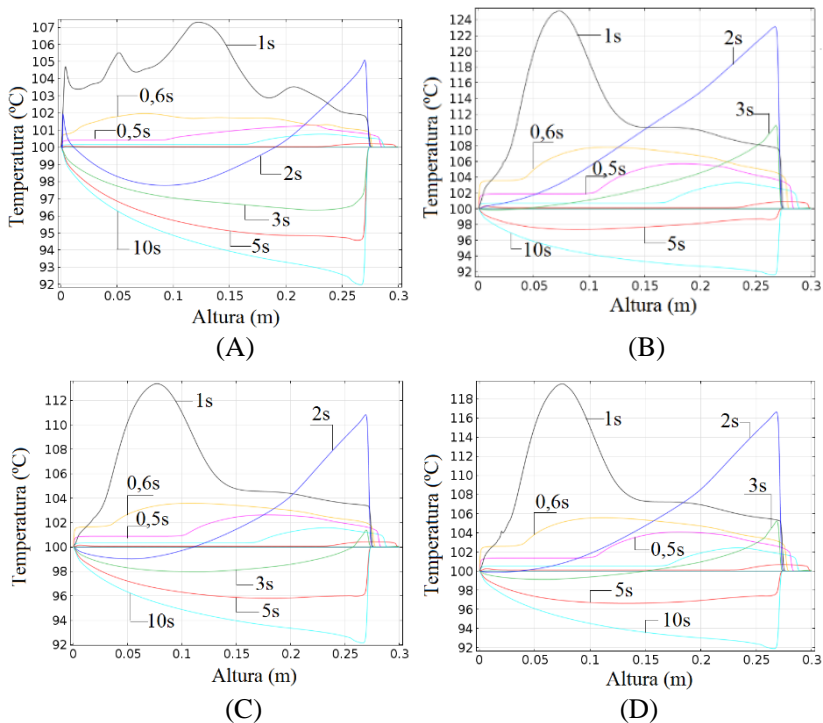
temperatura da interface seja a mesma, depois que se atinge estado estacionário.

Como se trata de um filme extremamente fino em contato com uma superfície aquecida, o fluido evapora antes mesmo de atingir sua temperatura de saturação, como também observado por Azarkish et. al (2015) e Yang e Yan (2011). Os autores avaliaram a evaporação de um filme de água em contato com superfícies aquecidas e indicaram como resultados a evaporação da água antes de atingir a temperatura de saturação. Com base nestes trabalhos e considerando o fato de haver uma quantidade ínfima de água escoando em uma superfície aquecida, justifica-se o fato de se observar evaporação do filme antes dos 100°C.

Considerando o fato também de o vapor estar resfriado, espera-se uma possível condensação do mesmo, porém este fenômeno não pôde ser observado nas simulações devido à densidade do vapor, que se encontra abaixo da densidade de saturação calculada pela lei dos gases ideais. Como comentado anteriormente, foi assumido como hipótese que o vapor d'água comporta-se como um gás ideal.

A Figura 67 mostra a variação da temperatura no centro da coluna, isto é, no vapor. O intervalo compreendido entre 0,1s e 1s sofre maior variação de temperatura na coluna porque corresponde ao período de formação do filme. Vale ressaltar que os tempos compreendidos entre 0,1s e 0,4s estão representados abaixo do tempo 0,5s, porém foi difícil destacá-los devido à proximidade das linhas.

Figura 67 - Variação da temperatura no centro da coluna para: (A) 110°C, (B) 120°C, (C) 130°C e (D) 140°C.



Fonte: Autora, 2015.

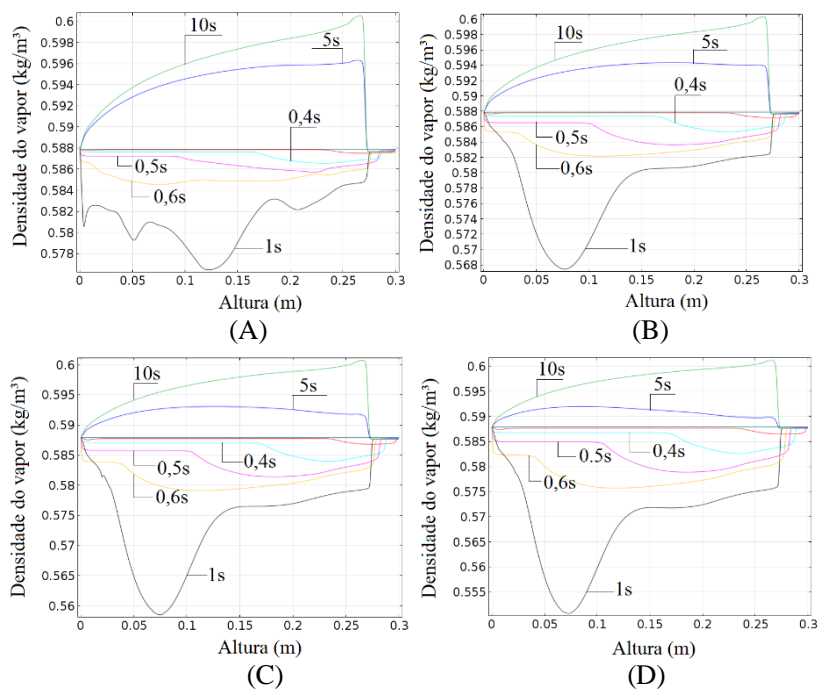
Como observado nas quatro situações, a partir de 2 segundos a variação da temperatura segue uma disposição semelhante até o tempo final de 10 segundos. Analisando as tendências das linhas, percebe-se que no primeiro segundo a coluna atinge seu pico máximo de calor, para os quatro casos. Os valores máximos de temperatura registrados foram de 107°C, 112°C, 118°C e 124°C, para (A), (B), (C) e (D), respectivamente. A partir de 2 segundos, uma queda gradual na temperatura é observada, até atingir um mínimo de 92°C, para as quatro situações. Apesar de todas as temperaturas testadas convergirem para um mínimo de 92°C, não significa que foi alcançado estado estacionário. Em um tempo de simulação maior, de acordo com as disposições das linhas, a tendência da temperatura é decair. A Figura 67 (A) apresenta uma acentuada oscilação no primeiro segundo porque está diretamente ligada à ruptura do filme.

Pela análise da temperatura, percebe-se que a evaporação é mais intensa nos primeiros segundos, quando a mesma atinge seus maiores valores.

De 0,1s a 1s nota-se uma evolução na temperatura até o alcance do seu pico máximo. Em seguida a mesma decai gradativamente até atingir seu valor mínimo. Este resfriamento da coluna corresponde ao arrefecimento da fase vapor, processo natural ocasionado pela evaporação. Durante o resfriamento da coluna, a intensidade de evaporação da película diminui.

Em relação à variação da massa específica do vapor com a temperatura, tem-se a Figura 68, que ilustra o comportamento desta propriedade física no centro da coluna.

Figura 68 - Variação da massa específica do vapor d'água para o tempo final de simulação para: (A) 110°C, (B) 120°C, (C) 130°C e (D) 140°C.



Fonte: Autora, 2015.

Comparando as Figuras 67 e 68, percebe-se um comportamento de maneira inversa, ou seja, nos pontos onde a temperatura é maior, a massa

específica do vapor é menor; nos pontos onde a temperatura é menor, a massa específica do vapor é maior.

Como mencionado anteriormente, o vapor d'água foi assumido como um gás ideal e sua massa específica varia de forma inversamente proporcional a temperatura. A densidade de saturação calculada foi de 0,6 kg/m³ para a temperatura de 92°C. Como pode-se observar na Figura 68, a densidade do vapor encontra-se abaixo da saturação para esta temperatura, e devido a este fato, não se observa condensação do mesmo.

Ao observar as Figuras nota-se que não houve variações bruscas da massa específica do vapor, e esta manteve-se entre: 0,578 kg/m³ e 0,600 kg/m³; 0,568 kg/m³ e 0,600 kg/m³; 0,560 kg/m³ e 0,600 kg/m³ e 0,550 kg/m³ e 0,600 kg/m³ para (A), (B), (C) e (D), respectivamente.

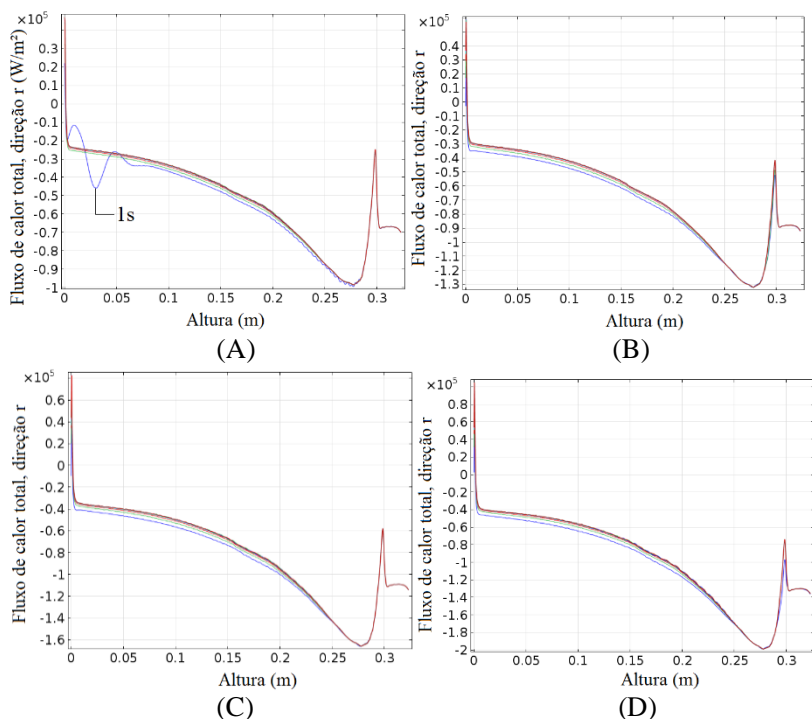
A massa específica do vapor possui seu valor mínimo no início (demarcado pela posição 0,3 m) e no final da coluna (demarcada pela posição zero). É importante lembrar que, como condição de contorno, foi assumido tanto a saída inferior quanto a abertura superior da coluna, aquecidas à temperatura de saturação e, por isso, as massa específicas foram mínimas nestes pontos. Este artifício foi necessário a fim de manter a temperatura na coluna, evitando uma perda de calor excessiva para o meio externo, visto que, experimentalmente (conforme trabalhos de Teleken (2013) e Tavares (2008)), a mesma encontra-se aberta à atmosfera e é natural a perda de calor para o exterior.

Seguindo ainda a análise térmica, tem-se na Figura 69 o fluxo de calor total fornecido à parede da coluna, na direção do raio.

Para a Figura 69 (A), no primeiro segundo de simulação observa-se uma perturbação no fluxo total de calor, pois este período corresponde a formação final do filme, no quantidade de movimento em que houve o desprendimento de uma gota. Assim que o filme se definiu e se manteve estável, o fluxo de calor se tornou uniforme. O sinal negativo simboliza que o fluxo total de calor é contrário à direção normal, ou seja, voltado para o lado de dentro da parede.

O fluxo de calor é mais intenso onde a espessura do filme é maior, isto é, na posição 0,29 m da coluna. Conforme a espessura diminui, o fluxo de calor se reduz. Sabe-se que, quanto maior a espessura, maior o fluxo de calor necessário para evaporar o filme e, quanto mais próximo à base da coluna, menor a espessura do filme.

Figura 69 - Fluxo de calor total na parede da coluna, em direção ao raio para: (A) 110°C, (B) 120°C, (C) 130°C e (D) 140°C nos tempos de 1s a 10s.



Fonte: Autora, 2015.

Analisando em módulo, têm-se os valores de fluxo total de calor de $1,0 \times 10^5$ W/m²; $1,3 \times 10^5$ W/m²; $1,6 \times 10^5$ W/m² e $2,0 \times 10^5$ W/m², para (A), (B), (C) e (D), respectivamente. Estes valores representam a maior intensidade do fluxo, para cada caso, e correspondem ao local onde a espessura da película é maior, na região próxima à entrada, abaixo do cone de distribuição de alimentação.

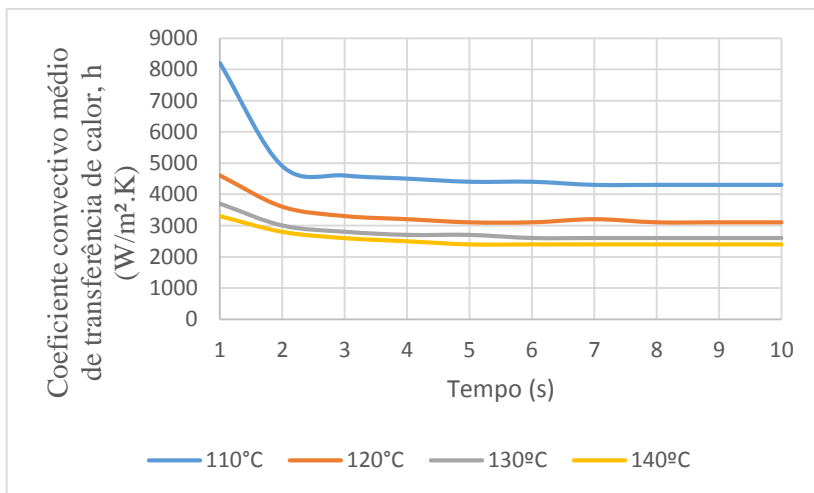
Considerando o comportamento das linhas, verifica-se que a evaporação é mais intensa quanto mais perto da entrada da coluna, onde se concentra um maior volume líquido e, conseqüentemente, onde há maior intensidade do fluxo de calor. Conforme a espessura degrada, o ritmo de evaporação da película reduz.

4.3.5 Análise do coeficiente convectivo de transferência de calor: Comparação entre o valor teórico e o simulado

A análise do coeficiente convectivo de transferência de calor é de suma importância, pois interfere diretamente na transferência de calor de um local para outro pelo movimento dos fluidos. A presença de movimento de volumes do fluido aumenta a transferência de calor entre a superfície sólida e o fluido.

A Figura 70 representa os valores de h obtidos para as temperaturas de 110°C, 120°C, 130°C e 140°C na parede da coluna. Estes valores de h estão em sintonia com o valor calculado via equação 16, que representa o valor simulado. O coeficiente convectivo de transferência de calor foi calculado a partir das simulações em três pontos da coluna (nas posições de 0,29m; 0,15m e 0,05m a partir do topo) para cada segundo de simulação. Posteriormente, para cada tempo, fez-se uma média dos coeficientes convectivos calculados nestes três pontos.

Figura 70 - Coeficiente convectivo de transferência de calor simulado para as temperaturas de 110°C, 120°C, 130°C e 140°C.



Fonte: Autora, 2015.

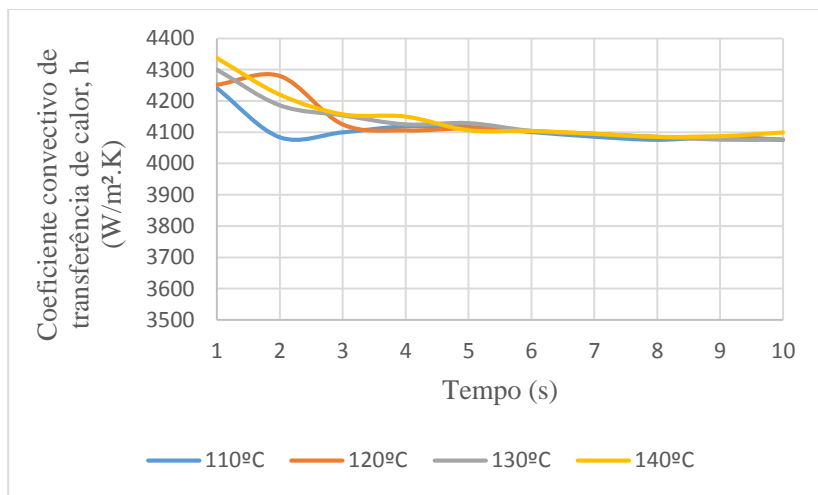
A Figura 70 mostra que, conforme aumenta a temperatura na parede, o valor do coeficiente convectivo diminui, pois o mesmo varia inversamente com o aumento da temperatura.

De outro lado, o aumento da temperatura reduz a espessura do filme e, nos locais onde a espessura é mais fina, o fluxo de calor diminui, como se pode observar pela Figura 69.

Os coeficientes convectivos de transferência de calor, para as temperaturas de 110°C, 120°C, 130°C e 140°C são em média, respectivamente: 4500 W/(m².K), 3100 W/(m².K), 2600 W/(m².K) e 2400 W/(m².K).

A Figura 71 apresenta os valores de h obtidos via cálculo através da Equação 15, para as temperaturas de 110°C, 120°C, 130°C e 140°C na parede da coluna. Assim, comprova-se que os valores de simulação antes apresentados estão em boa sintonia com estes previstos teoricamente para o coeficiente convectivo de transferência de calor.

Figura 71 - Coeficiente convectivo de transferência de calor teórico para as temperaturas de 110°C, 120°C, 130°C e 140°C.



Fonte: Autora, 2015.

As linhas do gráfico mostram a pequena variação no coeficiente convectivo de transferência de calor. O cálculo destes coeficientes se procederam da mesma maneira que o cálculo do valor simulado, ou seja, fez-se a média dos valores para os três pontos medidos na coluna, em cada segundo de simulação.

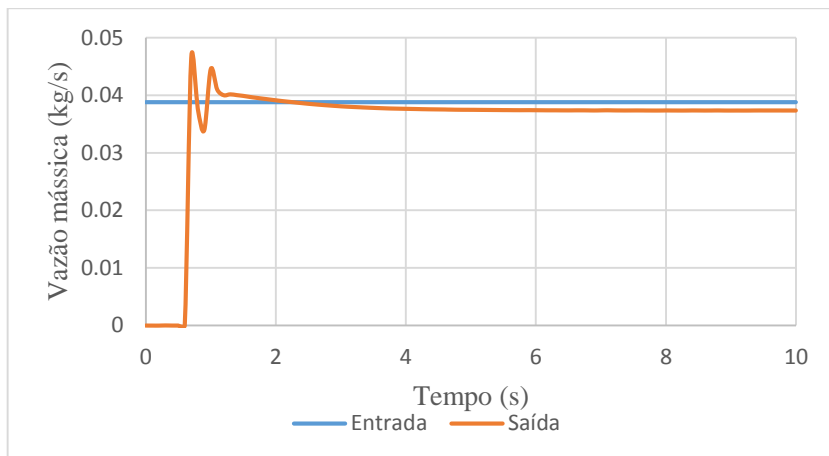
Há certa proximidade entre os valores simulado e teórico apenas para a condição de 110°C, cujos valores são de 4500 W/(m².K) para o simulado e para o teórico de 4100 W/(m².K). Para as demais temperaturas os valores calculados apresentam certo distanciamento, mas todos eles mantiveram-se na mesma ordem de grandeza.

4.3.6 Balanço de massa para o líquido

A fim de verificar se realmente houve evaporação com a temperatura fornecida ao sistema, realizou-se um balanço de massa idêntico ao apresentado na Figura 41. Ao comparar a massa de entrada com a massa de saída, percebeu-se uma diferença entre ambas, para os quatro casos de adição de temperatura, representadas pelas Figuras 72, 73, 74 e 75.

Considerando o fenômeno de pseudo-evaporação, descontou-se, para cada caso, o valor de 3,5% da evaporação bruta obtida nos balanços das situações sob o efeito de aquecimento.

Figura 72 - Balanço de massa na coluna a 110°C.



Fonte: Autora, 2015

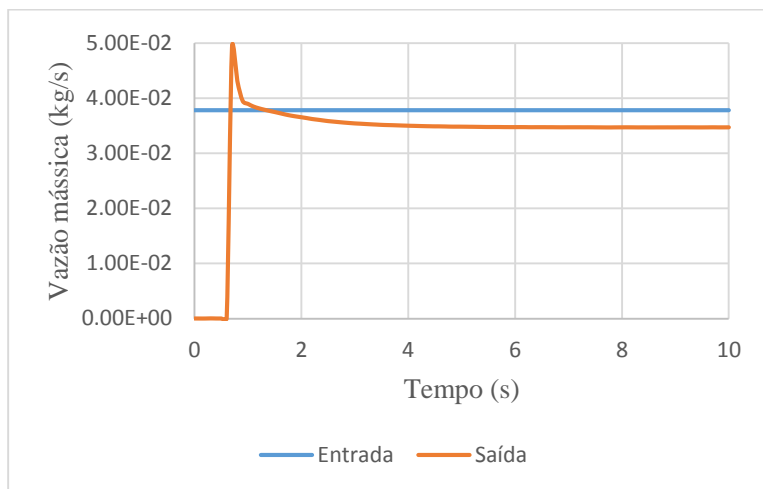
A massa de saída é ligeiramente menor que a massa de entrada. Esta diferença representa uma perda bruta de 3,75%, ou seja, houve evaporação do filme. Descontando o efeito da pseudo-evaporação, que

equivale a 3,5% de “vapor gerado” na situação isotérmica, têm-se um percentual de 0,25% de evaporação do fluido injetado.

A parte instável do gráfico, situada entre 0 e 2 segundos (linha laranja), corresponde ao instante de rompimento da película.

A Figura 73 mostra uma diferença mais acentuada em relação ao caso anterior e a mesma representa um total bruto de 8,2% da água evaporada. Descontando o efeito da pseudo-evaporação, tem-se um percentual de evaporação de 4,7%.

Figura 73 - Balanço de massa na coluna a 120°C.

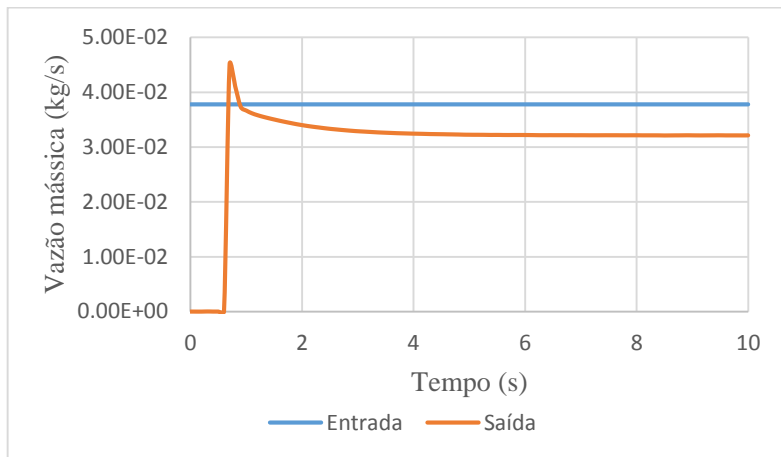


Fonte: Autora, 2015.

Para 130°C, tem-se o balanço representado na Figura 74. A diferença entre as linhas se torna mais acentuada em relação aos casos anteriores e a mesma representa um total bruto de 15% da água evaporada.

Descontando o efeito da pseudo-evaporação, tem-se um percentual de 11,5% de vapor gerado.

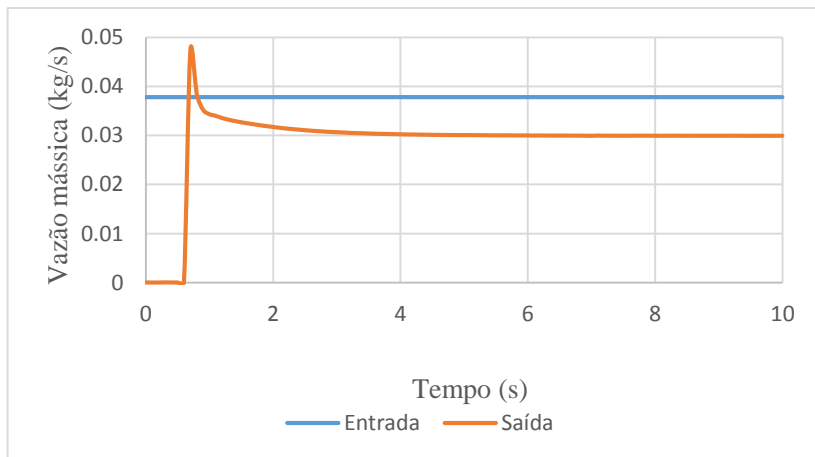
Figura 74 - Balanço de massa na coluna a 130°C.



Fonte: Autora, 2015.

Com 140°C fornecidos à parede da coluna, percebe-se uma perda de líquido maior, como se pode observar na Figura 75.

Figura 75 - Balanço de massa na coluna a 140°C.



Fonte: Autora, 2015.

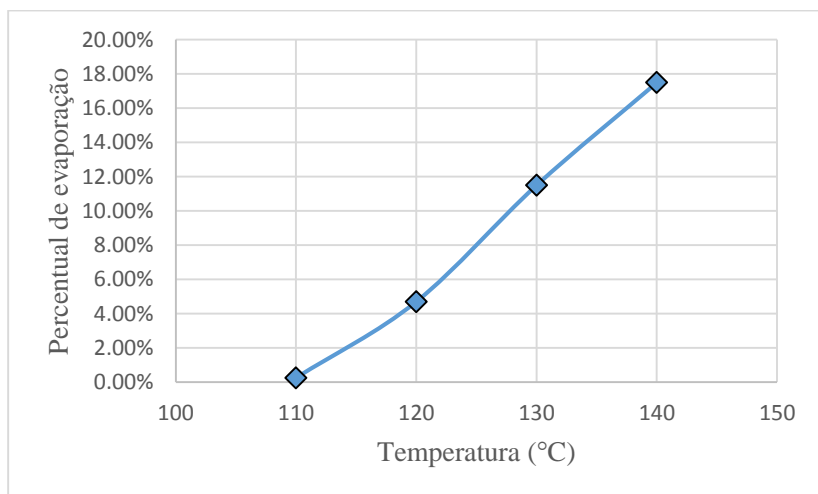
A taxa de evaporação se torna maior em relação às temperaturas anteriores. A evaporação bruta representada pela Figura 75, corresponde a um percentual de 21% e, descontando o percentual de “vapor gerado” pela situação isotérmica, tem-se um percentual real de 17,5%.

Para a coluna de película descendente, a temperatura ideal de destilação é aquela que não seca o filme, não originando pontos secos na coluna. A formação de pontos secos na coluna diminuem a eficiência da transferência de calor e massa. Para os casos simulados, até a temperatura de 140°C se pode notar um filme fino e estável, portanto, as temperaturas testadas podem ser utilizadas.

Em comparação com o balanço representado para a situação isotérmica, pode-se perceber a coerência do modelo utilizado. Espera-se que, quanto maior a temperatura aplicada, maior será o fluxo de calor gerado e maior o percentual de evaporação e, como observado, foram estes os resultados obtidos.

Abaixo encontra-se uma relação entre a temperatura da parede e o percentual de evaporação, exposta na Figura 76:

Figura 76 - Relação entre o percentual de evaporação e a temperatura fornecida à parede.



Fonte: Autora, 2015.

Logo se percebe que a relação segue uma tendência linear.

A Tabela 9 exposta em seguida reúne os principais resultados obtidos nas simulações, de acordo com a temperatura utilizada.

Tabela 9 - Comparação entre os principais parâmetros com e sem adição de calor.

Parâmetros	25°C	110°C	120°C	130°C	140°C
Espessura máxima (mm)	2,000	1,900	1,874	1,870	1,850
Espessura mínima (mm)	0,550	0,508	0,505	0,490	0,447
Velocidade fase vapor (m/s)	0,20	0,25	0,25	0,25	0,25
Velocidade fase líquida (m/s)	0,88	0,88	0,88	0,88	0,88
Temperatura máxima (°C)	-	107	112	118	124
Temperatura mínima (°C)	-	92	92	92	92
Temperatura da interface (°C) para 10s	-	88	88	88	88
Fluxo de calor total máximo (W/m ²)	-	1,0x10 ⁵	1,3x10 ⁵	1,6x10 ⁵	2,0x10 ⁵
Evaporação (%)	-	0,25	4,7	11,5	17,5
Tempo de residência na coluna (s)	0,34	0,34	0,34	0,34	0,34

Fonte: Autora, 2015.

4.4 ANÁLISE DOS EFEITOS DA APLICAÇÃO DE TEMPERATURA NA PAREDE DA COLUNA ACIMA DO PONTO DE LEIDENFROST

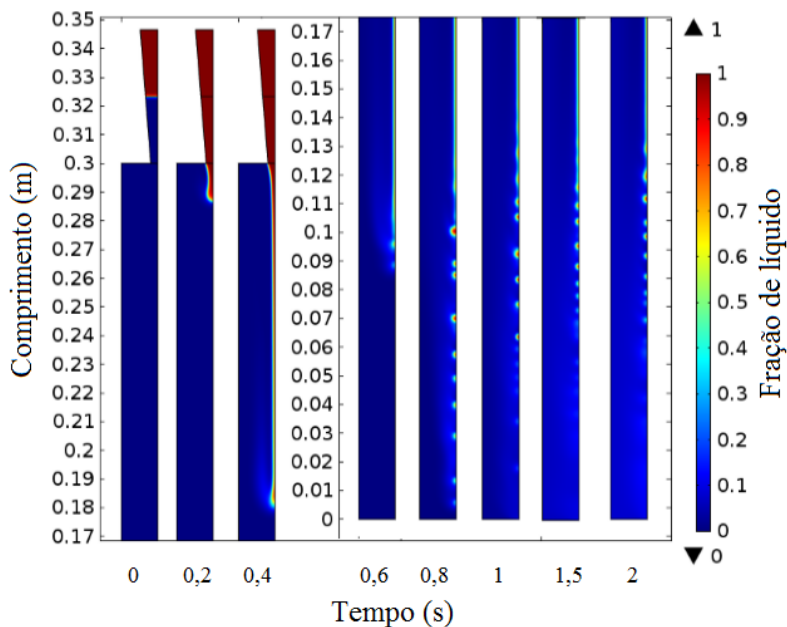
Com o objetivo de comprovar a adequação do modelo utilizado, fez-se uma simulação teste com a aplicação de temperatura na parede da coluna acima do ponto de Leidenfrost. Como visto anteriormente na

revisão bibliográfica, para sustentar a película de ebulição, o excesso de temperatura aplicado deve ser maior do que o ponto de Leidenfrost (este critério vale para grande massa de água). Para a água à pressão atmosférica, este valor corresponde a uma diferença de temperatura em torno de 130°C , entre a de saturação do líquido e da parede. Diante deste excesso, é natural se esperar uma evaporação quase total do filme.

Vale ressaltar que para este caso o tempo de simulação foi de 2 segundos, tempo considerado suficiente para avaliar o sistema, que se manteve estável logo após o primeiro segundo de simulação. A convergência do problema foi se tornando mais difícil, demandando um tempo muito grande de simulação. Dias seriam necessários para simular os 10 segundos de escoamento sob estas condições.

A Figura 77 ilustra a formação do filme descendente diante deste cenário:

Figura 77 - Escoamento do filme descendente de água a 230°C na parede da coluna.



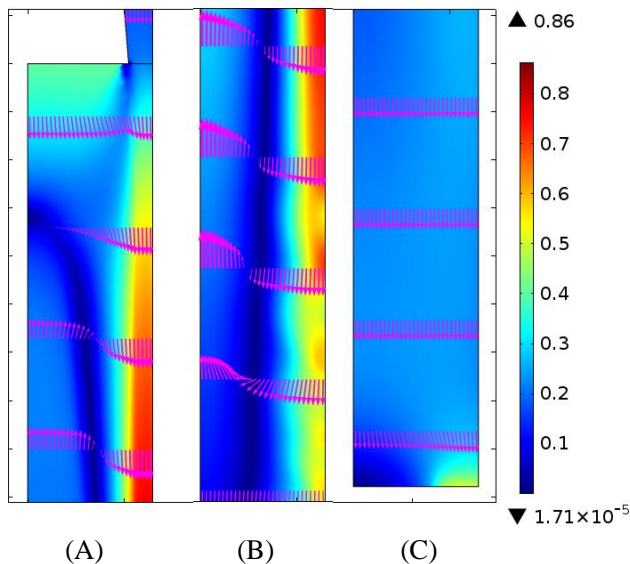
Fonte: Autora, 2015.

Com uma diferença de temperatura de 130°C entre a temperatura de saturação e a temperatura da parede, pode-se visualizar que o excesso de temperatura causou prejuízos à formação do filme, danificando consequentemente a transferência de calor. Tudo o que não se deseja em um escoamento de filme descendente é que haja rompimento da película líquida. A alta temperatura aplicada à parede fez com que o filme secasse quase que por completo, evitando assim que o mesmo chegasse ao final da coluna.

Até o tempo de 0,4 segundo observa-se um desenvolvimento normal, pois a vazão de alimentação ainda consegue renovar o filme até o meio da coluna. Na segunda metade, o filme enfraquece e goteja, começando a secar.

Outro exemplo do efeito da alta temperatura na parede é a alteração do campo de velocidade na coluna. A Figura 78 mostra o campo de velocidade, para o tempo final de simulação.

Figura 78 - Perfil de velocidade no filme e na fase gasosa em: (A) primeira parte da coluna, (B) metade da coluna e (C) última parte da coluna para uma temperatura de 230°C na parede, no tempo final de simulação.



Fonte: Autora, 2015.

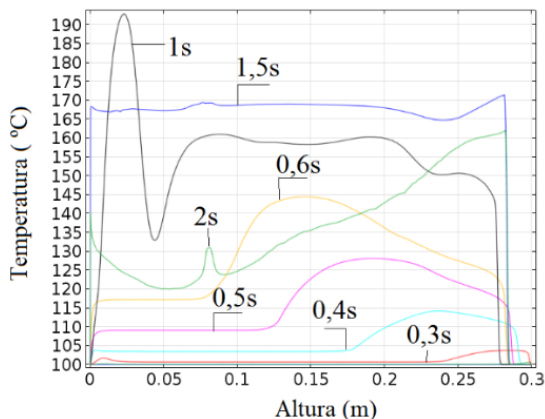
A velocidade do filme se mantém em 0,86 m/s até o meio da coluna, posição esta em que ainda há película líquida. Da metade em diante não se observa movimento de fluido.

Como nos casos anteriores, este também apresenta os efeitos de recirculação do vapor na parte superior da coluna.

Em termos de aplicação prática, esta situação é totalmente indesejável ao processo.

Partindo para a análise térmica, a figura 79 mostra graficamente a distribuição da temperatura no centro da coluna, para os 2 segundos de simulação:

Figura 79 - Variação da temperatura no centro da coluna.

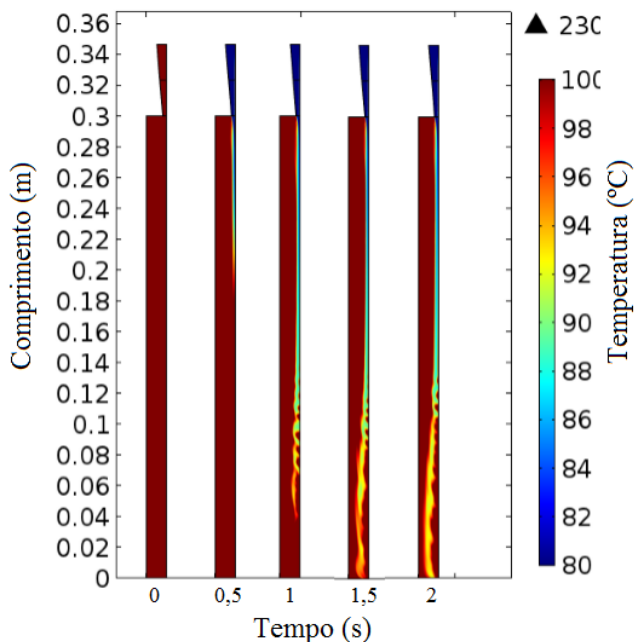


Fonte: Autora, 2015.

Altas temperaturas predominam no centro da coluna, variando entre 100°C e 190°C. Estes valores altos justificam a evaporação quase total da película. No tempo final de simulação, em 2 segundos, a temperatura se mantém maior na parte superior, formando uma região mais aquecida e no final da coluna, a temperatura reduz consideravelmente, de 160°C para 130°C.

A Figura 80 representa termicamente o gráfico exposto na Figura 70.

Figura 80 - Distribuição da temperatura na coluna.

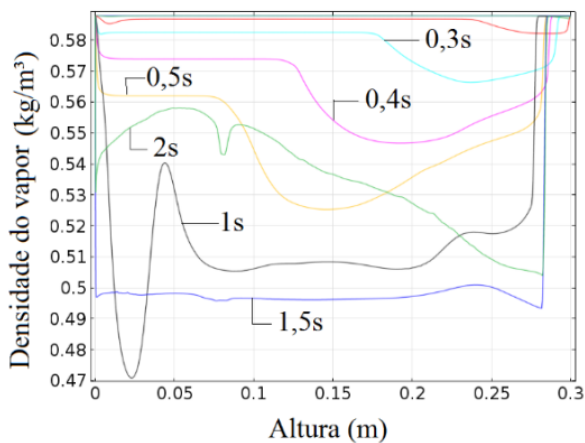


Fonte: Autora, 2015.

Percebe-se claramente que a coluna se mantém aquecida, e que os efeitos de variação da temperatura a partir da posição 0,12 m são mais perceptíveis, devido ao gotejamento do filme, nos tempos de 1s, 1,5s e 2s. Enquanto o vapor se mantém a temperaturas acima de 100°C, o filme se mantém líquido onde a temperatura é inferior à saturação. A película só não seca por completo devido a renovação do filme.

A massa específica do vapor, que varia inversamente com a temperatura, assume valores mais baixos em relação aos casos estudados anteriormente, variando entre 0,470 kg/m³ e 0,580 kg/m³, conforme ilustrado na Figura 81. Percebe-se que a massa específica varia a todo instante, e só se pode observar uma estabilidade em 1,5 segundos, tempo este em que a temperatura também se manteve estável na coluna em 170°C.

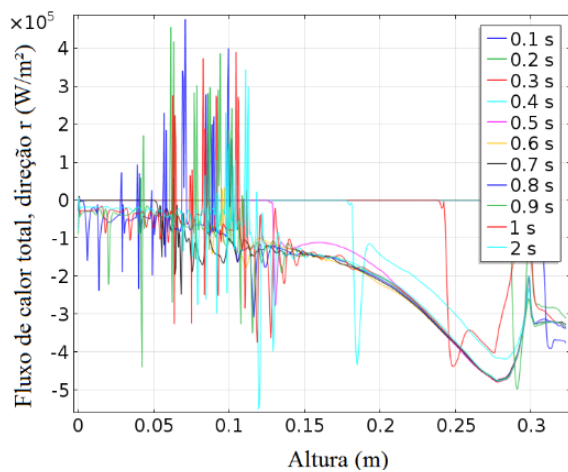
Figura 81 - Variação da massa específica do vapor.



Fonte: Autora, 2015.

Seguindo ainda na análise térmica, tem-se a Figura 82 que ilustra o fluxo de calor total, na direção r.

Figura 82 - Fluxo de calor total na parede da coluna, na direção r.

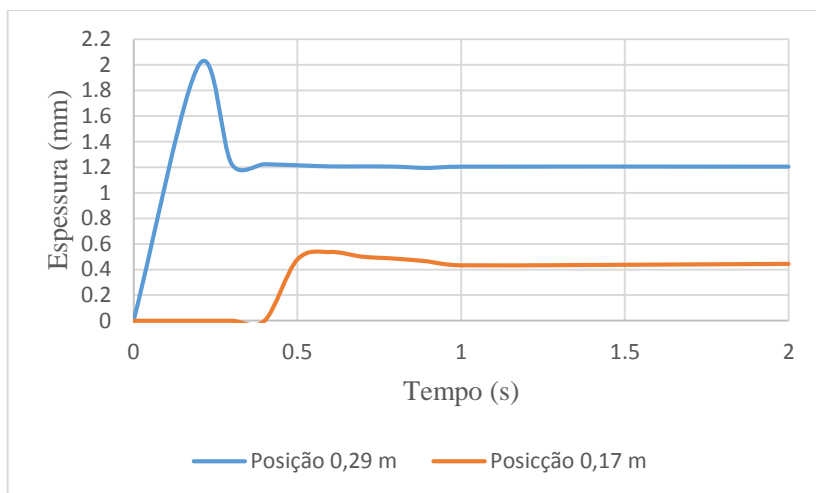


Fonte: Autora, 2015.

Nesta Figura foram plotados todos os tempos a fim de avaliar o cenário da distribuição do fluxo de calor. Como é de se esperar, o fluxo apresenta-se muito instável e com muitas perturbações, devido ao gotejamento e evaporação de grande parte do filme. O Fluxo de calor é mais intenso enquanto há filme líquido. A partir do momento em que o mesmo seca, há grandes variações, que podem ser consideradas como perturbações no sistema.

Como não há presença de filme líquido do meio ao final da coluna, calculou-se a espessura do mesmo até onde havia fração líquida, como representado na Figura 83.

Figura 83 - Espessura do filme líquido descendente.



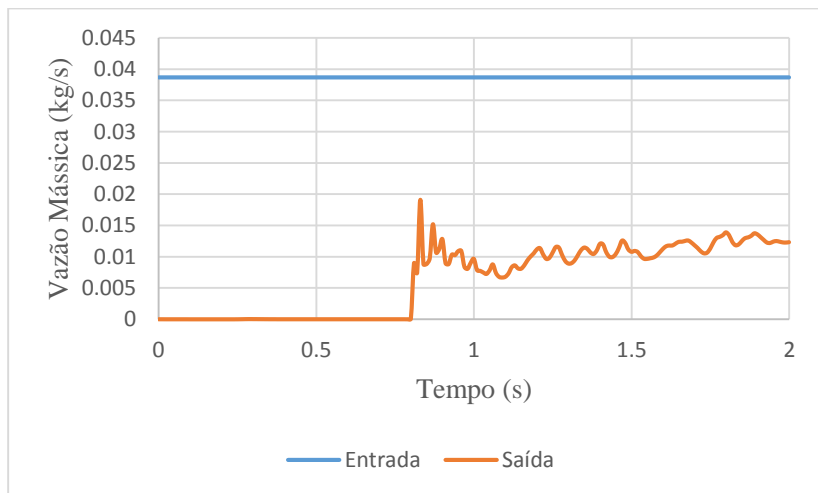
Fonte: Autora, 2015.

A maior espessura como o esperado, se deu no início da coluna, na posição 0,29 m, alcançando um valor máximo de 2,000 mm. Este valor máximo corresponde ao tempo de 0,2 segundo, instante este inicial à formação do filme, onde há uma gota espessa, conforme ilustra a Figura 77.

Ainda na posição 0,29 m, a espessura cai para 1,200 mm e reduz mais significativamente na posição 0,17 m, mantendo um valor de 0,400 mm.

Por fim, tem-se a principal análise que verifica o percentual evaporado; o balanço de massa. A Figura 84 mostra a discrepância entre as vazões de entrada e saída:

Figura 84 - Balanço de massa na coluna, a 230°C na parede.



Fonte: Autora, 2015.

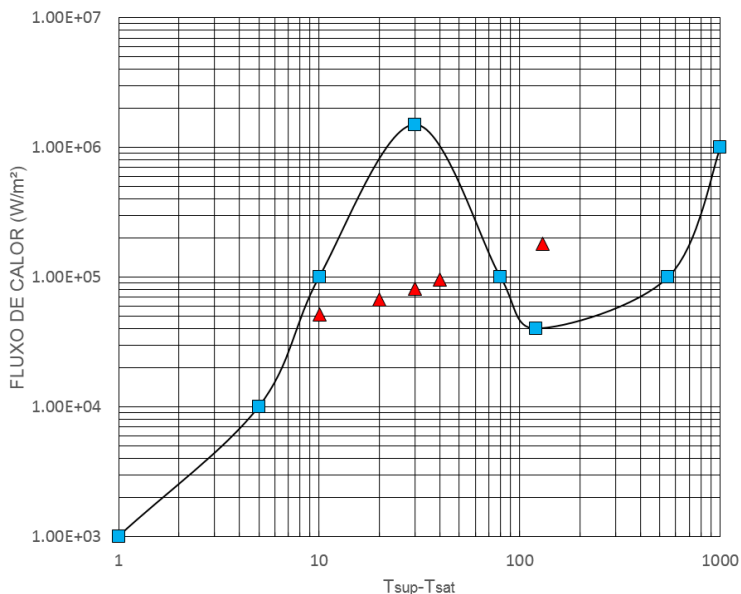
Esta grande diferença entre as vazões de entrada e saída representam 68% de evaporação bruta. Para este caso, como não houve formação de película líquida, subentende-se que dentro deste 68% de evaporação está incluso o efeito de pseudo-evaporação.

Como se pôde observar através das análises feitas, o modelo de transferência de calor com mudança de fase apresenta coerência em seus resultados e com a situação física do processo.

4.5 COMPARAÇÃO ENTRE A CURVA DE EBULIÇÃO DA ÁGUA À PRESSÃO ATMOSFÉRICA COM OS RESULTADOS SIMULADOS

A fim de comparar os dados simulados com a curva de ebulição da água, tem-se abaixo a Figura 85. Os pontos em vermelho (triângulos) representam os dados simulados.

Figura 85 - Comparação entre a curva de ebulição da água à pressão atmosférica com os resultados simulados.



Fonte: Autora, 2015.

Ao analisar a disposição dos pontos dispersos, percebe-se que a teoria válida para ebulição da água em piscina ou panela, não se aplica para a evaporação da água em uma coluna de parede molhada. A quantidade energética necessária para evaporar um filme de água é consideravelmente inferior à quantidade necessária para ebulir a água em uma panela.

5 CONCLUSÕES

Diante do estudo proposto e das situações estudadas, os resultados obtidos, tanto para escoamentos isotérmicos quanto para os casos incluindo a transferência de calor, constatou-se a adequação do modelo proposto para a simulação dos fenômenos físicos envolvidos segundo o conhecimento e observação prévia que se dispõe dos mesmos.

Como previsto, a viscosidade tem grande influência no escoamento, podendo alterar drasticamente o cenário da operação. Fluidos mais viscosos demandam uma vazão de alimentação baixa para a formação de um filme contínuo e estável, enquanto que para fluidos poucos viscosos, o contrário. Uma alimentação mínima de 12,5 kg/h é suficiente para a formação de filme com um fluido viscoso, enquanto que para um fluido pouco viscoso (água), é necessária uma vazão mínima de 140 kg/h.

O tempo de residência na coluna é bem maior para os fluidos de maior viscosidade, devido às elevadas taxas de transferência de quantidade de movimento. Entre os fluidos viscosos, que foram testados com a mesma vazão de alimentação, o mais viscoso (óleo de soja) desenvolveu seu filme por completo em 10 segundos, enquanto o menos viscoso (óleo Spindura) desenvolveu em 6 segundos, ambos para a vazão mínima de 12,5 kg/h. Para a água, o tempo de residência foi de 0,34 segundo, porém a vazão de alimentação mínima foi 11,2 vezes maior que a mínima utilizada nos óleos.

A espessura do filme depende principalmente de dois fatores: da viscosidade do fluido utilizado e também da vazão de alimentação. Para fluidos com mesma viscosidade e com vazões de alimentação diferentes, a espessura da película descendente será maior para aquele que apresentar maior vazão de alimentação. Para fluidos com viscosidades diferentes e uma mesma vazão, a espessura será maior para aquele com maior viscosidade. Entre os óleos, o que apresentou maior espessura foi o óleo de soja (mais viscoso), sendo esta de 1,40 mm, enquanto que para o óleo Spindura, a espessura do filme foi de 1,19 mm, ambas para a vazão de 25 Kg/h. Para a vazão mínima testada (12,5 kg/h), as espessuras dos filmes foram de 1,20 mm e 1,00 mm, para o óleo de soja e para o óleo Spindura, respectivamente. No caso da água, a espessura foi diminuindo conforme se aumentava a temperatura da parede. Os valores de espessura afastados do ponto de alimentação foram de 0,550 mm; 0,508 mm; 0,505 mm; 0,490 mm e 0,447 mm para a água na condição isotérmica, aquecida a 110°C, 120°C, 130°C e 140°C, respectivamente.

Quanto aos campos de velocidades para os fluidos viscosos, cuja natureza do escoamento é laminar, encontram-se valores significativamente mais baixos em relação àqueles fluidos cujo escoamento é turbulento, tanto para a fase gasosa quanto para a fase líquida. O escoamento dos fluidos viscosos apresentou velocidades da fase líquida de 0,12 m/s e 0,19 m/s, e para a fase gasosa, as velocidades foram de 0,07 m/s e 0,13 m/s, para o óleo de soja e para o óleo Spindura, respectivamente, na vazão de 25 kg/h. Para a água, em todas as condições analisadas, inclusive a isotérmica, a velocidade da fase líquida foi de 0,88 m/s enquanto a velocidade da fase vapor foi de 0,25 m/s para os casos com aquecimento. Na situação isotérmica, a velocidade da fase vapor foi de 0,2 m/s.

Para a transferência de calor com mudança de fase observou-se que a distribuição da temperatura na coluna seguiu um comportamento semelhante em todos os casos estudados. Foram efeitos comuns às situações simuladas: zonas aquecidas à temperatura de saturação concentradas junto à abertura superior, resfriamento do vapor à temperatura de 92°C com recirculação da fase gasosa no restante da coluna. Tais efeitos são consequências naturais do processo de evaporação, conforme afirmam Sosnowki, Petronio e Armenio (2013).

O fluxo de calor através da parede se mostrou mais intenso nas regiões onde a espessura do filme líquido é maior, ou seja, na primeira metade da coluna, principalmente no ponto próximo à alimentação. Conforme o filme avança na coluna, o fluxo de calor através do mesmo se reduz. Portanto, o maior grau de evaporação deu-se na primeira metade da coluna, onde tanto o fluxo de calor quanto a espessura eram maiores. Os fluxos de calor para todos os casos mantiveram-se na mesma ordem de grandeza (10^5 W/m^2).

De acordo com os balanços realizados, a situação com filme pleno em que houve maior evaporação foi aquela em que a parede se encontrava a 140°C, resultando em evaporação de 17,5% do líquido injetado. Para as temperaturas de 110°C, 120°C e 130°C, a evaporação parcial foi de 0,25%, 4,7% e 11,5 %, respectivamente. Estes valores remetem a uma relação linear entre a temperatura e o percentual de evaporação.

Através das simulações realizadas foi possível estudar os fenômenos de escoamento e de transferência de calor, pois os resultados obtidos estiveram em boa sintonia com os encontrados na literatura.

Também foi possível comprovar a eficiência do modelo utilizado aplicando uma temperatura acima do ponto de Leidenfrost na parede da coluna (230°C) e os efeitos da alta temperatura puderam ser observados já nos primeiros segundos de simulação. O filme descendente de água

secou a partir da metade da coluna, obtendo-se um percentual de evaporação de 68%, incluso o efeito de pseudo-evaporação.

Os resultados alcançados mostraram-se consistentes com a realidade física tal como a conhecemos e atestam a validade do modelo proposto.

Vale sublinhar que este trabalho representa apenas o início do estudo de um sistema onde concorrem diversos outros fenômenos, em especial a transferência de massa envolvendo vários componentes, tal como ocorre, por exemplo, na coluna de parede molhada destinada à destilação.

6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Estudar a transferência de massa acoplada à transferência de calor para sistemas multicomponentes;
- Desenvolver uma bancada experimental que permita testar diferentes fluidos e validar com maior propriedade o modelo proposto comparando-se os resultados experimentais com as simulações;
- Avaliar os efeitos de transferência de calor na coluna sob a condição de um perfil não isotérmico na parede, de forma a atender a condições operacionais mais realistas;
- Otimizar o sistema segundo a vazão de alimentação de líquido e temperatura imposta na parede visando o melhor grau de vaporização compatível com a destilação em película descendente de determinada mistura.

REFERÊNCIAS

- ALBERT, C.; MARSCHALL, H.; BOTHE, D. **Direct Numerical Simulation of interfacial mass transfer into falling films**. International Journal Heat and Mass Transfer, 69, 2013, 343-357.
- ALHUSSEINI, A. A., TUZLA K., CHEN, J. C. **Falling film evaporation of single component liquid**. International Journal Heat and Mass Transfer, 41, 1998, 1623-1632.
- ALMEIDA, J. K. P., NUNES, G. P., TEIXEIRA, C. C. M., RODRIGUES, D. P., MELLO, J. R. **Caracterizações físico-químicas de óleos vegetais utilizados para a produção de biodiesel com metodologias alternativas simples**. XXXI encontro nacional de engenharia de produção, Belo Horizonte, 2011.
- AZARKISH, H., BEHZADMEHR, A., SHEIKHOLESAMI, T. F., SARVARI, S. M. H., FRÉCHETTE, L. G. **Water evaporation phenomena on micro na nanostructured surfaces**. International Journal of Thermal Sciences, 90, 2015, 112-121.
- BADALASSI, V. E.; CENICEROS, H. D.; BANERJEE, S. **Computation of multiphase systems with phase field models**. Journal of Computational Physics, 2003, 371 – 397.
- BARROS, E., MEDEIROS, J. F., PEREIRA, N. C. **Análise das propriedades físico-químicas do óleo de soja degomado visando a produção de biodiesel**. Encontro Internacional de Produção Científica. Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2013.
- BERGMANN, T. L., LAVINE, A. S., INCROPERA, F.P. and DEWITT, D.P. **Fundamentals of Heat and Mass transfer**, John Wiley & Sons, Inc., 2002.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. **Transport phenomena**. New York: John Wiley, 1960.
- BORTOLI, A. L. **Introdução à Dinâmica de Fluidos Computacional**. Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre, 2000.

CAIRNS, R. C., ROPER, G. H. **Heat and transfer at high humidities in a wetted wall column.** Chemical Engineering Science. 3, 1954, 97 – 109.

ÇENGELEK, Y. A.; CIMBALA, J. M. **Mecânica dos fluidos: fundamentos e aplicações.** São Paulo: McGraw Hill, 2007.

ÇENGELEK, Y. A., GHAJAR, A.J. **Heat and mass transfer. Fundamentals & Applications.** 5th ed. McGraw Hill education, 2014.

CHEN, J., ZHANG, R., NIU, R. **Numerical simulation of horizontal tube bundle falling film flow pattern transformation.** Renewable Energy. XXX, 2014, 1-7.

CUSTÓDIO, A. F. **Modelagem-Simulação do processo de separação de óleo de soja-hexano por evaporação.** 2003. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Química da UNICAMP, 2003.

DRIBIKA, M. M., SANDALL, O. C. **Simultaneous heat and mass transfer for multicomponent distillation in a wetted-wall column.** Chemical Engineering Science. 34, 1979, 733-739.

DROSOS, E. I. P., PARAS, S. V., KARABELAS, A. J. **Counter – current gas-liquid flow in a vertical narrow channel-liquid film characteristics and flooding phenomena.** International Journal of Multiphase Flow, 32, 2006, 51-81.

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

FERNANDES, F. A. N., PIZZO, S. M., MORAES Jr, D. **Termodinâmica Química,** 2006, 1ª ed.

FOUST, A. S., WENZEL, L. A., CURTIS, W. C., MAUS, L., ANDERSEN, L. B. **Princípios das operações unitárias.** Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora S.A, 1980.

FRANÇA, F. A. **Modelagem de escoamentos multifásicos.**

Departamento de Engenharia de Petróleo, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

GEANKOPLIS, C. J. **Transport Processes and Unit Operations.** 3 ed. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1993.

GONÇALVES, N. D. F. **Método dos Volumes Finitos em malhas não-estruturadas.** Dissertação (mestrado em Engenharia Matemática). Departamento de matemática aplicada. Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, 2007.

HAELSSIG, J. B., TREMBLAY, A. Y.; THIBAUT, J., ETEMAD, S. G. **Direct numerical simulation of interphase heat and mass transfer in multicomponent vapour–liquid flows.** International Journal of Heat and Mass Transfer, 53, 2010, 3947–3960.

HASSANVAND, A., HASHENABADI, S. H. **Direct numerical simulation of interphase mass transfer in gas-liquid multiphase systems.** International Communications in Heat and Mass Transfer, 38, 2011, 943-970.

HELOUI, I. X. A. **Vibrações e esforços dinâmicos em tubulações induzidos pelo escoamento bifásico.** Dissertação (mestrado em Engenharia Mecânica). Universidade Federal Fluminense. Rio de Janeiro, 2008.

JACQMIN, D. **Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling.** Journal of Computational Physics, 1999, 96 – 127.

JONES, M. T., SPEDDING, P. L. **Heat and mass transfer in wetted-wall columns: I.** The Chemical Engineering Journal, 37, 1987, 165-176.

LOTTI, R. S., MACHADO, A. W., MAZZIEIRO, E. T., LANDRE Jr., J. **Aplicabilidade científica do método dos elementos finitos.** Maringá, 11, 2006, 35 – 43.

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

Engenharia Química, Universidade Federal de Santa Catarina. Florianópolis, SC, 2005.

MARINHO, I. V.; PINTO, J. C.; NOGUEIRA, E. S. **Simulações multifásicas por fluidodinâmica computacional como suporte ao planejamento de emergências com agentes químicos.** Revista Virtual de Química, 2014, 795-814.

MASCARENHAS, N., MUDAWAR, I. **Investigation of eddy diffusivity and heat transfer coefficient for free-falling turbulent liquid films subjected to sensible heating.** International Journal of Heat and Mass Transfer, 64, 2013, 647 – 660.

McCABE, W. L., JULIAN, C. J. **Operaciones básicas de Ingeniería Química.** Barcelona: Editora Reverté, 1981.

MOUSSA, L.S. **Análise Termodinâmica de Colunas de Destilação Visando à Otimização Energética.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Campinas: Universidade Estadual de Campinas, Curso de Engenharia Química; 2001.

MUKHERJEE, H., BRILL, J. P. **Multiphase flow in wells.** Texas: Society of petroleum Engineers Inc, 1999.

NASCIMENTO, J. C. S. **Simulador de escoamento multifásico em poços de petróleo.** Dissertação (Mestrado em Ciência e Engenharia de Petróleo). Centro de tecnologia. Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2013.

NIELSEN, C. H. E., KIIL, S., THOMSEN H. W., JOHANSEN, K. D. **Mass transfer in wetted-wall columns: Correlations at high Reynolds numbers.** Chemical Engineering Science, 53, 1997, 495-503.

NORTON, T.; SUN, D. W. **Computational fluid dynamics (CFD) an effective and efficient design and analysis tool for the food industry: a review.** Trends in Food Science and Technology, Oxford, 17, 2006, 600-620.

NÓS, R. L.; CENICEROS, H. D.; ROMA, A. M. **Simulação tridimensional adaptativa da separação das fases de uma mistura**

bifásica usando a equação de Cahn-Hilliard. Matemática Aplicada e Computacional, 13, 2012, 37-50.

OLIVEIRA, A. G., SILVA, G. P., GERALDELLI, W., ROPELATO, K. **O crescimento do uso da fluidodinâmica computacional (CFD) nas tecnologias de destilação, FCC e coqueamento retardado na engenharia básica de abastecimento da Petrobras.** Petro e Química, nº 343, 2012.

PACHECO, F., CAVALCANTE, C. C. P., MENDES, J. R. P., BANNWART, A. C., SERAPIÃO, A. B. S. **Identificação de padrões de escoamento multifásico e determinação da perda de carga com o auxílio de redes neurais.** 4º PDPETRO, Campinas, SP, 2007.

PADILHA, A., SCALON, V. L., SCALOPPE, J. H. **Estudo hidrodinâmico de uma película líquida descendente em placa plana.** Departamento de Engenharia Mecânica, UNESP, Bauru, 2000.

PALADINO, E. E. **Estudo do escoamento multifásico em medidores de vazão do tipo pressão diferencial.** Proposta de tese (Doutorado em Engenharia Mecânica). Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2001.

PERRY, Robert H.; GREEN, Don W. **Perry's Chemical engineers' handbook.** 8. ed. New York: McGraw-Hill, 2008.

PINTO, J. C. P.; PADILHA, A.; SCALON, V. L. **Simulação teórica da transferência de calor e massa de uma película líquida descendente ao longo da parede vertical interna de um tubo cilíndrico.** Mecânica. Computacional, XXII, 2003, 1736 – 1746.

PORTALSKI, S., CLEGG, A. J. **Interfacial area increase in rippled film flow on wetted wall columns.** Chemical Engineering Science. 26, 1970, 773-784.

PONCE, G. H. S. F. **Estudo de nova configuração de colunas de destilação aumentando eficiência energética.** Dissertação (mestrado em Engenharia Química). Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2011.

PRATA, J. E. **Modelagem de um absorvedor de filme descendente líquido para um ciclo de refrigeração por absorção amônia-água.** Dissertação (mestrado em Engenharia Mecânica de Energia e Fluidos). Escola Politécnica de São Paulo, São Paulo, 2012.

PORCIÚNCULA, C. B. **Simulação fluidodinâmica computacional de processos de separação por membranas.** Dissertação (mestrado em Engenharia Química). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2007.

RAACH, H., MITROVIC, J. **Seawater falling film evaporation on vertical plates with turbulence wires.** Desalination. 183, 2005, 307 – 316.

RADE, D. A. **Método dos elementos finitos aplicados à Engenharia Mecânica.** Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica. Universidade Federal de Uberlândia.

RIBEIRO, F. L. B. **Introdução ao método dos elementos finitos.** Notas de aula – COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 2004.

ROSA, E. S. **Escoamento multifásico isotérmico: Modelos de multífluídos e de mistura.** Porto Alegre: Editora Bookman, 2012.

SANTOS, F. P., MEDRONHO, R. A. **Simulação numérica da fluidodinâmica de um riser de craqueamento catalítico.** 4º DEPETRO, Campinas, SP, 2007.

SHEMBHARKAR, T. R., PAI, B. R. **Prediction of film cooling with a liquid coolant.** International Journal Heat and Mass Transfer. 29, 1986, 899 – 908.

SIMIONI, D.R., QUADRI, M. B., BOLZAN, A. **Estudo experimental e de simulação CFD do gotejamento de óleo a partir de uma pequena fonte cilíndrica submersa em água.** XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 2014.

SINOT, R. K. **Chemical Engineering Design.** 4ª ed. Oxford: Elsevier, 2005.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.(Hendrick C.). **Introdução a termodinâmica da engenharia química**. 3. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1980.

SON, G., DHIR, V. K. **A level set method for analysis of film boiling on an immersed solid surface**. Numerical Heat Transfer, Part B, 153-177, 2007.

SODNOWSKI, P., PETRONIO, A., ARMENIO, V. **Numerical model for thin liquid film with evaporation and condensation on solid surfaces in systems with conjugated heat transfer**. International Journal of Heat and Mass Transfer, 66, 2013, 382-395.

SOUZA, J. N. M. **Modelagem e simulação de escoamento multifásico em dutos de produção de óleo e gás natural**. Tese (doutorado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos). Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2010.

SOUZA, R. M. **O Método dos Elementos Finitos aplicado ao problema de condução de calor. Núcleo de instrumentação e computação aplicada à engenharia**. Universidade Federal do Pará, 2003.

SPEEDING, P. L. **Heat and Mass Transfer in wetted-wall columns: I**. The Chemical Engineering Journal, 37, 1988, 165-176.

TAVARES, E. G.; MILANEZ, F.H.; BOLZAN, A.; MARANGONI, C.; TELEKEN, J. G.; WERLE, L. O.; QUADRI, M. B.; MACHADO, R. A. F. **Projeto Destubcal: Desenvolvimento de tecnologia por tubos de calor, aplicável ao melhoramento de petróleo extra-pesado, em ambiente de produção offshore**. Relatório técnico parcial 1 – Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina, 2008.

TAVARES, E. G.; MILANEZ, F.H.; BOLZAN, A.; MARANGONI, C.; TELEKEN, J. G.; WERLE, L. O.; QUADRI, M. B.; MACHADO, R. A. F. **Projeto Destubcal: Desenvolvimento de tecnologia por tubos de calor, aplicável ao melhoramento de petróleo extra-pesado, em ambiente de produção offshore**. Relatório técnico parcial 2 – Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina, 2008.

TAVARES, E. G.; MILANEZ, F.H.; BOLZAN, A.; MARANGONI, C.; TELEKEN, J. G.; WERLE, L. O.; QUADRI, M. B.; MACHADO, R. A.

F. Projeto Destubcal: Desenvolvimento de tecnologia por tubos de calor, aplicável ao melhoramento de petróleo extra-pesado, em ambiente de produção offshore. Relatório técnico parcial 3 – Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina, 2008.

TAVARES, E. G.; MILANEZ, F.H.; BOLZAN, A.; MARANGONI, C.; TELEKEN, J. G.; WERLE, L. O.; QUADRI, M. B.; MACHADO, R. A. **F. Projeto Destubcal: Desenvolvimento de tecnologia por tubos de calor, aplicável ao melhoramento de petróleo extra-pesado, em ambiente de produção offshore.** Relatório técnico parcial 4 – Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina, 2008.

TELEKEN, J. G. **Modelagem Matemática e Análise Fluidodinâmica do Processo de Destilação por Filme Líquido Descendente.** Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina, Curso de Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos; 2013.

TSUI, Y-Y., LIN, S-W., LAI, Y-N, WU, F-C. **Phase change calculations for film boiling flows.** International Journal of Heat and Mass Transfer, 70, 2014, 745 – 757.

VEERSTEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method.** 2ed. Harlow: Prentice hall, 2007.

VIDELA, S., SOLÁ, C., LEMA, J. M. **Dynamic simulation of an air-water wetted wall column: comparison of experimental and numerical results.** Computers Chemical Engineering. 3, 1986, 311 – 317.

WANG, Q.; MA, X.; LAN, Z.; CHEN, J.; BAI, T. **Heat Transfer Characteristics of Falling Film Process on Coated Division Tubes: Effect of the Surface Configurations.** Industrial Engineering Chemistry Research, 49, 2010, 6622-6629.

WEISE, F., SCHOLL, S. **Evaporation of pure liquids with increase viscosity in a falling film evaporator.** Heat Mass Transfer, 45, 2009, 1037 – 1046.

WELTY, J. R., WICKS, C.E., WILSON, R. E., RORRER, G. L. **Fundamentals of momentum, heat, and mass transfer.** 5 ed. New York: John Wiley, 2008.

WERLE, L. O. **Minimização dos transientes através do aquecimento distribuído em coluna de destilação.** 2007. Dissertação. (Mestrado em 151 Engenharia Química) – Universidade Federal de Santa Catarina UFSC. Florianópolis, 2007.

WILSON, S. D. R. **The stability of a dry patch on a wetted wall.** International Journal Heat and Mass Transfer. 17, 1974, 1607 -1615.

YANG, X., YAN, Y.Y. **Molecular dynamics simulation for microscope insight of water evaporation on a heated magnesium surface.** Applied Thermal Engineering, 31, 2011, 640-648.

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