

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
CENTRO TECNOLÓGICO  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS

**TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM COLUNAS DE ABSORÇÃO:  
UMA ABORDAGEM NUMÉRICA E EXPERIMENTAL**

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química do  
Centro Tecnológico da Universidade Federal de Santa Catarina, como requisito  
parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

**Orientador:** Prof. Dr. Antônio Augusto Ulson de Souza

**Co-orientador :** Prof. Dr. José Antônio Ribeiro de Souza

**Jaime Humberto Palacio Revello**

Florianópolis - SC, março de 1998.

**TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM COLUNAS DE ABSORÇÃO:  
UMA ABORDAGEM NUMÉRICA E EXPERIMENTAL**

Por

**Jaime Humberto Palacio Revello**

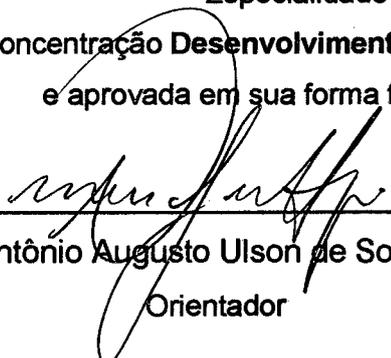
Esta dissertação foi julgada para a obtenção do título de

**Mestre em Engenharia**

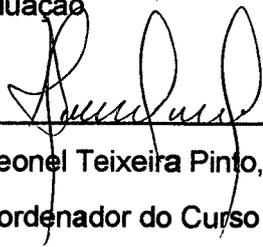
**Especialidade Engenharia Química**

**Área de Concentração Desenvolvimento de Processos Químicos e Biotecnológicos**

e aprovada em sua forma final pelo curso de Pós-Graduação

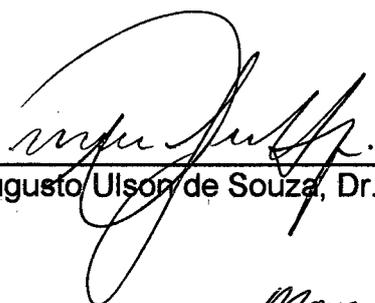
  
\_\_\_\_\_  
Prof. Antônio Augusto Ulson de Souza, Dr. Eng.

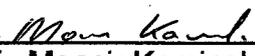
Orientador

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Leonel Teixeira Pinto, D. Sc.

Coordenador do Curso

**BANCA EXAMINADORA:**

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Antônio Augusto Ulson de Souza, Dr. Eng. (Presidente)

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Moacir Kaminski, Dr. Eng.

  
\_\_\_\_\_  
Prof. José Antônio Ribeiro de Souza, D. Sc.

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Selene M. A. Guelli Ulson de Souza, Dr. Eng.

Florianópolis, 6 de março de 1998.

*Decida que poderá fazer e faça,  
e então achará a maneira.*

Abraham LINCOLN.

Aos meus pais e meus irmãos pelo incentivo e apoio que contribuíram para o vencimento de mais uma etapa em minha vida.

## AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Prof. Antônio Augusto Ulson de Souza, e a Prof<sup>a</sup>. Selene Maria Arruda Guelli Ulson de Souza por sua constante dedicação e pelos conhecimentos transmitidos no decorrer deste trabalho.

Ao Prof. José Antônio Ribeiro de Souza pelos conhecimentos transmitidos.

Ao Edevilson Silva secretário da Coordenadoria pela amizade e colaboração ao longo de todo o Curso de Pós-Graduação.

Aos professores do Curso de Pós-Graduação pelos conhecimentos transmitidos.

Ao Prof. Adelamar Ferreira Novaes, pelas sugestões apresentadas na realização da parte experimental.

Aos meus colegas do LABSIN, José Alexandre Borges Valle, Adriano da Silva e Heloísa de Lima Brandão, pelos conhecimentos transmitidos e pela amizade.

Ao bolsista de iniciação científica Rafael Arioli, por sua colaboração nas corridas experimentais.

A CAPES, pelo apoio financeiro.

Finalmente, a todas aquelas pessoas que contribuíram de uma maneira direta ou indireta na realização deste trabalho.

## ÍNDICE GERAL

LISTA DE TABELAS .....	viii
LISTA DE FIGURAS .....	ix
SIMBOLOGIA .....	xiv
RESUMO .....	xix
ABSTRACT .....	xxi
CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO .....	1
CAPÍTULO II – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	6
2.1 TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM SISTEMAS BIFÁSICOS.....	6
2.2 TÉCNICAS E METODOLOGIAS NUMÉRICAS.....	18
CAPÍTULO III – FORMULAÇÃO PROPOSTA.....	28
3.1 EQUAÇÕES GOVERNANTES.....	29
3.2 TRANSFORMAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO PARA O SISTEMA DE COORDENADAS GENERALIZADAS.....	31
3.3 INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO NOS VOLUMES DISCRETOS.....	38
3.4 FUNÇÃO DE INTERPOLAÇÃO .....	42
3.5 ACOPLAMENTO ENTRE PRESSÃO-VELOCIDADE .....	45
3.6 AVALIAÇÃO DOS FLUXOS MÁSSICOS NAS FACES DOS VOLUMES DE CONTROLE .....	51

3.7 APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO .....	53
CAPÍTULO IV – RESULTADOS .....	56
4.1 AVALIAÇÃO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS.....	57
4.2 RELAÇÕES ENTRE AS FASES E DEFINIÇÕES.....	63
4.3 ABSORÇÃO DE AMÔNIA DE UMA MISTURA GASOSA AMÔNIA-HIDROGÊNIO PARA UMA MISTURA LÍQUIDA AMÔNIA-ÁGUA.....	65
4.4 DESSORÇÃO DE DIÓXIDO DE CARBONO DE UMA MISTURA LÍQUIDA, DIÓXIDO DE CARBONO-ÁGUA, PARA UMA MISTURA GASOSA, AR-ÁGUA.....	80
4.4.1 EQUIPAMENTOS E PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS..	80
4.4.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	83
4.5 INFLUÊNCIA DA TEMPERATURA NO PROCESSO DE UMIDIFICAÇÃO EM UMA COLUNA DE ABSORÇÃO AR-ÁGUA.	102
4.5.1 EQUIPAMENTOS E PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS..	102
4.5.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	104
CAPÍTULO V – CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	112
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	115

## LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 -	Valores de $\phi$ , $\Gamma^\phi$ , $P^\phi$ e $S^\phi$ para as diversas equações de conservação.....	31
Tabela 3.2 -	Expressões correspondentes para $\hat{P}^\phi$ e $\hat{S}^\phi$ .....	36
Tabela 4.1 -	Volumes atômicos e volumes molares no ponto normal de ebulição.	61
Tabela 4.2 -	Fatores de correção $I_A$ , $S_A$ , $Q_A$ , $A_B$ e $S_B$ .....	62
Tabela 4.3 -	Valores dos parâmetros empregados no problema de absorção de amônia.....	69
Tabela 4.4 -	Desvios relativos obtidos na solução da fase gasosa, nas diferentes alturas e posições radiais da coluna.....	73
Tabela 4.5 -	Desvios relativos obtidos na solução da fase líquida, nas diferentes alturas e posições radiais da coluna.....	77
Tabela 4.6 -	Frações mássicas de $\text{CO}_2$ obtidas experimentalmente, nas fases líquida e gasosa, para diversas alturas da coluna e vazões de ar estudadas.....	82
Tabela 4.7 -	Valores dos parâmetros empregados na solução do problema $\text{CO}_2\text{-Ar-H}_2$ .....	86
Tabela 4.8 -	Valores das propriedades físicas empregadas.....	105
Tabela 4.9 -	Fração mássica média na saída da coluna e desvio relativo para diferentes vazões de ar e temperaturas.....	111

## LISTA DE FIGURAS

Figura	2.1	- Coluna tipo “spray”.....	7
Figura	2.2	- Coluna de bolhas.....	8
Figura	2.3	- Coluna empacotada.....	9
Figura	2.4	- Coluna de parede molhada.....	9
Figura	2.5	- Modelo do Filme de Whitman (1923).....	10
Figura	2.6	- Teoria da Penetração de Higbie (1935).....	12
Figura	2.7	- Teoria de Renovação de superfície de Danckwerts (1951).....	13
Figura	2.8	- Arranjo de variáveis co-localizadas.....	19
Figura	2.9	- Localização das variáveis na malha computacional para o arranjo de variáveis desencontradas.....	20
Figura	2.10	- Campo de pressão inconsistente.....	21
Figura	3.1	- Volume de controle genérico para integração.....	38
Figura	3.2	- Volume de controle para a obtenção do fluxo de massa na face leste.....	52
Figura	3.3	- Volumes fictícios para as condições de contorno.....	53
Figura	3.4	- Extrapolação linear da pressão para a fronteira leste do volume de controle.....	55
Figura	4.1	- Domínio do problema físico.....	65
Figura	4.2	- Especificação das condições de contorno para a fase gasosa (mistura $\text{NH}_3\text{-H}_2$ ).....	67

Figura 4.3	- Especificação das condições de contorno para a fase líquida ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ).....	68
Figura 4.4	- Perfis de velocidade para a fase gasosa ( $\text{NH}_3\text{-H}_2$ ), em diversas alturas da coluna de absorção.....	70
Figura 4.5	- Perfis de fração mássica para a fase gasosa ( $\text{NH}_3\text{-H}_2$ ), em diversas alturas da coluna de absorção.....	71
Figura 4.6	- Comparação entre os perfis de fração mássica obtidos mediante o Método de Volumes Finitos (malha 80x40), e os perfis obtidos por Martins e Pereira (1996), utilizando o Método de Diferenças Finitas.....	72
Figura 4.7	- Perfil de velocidade para o filme líquido ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ).....	74
Figura 4.8	- Perfis de fração mássica para o filme líquido ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ), em diversas alturas da coluna.....	75
Figura 4.9	- Perfis de fração mássica na fase líquida, obtidos pelo Método de Volumes Finitos (malha 80x15), e obtidos por Martins e Pereira (1996), utilizando o Método de Diferenças Finitas.....	76
Figura 4.10	- Fluxo mássico da fase gasosa, para a fase líquida ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ), em diversas alturas da coluna de absorção.....	78
Figura 4.11	- Coeficiente de transferência de massa em diversas alturas da coluna de absorção.....	79
Figura 4.12	- Variação do número de Sherwood com a altura da coluna, para o problema $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{-H}_2\text{O}$ .....	79
Figura 4.13	- Diagrama esquemático do equipamento.....	81

Figura 4.14 - Especificação das condições de contorno para a fase líquida (CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O).....	84
Figura 4.15 - Especificação das condições de contorno para a fase gasosa (CO <sub>2</sub> -ar).....	85
Figura 4.16 - Perfil de velocidade para o filme líquido (CO <sub>2</sub> - H <sub>2</sub> O).....	87
Figura 4.17 - Perfis de fração mássica para o filme líquido, para vazão de ar de 40 l/min.....	88
Figura 4.18 - Perfis de fração mássica para o filme líquido, para vazão de ar de 60 l/min.....	89
Figura 4.19 - Perfis de fração mássica para o filme líquido, para vazão de ar de 80 l/min.....	89
Figura 4.20 - Influência da vazão de ar alimentado ao sistema, sobre a fração mássica de CO <sub>2</sub> na fase líquida, em diversas posições axiais da coluna.....	90
Figura 4.21 - Desvio relativo obtido na solução da fase líquida em diversas alturas da coluna de parede molhada, para diferentes vazões de ar.....	91
Figura 4.22 - Perfis de velocidade para a fase gasosa (vazão de ar de 40l/ min).....	93
Figura 4.23 - Perfis de velocidade para a fase gasosa (vazão de ar de 60l/ min).....	93
Figura 4.24 - Perfis de velocidade para a fase gasosa (vazão de ar de 80l/ min).....	94

Figura 4.25	- Perfis de fração mássica de CO <sub>2</sub> na fase gasosa (vazão de ar de 40l/min).....	95
Figura 4.26	- Perfis de fração mássica de CO <sub>2</sub> na fase gasosa (vazão de ar de 60l/min).....	95
Figura 4.27	- Perfis de fração mássica de CO <sub>2</sub> na fase gasosa (vazão de ar de 80l/min).....	96
Figura 4.28	- Influência da vazão sobre a fração mássica de CO <sub>2</sub> , em r=0,0124 m, para diversas alturas da coluna.....	97
Figura 4.29	- Fluxo molar de CO <sub>2</sub> , da fase líquida para a fase gasosa, em diversas alturas da coluna de absorção e para diversas vazões de ar.....	98
Figura 4.30	- Coeficiente convectivo de transferência de massa, para diversas alturas da coluna de absorção e diversas vazões de ar.....	99
Figura 4.31	- Variação do número de Sherwood local com a altura da coluna de absorção, para as diversas vazões de ar estudadas.....	100
Figura 4.32	- Efeito da velocidade do ar sobre o processo de transferência de massa em uma coluna de absorção, para o problema CO <sub>2</sub> -ar-H <sub>2</sub> O.....	100
Figura 4.33	- Desvio relativo obtido entre a solução numérica e os dados experimentais, em diversas alturas da coluna de parede molhada, para diversas vazões de ar.....	101
Figura 4.34	- Esquema simplificado do equipamento empregado.....	103
Figura 4.35	- Especificação das condições de contorno.....	104

Figura 4.36	- Perfil de velocidade na base e no topo da coluna de absorção.....	106
Figura 4.37	- Perfis de fração mássica na fase gasosa para uma vazão de ar de 69 l/min, em diversas alturas da coluna de absorção e para as temperaturas de 35 °C, 40 °C e 50 °C.....	107
Figura 4.38	- Perfis de fração mássica da água na fase gasosa para diversas alturas, vazão de 69 l/min e 40 °C.....	108
Figura 4.39	- Perfis de fração mássica na fase gasosa, para uma altura na coluna de absorção de 0,77m, e temperatura de 35 °C, para diversas vazões de ar.....	109
Figura 4.40	- Fluxo mássico de água na interface, para diversas alturas da coluna e diversas temperaturas, para vazão de ar de 69 l/min.....	110

## SIMBOLOGIA

- $a_i$  - coeficientes da equação discretizada onde  $i = P, E, W, S, N$ , etc.
- $A_B$  - parâmetro de interação para solventes associados, [Adimensional]
- $b^\phi$  - termo fonte da equação discretizada
- $\vec{B}$  - vetor força de campo por unidade de volume de fluido,  $[M/(L^2T^2)]$
- $C_i$  - fração mássica do componente  $i$ , na fase líquida,  $[M/M]$
- $C_1$  - variável definida pela equação (3.37)
- $C_2$  - variável definida pela equação (3.38)
- $C_3$  - variável definida pela equação (3.39)
- $D_{AB}$  - difusividade do componente  $A$  no componente  $B$ ,  $[L^2/T]$
- $g_x$  - componente da força do campo por unidade de massa, na direção  $x$ ,  $[L/T^2]$
- $g_y$  - componente da força do campo por unidade de massa, na direção  $y$ ,  $[L/T^2]$
- $h$  - coeficiente convectivo de transferência de massa,  $[L/T]$
- $I_A$  - parâmetro de interação para solutos polares, [Adimensional]
- $J$  - jacobiano da transformação
- $\vec{J}_i$  - fluxo molar convectivo da espécie  $i$ ,  $[Moles/(L^2T)]$
- $L$  - altura da coluna,  $[L]$
- $L[ ]$  - aproximação numérica da expressão no interior dos colchetes
- $\dot{m}_n$  - vazão mássica do fluido na face  $i$ ,  $[M/T]$
- $m_i$  - massa do componente  $i$ ,  $[M]$
- $M_i$  - peso molecular do componente  $i$ ,  $[Moles/M]$
- $\vec{n}$  - coordenada ao longo da direção normal à face do volume de controle,  $[L]$

- $\bar{n}_i$  - fluxo mássico total da espécie  $i$ ,  $[M/(L^2T)]$
- $\bar{N}_i$  - fluxo molar total da espécie  $i$ ,  $[Moles/(L^2T)]$
- $p_a$  - pressão parcial do componente condensável na fase gasosa,  $[M/(LT^2)]$
- $P$  - pressão do sistema,  $[M/(LT^2)]$
- $P_a$  - pressão de vapor do componente condensável,  $[M/(LT^2)]$
- $P^\phi$  - representa o gradiente de pressão na equação (3.8),  $[M/(L^2T^2)]$
- $\hat{P}^\phi$  - variável definida na Tabela 3.2,  $[M/(L^2T^2)]$
- $P(i, j)$  - ponto com coordenadas  $x = i$  e  $y = j$
- $Pe$  - número de Peclet,  $Pe = \frac{\rho u \Delta x}{\Gamma^\phi}$
- $Q$  - vazão volumétrica,  $[L^3/T]$
- $Q_A$  - fator de correção para gases com baixo peso molecular
- $r_A''$  - taxa mássica de reação química do componente A, por unidade de volume,  
 $[M/(L^3T)]$
- $R$  - raio da coluna,  $[L]$
- $R^*$  - constante universal dos gases ideais
- $Sh$  - número de Sherwood, [Adimensional]
- $S_i$  - fator de forma para parafinas, onde  $i = A$  e  $B$ .
- $S^\phi$  - termo fonte das equações de conservação,  $[M\phi/(L^3T)]$
- $\hat{S}^\phi$  - variável definida na Tabela 3.2,  $[M\phi/(L^3T)]$
- $t$  - tempo,  $[T]$
- $T$  - temperatura
- $u$  - componente da velocidade, na direção  $x$ , no sistema cartesiano,  $[L/T]$

- $u_g$  - componente da velocidade na fase gasosa, na direção  $x$ , [L/T]
- $u_L$  - componente da velocidade na fase líquida, na direção  $x$ , [L/T]
- $U$  - componente contravariante da velocidade, sem normalização métrica, [L/T]
- $v$  - componente da velocidade, na direção  $y$ , no sistema cartesiano, [L/T]
- $V$  - componente contravariante da velocidade, sem normalização métrica, [L/T]
- $V_B$  - volume molar do solvente  $B$ , [L<sup>3</sup>/Moles]
- $V_{SA}$  - volume molar do soluto  $A$ , [L<sup>3</sup>/Moles]
- $\vec{V}$  - vetor velocidade do fluido, [L/t]
- $W_i$  - fração mássica do componente  $i$ , na fase gasosa, [M/M]
- $x$  - coordenada do sistema cartesiano, [L]
- $y$  - coordenada do sistema cartesiano, [L]
- $y_i$  - fração molar do componente  $i$ , [Moles  $i$ /Moles totais]

### LETRAS GREGAS

- $\alpha$  - componente do tensor métrico da transformação, dada pela equação (3.40)
- $\beta$  - componente do tensor métrico da transformação, dada pela equação (3.41)
- $\gamma$  - componente do tensor métrico da transformação, dada pela equação (3.42)
- $\alpha$  - parâmetro definido pela equação (2.7)
- $\beta$  - parâmetro definido pela equação (2.8)
- $\Gamma^\phi$  - difusividade relativa à variável  $\phi$  multiplicada pela massa específica do fluido,  
[M/(L<sup>2</sup>T)]
- $\eta$  - coordenada do sistema generalizado, no plano transformado, [L]

$\mu$  - viscosidade dinâmica do fluido, [M/(LT)]

$\mu_{mistura}$  - viscosidade da mistura gasosa, [M/(LT)]

$\mu_i$  - viscosidade do componente  $i$ , [M/(LT)]

$\xi$  - coordenada do sistema generalizado, no plano transformado, [L]

$\rho$  - massa específica do fluido, [M/L<sup>3</sup>]

$\rho_i$  - massa específica do componente  $i$ , [M/L<sup>3</sup>]

$\sigma_{AB}$  - diâmetro de colisão, [L]

$\delta$  - espessura do filme, [L]

$\bar{\tau}$  - tensor tensão, [ M/(LT<sup>2</sup>) ]

$\tau_{ij}$  - componente do tensor tensão, [ M/(LT<sup>2</sup>) ]

$\phi$  - campo escalar geral

$\Omega_{DAB}$  - integral de colisão, [Adimensional]

$\Psi_B$  - parâmetro de associação para o solvente [Adimensional]

## ÍNDICES SUPERIORES

- ' - correção da variável
- \* - estimativa da variável
- $P$  - valores relativos à equação da pressão
- $u$  - valores relativos à equação de conservação da quantidade da movimento na direção  $x$
- $v$  - valores relativos à equação de conservação da quantidade da movimento na direção  $y$

## ÍNDICES INFERIORES

- $e, n, s, w, se, sw, ne, nw$  - valores relativos às faces leste, norte, sul, oeste, sudeste, sudoeste, nordeste e noroeste, respectivamente, do volume de controle centrado em  $P$
- $E, N, S, W, SE, SW, NE, NW$  - valores relativos aos volumes de controle vizinhos ao volume de controle centrado em  $P$
- $NB$  - pontos vizinhos ao ponto  $P$ , como  $E, W, S, N$ , etc.

## RESUMO

O problema de absorção gás-líquido envolve a transferência de massa de um componente da fase gasosa para um absorvente líquido, e a dessorção é o processo inverso migrando, neste caso, o componente da fase líquida para a gasosa. Para a solução de ambos os problemas, é requerida a solução simultânea das equações de Navier-Stokes, da conservação da massa e da espécie química, no caso do problema ser isotérmico. Para os casos não isotérmicos, é requerida também a solução da equação de conservação da energia. Estas equações são altamente não lineares, sendo necessária a utilização de técnicas numéricas, as quais garantem um tratamento adequado ao problema, além da alta eficiência, rapidez e baixo custo frente às técnicas experimentais.

Neste trabalho é apresentada uma metodologia numérica para a solução do processo de transferência de massa isotérmica em colunas de absorção gás-líquido. O método numérico empregado é o Método de Volumes Finitos, com o esquema WUDS para a avaliação dos fluxos convectivos e difusivos nas faces dos volumes de controle, bem como, o arranjo de variáveis co-localizadas na malha computacional.

Com a finalidade de validar o modelo, são resolvidos numericamente três problemas: absorção do sistema amônia-hidrogênio-água, dessorção de dióxido de carbono de uma mistura dióxido de carbono-água para o ar, e o problema de umidificação do ar pela água.

No primeiro dos casos, os resultados obtidos são comparados com os resultados apresentados na literatura e, nos outros dois casos, são comparados com resultados obtidos experimentalmente em uma coluna de absorção disponível no LABMASSA/EQA/UFSC.

## ABSTRACT

The gas-liquid absorption problem involves the mass transfer of a component of the gaseous phase for a liquid absorbent, and the desorption is the inverse process migrating in this case the component of the liquid phase for the gaseous. For the solution of both problems, the simultaneous solution of the Navier-Stokes equations, and the conservation equation of mass and chemical species is required, in the case of the isothermal problem. For non-isothermal problems, it is also required the solution of the energy conservation equation. These equations are highly not linear, being necessary the use of numerical techniques, which guarantee an adequate treatment to the problem, besides the high efficiency, performance and low cost compared to the experimental techniques.

In this work a numeric methodology is presented for the solution of the mass transfer process in isothermal columns of gas-liquid absorption. The numerical method used is the Finite Volumes Method, with the scheme WUDS for the evaluation of the convective and diffusive fluxes in the faces of the control volumes, as well as, the arrangement of co-located variables in the computational grid.

With the purpose of validating the model, three problems are solved numerically: absorption of the ammonia-hydrogen-water system, desorption of carbon dioxide from mixture carbon dioxide-water for the air, and the humidification problem of the air for the water.

In the first of these cases, the obtained results are compared with results presented in the literature and, in other two cases, they are compared with results obtained using experimental procedures in an absorption column available in LABMASSA/EQA/UFSC.

## **CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO**

Os processos de separação são freqüentemente empregados na indústria química, com o objetivo de se obter produtos com um maior grau de pureza. A separação pode ser efetuada por métodos químicos ou mecânicos.

Em alguns casos, em um equipamento de separação, é alimentado um produto com mais de uma fase presente, por exemplo uma fase líquida e uma sólida, tendo-se a necessidade de separar ambas as fases. Neste caso é utilizado um filtro ou uma centrífuga, separando-se eficientemente ambas fases.

Em outros casos, é requerida a separação de um componente que está misturado com outros produtos, formando uma mistura fisicamente homogênea, exigindo que haja uma transferência preferencial de um constituinte para uma segunda fase que possa ser fisicamente separada da mistura residual.

A destilação é uma das operações mais amplamente utilizadas na indústria química, e está baseada na diferença de volatilidades. Neste processo, uma fase vapor entra em contato com uma fase líquida, e há transferência de massa do líquido para o vapor e deste para aquele. O líquido e o vapor contém, em geral, os mesmos componentes, mas em quantidades diferentes. O líquido está no seu ponto bolha e o vapor em equilíbrio, no seu ponto de orvalho. Há transferência simultânea de calor e massa do líquido pela vaporização, e do vapor pela condensação. O efeito final é o

aumento da concentração do componente mais volátil no vapor e do componente menos volátil no líquido.

Na extração líquido-líquido, é adicionado como agente separador um solvente líquido imiscível. No caso ideal, o componente a ser extraído é solúvel no solvente, e os outros componentes são insolúveis, sendo o soluto o único componente transferido da mistura inicial para a fase solvente.

Na evaporação é concentrada uma solução pela adição de calor ao sistema, produzindo-se a vaporização do solvente. Outra operação na qual a separação acontece pela adição de calor ao sistema é a secagem de sólidos, sendo usualmente empregada na desidratação de alimentos.

O processo de absorção é uma operação na qual uma fase gasosa é posta em contato com uma fase líquida, com o objetivo de transferir um ou mais componentes da fase gasosa para a fase líquida, constituindo-se assim em um processo de separação.

O processo de dessorção é a operação oposta da absorção. Neste caso, o gás solúvel é transferido da fase líquida para a fase gasosa em virtude da concentração no líquido ser maior que a concentração de equilíbrio com o gás.

Os processos de absorção e dessorção são amplamente adotados na indústria química. O ácido clorídrico é produzido pela absorção do cloreto de hidrogênio gasoso em água. A fermentação aeróbica dos lodos de esgoto exige a absorção de oxigênio da corrente de ar. A carbonatação das bebidas refrigerantes envolve a absorção de dióxido de carbono, ocorrendo uma certa dessorção quando se abre a garrafa e a pressão é reduzida. A absorção também é muito importante na indústria petroquímica. Na atualidade, os processos de absorção vem sendo utilizados para

solucionar problemas ambientais, como por exemplo a remoção de odores de processos fermentativos e a eliminação de  $\text{NO}_x$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$  de efluentes gasosos.

Ambas as operações requerem a transferência de massa da espécie de interesse de uma fase para a outra. Os princípios das operações de absorção e dessorção são os mesmos, sendo que, nestes processos, a transferência de massa está sempre associada a de calor. Quando um componente passa de uma fase gasosa para uma solução em fase líquida, o calor latente associado à condensação é liberado.

Nos processos de umidificação e desumidificação estão envolvidos somente dois componentes e duas fases. A fase líquida, na maioria dos casos, a água, é um dos componentes, e a fase gasosa envolvida é constituída por um gás não-condensável, usualmente o ar, no qual está presente uma certa fração do vapor da fase líquida. Estes processos envolvem os fenômenos de transferência de calor e massa simultâneos.

Os processos de umidificação podem ser realizados a fim de controlar a umidade de um ambiente ou, como é mais comum, para resfriar e recuperar a água mediante o contato com o ar à baixa umidade. A desumidificação é efetuada, comumente, como uma etapa nos sistemas de condicionamento de ar.

Como é bem conhecido, para a obtenção da solução de problemas envolvendo escoamento de fluidos com transferência de massa, é requerida a solução das equações de Navier-Stokes, da conservação da massa e da espécie química, as quais estão fortemente acopladas, contendo termos não lineares. Devido à complexidade das equações diferenciais e a não existência de soluções analíticas, é

necessária a utilização de técnicas numéricas para a solução do sistema de equações.

Neste trabalho é utilizado o Método de Volumes Finitos, que possui a vantagem de garantir a conservação das grandezas envolvidas ao nível elementar e global, juntamente com o esquema WUDS para a avaliação dos fluxos convectivos e difusivos nas faces do volume de controle, bem como, o arranjo de variáveis co-localizadas na malha computacional.

São estudados três problemas típicos envolvendo escoamento bifásico com transferência de massa. No primeiro caso, considera-se o problema da absorção da amônia de uma mistura de amônia-hidrogênio para uma mistura líquida amônia-água. São obtidos os perfis de velocidade e concentração, mediante os quais é possível obter e quantificar o fluxo mássico da espécie química amônia de uma fase para a outra, além do cálculo do coeficiente de transferência de massa, necessário para o dimensionamento de equipamentos. Os resultados obtidos são comparados com os resultados encontrados por Martins e Pereira (1996), para a mesma mistura.

O segundo problema é a dessorção de dióxido de carbono de uma mistura líquida, dióxido de carbono-água, para uma mistura gasosa ar-dióxido de carbono. É avaliado, da mesma forma, o processo da transferência de massa da espécie química  $\text{CO}_2$  de uma fase para a outra. Os resultados numéricos são comparados com dados obtidos experimentalmente em uma coluna de absorção.

No terceiro e último dos casos é resolvido o problema isotérmico de umidificação ar-água, em uma coluna de parede molhada, para várias temperaturas. Os resultados obtidos numericamente são comparados com os resultados experimentais.

Este trabalho está dividido em vários capítulos, conforme descrito a seguir.

**CAPÍTULO II - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA :** São apresentados, neste capítulo, os principais fundamentos e trabalhos encontrados na literatura relacionados com a absorção gás-líquido, em sistemas que envolvem filmes líquidos descendentes em contato com um gás ou vapor.

**CAPÍTULO III - FORMULAÇÃO PROPOSTA :** Este capítulo contém a metodologia numérica empregada na solução dos problemas já anteriormente mencionados, as equações governantes transformadas para o sistema de coordenadas generalizadas e sua discretização. Também é apresentada a função de interpolação escolhida e o método de tratamento do acoplamento pressão-velocidade.

**CAPÍTULO IV - RESULTADOS :** Neste capítulo, são apresentados os resultados numéricos obtidos de acordo com a metodologia apresentada no CAPÍTULO III. No primeiro dos problemas estudados (absorção da amônia), os resultados obtidos são comparados com os resultados encontrados por Martins e Pereira (1996), para a mesma mistura. Nos outros dois casos estudados, dessorção de dióxido de carbono e umidificação de ar pela água, os resultados são comparados com dados obtidos experimentalmente.

**CAPÍTULO V - CONCLUSÕES E SUGESTÕES :** São apresentadas, neste capítulo, as principais conclusões obtidas neste trabalho, bem como, as sugestões para o desenvolvimento de trabalhos futuros.

**CAPÍTULO II - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA****2.1 - TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM SISTEMAS BIFÁSICOS.**

Em muitas operações de transferência de massa, duas fases imiscíveis são colocadas em contato, para permitir a transferência de massa dos componentes da mistura, entre as fases. A velocidade de difusão em cada fase depende do gradiente de concentração existente entre as espécies químicas.

Para qualquer combinação das fases num sistema, existe uma condição em que a taxa de transferência de certas grandezas do sistema, usualmente a massa ou energia, num processamento químico, é igual a zero; esta combinação dos estados das fases é denominado o equilíbrio do sistema. Para todas as situações de não-equilíbrio, a diferença entre a concentração de uma certa grandeza, existente numa certa condição, e a concentração que a mesma grandeza teria no equilíbrio, constitui uma força motriz, ou uma diferença de potencial, que tende a alterar o sistema no sentido de alcançar o equilíbrio. É importante mencionar que, no estado de equilíbrio, as concentrações não são iguais nas fases líquida e gasosa. O que é mantido igual em ambas fases é o potencial químico, e deve distinguir-se que é a

igualdade dos potenciais químicos, e não a igualdade das concentrações, a causa da suspensão da transferência de massa de soluto, de acordo com Foust *et al.* (1982).

Muitos são os tipos de colunas utilizadas nos processos de absorção gás-líquido, sendo as mais importantes: as colunas tipo "spray", as colunas de bolhas, as colunas empacotadas e as colunas de parede molhada. O uso de uma ou outra depende em grande parte da solubilidade dos componentes de interesse da fase gasosa na fase líquida ou vice-versa, e da resistência à transferência de massa imposta pelas fases.

Na coluna tipo "spray", o líquido alimentado é pulverizado em gotas muito finas, as quais caem por ação da gravidade, e em contracorrente com um gás ascendente, conforme é mostrado na Figura 2.1.

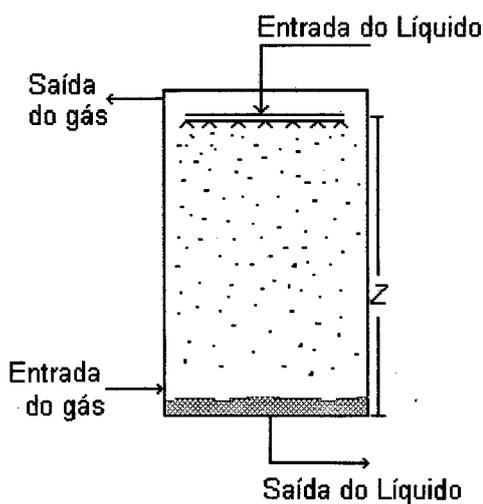


Figura 2.1 - Coluna tipo "spray".

Este tipo de coluna é usado freqüentemente nos casos que se tem gases altamente solúveis e quando a resistência da fase gasosa normalmente controla a velocidade de transferência de massa.

O princípio de funcionamento das colunas de bolhas é oposto ao princípio das colunas tipo "spray". Neste caso o gás é disperso no interior do líquido na forma de bolhas. A transferência de massa ocorre durante a formação das bolhas e quando estas ascendem através do líquido, conforme é ilustrado na Figura 2.2.

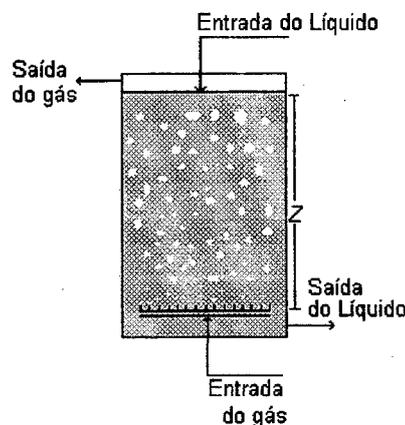


Figura 2.2 – Coluna de bolhas.

O uso deste tipo de colunas é adequado quando a resistência da fase líquida controla a velocidade de transferência de massa, e no caso em que as espécies de interesse no gás são pouco solúveis no líquido.

As colunas empacotadas, utilizadas para o contato contínuo líquido-gás, em contracorrente, são colunas recheadas com elementos de uma grande área superficial, conforme é mostrado na Figura 2.3. O líquido é distribuído desde a parte

superior, através do leito recheado, obtendo-se desta forma um aumento da área de contato com o gás, e por conseguinte, um aumento na transferência de massa.

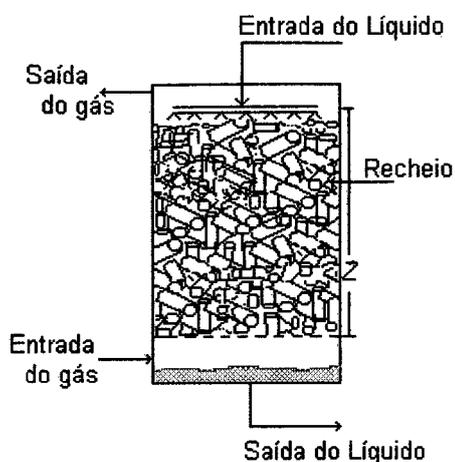


Figura 2.3 – Coluna empacotada

Uma coluna de parede molhada é constituída por um filme líquido que desce pela parte interna de um tubo vertical, com um gás que flui em igual ou em sentido oposto ao líquido, tal como é ilustrado na Figura 2.4.

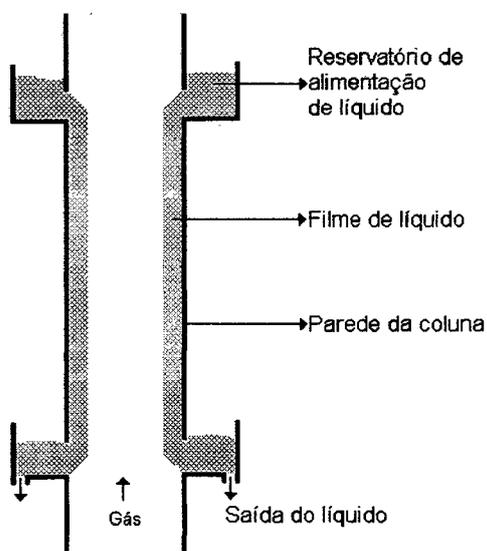


Figura 2.4 - Coluna de parede molhada.

O objetivo fundamental da coluna de absorção é originar um contato íntimo entre as fases líquida e gasosa, para permitir a difusão das espécies químicas entre as fases constituintes, resultando no enriquecimento, aumento da concentração dos componentes desejados ou no empobrecimento de outros componentes indesejados, como, por exemplo, contaminantes e poluentes.

As colunas de parede molhada tem sido bastante estudadas e utilizadas em estudos de transferência de massa, em virtude de sua simplicidade na construção experimental e na determinação da área de contato gás-líquido. A seguir são descritos os principais modelos utilizados para descrever o processo de transferência da massa em sistemas gás-líquido.

O mais antigo e simples dos modelos desenvolvidos para descrever o processo de transferência de massa da fase gasosa para a fase líquida é estabelecido por Whitman (1923), o Modelo do Filme, que assume a existência de um filme de espessura  $\delta$ , estagnado e adjacente a uma interface gás-líquido. Admite-se que, no filme, tem-se a transferência de massa unicamente por difusão molecular unidimensional, na direção normal à interface, conforme ilustra a Figura 2.5.

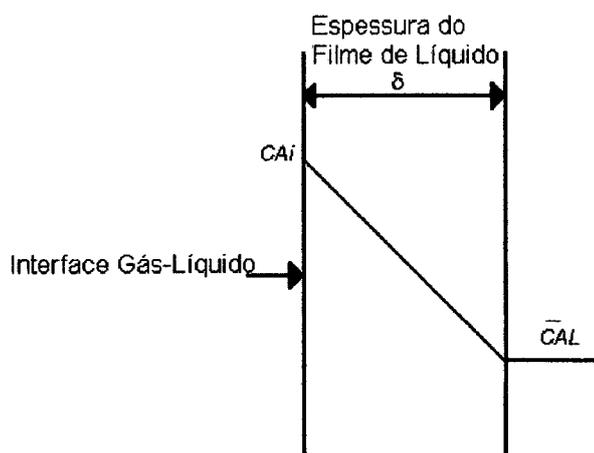


Figura 2.5 - Modelo do Filme de Whitman (1923).

Os elementos de fluido, no interior do líquido e externos ao filme, são idealmente misturados devido a uma intensa convecção, a qual ocorre durante o escoamento turbulento. A resistência à difusão no filme é equivalente a resistência real de transferência de massa por difusão e convecção. Para ser válida esta teoria, é necessário que o filme seja muito fino, para que a quantidade de soluto dentro deste seja muito pequena em relação a quantidade que passa por ele, fazendo com que o gradiente de concentração seja estabelecido rapidamente. O gradiente de concentração no filme é aquele característico do estado estacionário.

A teoria do filme prediz que o coeficiente de transferência de massa é diretamente proporcional a  $D_{AB}$  e é dado por:

$$K_{AB} = \frac{D_{AB}}{\delta} \quad (2.1)$$

É importante salientar que, nos problemas reais, a espessura do filme não é conhecida a priori.

Em muitas situações práticas, é bastante curto o tempo de exposição do fluido à transferência de massa, sendo que o gradiente de concentração, da teoria do filme de Whitman (1923), característico do estado estacionário, não tem um tempo suficiente para se desenvolver. A teoria da penetração de Higbie (1935) foi concebida para descrever o contato entre dois fluidos, como é mostrado na Figura 2.6.

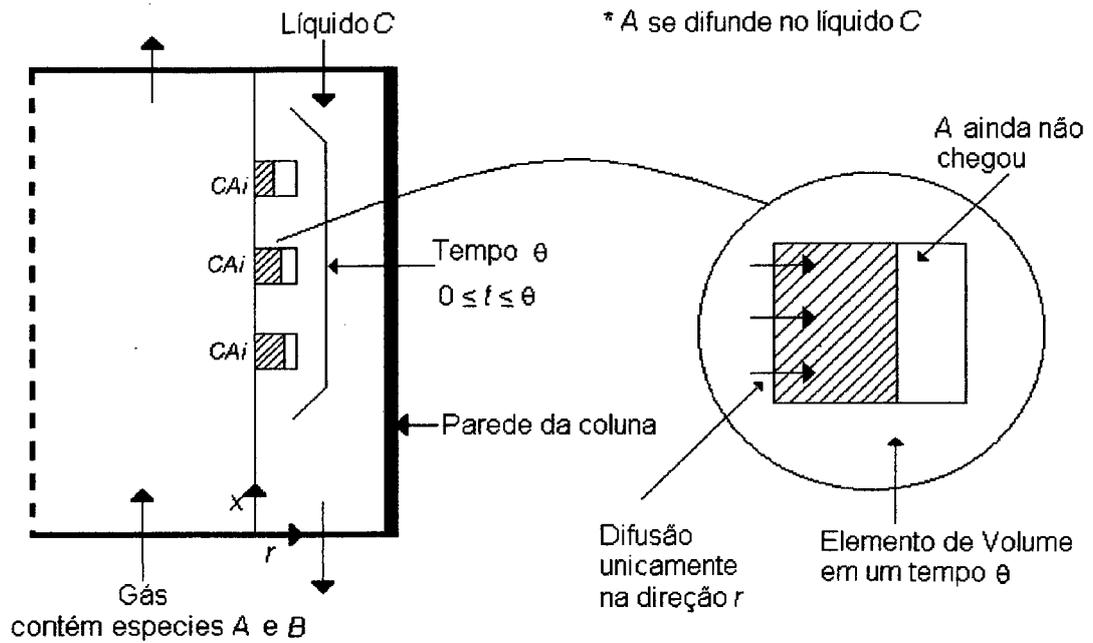


Figura 2.6 - Teoria da Penetração de Higbie (1935).

Um elemento de volume do líquido C entra em contato com o gás por um tempo  $\theta$  suficiente para que o gás A, que se difunde, alcance o lado posterior do elemento de volume de controle. Neste modelo, o tempo é constante para todos os volumes de controle de líquido.

A concentração do gás dissolvido no líquido à entrada da coluna é uniforme e igual a  $C_{A0}$ . Quando é estabelecido o contato entre o gás e o líquido, a concentração na interface é  $C_{Ai}$ . Durante o tempo  $\theta$ , o elemento de volume está submetido à difusão em estado não estacionário, com a penetração do soluto na direção  $r$ .

O coeficiente de transferência de massa proposto neste modelo é igual a:

$$K_{AB} = 2\sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi\theta}} \quad (2.2)$$

Danckwerts (1951) propôs a teoria da Renovação Superficial. Neste trabalho Danckwerts (1951) discute que a teoria de Higbie (1935), a qual considera o tempo constante de exposição dos volumes de fluido na interface, é um caso especial, pois na realidade os elementos estão expostos durante intervalos variáveis de tempo. A interface gás-líquido é constituída, portanto, por um conjunto de elementos superficiais, com diferentes tempos de exposição. A velocidade média por unidade de área superficial deve ser determinada mediante o somatório dos elementos de volumes individuais.

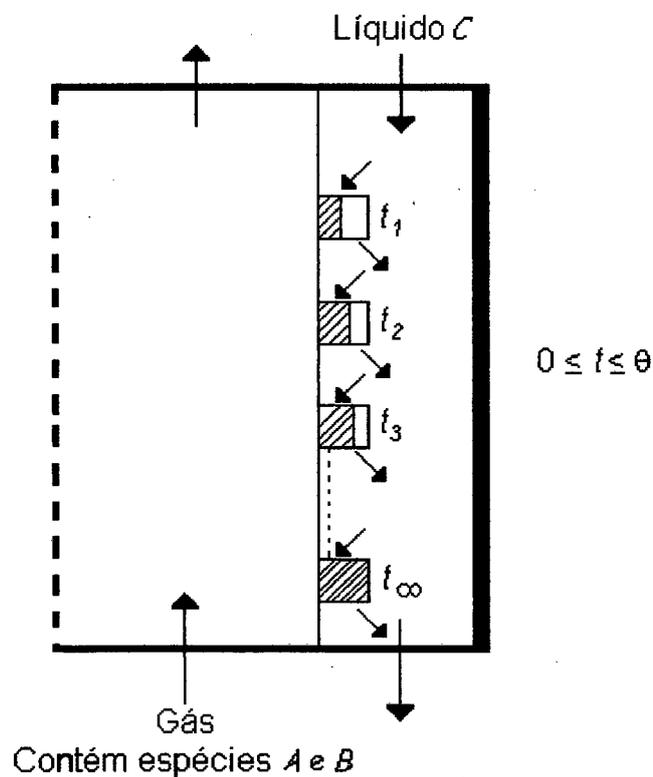


Figura 2.7 - Teoria de Renovação de superfície de Danckwerts (1951).

Conhecendo-se a probabilidade de que um elemento seja substituído por outro, independentemente do tempo que tenha permanecido na superfície, e sendo  $S$  o parâmetro do modelo que relaciona a substituição de elementos pertencentes aos

grupos da mesma exposição à transferência de massa, Danckwerts (1951) propõe a seguinte relação para o cálculo do fluxo molar da espécie química A :

$$N_{A,med} = (C_{Ai} - C_{A0}) \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi \theta}} S e^{-s\theta} d\theta = (C_{Ai} - C_{A0}) \sqrt{D_{AB} S} \quad (2.3)$$

sendo que,

$$K_{AB} = \sqrt{D_{AB} S} \quad (2.4)$$

Os modelos descritos acima permitem compreender com clareza o comportamento do processo de transferência de massa entre as fases em uma coluna de absorção, servindo de suporte a muitos estudos encontrados na literatura.

O problema de absorção em uma coluna de parede molhada pode ser tratado de diversas formas: analiticamente, numericamente ou experimentalmente.

Os métodos analíticos, quando aplicados na solução de problemas envolvendo escoamento de fluidos, com transferência de massa, tem como restrição a aplicação somente a problemas cujas hipóteses simplificativas o desviam demasiadamente do fenômeno físico real. Além disso, são aplicados, normalmente, a geometrias simples e condições de contorno simples. Obviamente, as soluções analíticas não são descartadas na totalidade e uma das importantes aplicações é a avaliação de casos limites de modelos numéricos.

A grande vantagem da experimentação em laboratório é o fato de se tratar com a configuração real, com a possibilidade de se observar novos fenômenos. Ela é, entretanto, de altíssimo custo e muitas vezes não pode ser realizada, por questões de segurança.

O uso de técnicas numéricas, por sua vez, praticamente não apresenta restrições, podendo resolver problemas com complicadas condições de contorno, definidos em geometrias arbitrárias e apresentando resultados com grande rapidez. Os dados obtidos devem ser, entretanto, confiáveis. Por isto é importante salientar que não possui validade uma metodologia numérica que não foi criteriosamente testada, via comparações com soluções já existentes, ou via experimentação de laboratório, de acordo com Maliska (1995).

Processos de absorção gás-líquido tem uma grande aplicação em equipamentos convencionais, tais como: bombas de calor, equipamentos de resfriamento e de ar condicionado, etc. Por isto, muitos pesquisadores tem dado grande importância aos estudos de absorção gás-líquido. Alguns estudos apresentam o desenvolvimento e a análise de uma fase (gasosa ou líquida), outros entretanto, consideram ambas as fases.

Andberg (1982), e Andberg e Vliet (1983) apresentam a solução para o tratamento do filme líquido LiBr-H<sub>2</sub>O. O modelo considera a parte térmica e mássica para este sistema.

Grossman (1983) apresenta a solução simultânea da equação de conservação de calor e massa, para o mesmo sistema, mas o modelo tem restrições no balanço térmico, para o caso em que a temperatura de entrada do absorvente é igual à temperatura da parede.

Yang e Wood (1992) apresentam um modelo numérico para a solução do problema da transferência simultânea de massa e calor, em um filme líquido descendente. No estudo, são considerados os sistemas LiCl-H<sub>2</sub>O e LiBr-H<sub>2</sub>O, os quais são freqüentemente empregados como líquidos refrigerantes. O modelo apresenta

resultados bastantes semelhantes aos apresentados por Andberg (1982), com a vantagem adicional de possuir uma formulação mais simples.

Ibrahim e Vinnicombe (1993) resolvem, utilizando um novo método híbrido, o qual combina um tratamento analítico com o método de Diferenças Finitas, as equações que descrevem o comportamento de um filme líquido descendente. As correntes do líquido absorvente e do vapor são injetadas no interior do absorvedor no mesmo sentido e em contracorrente com um líquido resfriante. O desempenho do absorvedor é medido em termos de um fator de efetividade  $E$ , número de unidades de transferência de massa, e da relação de capacidades caloríficas do líquido absorvente e do líquido resfriante. Neste caso é considerado igualmente o sistema LiBr-H<sub>2</sub>O. No estudo se indica como melhorar o desempenho de um absorvedor e quais são as condições ótimas para seu melhor funcionamento.

Yang e Jou (1995) avaliam o efeito da porosidade em um filme líquido descendente através de um meio poroso. O modelo numérico desenvolvido resolve simultaneamente as equações governantes dos processos de transferência de massa e de calor considerando, dentro das equações, um fator de porosidade e um fator de permeabilidade. Os resultados permitem estabelecer as condições ótimas de operação de um absorvedor provido de um sistema de resfriamento.

Silva *et al.* (1996) resolvem numericamente o problema de dessorção isotérmica, no sistema H<sub>2</sub>O/Ar/CO<sub>2</sub>, para uma corrente de água saturada com gás carbônico formando um filme líquido no sentido descendente da coluna, em contracorrente com um fluxo de ar saturado com água. A simulação numérica é feita utilizando-se o Método de Volumes Finitos. É resolvida unicamente a fase gasosa, obtendo-se o desenvolvimento dos perfis de concentração e velocidade em três

posições da coluna, para três vazões de ar diferentes. Os resultados obtidos na simulação são comparados com resultados obtidos experimentalmente.

Outros estudos são realizados com o objetivo de resolver conjuntamente as duas fases, líquida e gasosa, como é o caso do trabalho apresentado por Yang e Chen (1991), no qual é resolvido numericamente o problema de absorção em um filme líquido descendente, considerando-se o efeito da presença de um gás não-condensável. Neste trabalho é resolvido simultaneamente o problema da transferência de massa e de calor na coluna de absorção. O vapor de água, misturado com ar como gás não condensável, é absorvido por uma solução LiCl-H<sub>2</sub>O, a qual forma um filme líquido no sentido descendente. O método numérico empregado é o Método de Diferenças Finitas. Os resultados mostram que a presença de gases não-condensáveis reduz consideravelmente a velocidade de absorção. Isto é de muito interesse na operação de equipamentos de absorção, como por exemplo, as bombas de calor.

Martins e Pereira (1996) resolvem igualmente as duas fases em um problema de absorção gás-líquido. Neste caso, a espécie química absorvida é a amônia, a qual migra de uma mistura gasosa amônia-hidrogênio, para uma mistura líquida amônia-água. O gás e o líquido são introduzidos no sistema em contracorrente, e o método de solução empregado é o método de Diferenças Finitas. São obtidos os perfis de concentração e velocidade para ambas as fases. Também é resolvido o caso onde a fase gasosa é constituída de amônia pura, estabelecendo-se desta maneira o efeito do hidrogênio (gás não condensável), sobre o processo de transferência de massa.

## 2.2 - TÉCNICAS E METODOLOGIAS NUMÉRICAS.

A maior parte dos problemas de Engenharia Química possuem geometrias irregulares. Isto faz com que o sistema de coordenadas cartesianas, às vezes, seja impossível de ser utilizado, sendo, neste caso, a escolha do sistema de coordenadas generalizadas mais apropriada, por este sistema ser coincidente com a fronteira, evitando-se a necessidade de interpolação das condições de contorno.

Outro fator que é de grande importância na solução numérica de um determinado problema é a escolha da malha, podendo esta ser estruturada ou não estruturada. Em uma malha generalizada não estruturada, os pontos não seguem nenhuma regra de formação, e apresentam uma maior facilidade da concentração dos pontos em regiões de maior interesse. As malhas estruturadas, por sua vez apresentam como vantagem a conexão entre os pontos estabelecida por uma regra, o que facilita grandemente a implementação computacional. Ela é também mais adequada para esquemas iterativos de solução de sistemas lineares.

Tanto a malha estruturada como a não estruturada podem ser empregadas com o Método dos Volumes Finitos, dando origem a volumes elementares construídos diferentemente. Com o uso de malhas não estruturadas, o sistema coordenado é local e normalmente cartesiano, enquanto que no caso das malhas estruturadas a equação diferencial pode ser escrita no novo sistema de coordenadas, o que facilita a integração da equação diferencial no volume de controle, conforme Maliska (1992).

No presente trabalho é escolhido o Método de Volumes Finitos, que garante os princípios de conservação no nível elementar e no nível global.

Os principais passos para o desenvolvimento de algoritmos na solução de problemas de escoamento de fluidos incompressíveis são: a localização das variáveis na malha computacional, o tratamento do acoplamento pressão-velocidade, a obtenção das funções de interpolação entre os pontos discretos, e a solução do sistema de equações lineares.

São várias as possibilidades de localização das variáveis na malha computacional, conforme descrito por Shih, Tan e Hwang (1989), Silva(1991), Ulson de Souza, S.M.A.G (1992) e Maliska (1981). Os arranjos de variáveis na malha computacional mais utilizados são: variáveis co-localizadas e variáveis desencontradas.

No arranjo de variáveis co-localizadas, todas as variáveis estão localizadas no mesmo ponto, possuindo o mesmo volume de controle, conforme mostrado na Figura 2.8, sendo este esquema utilizado por Peric *et al.* (1988), Schneider (1986), Majumdar (1988), Marchi *et al.* (1989), Ulson de Souza, S.M.A.G (1992) e Bortoli *et al.* (1990)

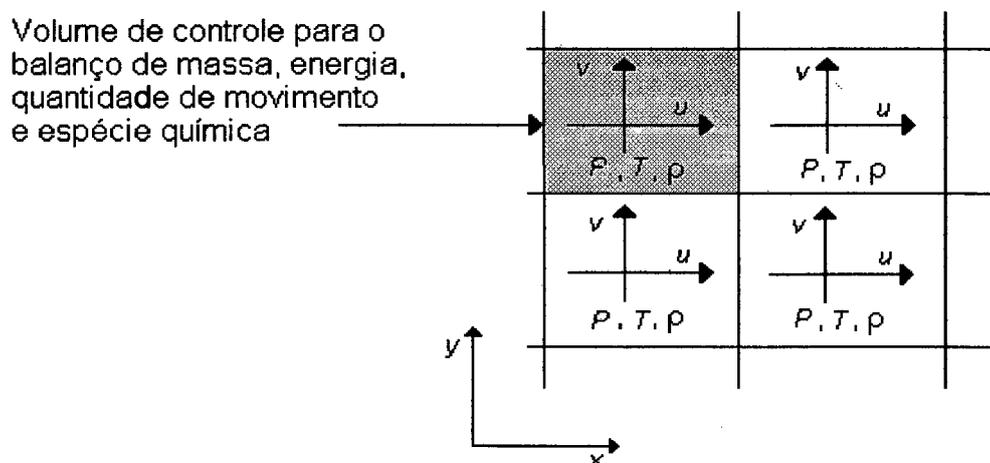


Figura 2.8 - Arranjo de variáveis co-localizadas.

No arranjo de variáveis desencontradas, as variáveis de interesse estão localizadas na malha computacional, conforme ilustra a Figura 2.9, onde as componentes da velocidade estão defasadas em relação a outras variáveis do problema ( $P$ ,  $T$ ,  $\rho$ ,  $\mu$ , etc).

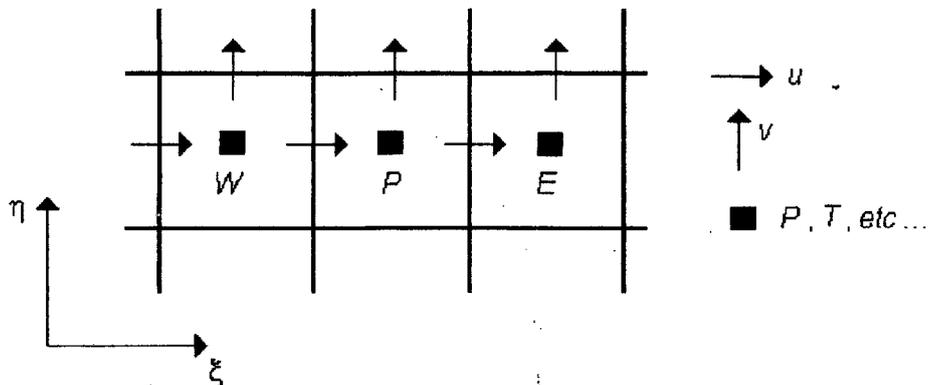


Figura 2.9- Localização das variáveis na malha computacional para o arranjo de variáveis desencontradas.

Ambos os esquemas de localização de variáveis na malha computacional apresentam vantagens e desvantagens. O uso do esquema de variáveis co-localizadas pode gerar o problema de oscilação do campo de pressão (“checkerboard”), conforme descrito por Patankar (1980). Na Figura 2.10 é mostrado o problema de “checkerboard” para um dado campo de pressão. Fisicamente este campo de pressão não é consistente e, pelo fato de todas as variáveis estarem localizadas em um mesmo ponto, esta inconsistência não será detectada pelas componentes da equação da conservação da quantidade de movimento. Para o volume de controle das componentes de velocidade centradas em  $P$ , o gradiente de pressão nas direções  $x$  e  $y$  será zero, pois os pontos envolvidos são  $P_E$  e  $P_W$ ,  $P_N$  e  $P_S$ , respectivamente.

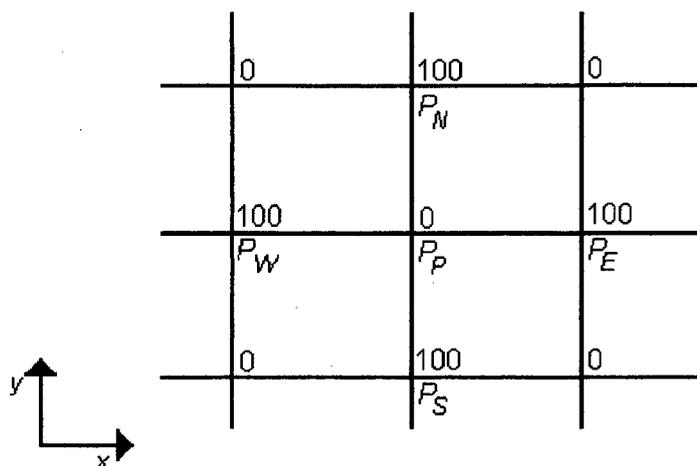


Figura 2.10 - Campo de pressão inconsistente.

No entanto, o arranjo de variáveis co-localizadas vem sendo cada vez mais utilizado por pesquisadores na solução de problemas envolvendo escoamento de fluidos incompressíveis, principalmente por sua simplicidade de implementação numérica e pelo fato dos problemas apresentados por Patankar (1980) estarem sendo paulatinamente resolvidos com o uso de funções de interpolação cada vez mais completas, que utilizam assim gradientes de pressão mais adequados.

O arranjo de variáveis desencontradas, devido à forma como armazena as variáveis no problema, introduz um adequado acoplamento entre a pressão e a velocidade para escoamento incompressíveis, mas por outro lado necessita de diferentes volumes de controle para as variáveis dependentes. Isto faz com que um número maior de informações geométricas necessitem ser armazenadas e, associado ao armazenamento de um número maior de informações geométricas, está a necessidade de um número maior de operações algébricas, como por exemplo o cálculo dos fluxos de massa nas interfaces do volume de controle. Este número maior de informações geométricas armazenadas e o número maior de operações

geométricas acarretam em um maior tempo de computação. Para a solução de problemas tridimensionais, o problema é ainda maior.

Os valores da propriedade de interesse  $\phi$  são conhecidos no centro dos volumes elementares; portanto, funções de interpolação devem ser assumidas entre os pontos nodais para determinar o valor da propriedade  $\phi$  nas faces do volume de controle, a qual é necessária para a solução da equação resultante discretizada no Método de Volumes Finitos.

O uso de Diferenças Centrais (CDS) é adequado no caso onde a difusão é dominante e para problemas com baixos números de Reynolds ou Peclet. Em situações nas quais se tem altas velocidades, dando origem a altos valores dos números de Reynolds e Peclet, a solução cria coeficientes negativos. A presença destes coeficientes associados à natureza do método iterativo usado para a solução do sistema linear pode impedir totalmente a obtenção da solução. Além disso, a presença de aproximações de alta ordem, como diferenças centrais, nos termos convectivos, quando estes forem dominantes, gera instabilidade, produzindo soluções que apresentam oscilações numéricas em regiões de grandes gradientes. É importante salientar que a existência de coeficientes negativos não significa a impossibilidade total de obter a solução. O uso de softwares mais elaborados e a forma de avançar a solução permitem a obtenção da solução, mesmo com coeficientes negativos, conforme relatado por Silva (1991).

A maneira de evitar os coeficientes negativos é usar uma outra aproximação para o termo convectivo. Uma aproximação de um lado só, por exemplo também conhecido como Upwind, resolve o problema.

O esquema UDS “Upwind” usa informações a montante, sendo apropriado quando a convecção é dominante. Este esquema evita o aparecimento de coeficientes negativos e, em conseqüência, desaparecem as oscilações numéricas na solução resultante. Por outro lado, os cálculos utilizando esquema “Upwind” freqüentemente sofrem grandes imprecisões devido à falsa difusão, ou difusão numérica, resultante de erros de truncamento, existência de termo fonte, presença de gradientes da variável dependente normais à linha de corrente e inclinação do vetor velocidade relativamente à malha.

O esquema exponencial proposto por Raithby e Torrance (1974) usa as funções de interpolação obtidas da solução exata do problema unidimensional de convecção e difusão. A dificuldade com o esquema exponencial é o tempo de computação para avaliar as exponenciais. Como a função de interpolação depende da velocidade (Peclet), será necessário calcular exponenciais para todas as interfaces dos volumes de controle. Uma variante deste método, com simplificações nos cálculos das exponenciais, criando expressões que procuram seguir a expressão exata, por faixas do número de Peclet, denominado “Power-Law”, foi proposto por Patankar (1980).

O esquema WUDS, desenvolvido por Raithby (1976), propõe uma função de interpolação, a qual é associada a dois coeficientes  $\alpha$  e  $\beta$ , que dependem do número de Peclet e servem como pesos entre a convecção e a difusão. Tomando a face leste como exemplo, o valor de  $\phi$  e de sua derivada nas faces do volume de controle pode ser dado como:

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \alpha_e\right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right) \phi_E \quad (2.5)$$

e,

$$\Gamma_e \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e = \beta_e \Gamma_e \left( \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) \quad (2.6)$$

Analisando-se as equações acima, pode-se notar que, para  $\alpha = 0$  e  $\beta = 1,0$ , o esquema de diferenças centrais é recuperado, enquanto que, para  $\alpha = 0,5$  e  $\alpha = -0,5$  com  $\beta = 0$  para ambos, recupera-se o esquema “upwind”, para velocidades positivas e negativas, respectivamente.

Raithby [1976] propôs as seguintes expressões para os coeficientes  $\alpha$  e  $\beta$  em função do número de Peclet :

$$\alpha_e = \frac{Pe^2}{10 + 2Pe^2} \quad (2.7)$$

$$\beta_e = \frac{1 + 0.005Pe^2}{1 + 0.05Pe^2} \quad (2.8)$$

A utilização do esquema WUDS evita oscilações espaciais e também a possível divergência da solução, mas pode ocorrer a difusão numérica devido a um aumento da velocidade fazendo  $\alpha$  tender a  $\frac{1}{2}$ .

O esquema WUDS-E é proposto por Uilson de Souza, A.A. (1992). Neste esquema, o qual é uma extensão do esquema WUDS, é considerado o efeito dos termos difusivo e convectivo na direção normal, bem como, do termo fonte, de pressão, para a avaliação das variáveis nas faces do volume de controle, os quais são desprezados no esquema WUDS.

A função de interpolação completa, proposta por Ulson de Souza, S.M.A.G (1992), é originária da própria equação diferencial que se deseja resolver. Esta função de interpolação possui as dimensões que o problema requer e considera todas as influências físicas presentes na equação diferencial a ser resolvida. O esquema é de difícil implementação devido à complexidade de seus coeficientes.

Outro fato bastante importante é o tratamento do acoplamento pressão-velocidade, o qual tem recebido muita atenção por muitos pesquisadores. O objetivo dos métodos desenvolvidos até agora é criar um algoritmo para avançar os valores de pressão. Praticamente, em todos os métodos, a seqüência de cálculo envolve dois passos distintos; no primeiro, as velocidades são corrigidas de maneira a satisfazer a equação de conservação da massa e, no segundo, as pressões são avançadas para completar aquele ciclo iterativo.

O método SIMPLE foi desenvolvido por Patankar e Spalding (1972), onde a pressão é escrita como a soma da melhor estimativa da pressão disponível,  $P^*$ , mais a correção  $P'$ , que é calculada de maneira a satisfazer a equação da conservação da massa.

$$P = P^* + P' \quad (2.9)$$

A equação (2.9) não tem uma fundamentação física que a suporte. Ela não é obtida nem a partir da equação da conservação da massa, nem da equação da conservação da quantidade de movimento. É apenas uma maneira simples de avançar os valores de  $P$ .

O método SIMPLER (SIMPLE revisado), proposto por Patankar (1980), apresenta uma nova maneira de calcular o campo de pressões em cada iteração, procurando associar o cálculo do campo de pressões com as equações que governam o fenômeno. Para calcular a pressão, as equações da conservação da quantidade de movimento, já aproximadas utilizando o Método de Volumes Finitos, para  $u$  e  $v$ , são escritas na seguinte forma:

$$u_p = \hat{u}_p - \frac{\Delta V}{A_p} \frac{\Delta P}{\Delta x} \quad (2.10)$$

$$v_p = \hat{v}_p - \frac{\Delta V}{A_p} \frac{\Delta P}{\Delta y} \quad (2.11)$$

As velocidades  $\hat{u}_p$  e  $\hat{v}_p$  são obtidas algebricamente utilizando as mais recentes velocidades calculadas. Procurando obter um campo de pressões que satisfaça as equações da conservação da quantidade de movimento e da conservação da massa, as equações (2.10) e (2.11) são introduzidas na equação da conservação da massa para obter uma equação para a pressão na forma:

$$A_p P_p = A_e P_e + A_w P_w + A_n P_n + A_s P_s - \nabla \cdot \vec{V} \quad (2.12)$$

A motivação principal do Método PRIME, conforme Maliska (1981), é a eliminação da solução de duas equações de Poisson, necessárias no Método SIMPLER, procurando realizar os dois passos (correção da velocidade e cálculo da pressão) de uma só vez. Isto pode ser conseguido, utilizando-se as equações (2.10)

e (2.11), não só para o cálculo da pressão, mas também para a correção da velocidade, tornando desnecessária a obtenção do campo  $P'$  de pressões para corrigir o campo de velocidade.

O Método SIMPLEC (SIMPLE consistente), proposto por Van Doormaal e Raithby (1984), tem o procedimento idêntico ao SIMPLE, diferindo apenas nos coeficientes das equações de correção das velocidades.

### **CAPÍTULO III - FORMULAÇÃO PROPOSTA**

Os problemas de escoamento de fluidos com transferência de massa em colunas de absorção, objeto de estudo deste trabalho, envolvem a solução das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química. Devido à complexidade das equações, não linearidades e forte acoplamento entre elas, faz-se necessário o uso de métodos numéricos para a solução do conjunto de equações resultantes.

Diversas metodologias numéricas podem ser empregadas para a solução do conjunto de equações diferenciais parciais resultantes da modelagem dos problemas em estudo, sendo escolhido neste trabalho o Método de Volumes Finitos.

Neste capítulo são apresentadas as equações de conservação no sistema de coordenadas cartesianas, e a transformação para o sistema de coordenadas generalizadas. Também são apresentadas as equações discretizadas através do Método de Volumes Finitos, o esquema utilizado para avaliação dos fluxos convectivos e difusivos nas faces dos volumes de controle, bem como, uma descrição completa do método de acoplamento entre a pressão e a velocidade.

### 3.1 - EQUAÇÕES GOVERNANTES

Na modelagem dos problemas de escoamento de fluidos com transferência de massa, é requerido o uso das equações de Navier Stokes, da conservação da massa e da espécie química, as quais são apresentadas a seguir, na forma vetorial,

Equação de conservação da massa:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \quad (3.1)$$

Equação de conservação da quantidade de movimento:

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} + \vec{B} \quad (3.2)$$

onde  $\vec{B}$  é o vetor dado pelas forças externas, por unidade de volume de fluido,  $\vec{\tau}$  é o tensor tensão.

Equação de conservação da espécie química :

$$\rho \frac{DW_A}{Dt} = \rho D_{AB} \nabla^2 W_A + r_A''' \quad (3.3)$$

onde  $D_{AB}$  é a difusividade do componente A no componente B,  $r_A'''$  é a taxa mássica de reação química do componente A, por unidade de volume de fluido e  $W_A$  é a fração mássica do componente A.

As equações (3.1), (3.2) e (3.3), escritas no sistema de coordenadas cartesianas, considerando-se o fluido newtoniano, com escoamento bidimensional, em regime laminar e as propriedades físicas do fluido constantes, podem ser expressas como

Equação de Conservação da Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad (3.4)$$

Equação de Conservação da Quantidade de Movimento na direção x :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v u) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial y}\right) - \frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x \quad (3.5)$$

Equação de Conservação da Quantidade de Movimento na direção y :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u v) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v v) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial y}\right) - \frac{\partial P}{\partial y} + \rho g_y \quad (3.6)$$

Equação de Conservação da Espécie Química A :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho W_A) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u W_A) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v W_A) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D_{AB} \frac{\partial W_A}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\rho D_{AB} \frac{\partial W_A}{\partial y}\right) + r_A''' \quad (3.7)$$

### 3.2 – TRANSFORMAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO PARA O SISTEMA DE COORDENADAS GENERALIZADAS.

As equações (3.4) a (3.7) são escritas para uma variável genérica  $\phi$  como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) = \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma^x \frac{\partial\phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma^y \frac{\partial\phi}{\partial y}) - P^\phi + S^\phi \quad (3.8)$$

onde a variável  $\phi$ ,  $P^\phi$ ,  $S^\phi$  e  $\Gamma^\phi$  possuem expressões específicas em cada uma das equações de conservação, de acordo com a Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Valores de  $\phi$ ,  $\Gamma^\phi$ ,  $P^\phi$  e  $S^\phi$  para as diversas equações de conservação.

Equação da Conservação	$\phi$	$\Gamma^\phi$	$P^\phi$	$S^\phi$
Massa	1	0	0	0
Quantidade de Movimento em x	u	$\mu$	$\frac{\partial P}{\partial x}$	$\rho g_x - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2}{3} \mu (\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right]$
Quantidade de Movimento em y	v	$\mu$	$\frac{\partial P}{\partial y}$	$\rho g_y - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{2}{3} \mu (\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right]$
Espécie Química	$W_A$	$\rho D_{AB}$	0	$r_A'''$

A maioria dos problemas de engenharia apresentam geometrias irregulares e complicadas, dificultando-se a aplicação de coordenadas cartesianas na solução destes problemas, devido ao fato das linhas coordenadas não serem coincidentes com a fronteira do domínio de cálculo, gerando, portanto, uma maior dificuldade na

implementação das condições de contorno. O programa computacional, com as equações escritas no sistema cartesiano de coordenadas, ficará extremamente dependente da geometria do problema. O uso de coordenadas generalizadas, por serem coincidentes com a fronteira, torna o programa computacional mais flexível.

A equação (3.8), escrita para uma variável genérica  $\phi$ , no sistema cartesiano de coordenadas, é transformada para o sistema de coordenadas generalizadas  $(\xi, \eta)$ . Esta transformação é feita utilizando-se a regra da cadeia.

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \quad (3.10)$$

Na obtenção das derivadas de maior ordem, é feita a aplicação sucessiva das equações (3.9) e (3.10).

A seguinte transformação pode ser empregada:

$$\xi = \xi(x, y) \quad (3.11)$$

$$\eta = \eta(x, y) \quad (3.12)$$

ou,

$$x = x(\xi, \eta) \quad (3.13)$$

$$y = y(\xi, \eta) \quad (3.14)$$

onde as métricas desta transformação podem ser obtidas através da função inversa, sendo que os diferenciais em cada eixo coordenado do domínio transformado são dados por

$$d\xi = \xi_x dx + \xi_y dy \quad (3.15)$$

$$d\eta = \eta_x dx + \eta_y dy \quad (3.16)$$

As equações (3.15) e (3.16) podem ser escritas na forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

A equação anterior é equivalente a:

$$[d^T] = [A][d^F] \quad (3.18)$$

onde  $[d^T]$  é a diferencial para o domínio transformado e  $[d^F]$  é a diferencial para o domínio físico.

Através dos diferenciais no plano físico, obtém-se:

$$\begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

ou,

$$[d^F] = [B][d^T] \quad (3.20)$$

$$\frac{[d^F]}{[B]} = [d^T] \Rightarrow [d^T] = [d^F][B^{-1}] \quad (3.21)$$

Comparando as equações (3.18) e (3.21) tem-se que

$$[A] = [B]^T = J \quad (3.22)$$

onde  $J$  é o Jacobiano da transformação

Aplicando-se a Regra de Cramer na equação (3.19), tem-se

$$d\xi = \frac{\begin{vmatrix} dx & x_\eta \\ dy & y_\eta \end{vmatrix}}{[B]} = J \begin{vmatrix} dx & x_\eta \\ dy & y_\eta \end{vmatrix} \quad (3.23)$$

ou,

$$d\xi = J(y_\eta dx - x_\eta dy) \quad (3.24)$$

Por comparação da equação (3.24) com a equação (3.15) tem-se

$$\xi_x = Jy_\eta \quad (3.25)$$

$$\xi_y = -Jx_\eta \quad (3.26)$$

Da mesma forma:

$$d\eta = \frac{\begin{vmatrix} x_\xi & dx \\ y_\xi & dy \end{vmatrix}}{[B]} = J \begin{vmatrix} x_\xi & dx \\ y_\xi & dy \end{vmatrix} \quad (3.27)$$

$$d\eta = J(x_\xi dy - y_\xi dx) \quad (3.28)$$

Comparando-se as equações (3.28) e (3.16), tem-se que

$$\eta_x = -Jy_\xi \quad (3.29)$$

$$\eta_y = Jx_\xi \quad (3.30)$$

Executando-se as simplificações e os agrupamentos necessários, são obtidas as equações bidimensionais, em coordenadas generalizadas que, de forma genérica, podem ser expressas por:

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \frac{1}{J} (\xi_x \rho u \phi + \xi_y \rho v \phi) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \frac{1}{J} (\eta_x \rho u \phi + \eta_y \rho v \phi) \right] + \frac{P^\phi}{J} = \\ = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \frac{1}{J} \left( \xi_x \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} + \xi_y \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \frac{1}{J} \left( \eta_x \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} + \eta_y \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] + \frac{S^\phi}{J} \end{aligned} \quad (3.31)$$

ou,

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial \xi}(\rho U \phi) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\rho V \phi) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ C_1 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ C_3 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right] - \hat{P}^\phi + \hat{S}^\phi \quad (3.32)$$

onde, 
$$\hat{P}^\phi = \frac{P^\phi}{J} \quad (3.33)$$

$$\hat{S}^\phi = \frac{S^\phi}{J} \quad (3.34)$$

As variáveis  $U$  e  $V$  são as componentes contravariantes do vetor velocidade, sem normalização métrica, sendo expressas em função das velocidades cartesianas como:

$$U = u y_\eta - v x_\eta \quad (3.35)$$

$$V = v x_\xi - u y_\xi \quad (3.36)$$

Os coeficientes  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$  são os coeficientes de transporte transformados, expressos por:

$$C_1 = \Gamma^\phi J\alpha \quad (3.37)$$

$$C_2 = -\Gamma^\phi J\beta \quad (3.38)$$

$$C_3 = \Gamma^\phi J\gamma \quad (3.39)$$

As componentes do tensor métrico da transformação,  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , são dadas por:

$$\alpha = x_\eta^2 + y_\eta^2 \quad (3.40)$$

$$\beta = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta \quad (3.41)$$

$$\gamma = x_\xi^2 + y_\xi^2 \quad (3.42)$$

Na Tabela 3.2 são apresentadas as expressões para os termos  $\hat{S}^\phi$  e  $\hat{P}^\phi$  nas equações de conservação.

Tabela 3.2 - Expressões correspondentes para  $\hat{P}^\phi$  e  $\hat{S}^\phi$ .

$\phi$	$\hat{P}^\phi$	$\hat{S}^\phi$
1	0	0
$u$	$\frac{\partial P}{\partial \xi} y_\eta - \frac{\partial P}{\partial \eta} y_\xi$	$\hat{S}^u$
$v$	$\frac{\partial P}{\partial \eta} x_\xi - \frac{\partial P}{\partial \xi} x_\eta$	$\hat{S}^v$
$W_A$	0	$\hat{S}^{W_A}$

As equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química, escritas para o novo sistema de coordenadas  $(\xi, \eta)$ , são dadas por

Equação de Conservação da Massa:

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi}(\rho U) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\rho V) = 0 \quad (3.43)$$

Equação de Conservação da Quantidade de Movimento na direção  $x$  :

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial \xi}(\rho Uu) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\rho V u) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ C_1 \frac{\partial u}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial u}{\partial \eta} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ C_3 \frac{\partial u}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial u}{\partial \xi} \right] - \frac{\partial P}{\partial \xi} y_{,\eta} + \frac{\partial P}{\partial \eta} y_{,\xi} + \hat{S}^u \end{aligned} \quad (3.44)$$

Equação de Conservação da Quantidade de Movimento na direção  $y$  :

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial \xi}(\rho Uv) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\rho Vv) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ C_1 \frac{\partial v}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial v}{\partial \eta} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ C_3 \frac{\partial v}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial v}{\partial \xi} \right] - \frac{\partial P}{\partial \eta} x_{,\xi} + \frac{\partial P}{\partial \xi} x_{,\eta} + \hat{S}^v \end{aligned} \quad (3.45)$$

Equação de Conservação da Espécie Química A :

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(\rho W_A) + \frac{\partial}{\partial \xi}(\rho U W_A) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\rho V W_A) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ C_1 \frac{\partial W_A}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial W_A}{\partial \eta} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ C_3 \frac{\partial W_A}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial W_A}{\partial \xi} \right] + \hat{S}^{WA} \end{aligned} \quad (3.46)$$

A solução do conjunto de equações de conservação é feita utilizando-se o Método de Volumes Finitos, exigindo a discretização do domínio de cálculo e a integração destas equações nos volumes elementares.

### 3.3 - INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO NOS VOLUMES DISCRETOS.

A equação (3.32) é integrada espacial e temporalmente sobre os diversos volumes elementares, obtendo-se assim uma equação para cada volume de controle.

As equações de conservação são integradas ao longo de um volume de controle delimitado por duas linhas de  $\xi$  constante e duas linhas de  $\eta$  constante, como mostra a Figura 3.1. É realizada também uma integração temporal, ao longo do intervalo de tempo,  $\Delta t$ .

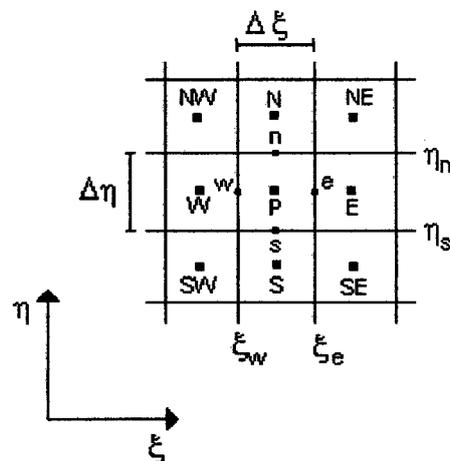


Figura 3.1 - Volume de controle genérico para integração

A equação resultante é expressa por:

$$\begin{aligned}
 & \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \frac{1}{J} \{ [\rho\phi]^{t+\Delta t} - [\rho\phi] \} d\eta d\xi + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \{ [\rho U\phi]_e - [\rho U\phi]_w \} d\eta dt + \\
 & + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \{ [\rho V\phi]_n - [\rho V\phi]_s \} d\xi dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \{ \hat{P}^\phi - \hat{S}^\phi \} d\eta d\xi dt = \\
 & = \int_t^{t+\Delta t} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left\{ \left[ C_1 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right]_e - \left[ C_1 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right]_w \right\} d\eta dt + \\
 & + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \left\{ \left[ C_3 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right]_n - \left[ C_3 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right]_s \right\} d\xi dt \quad (3.47)
 \end{aligned}$$

onde  $\Delta t$  é o intervalo de tempo arbitrário. Os termos entre colchetes do lado direito da equação (3.47) são os termos difusivos, os quais relacionam-se com a variação da variável  $\phi$  ao longo da direção normal às faces através das seguintes expressões:

$$\left[ \Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial\phi}{\partial\bar{n}} \right]_n = \left[ C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right]_n + \left[ C_3 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right]_n \quad (3.48)$$

$$\left[ \Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial\phi}{\partial\bar{n}} \right]_s = - \left[ C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right]_s - \left[ C_3 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right]_s \quad (3.49)$$

$$\left[ \Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial\phi}{\partial\bar{n}} \right]_e = \left[ C_1 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right]_e + \left[ C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right]_e \quad (3.50)$$

$$\left[ \Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial\phi}{\partial\bar{n}} \right]_w = - \left[ C_1 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right]_w - \left[ C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right]_w \quad (3.51)$$

Substituindo-se as equações (3.48) a (3.51) na equação (3.47), resulta:

$$\begin{aligned}
 & \int_{\xi_w}^{\xi_e} \frac{\eta n}{\eta_s} \frac{1}{J} \left\{ [\rho\phi]^{t+\Delta t} - [\rho\phi]^t \right\} d\eta d\xi + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left\{ [\rho U\phi]_e - [\rho U\phi]_w \right\} d\eta dt + \\
 & + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \left\{ [\rho V\phi]_n - [\rho V\phi]_s \right\} d\xi dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \frac{\eta n}{\eta_s} \left\{ \left[ \hat{P}^\phi - \hat{S}^\phi \right] \right\} d\eta d\xi dt = \\
 & = \int_t^{t+\Delta t} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left\{ \left[ \Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_e + \left[ \Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_w \right\} d\eta dt + \\
 & + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \left\{ \left[ \Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_n + \left[ \Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_s \right\} d\xi dt \quad (3.52)
 \end{aligned}$$

As seguintes hipóteses são admitidas para a realização das integrais na equação (3.52):

- os fluxos de massa nas faces  $e$ ,  $w$ ,  $n$  e  $s$  são uniformes ao longo de cada face.
- $\phi$  na face e sua derivada normal à face, as métricas,  $\Gamma^\phi$  e a pressão na face são uniformes ao longo de cada face.
- todos os termos, exceto  $\rho\phi$ , são constantes ao longo de  $\Delta t$  e são avaliados em  $t+\Delta t$ , o que implica em uma formulação totalmente implícita.
- $(\rho\phi)$  e  $\hat{S}^\phi$  são constantes no volume de controle.

O termo  $\dot{m}_{fi}$  é igual ao fluxo de massa na face  $i$ , dado por:

$$\dot{m}_{fe} = (\rho U)_e \Delta \eta \quad (3.53)$$

$$\dot{m}_{fw} = (\rho U)_w \Delta \eta \quad (3.54)$$

$$\dot{m}_{fs} = (\rho V)_s \Delta \xi \quad (3.55)$$

$$\dot{m}_{fn} = (\rho V)_n \Delta \xi \quad (3.56)$$

A massa do volume centrado no ponto  $P$  pode ser expressa por:

$$m_p = \frac{\rho_p \Delta \xi \Delta \eta}{J_p} \quad (3.57)$$

Admitindo-se as hipóteses acima e utilizando-se as definições dadas pelas equações (3.53) a (3.57), obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{m_P \phi_P - m_P^\circ \phi_P^\circ}{\Delta t} + \dot{m}_{fe} \phi_e - \dot{m}_{fw} \phi_w - \dot{m}_{fs} \phi_s + \dot{m}_{fn} \phi_n = & \left\{ \left[ \Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_e + \left[ \Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_w \right\} \Delta \eta + \\ & + \left\{ \left[ \Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_s + \left[ \Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_n \right\} \Delta \xi + \left\{ L[\hat{S}_p^\phi] - L[\hat{P}_p^\phi] \right\} \Delta \xi \Delta \eta \end{aligned} \quad (3.58)$$

O superscrito ( $^\circ$ ) representa os valores obtidos na iteração anterior; os subscritos  $e, w, n$  e  $s$  indicam as faces leste, oeste, norte e sul dos volumes de controle, respectivamente; o operador  $L[ ]$  representa a aproximação dos termos entre colchetes.

Os termos de pressão transformados podem ser escritos como:

$$L[\hat{P}_p^u] = \frac{[(P_{y_\eta})_e - (P_{y_\eta})_w]}{\Delta \xi} + \frac{[(P_{y_\xi})_s - (P_{y_\xi})_n]}{\Delta \eta} \quad (3.59)$$

$$L[\hat{P}_p^v] = \frac{[(P_{x_\xi})_n - (P_{x_\xi})_s]}{\Delta \eta} + \frac{[(P_{x_\eta})_w - (P_{x_\eta})_e]}{\Delta \xi} \quad (3.60)$$

Para o cálculo do termo de convecção da propriedade  $\phi$  através das faces do volume de controle, é necessário conhecer o valor de  $\phi$  na interface de interesse, assim como, o gradiente de  $\phi$ . Os valores de  $\phi$  são conhecidos no centro dos volumes

elementares e, portanto, funções de interpolação devem ser assumidas, sendo a função de interpolação WUDS uma das mais utilizadas.

A função de interpolação WUDS é utilizada ao longo deste trabalho.

### 3.4 - FUNÇÃO DE INTERPOLAÇÃO

O valor da propriedade  $\phi$ , nas faces do volume de controle, é obtida utilizando-se esquema WUDS, proposto por Raithby [1976], que fornece:

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_e\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e\right)\phi_E \quad (3.61)$$

$$\phi_w = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w\right)\phi_W + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_w\right)\phi_P \quad (3.62)$$

$$\phi_n = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_n\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n\right)\phi_N \quad (3.63)$$

$$\phi_s = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s\right)\phi_S + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_s\right)\phi_P \quad (3.64)$$

Para a aproximação do gradiente de  $\phi$  na interface, são utilizadas as seguintes expressões:

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right|_e = \bar{\beta}_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta\xi}\right) \quad (3.65)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_w = \bar{\beta}_w \left( \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta \xi} \right) \quad (3.66)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_n = \bar{\beta}_n \left( \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta \eta} \right) \quad (3.67)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_s = \bar{\beta}_s \left( \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta \eta} \right) \quad (3.68)$$

Os termos cruzados são aproximados por diferenças centrais, fornecendo as seguintes expressões:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_e = \frac{\phi_{NE} + \phi_N - \phi_{SE} - \phi_S}{4\Delta \eta} \quad (3.69)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_w = \frac{\phi_{NW} + \phi_N - \phi_{SW} - \phi_S}{4\Delta \eta} \quad (3.70)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_n = \frac{\phi_{NE} + \phi_E - \phi_{NW} - \phi_W}{4\Delta \xi} \quad (3.71)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_s = \frac{\phi_{SE} + \phi_E - \phi_{SW} - \phi_W}{4\Delta \xi} \quad (3.72)$$

onde  $\bar{\alpha}$  e  $\bar{\beta}$  são os coeficientes que dependem do problema físico e apresentam variação dentro do domínio de solução. As expressões para os coeficientes  $\bar{\alpha}$  e  $\bar{\beta}$  foram apresentadas no capítulo anterior, pelas equações (2.7) e (2.8).

Substituindo-se as equações (3.61) a (3.72), na equação (3.58), e considerando-se  $\Delta\eta = 1$  e  $\Delta\xi = 1$ , resulta:

$$a_p^\phi \phi_p = a_e^\phi \phi_E + a_w^\phi \phi_W + a_n^\phi \phi_N + a_s^\phi \phi_S + a_{ne}^\phi \phi_{NE} + a_{se}^\phi \phi_{SE} + a_{nw}^\phi \phi_{NW} + a_{sw}^\phi \phi_{SW} + b_p^\phi \quad (3.73)$$

onde

$$a_p^\phi = \frac{m_p}{\Delta t} + a_e^\phi + a_w^\phi + a_n^\phi + a_s^\phi \quad (3.74)$$

$$a_w^\phi = \left( \frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w \right) \dot{m}_{rw} + C_1 \bar{\beta}_w + \frac{C_2}{4} \Big|_n - \frac{C_2}{4} \Big|_s \quad (3.75)$$

$$a_e^\phi = - \left( \frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e \right) \dot{m}_{re} + C_1 \bar{\beta}_e - \frac{C_2}{4} \Big|_n + \frac{C_2}{4} \Big|_s \quad (3.76)$$

$$a_n^\phi = - \left( \frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n \right) \dot{m}_{rn} + C_3 \bar{\beta}_n - \frac{C_2}{4} \Big|_e + \frac{C_2}{4} \Big|_w \quad (3.77)$$

$$a_s^\phi = \left( \frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s \right) \dot{m}_{rs} + C_3 \bar{\beta}_s + \frac{C_2}{4} \Big|_e - \frac{C_2}{4} \Big|_w \quad (3.78)$$

$$a_{ne}^\phi = - \frac{C_2}{4} \Big|_e - \frac{C_2}{4} \Big|_n \quad (3.79)$$

$$a_{nw}^{\phi} = \frac{C_2}{4} \Big|_w + \frac{C_2}{4} \Big|_n \quad (3.80)$$

$$a_{se}^{\phi} = \frac{C_2}{4} \Big|_s + \frac{C_2}{4} \Big|_e \quad (3.81)$$

$$a_{sw}^{\phi} = -\frac{C_2}{4} \Big|_w - \frac{C_2}{4} \Big|_s \quad (3.82)$$

$$b_p^{\phi} = -\frac{\Delta V}{J} L[P_p^{\phi}] + \frac{\Delta V}{J} L[S_p^{\phi}] + \frac{m_p^{\circ} \phi_p^{\circ}}{\Delta t} \quad (3.83)$$

### 3.5 - ACOPLAMENTO ENTRE PRESSÃO - VELOCIDADE

Na solução das equações, é necessário que cada variável tenha uma equação evolutiva para ser avançada. As variáveis  $u$ ,  $v$  podem ser avançadas pela equação da conservação da quantidade de movimento em cada direção. O avanço da pressão é dependente do tipo de escoamento, compressível ou incompressível. Para a obtenção da solução das equações de conservação, é necessária a escolha de um método para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade. Existem, atualmente, diversos métodos para tratar deste acoplamento. O objetivo de todos eles é criar uma equação para a pressão que permita que o processo iterativo avance, observando a conservação da massa.

Neste trabalho é utilizado o método SIMPLEC, proposto por Van Doormal e Raithby [1984], para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade.

A equação de conservação da quantidade de movimento na direção  $x$  pode ser escrita na forma:

$$a_p u_p = \sum_{nb} a_{nb} u_{NB} + b_p^u - L[\hat{P}_p]^u \quad (3.84)$$

Resolvendo-se a equação da conservação da quantidade de movimento para um campo de pressão estimado,  $P^*$ , são obtidas as componentes da velocidade,  $u^*$ , resultando na seguinte expressão:

$$a_p u_p^* = \sum_{nb} a_{nb} u_{NB}^* + b_p^u - L[\hat{P}_p^*]^u \quad (3.85)$$

Utilizando-se o campo de pressão correto, mas que normalmente é desconhecido, as componentes de velocidade,  $u$ , obtidas da equação (3.84), satisfarão a equação de conservação da massa, enquanto que os valores da componente  $u^*$ , obtidos através da equação (3.85), não irão satisfazer à equação de conservação da massa. Portanto, é necessária uma correção da pressão estimada,  $P' = P - P^*$ , para corrigir o campo de velocidade  $u^*$ , através de  $u' = u - u^*$ .

Subtraindo-se a equação (3.85) da equação (3.84), obtém-se

$$a_p u_p' = \sum_{nb} a_{nb} u_{NB}' - L[\hat{P}_p']^u \quad (3.86)$$

Os campos de pressão,  $P$ , e da componente de velocidade  $u$ , que satisfazem a equação de conservação da massa e da quantidade de movimento, na direção  $x$ , são :

$$u_p = u_p^* + u_p' \quad (3.87)$$

$$P_p = P_p^* + P_p' \quad (3.88)$$

Subtraindo-se, de ambos os lados da equação (3.86), o termo  $\sum_{nb} a_{nb} u'_p$ , obtém-se

$$\left( a_p - \sum_{nb} a_{nb} \right) u'_p = \sum_{nb} a_{nb} (u'_{NB} - u'_p) - L[\hat{P}_p]^u \quad (3.89)$$

No método SIMPLEC, o termo  $\sum_{nb} a_{nb} (u'_{NB} - u'_p)$ , da equação (3.89), é desprezado, resultando a seguinte expressão para a correção da velocidade:

$$u'_p = -\frac{1}{\left( a_p - \sum_{nb} a_{nb} \right)} L[\hat{P}_p]^u \quad (3.90)$$

ou,

$$u'_p = -d_p^u L[\hat{P}_p]^u \quad (3.91)$$

onde,

$$d_p^u = \frac{1}{\left( a_p - \sum_{nb} a_{nb} \right)} \quad (3.92)$$

Expressão análoga à equação (3.91) pode ser escrita para a correção da componente da velocidade na face leste do volume de controle,  $u'_e$ ,

$$u'_e = -d_e^u L[\hat{P}_e]^u \quad (3.93)$$

onde

$$d_e^u = \frac{d_p^u + d_E^u}{2} \quad (3.94)$$

Substituindo-se  $u'_e$  por  $u_e - u'_e$ , na equação (3.93), obtém-se

$$u_e = u'_e - d'_e L[P'_e] \quad (3.95)$$

Da mesma forma, para a componente de velocidade,  $v_e$ , pode escrever-se que

$$v_e = v'_e - d'_e L[P'_e] \quad (3.96)$$

onde os termos  $L[\hat{P}'_e]$  e  $L[\hat{P}'_e]$  são dados por :

$$L[\hat{P}'_e] = y_{\eta} \Big|_e (P'_E - P'_P) - \frac{y_{\xi} \Big|_e (P'_{NE} + P'_N)}{4} + \frac{y_{\xi} \Big|_e (P'_S + P'_{SE})}{4} \quad (3.97)$$

$$L[\hat{P}'_e] = \frac{x_{\xi} \Big|_e}{4} \{ (P'_N + P'_{NE}) - (P'_S + P'_{SE}) \} - x_{\eta} \Big|_e (P'_E - P'_P) \quad (3.98)$$

A componente contravariante da velocidade,  $U_e$ , pode ser expressa por

$$U_e = U'_e - d'_e \{ L[\hat{P}'_e] y_{\eta} \Big|_e - L[\hat{P}'_e] x_{\eta} \Big|_e \} \quad (3.99)$$

onde,

$$U'_e = u'_e y_{\eta} \Big|_e - v'_e x_{\eta} \Big|_e \quad (3.100)$$

Expressões análogas às equações (3.93), (3.96) e (3.99) podem ser obtidas para as componentes contravariantes e cartesianas da velocidade, nas demais faces do volume de controle.

A equação de conservação da massa pode então ser escrita como:

$$(\rho U)_e - (\rho U)_w + (\rho V)_n - (\rho V)_s = 0 \quad (3.101)$$

Substituindo-se a equação (3.99) e as equações análogas para as outras faces do volume de controle, na equação de conservação da massa, equação (3.101), obtém-se a seguinte expressão para a correção da pressão:

$$a_p^p P_p = a_E^p P_E + a_W^p P_W + a_N^p P_N + a_S^p P_S + a_{NE}^p P_{NE} + a_{NW}^p P_{NW} + a_{SE}^p P_{SE} + a_{SW}^p P_{SW} + b_p^p \quad (3.102)$$

onde,

$$a_E^p = \rho_o \alpha_o d_o^u - \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} + \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (3.103)$$

$$a_W^p = \rho_w \alpha_w d_w^u + \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} - \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (3.104)$$

$$a_N^p = \rho_n \gamma_n d_n^v - \frac{\rho_o \beta_o d_o^u}{4} + \frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} \quad (3.105)$$

$$a_S^p = \rho_s \gamma_s d_s^v + \frac{\rho_o \beta_o d_o^u}{4} - \frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} \quad (3.106)$$

$$a_{NE}^p = -\frac{\rho_o \beta_o d_o^u}{4} - \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} \quad (3.107)$$

$$a_{NW}^P = \frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} + \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} \quad (3.108)$$

$$a_{SE}^P = \frac{\rho_e \beta_e d_e^u}{4} + \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (3.109)$$

$$a_{SW}^P = -\frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} - \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (3.110)$$

$$b_p^P = -\rho_e U_e^* + \rho_w U_w^* - \rho_n V_n^* + \rho_s V_s^* \quad (3.111)$$

e,

$$a_p^P = a_E^P + a_W^P + a_N^P + a_S^P + a_{NE}^P + a_{NW}^P + a_{SE}^P + a_{SW}^P \quad (3.112)$$

Os coeficientes  $d_e^u$ ,  $d_w^u$ ,  $d_n^v$  e  $d_s^v$  podem ser dados por

$$d_e^u = \frac{d_p^u + d_E^u}{2} \quad (3.113)$$

$$d_w^u = \frac{d_p^u + d_W^u}{2} \quad (3.114)$$

$$d_n^v = \frac{d_p^v + d_N^v}{2} \quad (3.115)$$

$$d_s^v = \frac{d_p^v + d_S^v}{2} \quad (3.116)$$

onde,

$$d_p^u = d_p^v = \frac{1}{a_p - \sum_{nb} a_{nb}} \quad (3.117)$$

Para a solução do sistema de equações lineares obtido através da equação (3.102), é utilizado o método MSI modificado, proposto por Schneider e Zedan [1981].

O ciclo iterativo completo para resolver o acoplamento pressão-velocidade, usando o método SIMPLEC, é o seguinte:

- a - Estimar campos de velocidades e determinar o campo de pressão ( $P^*$ ),
- b - Calcular os coeficientes das equações de quantidade de movimento para  $u$  e  $v$ ,
- c - Resolver as equações de conservação de quantidade de movimento, usando  $P^*$ , obtendo  $u^*$  e  $v^*$ ,
- d - Obter  $P'$ ,
- e- Corrigir  $u^*$  e  $v^*$ , obtendo o campo de velocidades que satisfaz a equação da conservação da massa,
- f- Calcular  $P$  através da equação (3.88),
- g- Resolver as equações de conservação para as outras variáveis, tais como, concentração e, se o problema é térmico, temperatura,
- h - Fazer  $P^*=P$  e recomeçar no item b até a convergência.

### 3.6 - AVALIAÇÃO DOS FLUXOS MÁSSICOS NAS FACES DOS VOLUMES DE CONTROLE

É preciso o conhecimento do fluxo mássico nas faces do volume de controle; para isto é necessário fazer uma interpolação a partir dos valores dos pontos vizinhos.

O esquema para avaliação do fluxo de massa nas faces do volume de controle, proposto por Marchi *et al.* [1989], é utilizado neste trabalho. A obtenção das equações será descrita para a face leste do volume de controle, conforme ilustrado na Figura 3.2, podendo ser estendido para as faces norte, sul e oeste, de maneira análoga.

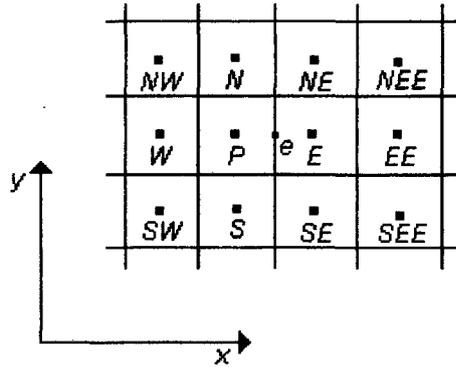


Figura 3.2 - Volume de controle para a obtenção do fluxo de massa na face leste.

As equações de conservação da quantidade de movimento, nas direções  $x$  e  $y$ , escritas para a face leste do volume de controle, são obtidas utilizando-se as seguintes expressões:

$$u_e = \frac{1}{2a_{Pe}} \left[ \sum_{nb} a_{nb} u_{NB} \Big|_P + \sum_{nb} a_{nb} u_{NB} \Big|_E + b^u \Big|_P + b^u \Big|_E \right] - \frac{1}{a_{Pe}} \hat{P}^u \quad (3.118)$$

e,

$$v_e = \frac{1}{2a_{Pe}} \left[ \sum_{nb} a_{nb} v_{NB} \Big|_P + \sum_{nb} a_{nb} v_{NB} \Big|_E + b^v \Big|_P + b^v \Big|_E \right] - \frac{1}{a_{Pe}} \hat{P}^v \quad (3.119)$$

onde o termo fonte  $a_{Pe}$  é calculado através de uma interpolação linear entre os termos  $a_{PP}$  e  $a_{PE}$ . O termo  $a_{PP}$  é o coeficiente central  $a_P$  do volume de controle  $P$  e o termo  $a_{PE}$  é o coeficiente central  $a_P$  do volume de controle  $E$ .

A obtenção das componentes do vetor velocidade na face leste do volume de controle, através das equações (3.118) e (3.119), envolve os oito pontos vizinhos ao ponto  $P$  e os oito pontos vizinhos ao ponto  $E$ , bem como, os pontos  $P$  e  $E$ .

Para a resolução da equação de conservação da massa, é necessário conhecer as componentes contravariantes do vetor velocidade nas faces dos volumes de controle. Para a face leste, utilizando-se as equações (3.118) e (3.119), pode-se escrever que

$$U_e = u_e y_\eta \Big|_e - v_e x_\eta \Big|_e \quad (3.120)$$

$$V_n = v_n x_\xi \Big|_n - u_n y_\xi \Big|_n \quad (3.121)$$

De forma análoga, podem ser obtidas as componentes contravariantes da velocidade nas outras faces dos volumes de controle.

### 3.7 - APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO

A resolução acertada de um problema de engenharia depende diretamente da compreensão física do problema, ligada à aplicação correta das condições de contorno.

O processo de aplicação das condições de contorno está extremamente ligado à localização das variáveis na malha computacional.

A Figura 3.3 mostra uma malha bidimensional com volumes fictícios.

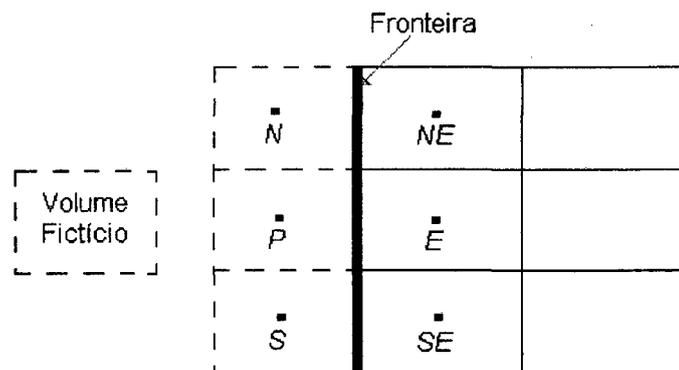


Figura 3.3 - Volumes fictícios para as condições de contorno

O uso de volumes fictícios é uma prática atraente pela facilidade de implementação, mas tem, como inconveniência, o aumento do número de incógnitas. Por outro lado, o uso de volumes fictícios simplifica o algoritmo numérico pois todos os volumes internos podem ser tratados por um único procedimento.

Quando o valor da propriedade  $\phi$  na face leste ( $\phi_e$ ) for prescrito, então a seguinte equação pode ser escrita:

$$\phi_o = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (3.122)$$

ou ainda,

$$\phi_P = 2\phi_o - \phi_E \quad (3.123)$$

A equação (3.123) é da forma :

$$A_P \phi_P = A_e \phi_e + B_e \quad (3.124)$$

Comparando-se as equações (3.124) e (3.123), obtém-se:

$$A_P = 1,0 \quad A_e = -1,0 \quad B_e = 2 \phi_o \quad (3.125)$$

O fluxo da propriedade na fronteira pode ser escrito como

$$F_\phi = \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3.126)$$

Quando o fluxo for prescrito, a seguinte equação, pode ser escrita:

$$F_\phi = \Gamma_\phi \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \quad (3.127)$$

$$\phi_p = \phi_e - \frac{F_\phi \Delta x}{\Gamma_\phi} \quad (3.128)$$

Portanto, quando se utiliza uma aproximação em diferenças centrais, tem-se os seguintes valores para os coeficientes:

$$A_p = 1,0 \quad A_e = 1,0 \quad B_e = -\frac{F_\phi \Delta x}{\Gamma_\phi} \quad (3.129)$$

Para avaliação da pressão nas fronteiras, é empregada uma extrapolação linear. Para o cálculo da pressão na face do volume de controle da fronteira leste em função do valor da pressão nos pontos  $P$  e  $W$ , conforme ilustra a Figura 3.4, pode-se escrever que

$$P_e = \frac{3}{2}P_p - \frac{1}{2}P_w \quad (3.130)$$

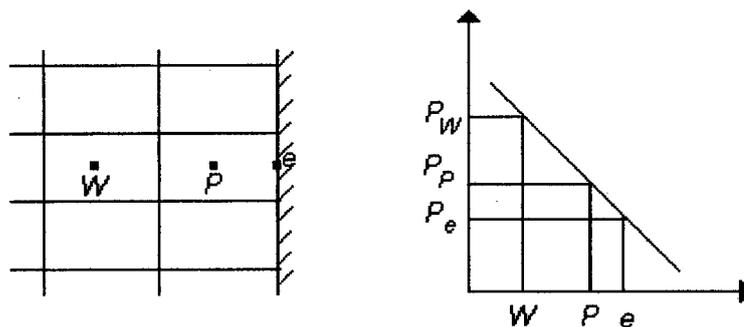


Figura 3.4 – Extrapolação linear da pressão para a fronteira leste do volume de controle.

A seguir serão apresentados os principais resultados obtidos no presente trabalho.

## CAPÍTULO IV – RESULTADOS

Neste capítulo são apresentadas as soluções de três problemas envolvendo a separação de um componente de interesse em um sistema gás-líquido, que tem lugar em colunas de absorção, utilizando a metodologia numérica apresentada no capítulo anterior.

No primeiro dos casos, é resolvido o problema da absorção da amônia de uma mistura gasosa amônia-hidrogênio, para uma mistura líquida amônia-água. Os resultados obtidos são comparados com os resultados encontrados por Martins e Pereira (1996), os quais utilizam o Método de Diferenças Finitas.

No segundo caso, é estudada a dessorção de gás carbônico contido numa mistura gás carbônico-água para uma mistura ar-gás carbônico. Neste caso, os resultados numéricos são comparados com os resultados experimentais obtidos no Laboratório de Transferência de Massa, LABMASSA/EQA/UFSC.

Por último, é resolvido o problema de umidificação ar-água efetuada em condições isotérmicas em uma coluna de parede molhada, para várias temperaturas. Os

resultados obtidos na simulação são comparados com os dados obtidos experimentalmente em uma coluna de parede molhada, no LABMASSA.

#### 4.1 -AVALIAÇÃO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS

Para avaliar as propriedades físicas dos componentes puros das misturas líquida e gasosa, são utilizadas tabelas, gráficos e correlações encontradas na literatura.

A seguir são apresentadas as correlações utilizadas para a estimativa das seguintes propriedades: massa específica, viscosidade e difusividade nas fases gasosa e líquida.

A massa específica na fase gasosa pode ser estimada a partir da equação de estado:

$$\rho_i = \frac{PM_i}{R^*T} \quad (4.1)$$

onde,  $\rho_i$  = massa específica do componente  $i$ ,

$M_i$  = peso molecular do componente  $i$ ,

$P$  = pressão do sistema,

$T$  = temperatura do sistema,

$R^*$  = constante universal dos gases ideais.

A viscosidade dos componentes puros da fase gasosa pode ser encontrada em tabelas disponíveis em Perry e Green (1984), Geankoplis (1983) e Bird *et al.* (1960).

Para avaliar a viscosidade da mistura gasosa, é empregada a equação semi-empírica de Wilke, conforme Bird *et al.* (1960).

$$\mu_{mistura} = \frac{\sum_{i=1}^n X_i \mu_i}{\sum_{j=1}^n X_j \phi_{ij}} \quad (4.2)$$

onde,

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left( 1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-\frac{1}{2}} \left[ 1 + \left( \frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{M_j}{M_i} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2 \quad (4.3)$$

onde,  $\mu_i$  é a viscosidade do componente  $i$ ;  $\mu_j$  é a viscosidade do componente  $j$ ;  $M_i$  é o peso molecular do componente  $i$ ;  $M_j$  é o peso molecular do componente  $j$ ;  $x_i$  é a fração molar do componente  $i$ ; e  $x_j$  é a fração molar do componente  $j$ .

A difusividade do componente  $A$  no componente  $B$ , na fase gasosa, é determinada a partir da correlação de Chapman-Enskog, de acordo com Geankoplis (1983).

$$D_{AB} = \frac{1,8583 * 10^{-7} \sqrt{T^3 \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_{DAB}} \quad (4.4)$$

onde  $D_{AB}$  é a difusividade mássica do componente A no componente B, [m<sup>2</sup>/s]; T é a temperatura do sistema [K];  $\sigma_{AB}$  é o diâmetro de colisão [Å];  $\Omega_{D_{AB}}$  é a integral de colisão [adimensional]; P é a pressão absoluta [atm];  $M_A$  é o peso molecular do componente A [kg/kgmol]; e,  $M_B$  é o peso molecular do componente B [kg/kgmol].

A massa específica dos componentes da fase líquida pode ser determinada a partir de tabelas, na temperatura correspondente, conforme Perry e Green (1984).

A viscosidade dos componentes puros na fase líquida é determinada a partir de tabelas, na temperatura correspondente, conforme Geankoplis (1983), e Perry e Green (1984).

A avaliação da viscosidade da mistura é estabelecida utilizando-se a equação de McAllister generalizada, de acordo com Reid *et al.* (1977).

$$f(\mu_{mistura})_L = \sum_i x_i f(\mu_i)_L \quad (4.5)$$

onde,  $f(\mu)_L = \ln \mu_L$ ;  $x_i$  é a fração molar do componente  $i$ . Para uma mistura de dois componentes, tem-se

$$\ln \mu_{mistura} = x_1 \ln \mu_1 + x_2 \ln \mu_2 \quad (4.6)$$

onde  $\mu_{mistura}$  é a viscosidade da mistura;  $x_1$  é a fração molar do componente 1;  $x_2$  é a fração molar do componente 2;  $\mu_1$  é a viscosidade do componente 1 puro; e,  $\mu_2$  é a viscosidade do componente 2 puro.

Para a determinação da difusividade mássica na fase líquida, diversas correlações podem ser encontradas na literatura. Neste trabalho são utilizadas duas correlações. A primeira e mais conhecida é a correlação de Wilke e Chang, de acordo com Zarzyckie e Chachuk (1993).

$$\frac{D_{AB}^0 \mu_B}{T} = 1,17 * 10^{-16} \frac{[\Psi_B M_B]^{0,5}}{[V_{SA}]^{0,6}} \quad (4.7)$$

onde  $V_{SA}$  é o volume molar do soluto A no ponto normal de ebulição [ $m^3/kgmol$ ];  $\Psi_B$  é o parâmetro de associação para o solvente [adimensional], sendo igual a 2,6 para água como solvente; 1,9 para metanol como solvente; 1,5 para etanol como solvente; 1,0 para solventes não associados tais como o benzeno e eter etílico;  $M_B$  é o peso molecular do solvente [ $kg/kgmol$ ];  $\mu_B$  é a viscosidade do solvente [ $kg/m.s$ ];  $T$  é a temperatura em K; e,  $D_{AB}^0$  é a difusividade de A, em solução diluída no solvente B, [ $m^2/s$ ].

Na Tabela 4.1 são apresentados os volumes atômicos e volumes molares de algumas substâncias, na temperatura normal de ebulição.

Tabela 4.1 - Volumes atômicos e volumes molares no ponto normal de ebulição.

Átomo ou Estrutura	$V_{S1} * 10^{-3}$ [m <sup>3</sup> /kgmol]	Substância	$V_{S1} * 10^{-3}$ [m <sup>3</sup> /kgmol]
C	14,8	Hidrogênio	14,3
H	3,7	Oxigênio	25,6
O		Nitrogênio	31,2
ligação	7,4	Óxido Nítrico	23,6
ligação com N, P, S	8,3	Óxido Nitroso	36,4
em esteres e éters		Acido Sulfídrico	32,9
- metil	9,1	Ar	29,9
- etil	9,9	Óxido de Carbono	30,7
- grandes esteres	11,0	Amônia	25,8
em -O- ácidos	12,0	Cl <sub>2</sub>	48,4
em álcoois	7,2	Br	53,2
N em aminas		I <sub>2</sub>	71,5
- primárias	10,5	Dióxido de Enxofre	44,8
- secundárias	12,0	Dióxido de Carbono	34,0
Si	32,0	Água	18,9
P	27,0	Metanol	42,7
S	25,6	Etanol	62,6
F	8,7	n-Propanol	81,7
Cl			
R-Cl	21,6		
R-CHCl-R	24,6		
Bromo	27,0		
Iodo	37,0		
Anel			
três-membros	-6,0		
quatro-membros	-8,5		
cinco-membros	-11,5		
seis-membros	-15,0		
Naftaleno	-30,0		
Antraceno	-47,0		

A segunda correlação empregada é a correlação de Nakanishi, a qual apresenta bons resultados no tratamento de solutos polares, de acordo com Zarzycki e Chachuck (1993), dada por:

$$\frac{D_{AB}^0 \mu_B}{T} = \frac{9,97 * 10^{-16} V_A^{-1/3}}{(I_A Q_A)^{1/3}} + 2,40 * 10^{-15} \frac{A_B S_B V_B}{I_A S_A Q_A V_A} \quad (4.8)$$

onde  $\mu_B$  é a viscosidade do solvente B [kg/m s]; T é a temperatura em K;  $D_{AB}^0$  é difusividade de A, em solução diluída no solvente B, [m<sup>2</sup>/s];  $A_B$  é o parâmetro de associação para solventes associados [adimensional];  $I_A$  é o parâmetro de interação para solutos polares;  $V_A = \alpha V_{SA}$ , sendo  $\alpha$  igual a 0,894 para sólidos e igual a 1,065 para gases;  $V_{SA}$  é o volume molar para o soluto [m<sup>3</sup>/kgmol];  $V_B$  é o volume molar do solvente B [m<sup>3</sup>/kgmol];  $S_A$  e  $S_B$  são os fatores de forma para parafinas;  $Q_A$  é o fator de correção para gases com baixo peso molecular.

Na Tabela 4.2 são dados os valores para os parâmetros de correção usualmente empregados.

Tabela 4.2 - Fatores de correção  $I_A$ ,  $S_A$ ,  $Q_A$ ,  $A_B$  e  $S_B$ .

Composto ou grupos de compostos	como soluto		como solvente		
	$I_A$	$S_A$	$Q_A$	$A_B$	$S_B$
Água	2,8(1,8) <sup>d</sup>	1,0	1,0	2,8	1,0
Metanol	2,2(1,5)	1,0	1,0	2,0	1,0
Etanol	2,5(1,5)	1,0	1,0	2,0	1,0
Alifático					
Álcoois monohídricos	1,5	1,0	1,0	1,8	1,0
Etileno Glicol e Ácidos Orgânicos <sup>a</sup>	2,0	1,0	1,0	2,0	1,0
Piridina, Anilina, Nitrobenzeno e Iodina <sup>b</sup>	1,5	1,0	1,0	1,0	1,0
Parafinas					
(5 ≤ n ≤ 12) <sup>c</sup>	1,0	0,7	1,0	1,0	0,7
Gases Quânticos	1,0	1,0	1+0,85 <sup>2e</sup>	-	-
Todas as outras substâncias	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0

- Nota: a) este conjunto de valores de parâmetros pode ser usado para outros compostos associados;
- b) este conjunto de valores de parâmetros pode ser usado para substâncias altamente polares;
- c)  $n$  é o número de átomos de carbono;
- d) os valores entre parênteses são para os casos onde os solutos são dissolvidos em solvente o qual é mais polar do que os solutos;
- e)  $\Lambda$  é 3,08 para He<sup>3</sup>; 2,67 para He<sup>4</sup>; 1,729 para H<sup>2</sup>; 1,223 para D<sup>2</sup>; 0,593 para Ne e zero para todas as outras substâncias.

#### 4.2 - RELAÇÕES ENTRE AS FASES E DEFINIÇÕES

Considerando-se um sistema constituído por  $n$  espécies químicas, tem-se:

- Concentração mássica do componente  $i$ :  $\rho_i = \frac{m_i}{V}$ , [ M / L<sup>3</sup> ] (4.9)

- Concentração molar do componente  $i$ :  $C_i = \frac{\rho_i}{M_i}$ , [ moles / L<sup>3</sup> ] (4.10)

- Fração mássica:  $W_i = \frac{\rho_i}{\rho}$ , [ massa  $i$  / massa total da mistura ] (4.11)

- Fração molar:  $x_i = \frac{C_i}{C}$ , [ moles  $i$  / moles totais da mistura ] (4.12)

O peso molecular médio da mistura é definido como

$$M = \frac{\rho}{C} \quad (4.13)$$

e pode ser calculado a partir das seguintes relações válidas para mistura binária :

$$x_1 M_1 + x_2 M_2 = M \quad (4.14)$$

$$\frac{W_1}{M_1} + \frac{W_2}{M_2} = \frac{1}{M} \quad (4.15)$$

O Fluxo mássico total da espécie 1 é definido como

$$\vec{n}_1 = -D_{12} \rho \bar{\nabla} W_1 + W_1 (\vec{n}_1 + \vec{n}_2) \quad (4.16)$$

O Fluxo molar total da espécie 1 é definido por

$$\vec{N}_1 = -D_{12} C \bar{\nabla} y_1 + y_1 (\vec{N}_1 + \vec{N}_2) \quad (4.17)$$

O Fluxo molar convectivo da espécie 1 pode ser calculado através de

$$\vec{J}_1 = h (C_{1inter} - \bar{C}_1) \quad (4.18)$$

onde  $C_{1inter}$  é a concentração da espécie 1 na interface e  $\bar{C}_1$  é a concentração média da espécie 1.

Para avaliar a fração mássica de um dado componente na interface, pode-se utilizar a Lei de Raoult-Dalton, que descreve o equilíbrio, dada por

$$p_a = P y_s = P_a x \quad (4.19)$$

onde  $p_a$  é a pressão parcial do componente condensável na fase gasosa;  $P$  é a pressão total da fase gasosa;  $P_a$  é a pressão de vapor do componente condensável;  $y_s$  e  $x$  são a fração molar do componente condensável na fase vapor e na fase líquida, respectivamente, que estão em equilíbrio.

#### 4.3 – ABSORÇÃO DE AMÔNIA DE UMA MISTURA GASOSA AMÔNIA-HIDROGÊNIO PARA UMA MISTURA LÍQUIDA AMÔNIA-ÁGUA.

É resolvido numericamente o problema isotérmico de absorção da amônia, de uma fase gasosa, amônia-hidrogênio, escoando no sentido ascendente vertical, para uma corrente líquida, amônia-água, a qual forma um filme líquido junto à parede da coluna, escoando em contra-corrente. Os resultados obtidos com a formulação proposta neste trabalho são comparados com a solução obtida por Martins e Pereira (1996). Na Figura 4.1 é apresentado o diagrama esquemático do problema em estudo.

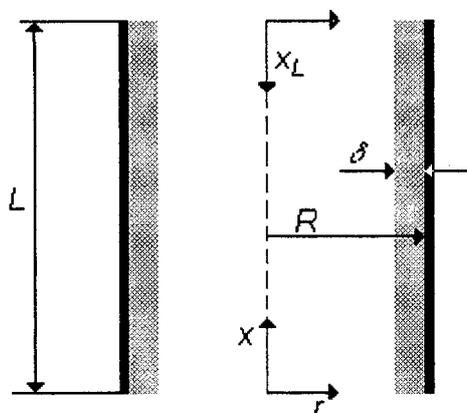


Figura 4.1 - Domínio do problema físico.

A coluna empregada tem uma altura de 0,5 m e um raio de 0,005 m. É resolvida a metade do domínio do problema físico, devido à simetria. O domínio é dividido em dois subdomínios. O domínio da fase líquida é definido como:  $0 \leq x_L \leq L$  e  $(R - \delta) \leq r \leq R$ , com  $x_L$  medido desde o topo até a base da coluna, e o domínio da fase gasosa é definido como:  $0 \leq x \leq L$  e  $0 \leq r \leq (R - \delta)$ , com  $x$  medido desde a base até o topo da coluna.

As condições de contorno prescritas, para a fase gasosa, na entrada são: componente do vetor velocidade  $u$  igual a  $u_g = 0,50$  m/s. A componente do vetor velocidade  $v$  é considerada nula e a fração mássica é prescrita e é igual a  $0,55$  kg  $\text{NH}_3$  / kg de solução. É resolvida metade do domínio do problema físico, devido à simetria do mesmo. Na fronteira sul, é imposta a condição de contorno de simetria (derivada nula). Na fronteira norte, é prescrita a componente do vetor velocidade,  $u$ , igual a velocidade descendente do líquido ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ) na interface; a componente do vetor velocidade  $v$  é prescrita nula, e a fração mássica é o valor da condição de equilíbrio de acordo com Martins e Pereira (1996). Na saída da coluna, é imposta a condição de contorno de saída (derivada nula).

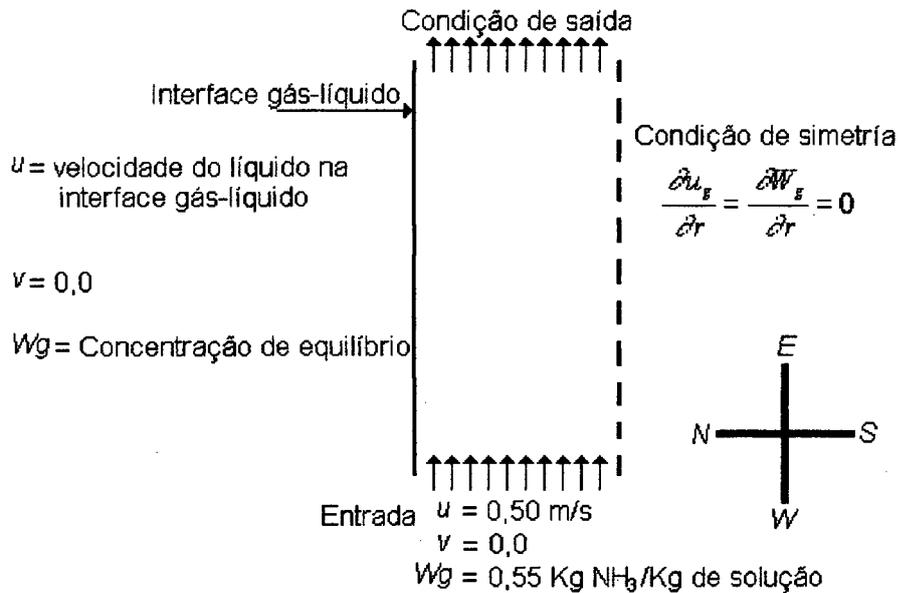


Figura 4.2 - Especificação das condições de contorno para a fase gasosa (mistura  $\text{NH}_3\text{-H}_2$ ).

A fase líquida é resolvida utilizando uma malha 80x15, com as seguintes condições de contorno: à entrada da coluna, é assumido que a componente da velocidade  $u$  é prescrita, sendo igual à velocidade média da mistura líquida ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ), utilizada no trabalho apresentado por Martins e Pereira (1996). A componente do vetor velocidade  $v$  é considerada nula, e a fração mássica da entrada é prescrita e é igual a 0,15 kg  $\text{NH}_3/\text{kg}$  de solução. Na fronteira sul, é imposta a condição de parede impermeável, sendo a velocidade nula. Na fronteira norte, é assumido que a força de cisalhamento entre o gás e o líquido é desprezível, o que implica em derivada nula

$\left( \frac{\partial u_L}{\partial r} = 0 \right)$ , e a fração mássica é prescrita igual ao valor de equilíbrio. Na base da coluna,

é imposta a condição de contorno de saída (derivada nula), conforme ilustrado na Figura 4.3.

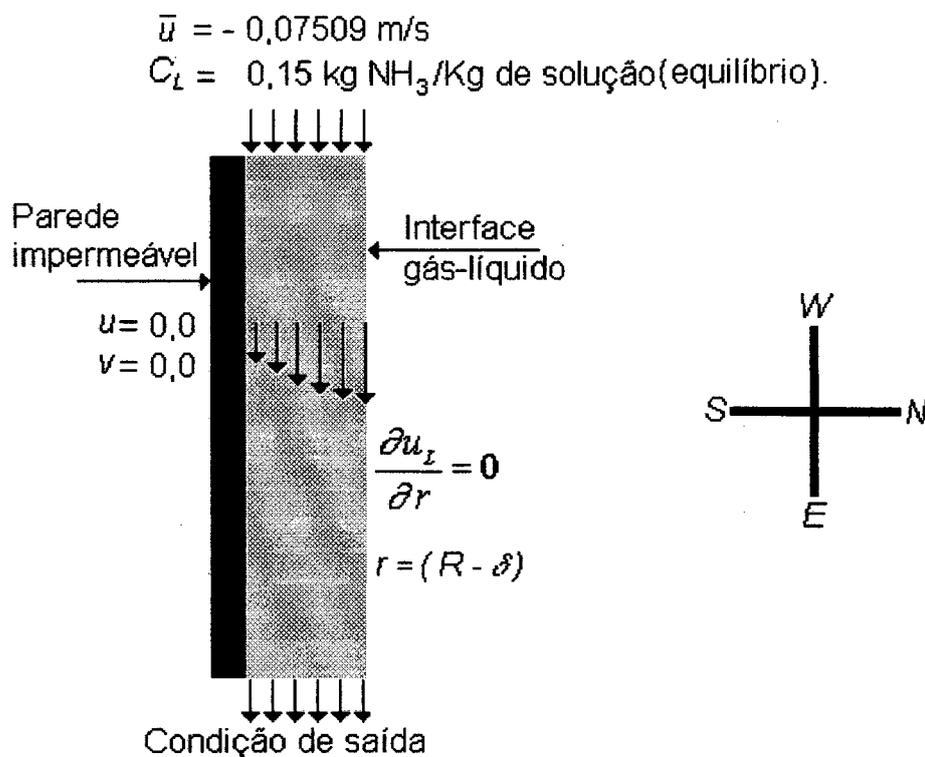


Figura 4.3 - Especificação das condições de contorno para a fase líquida ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ).

Na Tabela 4.3, são apresentados os valores de alguns parâmetros e propriedades utilizados na solução do problema.

O valor encontrado para a viscosidade na fase gasosa é de  $9,973 \cdot 10^{-6} \text{ kg/ms}$ , sendo calculado a partir da equação (4.2) e corrigido para a pressão de 24,67 atm, conforme Bird *et al.* (1960). A difusividade de  $\text{NH}_3$  em  $\text{H}_2$  e a massa específica são calculadas a partir das equações (4.4) e (4.1), respectivamente, na pressão de 24,67 atm.

Tabela 4.3 Valores dos parâmetros empregados no problema de absorção da amônia.

Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Altura da coluna	$L$	0,50	m
Raio da coluna	$R$	0,005	m
Fração mássica inicial da amônia no líquido	$C_{LO}$	0,15	kg/kg
Fração mássica inicial da amônia no gás	$W_{GO}$	0,55	kg/kg
Temperatura	$T$	30	°C
Pressão total	$P$	24,67	atm
Espessura do filme	$\delta$	$1,4 \cdot 10^{-4}$	m
Viscosidade do gás	$\mu_G$	$9,973 \cdot 10^{-6}$	kg/ms
Viscosidade do líquido	$\mu_L$	$1,55 \cdot 10^{-3}$	kg/ms
Difusividade de NH <sub>3</sub> em H <sub>2</sub>	$D_{NH_3-H_2}$	$3,143 \cdot 10^{-5}$	m <sup>2</sup> /s
Difusividade de NH <sub>3</sub> em H <sub>2</sub> O	$D_{NH_3-H_2O}$	$2,215 \cdot 10^{-9}$	m <sup>2</sup> /s
Massa específica do gás	$\rho_G$	3,383	kg/m <sup>3</sup>
Massa específica do líquido	$\rho_L$	931	kg/m <sup>3</sup>

A mistura líquida (NH<sub>3</sub> - H<sub>2</sub>O), à temperatura de 30 °C, possui viscosidade de  $1,55 \cdot 10^{-3}$  kg/ms e massa específica de 931 kg/m<sup>3</sup>, de acordo com Perry e Green (1984). A difusividade de NH<sub>3</sub> na H<sub>2</sub>O é calculada a partir da equação (4.8), obtendo-se um valor de  $2,215 \cdot 10^{-9}$  m<sup>2</sup>/s.

A fase gasosa é resolvida com uma malha 80x40 (80 pontos na direção axial e 40 pontos na direção radial).

Na Figura 4.4 são apresentados os perfis de velocidade para a mistura gasosa  $\text{NH}_3\text{-H}_2$  em diversas alturas da coluna. Pode-se observar que, na entrada da coluna, o perfil é constante e apresenta uma diminuição nas proximidades da interface. Com o aumento da altura da coluna, o perfil de velocidade do gás se desenvolve, apresentando um comportamento parabólico. Nas proximidades da interface, a velocidade é negativa; isto é devido ao fato do gás ser arrastado pela camada de líquido adjacente à interface.

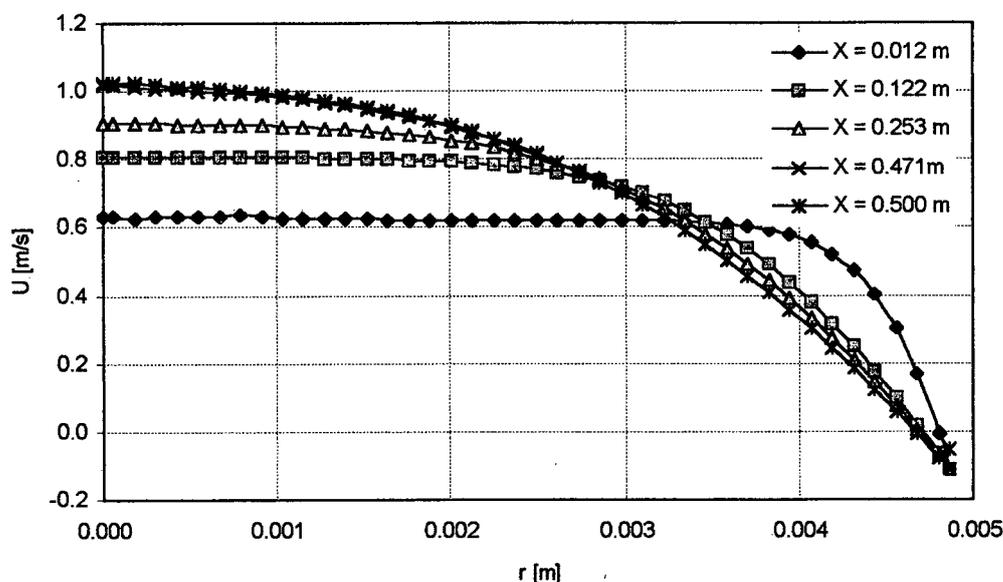


Figura 4.4 - Perfis de velocidade para a fase gasosa ( $\text{NH}_3\text{-H}_2$ ), em diversas alturas da coluna de absorção.

A Figura 4.5 apresenta os perfis de fração mássica para a fase gasosa em diversas alturas da coluna. Observa-se que a fração mássica de  $\text{NH}_3$  diminui com o

aumento da altura e com o aumento do raio da coluna, o qual se deve à transferência de massa da amônia da fase gasosa para a fase líquida. Na saída da coluna, os perfis apresentam um comportamento exponencial e os maiores gradientes de concentração ocorrem perto da interface gás-líquido ( $r=0,00486$  m).

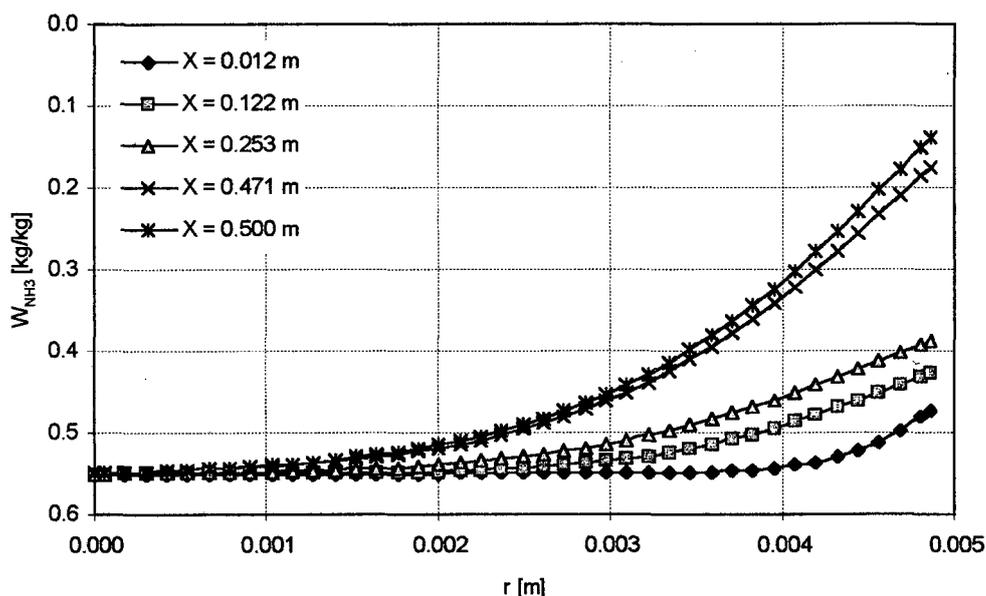


Figura 4.5 - Perfis de fração mássica para a fase gasosa ( $\text{NH}_3\text{-H}_2$ ), em diversas alturas da coluna de absorção.

Na Figura 4.6 é feita uma comparação entre os perfis de fração mássica obtidos neste trabalho e os perfis obtidos por Martins e Pereira (1996). Pode-se observar que, nas três posições da coluna estudadas, os perfis são bastante coincidentes, o que mostra uma boa eficiência do Método de Volumes Finitos, para a solução da fase gasosa.

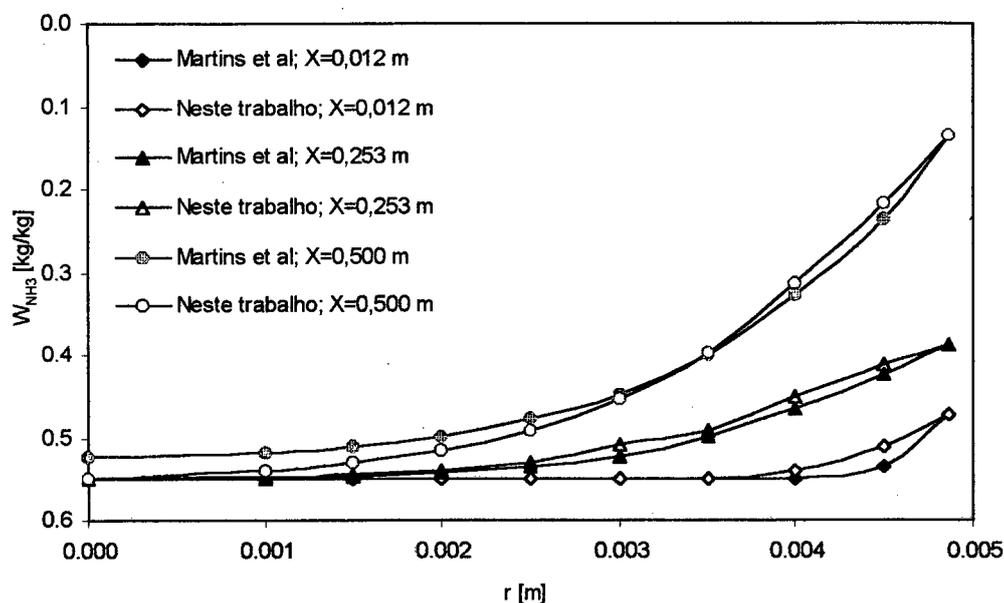


Figura 4.6 – Comparação entre os perfis de fração mássica obtidos mediante o Método de Volumes Finitos (malha 80x40), e os perfis obtidos por Martins e Pereira (1996), utilizando o Método de Diferenças Finitas.

O desvio é calculado com relação aos valores das frações mássicas apresentados por Martins e Pereira (1996), relativamente à fração mássica na interface. Pode-se observar, na Tabela 4.4, que os desvios são maiores quanto maior a altura na coluna. O valor máximo dos desvios, em todos os casos estudados, é inferior à 10%.

Tabela 4.4 - Desvios relativos obtidos na solução da fase gasosa, nas diferentes alturas e posições radiais da coluna.

Raio da Coluna [ m ]	Altura da coluna [ m ]				
	0,0012	0,122	0,253	0,471	0,500
	Desvio [ % ]				
0,0000	0,000	0,000	0,000	4,195	4,882
0,0010	0,000	0,040	0,382	3,249	3,753
0,0015	0,000	0,142	0,211	3,107	3,451
0,0020	0,000	0,433	0,513	3,385	2,771
0,0025	0,000	0,807	0,905	2,473	2,535
0,0030	0,073	2,244	2,624	0,587	0,927
0,0035	0,260	2,100	1,716	2,258	0,304
0,0040	1,807	2,831	2,602	5,596	4,656
0,0045	4,225	2,647	1,804	8,740	3,436
0,00486	0,000	0,000	0,000	0,000	0,782

Na solução da fase líquida é empregada uma malha 80x15 (80 pontos na direção axial e 15 pontos na direção radial).

O perfil de velocidade na fase líquida é apresentado na Figura 4.7; este não apresenta variações ao longo da altura da coluna, tendo um comportamento parabólico e constante em todas as posições axiais da coluna. O valor máximo da velocidade é de -0,1144 m/s, sendo obtido numa posição radial de 0,00486 m (interface gás-líquido). Com o aumento do raio, a velocidade apresenta uma diminuição devido à influência da parede da coluna.

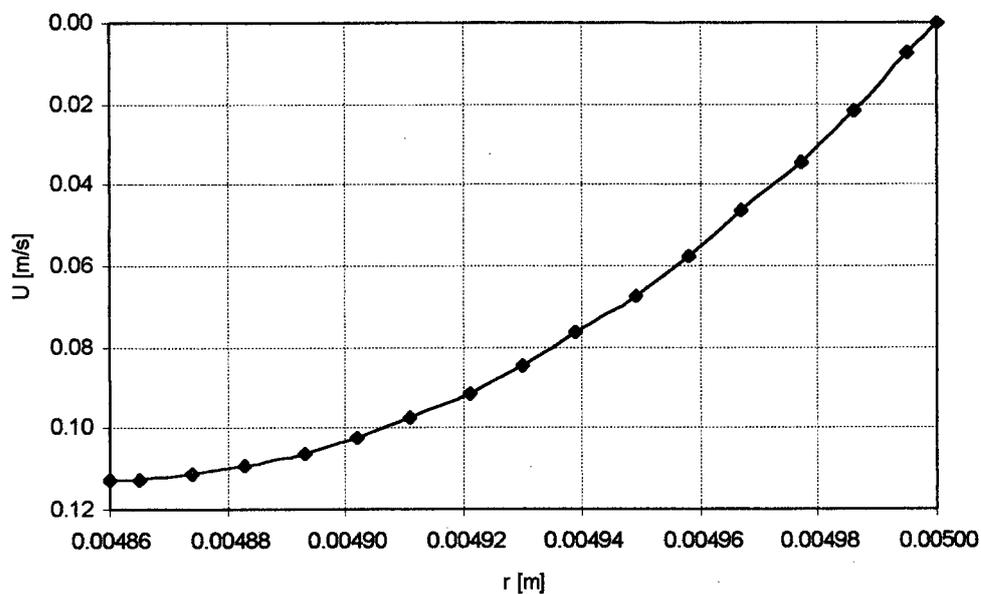


Figura 4.7 - Perfil de velocidade para o filme líquido ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ )

A Figura 4.8 mostra os perfis de fração mássica na fase líquida, para diversas alturas na coluna. Pode-se observar que a concentração de amônia no líquido aumenta à medida que diminui a altura da coluna, obtendo-se as mais altas frações mássicas na parte inferior da coluna e perto da interface gás-líquido. Também é bastante apreciável a diminuição da fração mássica de  $\text{NH}_3$  com o aumento do raio, para todas as posições axiais. Isto é devido à transferência de massa da fase gasosa para a fase líquida.

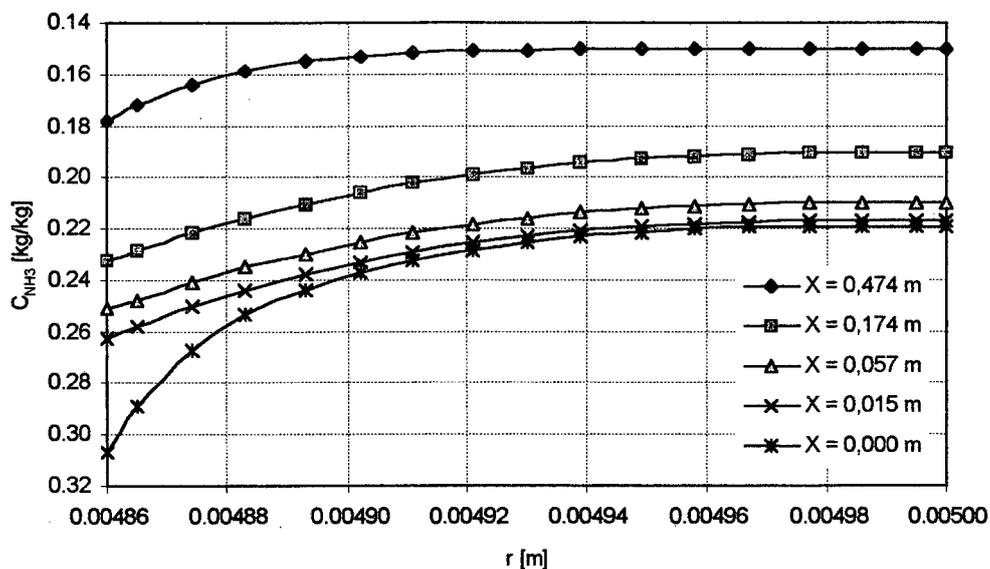


Figura 4.8 - Perfis de fração mássica para o filme líquido ( $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ ), em diversas alturas da coluna.

A Figura 4.9 mostra uma comparação entre os perfis de fração mássica na fase líquida obtidos neste trabalho e os perfis encontrados por Martins e Pereira (1996), em três posições da coluna de absorção. Os maiores desvios são obtidos na parte inferior da coluna,  $x=0,0$  (saída do líquido).

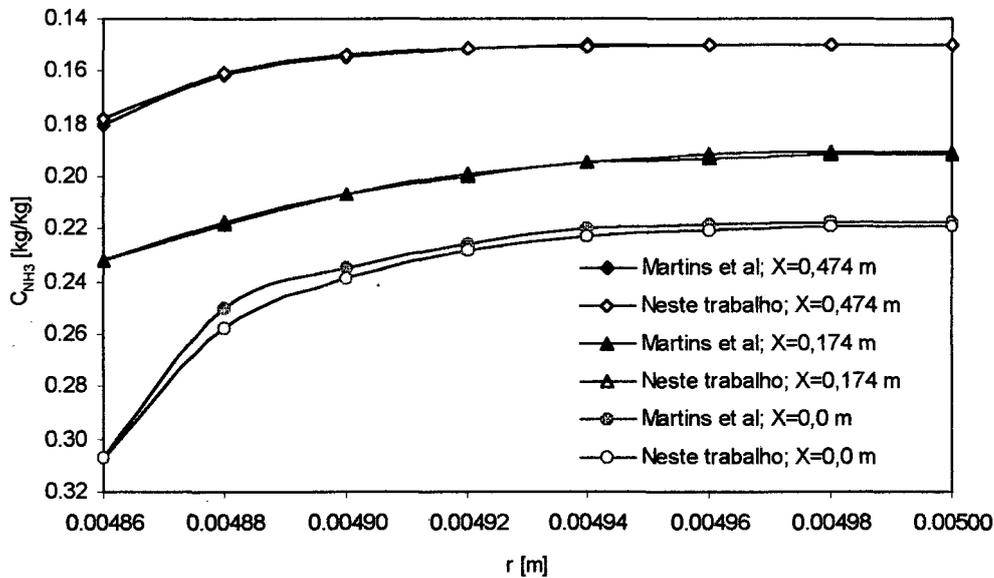


Figura 4.9 - Perfis de fração mássica na fase líquida, obtidos pelo Método de Volumes Finitos (malha 80x15), e obtidos por Martins e Pereira (1996), utilizando o Método de Diferenças Finitas.

Na Tabela 4.5 são apresentados os desvios entre os resultados obtidos neste trabalho e os apresentados por Martins e Pereira (1996), na interface, relativamente à fração mássica inicial da amônia no líquido. O valor máximo dos desvios não ultrapassa 6%.

Tabela 4.5 - Desvios relativos obtidos na solução da fase líquida, nas diferentes alturas e posições radiais da coluna.

Raio da coluna [ m ]	Altura da coluna [ m ]		
	0,000	0,174	0,474
	Desvio [ % ]		
0,00486	0,00	0,01	1,10
0,00488	5,40	0,63	0,79
0,00490	2,53	0,23	0,58
0,00492	1,78	0,64	0,23
0,00494	2,09	0,36	0,26
0,00496	1,12	0,69	0,11
0,00498	1,31	0,44	0,07
0,00500	1,13	0,59	0,06

O fluxo de massa de  $\text{NH}_3$  da fase gasosa para a fase líquida pode ser observado a partir da Figura 4.10. Na parte inferior da coluna, a migração de  $\text{NH}_3$  para a fase líquida é alta. A medida que se incrementa a altura, o fluxo apresenta uma diminuição até atingir um valor constante de  $5,7 \text{ kg/m}^2\text{s}$ . Depois de uma altura de  $0,25\text{m}$ , a qual corresponde a metade da coluna, o fluxo apresenta um aumento gradativo até a saída da coluna. Isto é devido a um elevado potencial de concentração de  $\text{NH}_3$  na entrada no líquido ( $\Delta C_{L_0}$ ).

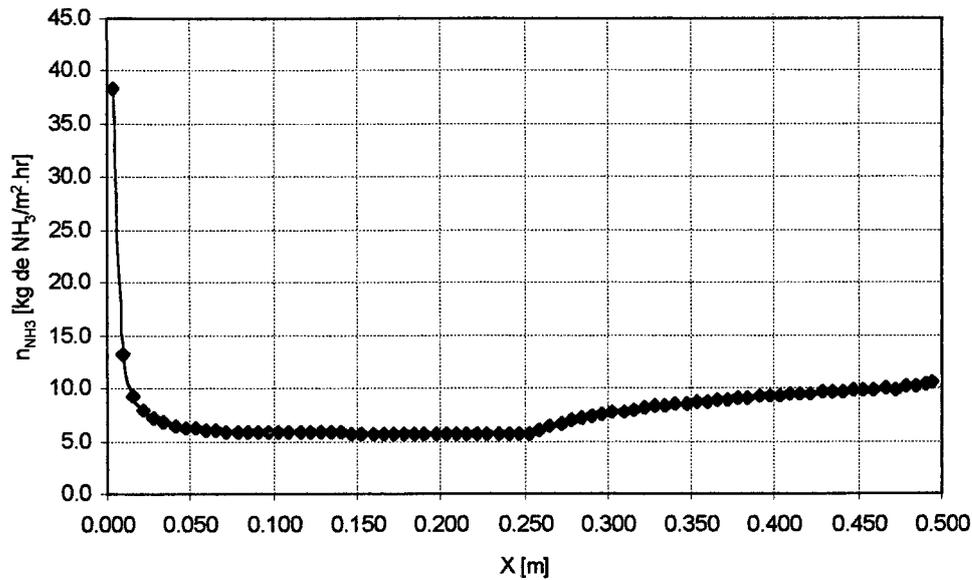


Figura 4.10 - Fluxo mássico da fase gasosa, para a fase líquida ( $NH_3-H_2O$ ), em diversas alturas da coluna de absorção.

O coeficiente convectivo de transferência de massa,  $h$ , ao longo da altura da coluna, é calculado a partir da equação (4.18). O coeficiente convectivo de transferência de massa da amônia da fase gasosa para a fase líquida é mostrado na Figura 4.11. Observa-se que, na base da coluna, o coeficiente  $h$  é alto, sendo elevada a transferência de massa da amônia, nesta posição. A medida que se aumenta a altura, o coeficiente convectivo vai diminuindo.

Na Figura 4.12 pode-se observar que o número de Sherwood aumenta com o aumento da altura da coluna. Este comportamento é mais expressivo em regiões próximas à base da coluna, onde o gás está mais rico em amônia. A relação é quase linear até a metade da coluna, (0,25 m), assumindo um comportamento assintótico próximo ao topo da coluna.

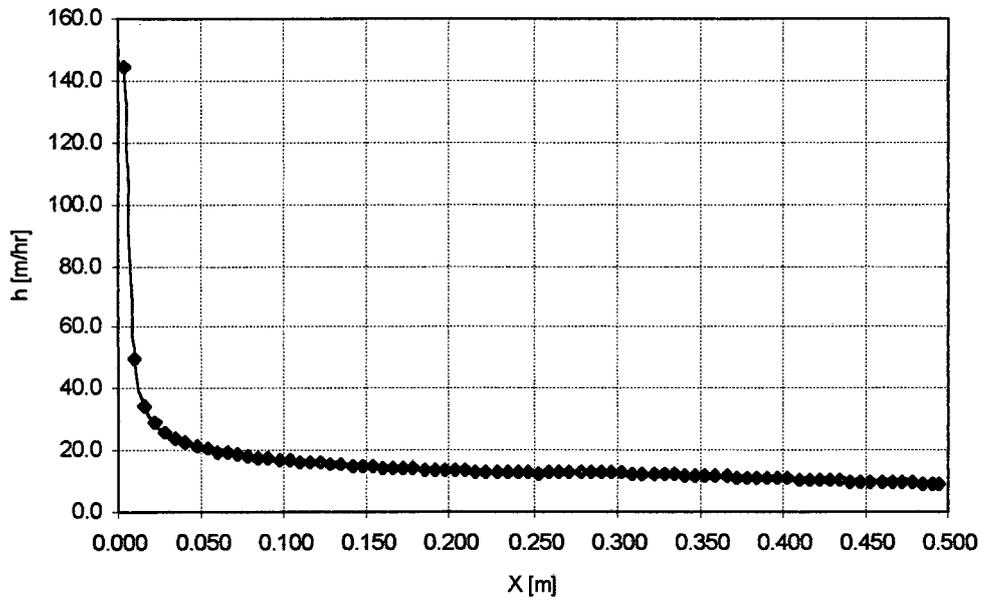


Figura 4.11 - Coeficiente de transferência de massa em diversas alturas da coluna de absorção.

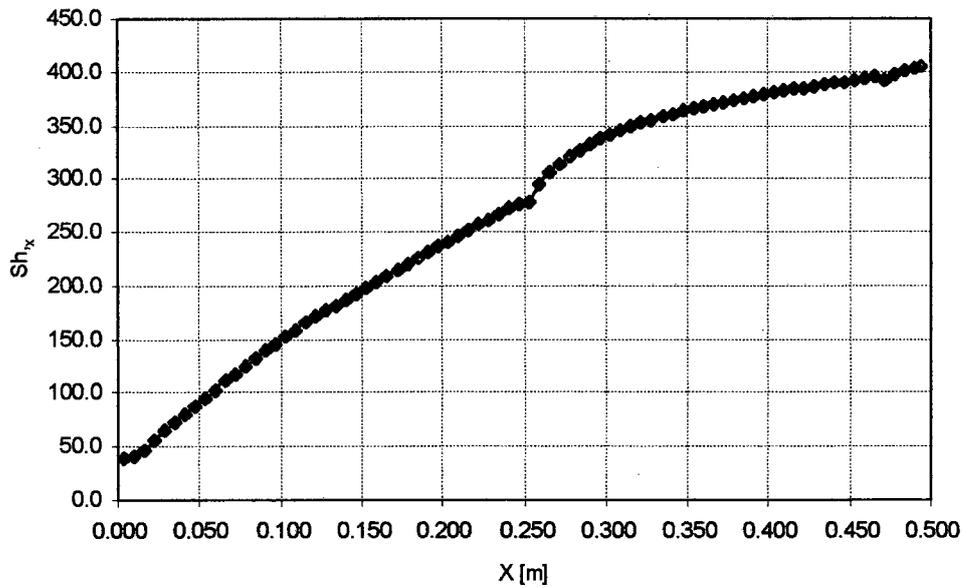


Figura 4.12 - Variação do número de Sherwood com a altura da coluna, para o problema  $NH_3-H_2-H_2O$ .

#### 4.4 - DESSORÇÃO DE DIÓXIDO DE CARBONO DE UMA MISTURA LÍQUIDA, DIÓXIDO DE CARBONO-ÁGUA, PARA UMA MISTURA GASOSA, AR-DIÓXIDO DE CARBONO.

É resolvido o problema da dessorção de dióxido de carbono de uma corrente de água saturada com dióxido de carbono, para uma corrente de ar saturada com água. Os resultados obtidos através da simulação numérica são comparados com os dados obtidos experimentalmente em uma coluna de absorção.

##### 4.4.1 - EQUIPAMENTOS E PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS

Os experimentos são conduzidos em uma coluna de absorção de 1,5 m de altura e 0,065 m de diâmetro. Um diagrama esquemático do equipamento empregado é mostrado na Figura 4.13.

A realização dos experimentos é feita escoando-se água saturada com dióxido de carbono, pela parede interna do tubo em forma de filme, e o ar em contracorrente pelo núcleo da coluna. São tomadas amostras nas fases líquida e gasosa, em 5 pontos da coluna, nas distâncias: 0,15 m; 0,45 m; 0,75 m; 1,05 m e 1,35 m, as quais são medidas desde a base da coluna (entrada do ar). A concentração de CO<sub>2</sub> presente em ambas as fases, ao longo das diversas alturas estudadas, é quantificada a partir do método do cloreto de bário.

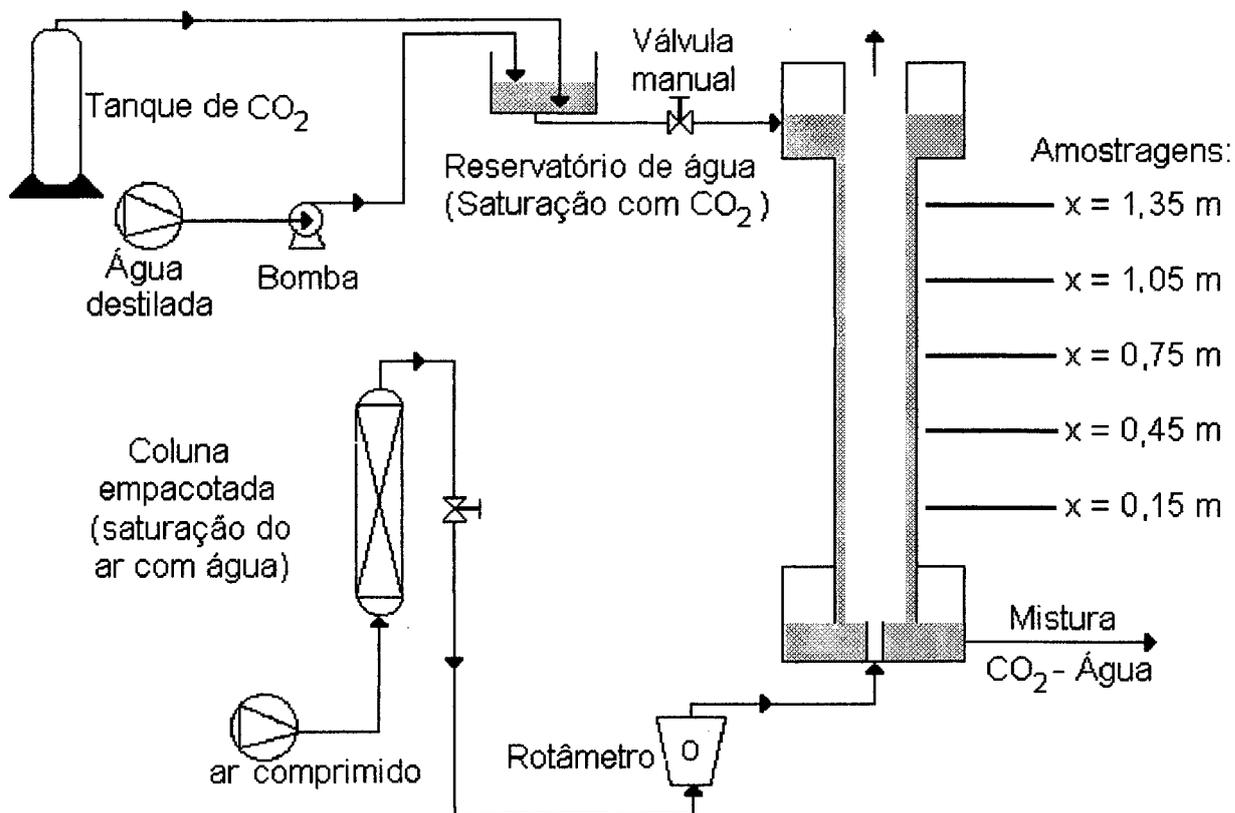
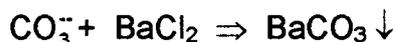
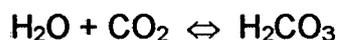


Figura 4.13 - Diagrama esquemático do equipamento.

No método do cloreto de bário, as seguintes reações estão presentes:



A amostra é titulada com HCl e, com o volume de HCl gasto na titulação, é calculada a fração mássica de CO<sub>2</sub> nas fases líquida e gasosa. O método é descrito

com maiores detalhes em Vogel (1960). São estudadas três vazões de ar (40, 60 e 80 l/min), para uma mesma vazão de líquido, isto com o objetivo de estabelecer a influência da velocidade do escoamento de ar sobre o fenômeno de transferência de massa.

Na Tabela 4.6 são apresentadas as frações mássicas de CO<sub>2</sub> obtidas experimentalmente para ambas fases (líquida e gasosa), para diversas alturas e vazões de ar estudadas.

Tabela 4.6 - Frações mássicas de CO<sub>2</sub> obtidas experimentalmente, nas fases líquida e gasosa, para diversas alturas da coluna e vazões de ar estudadas.

Altura da coluna [ m ]	Vazões de ar [l/min ]					
	40		60		80	
	Frações mássicas de CO <sub>2</sub> [ kg/kg ] * 10 <sup>-4</sup>					
	Fase gasosa	Fase líquida	Fase gasosa	Fase Líquida	Fase gasosa	Fase Líquida
<b>0,15</b>	4,813	6,012	4,692	6,559	4,464	6,969
<b>0,45</b>	5,405	6,999	5,056	7,227	4,784	7,470
<b>0,75</b>	5,466	7,591	5,132	7,652	4,995	7,683
<b>1,05</b>	5,769	7,683	5,420	7,789	5,056	8,381
<b>1,35</b>	6,696	9,671	6,513	9,869	5,967	10,13

#### 4.4.2 - SOLUÇÃO NUMÉRICA.

Uma forma esquemática do domínio deste problema está ilustrada na Figura 4.1. Novamente é resolvida somente a metade do domínio do problema físico, devido à simetria.

Na solução da fase líquida, são empregadas as seguintes condições de contorno: na fronteira oeste, é prescrita a velocidade do líquido, sendo a componente  $u$  do vetor velocidade igual à  $-0,14337$  m/s e a componente  $v$  nula. A fração mássica de  $\text{CO}_2$  na entrada é medida experimentalmente, apresentando um valor de  $1,037 \cdot 10^{-3}$  kg de  $\text{CO}_2$ /kg de solução, na temperatura de  $20^\circ\text{C}$  e na pressão atmosférica. Na fronteira leste, é empregada a condição de saída (derivada nula). Na fronteira sul, tem-se a condição de parede impermeável, sendo ambas componentes do vetor velocidade iguais a zero ( $u=0,0$  e  $v=0,0$ ). Na face norte é assumida como desprezível a força de cisalhamento entre a fase gasosa e a fase líquida, implicando que  $\partial u_L / \partial r$  seja nulo. O valor da concentração é prescrito, igual ao valor da concentração de dióxido de carbono medido experimentalmente na fase líquida, nos pontos 1 a 5, da Figura 4.13. Estas condições de contorno estão ilustradas na Figura 4.14.

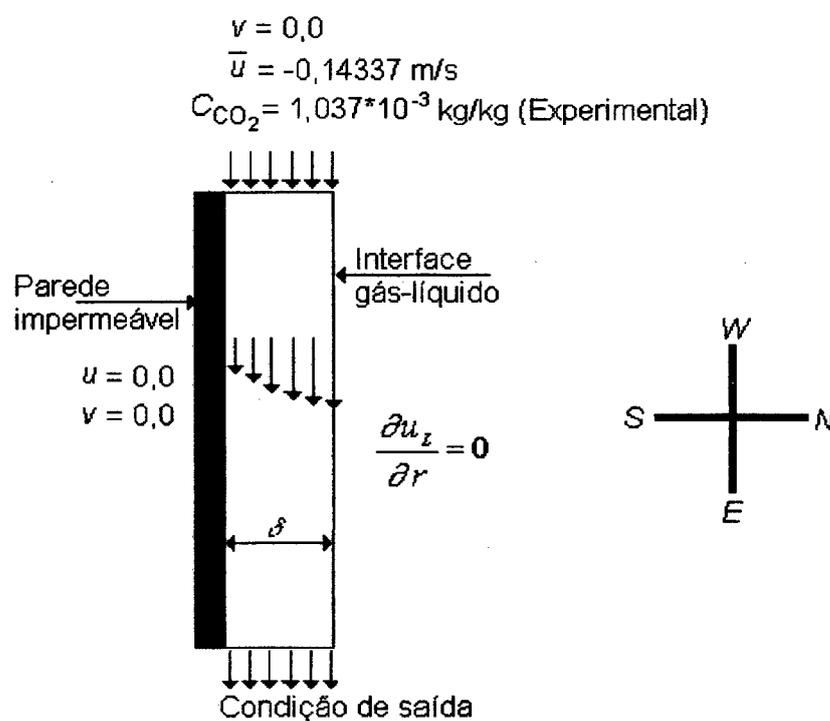


Figura 4.14-Especificação das condições de contorno para a fase líquida ( $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ ).

As condições de contorno impostas na fase gasosa são ilustradas na Figura 4.15, sendo assumida a condição de simetria (derivada nula) na fronteira sul (centro da coluna); condição de saída (derivada nula), na fronteira leste da coluna. Na fronteira oeste, é prescrita a velocidade de entrada do ar, sendo a componente  $v$  nula. A fração mássica de  $\text{CO}_2$  é prescrita igual a  $3,69 \cdot 10^{-4}$  kg de  $\text{CO}_2/\text{kg}$  de solução. Para a fronteira norte, a componente  $u$  da velocidade é prescrita igual ao valor da velocidade do líquido, na interface gás-líquido. A componente  $v$  da velocidade é igual a zero, e o valor da concentração de  $\text{CO}_2$  é prescrita, sendo determinada experimentalmente, nos pontos 1 a 5, conforme a Figura 4.13.

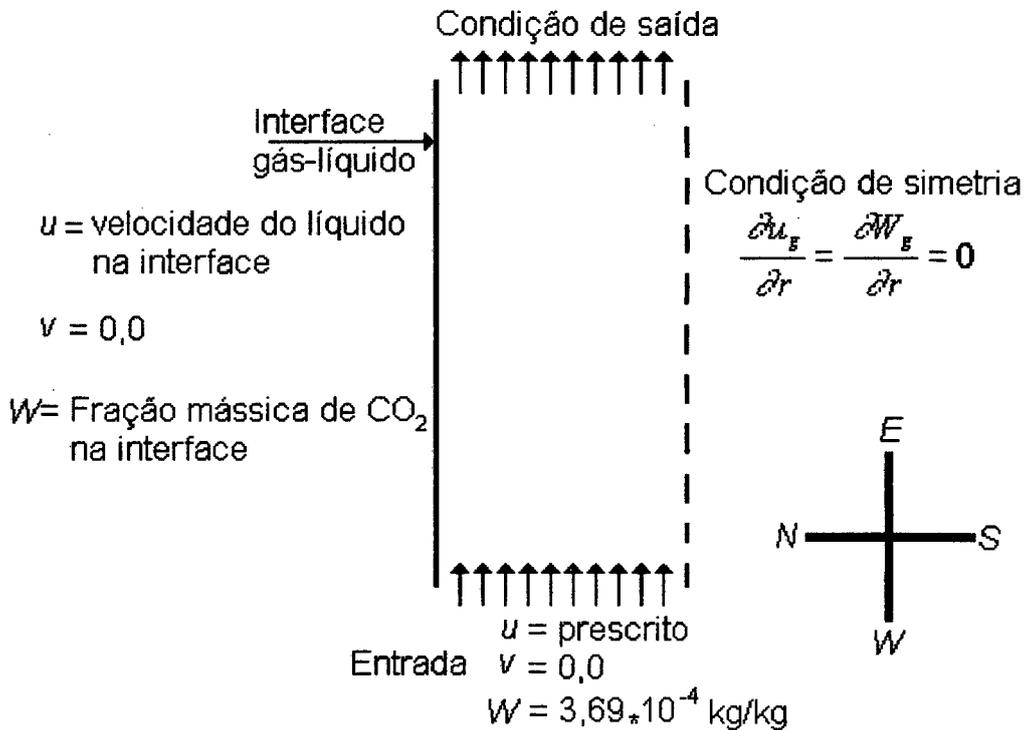


Figura 4.15 - Especificação das condições de contorno para a fase gasosa (CO<sub>2</sub>-Ar).

O valor encontrado para a massa específica do líquido, na temperatura de 20 °C e pressão atmosférica é de 998,23 kg/m<sup>3</sup>, de acordo com Geankoplis (1983).

Para a avaliação da viscosidade e da difusividade da mistura líquida, são empregadas as equações (4.6) e (4.7), respectivamente, obtendo-se os seguintes valores:  $D_{CO_2-H_2O} = 1,784 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$  e  $\mu_{mistura} = 1,00 \cdot 10^{-3} \text{ kg/ms}$ .

O valor da massa específica do ar, na temperatura de 20 °C e 1 atm de pressão, é de 1,2068 kg/m<sup>3</sup>, de acordo com Bird *et al.* (1960). A viscosidade e difusividade da mistura gasosa (CO<sub>2</sub>-ar) apresentam valores de 1,8232\*10<sup>-5</sup>Kg/ms e 1,471\*10<sup>-5</sup> m<sup>2</sup>/s, sendo estes calculados a partir das equações (4.2) e (4.4), respectivamente.

As propriedades físicas descritas acima para ambas fases e os valores de outros parâmetros de interesse são incluídos na Tabela 4.7.

Na solução numérica do problema, é resolvida primeiramente a fase líquida, de acordo com a metodologia numérica descrita no capítulo anterior, empregando-se uma malha 40x20 (40 pontos na direção axial e 20 pontos na direção radial).

Tabela 4.7 - Valores dos parâmetros empregados na solução do problema CO<sub>2</sub>-ar-H<sub>2</sub>O.

Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Altura da coluna	$L$	1,5	m
Raio da coluna	$R$	$3,25 \cdot 10^{-2}$	m
Fração mássica inicial do CO <sub>2</sub> no líquido	$C_{LO}$	$1,04 \cdot 10^{-3}$	kg/kg
Fração mássica inicial do CO <sub>2</sub> no gás	$W_{GO}$	$3,69 \cdot 10^{-4}$	kg/kg
Temperatura	$T$	20	°C
Pressão total	$P$	1	atm
Espessura do filme	$\delta$	$2,00 \cdot 10^{-3}$	m
Viscosidade do gás	$\mu_G$	$1,82 \cdot 10^{-5}$	kg/m.s
Viscosidade do líquido	$\mu_L$	$1,00 \cdot 10^{-3}$	kg/m.s
Difusividade do CO <sub>2</sub> no ar	$D_{CO_2 - ar}$	$1,47 \cdot 10^{-5}$	m <sup>2</sup> /s
Difusividade do CO <sub>2</sub> em H <sub>2</sub> O	$D_{CO_2 - H_2O}$	$1,78 \cdot 10^{-9}$	m <sup>2</sup> /s
Massa específica do gás	$\rho_G$	1,21	kg/m <sup>3</sup>
Massa específica do líquido	$\rho_L$	998,23	kg/m <sup>3</sup>

O perfil de velocidade obtido para mistura líquida (CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O) tem um comportamento parabólico e constante, ao longo de todo o percurso do líquido pela coluna, conforme ilustra a Figura 4.16.

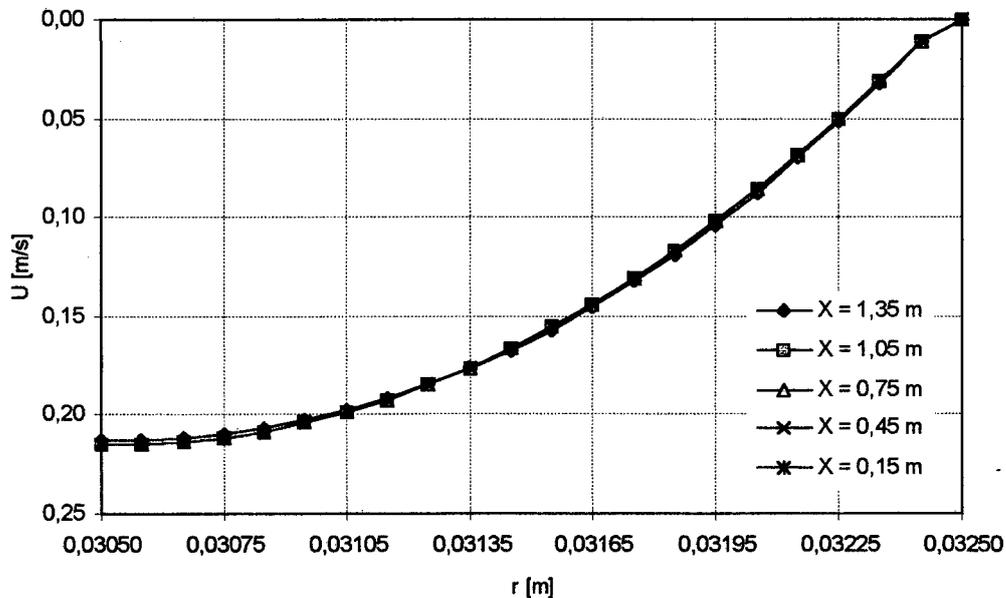


Figura 4.16 - Perfil de velocidade para o filme líquido ( $\text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ ).

É importante salientar que o perfil de velocidade não apresenta variação significativa com o aumento da vazão de ar injetado no sistema, permanecendo inalterado o perfil de velocidade na fase líquida, para as três vazões de ar estudadas.

A variação da fração mássica de  $\text{CO}_2$  na fase líquida, na direção axial e radial, é mostrada nas Figuras 4.17, 4.18 e 4.19, para as vazões de ar de 40, 60 e 80 l/min, respectivamente. Pode-se notar que, para as três vazões estudadas, a fração mássica de  $\text{CO}_2$  aumenta com o aumento da altura e do raio da coluna.

O efeito da vazão de ar sobre os perfis de concentração na fase líquida é bastante significativo, apresentando maior influência nas proximidades da interface gás-líquido (raios menores que 0,03075 m). Para altas vazões de ar e para uma mesma posição radial, a concentração de CO<sub>2</sub> na fase líquida é maior. Este comportamento pode ser devido ao tempo de contato, o qual diminui com o aumento da vazão de ar.

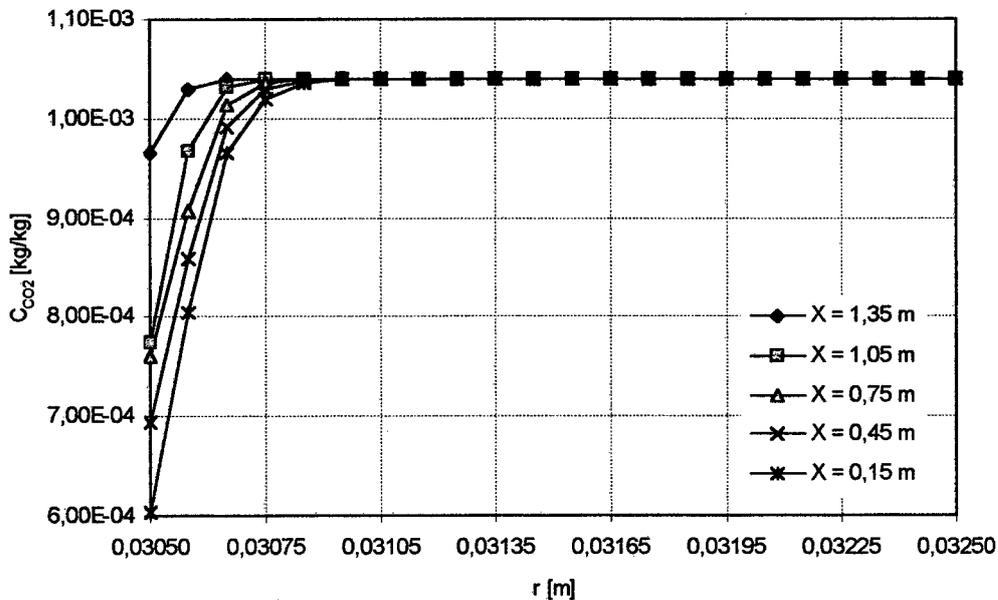


Figura 4.17 - Perfis de fração mássica para o filme líquido, para vazão de ar de 40 l/min.

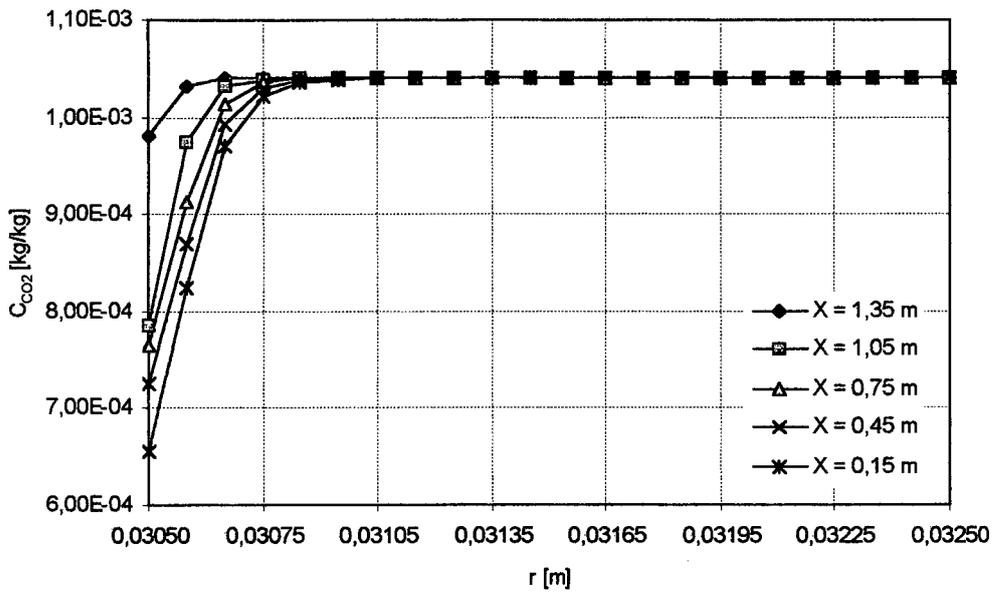


Figura 4.18 - Perfis de fração mássica para o filme líquido, para vazão de ar de 60 l/min.

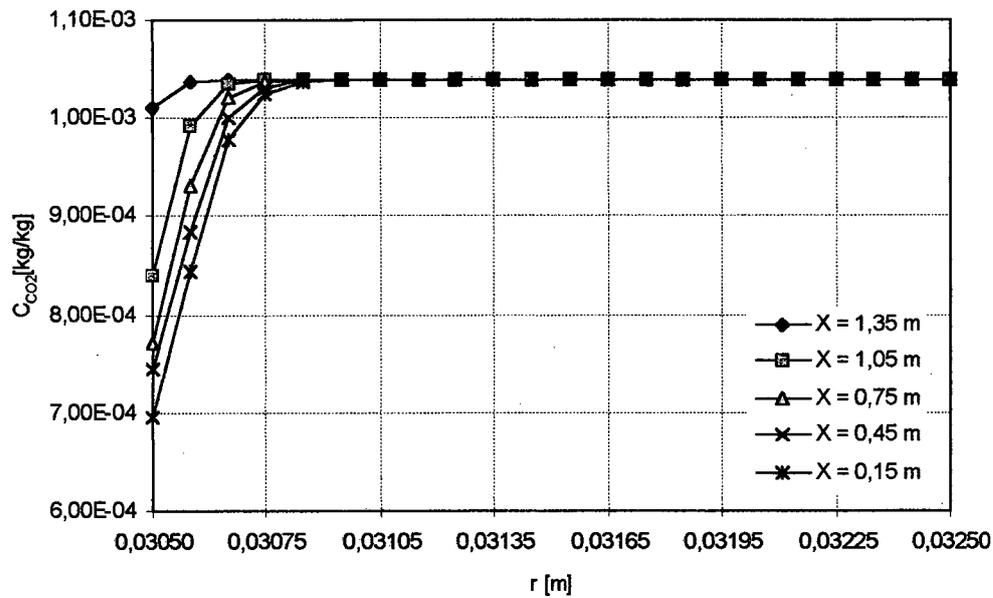


Figura 4.19 - Perfis de fração mássica para o filme líquido, para vazão de ar de 80 l/min.

A dependência da fração mássica de  $\text{CO}_2$  na fase líquida com a vazão de ar, para diversas alturas, é mostrada na Figura 4.20. Observa-se que, a medida que se aumenta a vazão de ar, aumenta a fração mássica de  $\text{CO}_2$ , apresentando uma relação linear para todas as alturas estudadas.

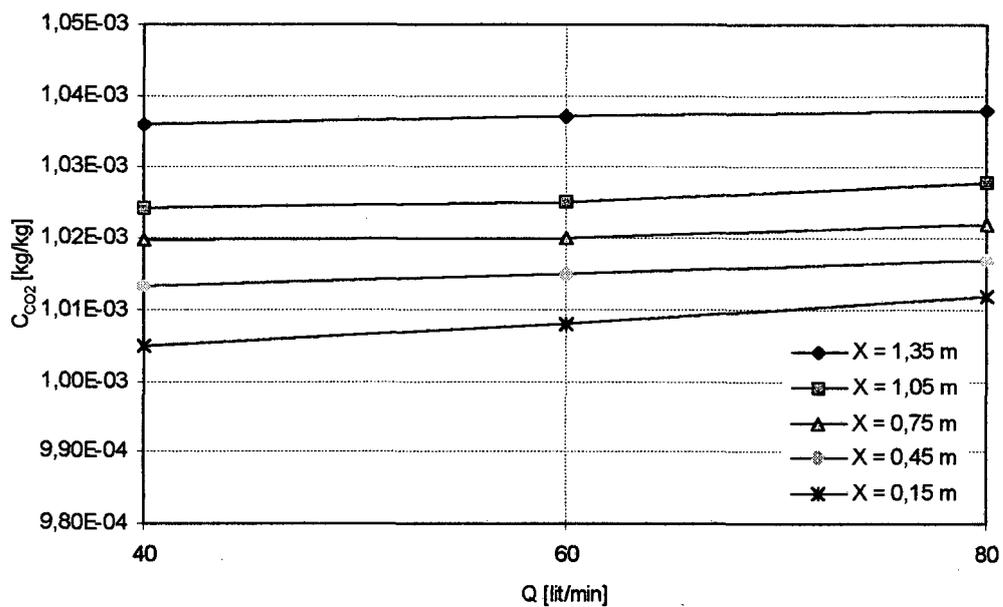


Figura 4.20 - Influência da vazão de ar alimentado ao sistema, sobre a fração mássica de  $\text{CO}_2$  na fase líquida, em diversas posições axiais da coluna.

Pode-se observar, na Figura 4.21, que o desvio aumenta com a diminuição da altura da coluna, apresentando-se os maiores desvios para baixas alturas da coluna (saída do líquido).

O desvio é calculado pela diferença entre a fração mássica obtida numericamente e a obtida experimentalmente, relativamente à fração mássica inicial da mistura líquida. Observa-se, para todas as alturas estudadas, que o desvio diminui com o aumento da vazão, sendo que a relação é linear em todos os casos.

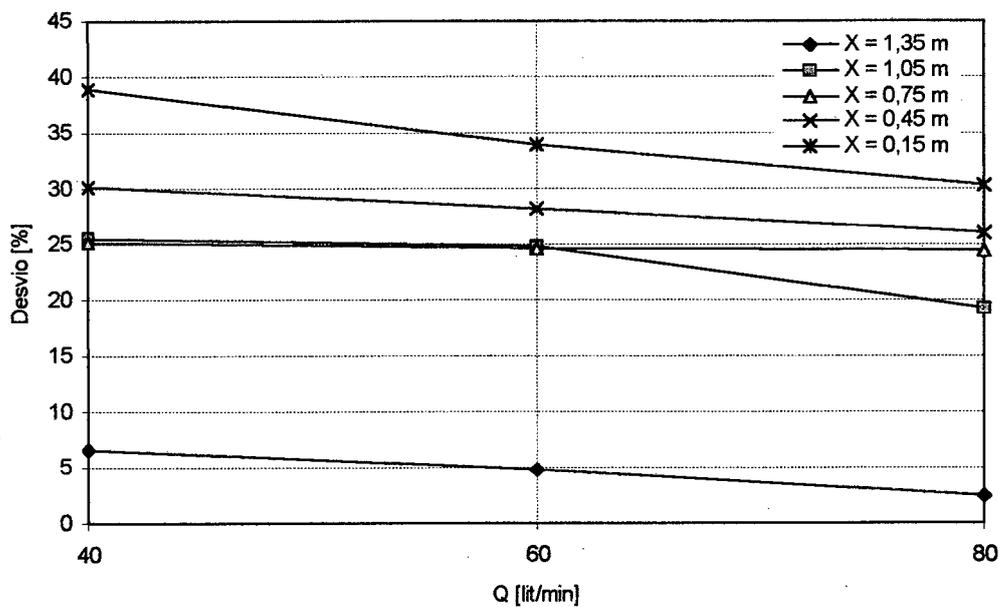


Figura 4.21 – Desvio relativo obtido na solução da fase líquida, em diversas alturas da coluna de parede molhada, para diferentes vazões de ar.

Na fase gasosa é empregada uma malha 40x20, igualmente espaçada, a qual possui 40 pontos na direção axial e 20 pontos na direção radial. A solução da fase gasosa ( $\text{CO}_2\text{-Ar}$ ) exige o conhecimento prévio da velocidade do líquido e concentração do dióxido de carbono na interface gás-líquido. O valor da velocidade na interface é

conhecido a partir da solução do problema da fase líquida, sendo igual a  $-0,212$  m/s, de acordo com a Figura 4.16.

Os valores da concentração na interface são obtidos a partir da lei de Raoult-Dalton (equação (4.19)), sendo conhecidas as concentrações de  $\text{CO}_2$  na fase líquida (medidas experimentalmente), o valor da pressão de vapor para o  $\text{CO}_2$ , o qual corresponde a  $56,8$  atm, de acordo com Perry e Green (1984) e o valor da pressão total que é de  $1$  atm.

Os perfis do vetor velocidade, para as três vazões de ar estudadas  $40$ ,  $60$  e  $80$  l/min, são apresentados nas Figuras 4.22 a 4.24. O comportamento é bastante semelhante nos três casos, obtendo-se um aumento da velocidade da mistura gasosa ( $\text{CO}_2$ -Ar) no centro com o aumento da altura da coluna, e uma diminuição com o aumento do raio. Nas proximidades da interface gás-líquido, o sentido da velocidade é contrário ao escoamento do ar; isto é devido ao arraste pelo líquido da camada de gás adjacente ao líquido.

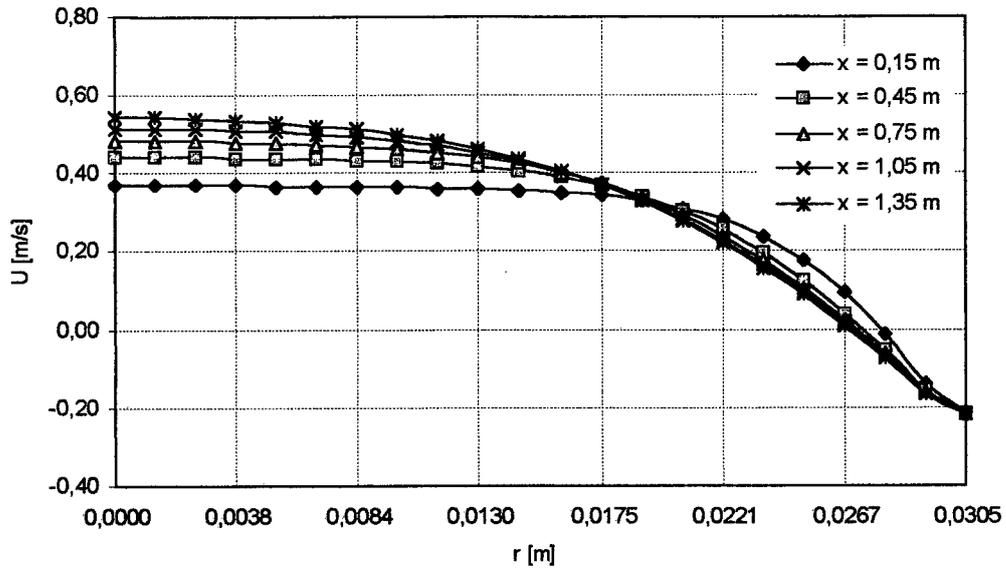


Figura 4.22 - Perfis de velocidade para a fase gasosa (vazão de ar de 40l/ min).

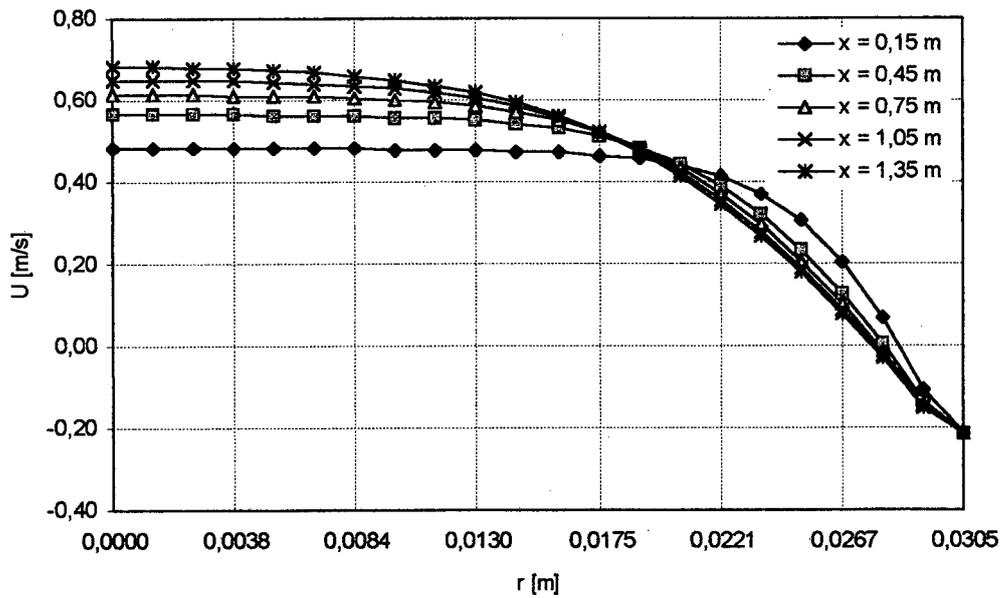


Figura 4.23 - Perfis de velocidade para a fase gasosa (vazão de ar de 60 l/min).

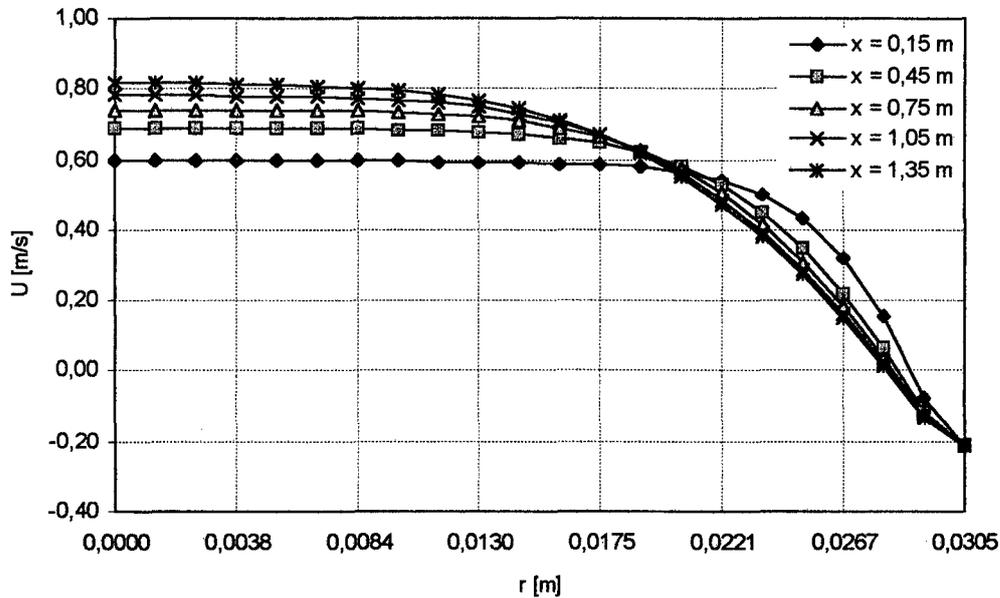


Figura 4.24 - Perfis de velocidade para a fase gasosa (vazão de ar de 80 l/min).

A fração mássica obtida a partir da solução numérica para a fase gasosa nas posições  $x=0,15$  m;  $x=0,45$  m;  $x=0,75$  m;  $x=1,05$  e  $x=1,35$  m é apresentada nas Figuras 4.25, 4.26 e 4.27, para as vazões de 40, 60 e 80 l/min, respectivamente.

Na base da coluna, o ar entra com fração mássica de  $\text{CO}_2$  constante e igual a  $3,69 \cdot 10^{-4}$ , a qual foi medida experimentalmente.

Pode-se observar nas Figuras 4.25 a 4.27 que, para um mesmo raio, para todas as vazões, a fração mássica na fase gasosa é maior quanto mais perto do topo da coluna.

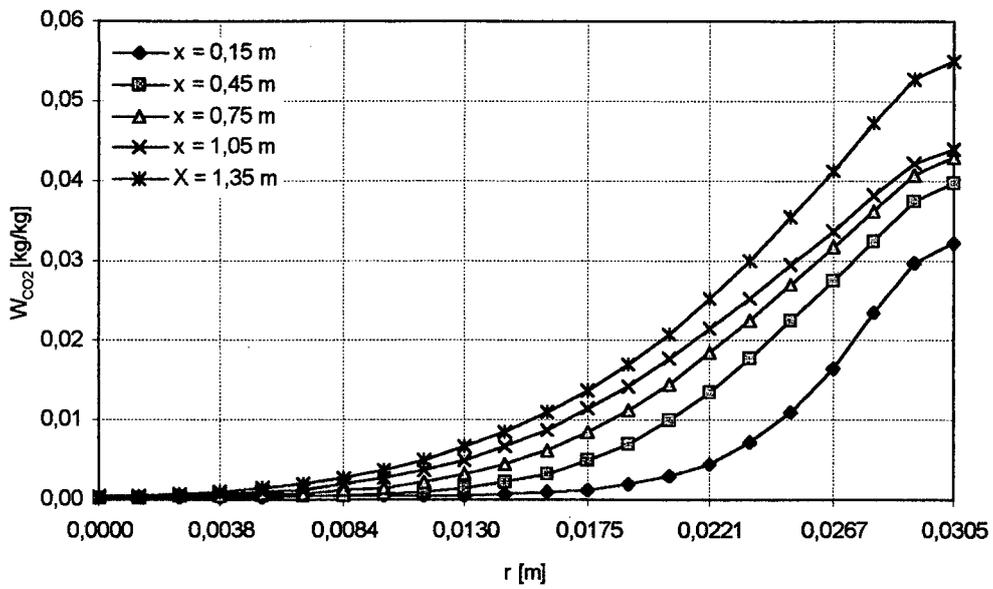


Figura 4.25 - Perfis de fração mássica de CO<sub>2</sub> na fase gasosa (vazão de ar de 40l/min).

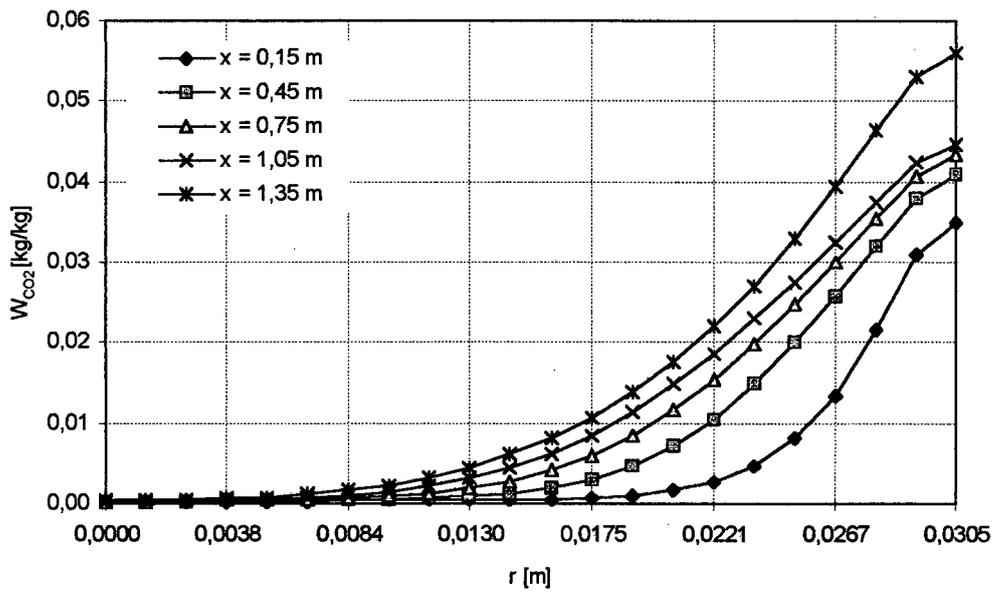


Figura 4.26 - Perfis de fração mássica de CO<sub>2</sub> na fase gasosa (vazão de ar de 60l/min).

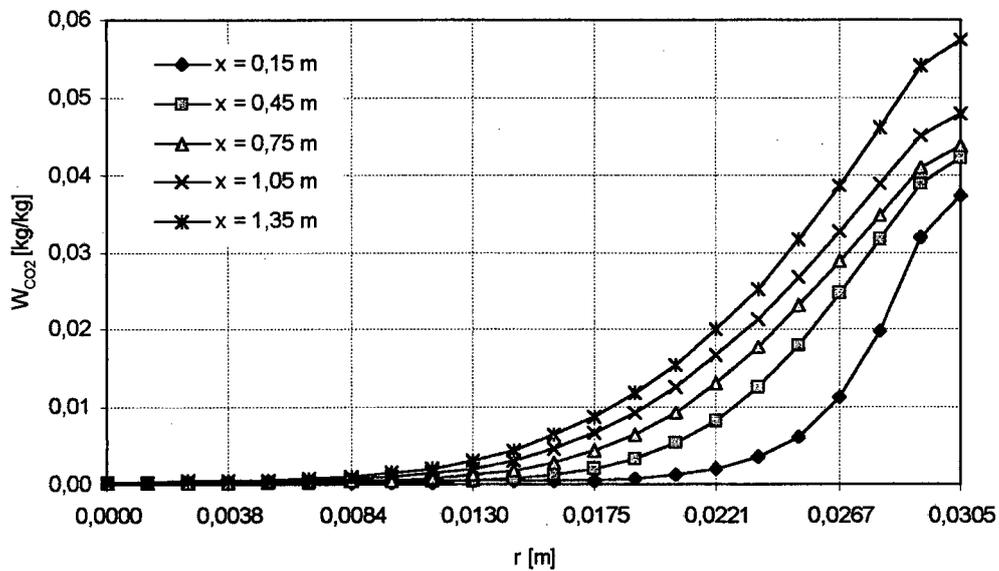


Figura 4.27 - Perfis de fração mássica de CO<sub>2</sub> na fase gasosa (vazão de ar de 80l/min).

Na Figura 4.28 é mostrada a relação entre a fração mássica e a vazão de ar, para um ponto de amostragem, em  $r=0,0124$  m e diversas alturas. Conforme se pode observar, quanto maior a vazão de ar, menor é a fração mássica de CO<sub>2</sub>. Quanto maior a altura da coluna, maior é a fração mássica de CO<sub>2</sub>, pois maior é o tempo de contato entre as duas fases.

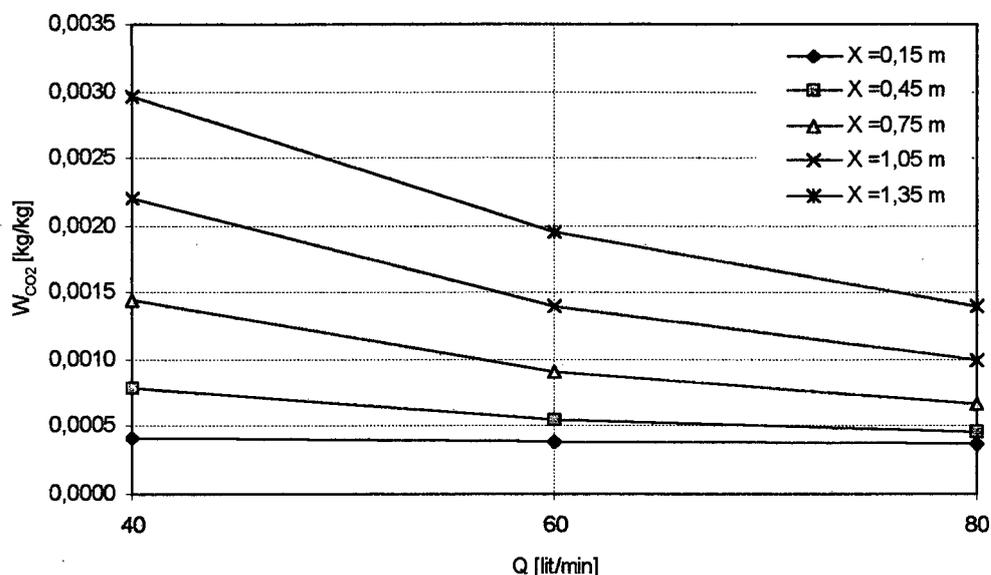


Figura 4.28 - Influência da vazão sobre a fração mássica de CO<sub>2</sub>, em  $r=0,0124$  m, para diversas alturas da coluna.

Na Figura 4.29 é mostrado o fluxo molar de CO<sub>2</sub> da fase líquida para a fase gasosa,  $N_{CO_2}$ , para as três vazões de ar estudadas (40, 60 e 80 l/min). Na parte inferior da coluna, entrada de ar no sistema, a transferência de massa é alta, obtendo-se altos valores de  $N_{CO_2}$ . O fluxo molar  $N_{CO_2}$  apresenta uma diminuição com o aumento da altura. Depois de uma altura de 1,05 m, o fluxo apresenta um aumento gradativo até a saída da coluna, em virtude do líquido entrar na coluna com a concentração de saturação do CO<sub>2</sub>. Para as três vazões estudadas, é possível se verificar esta mesma tendência.

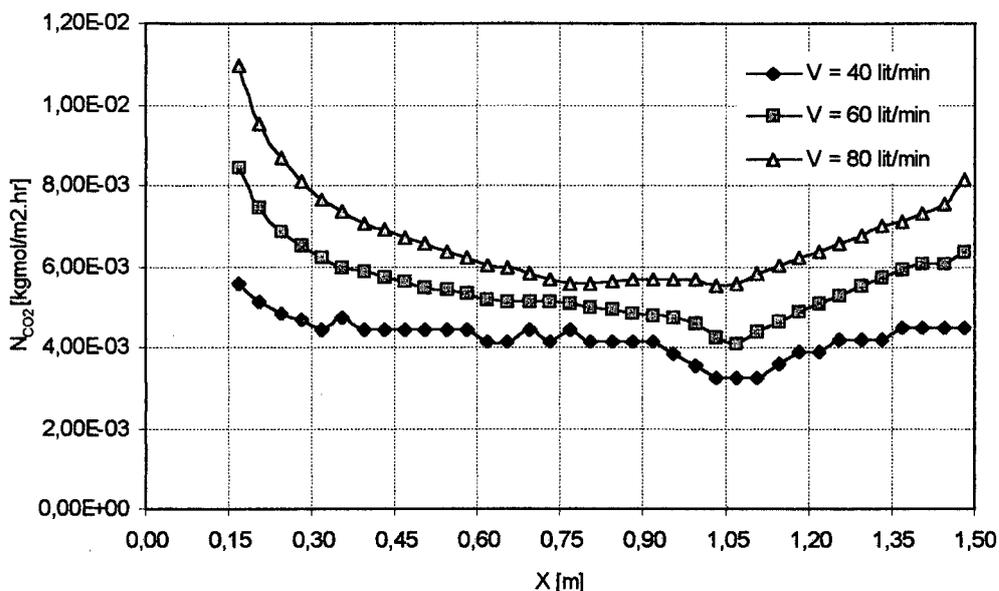


Figura 4.29 - Fluxo molar de CO<sub>2</sub>, da fase líquida para a fase gasosa, em diversas alturas da coluna de absorção e para diversas vazões de ar.

O aumento da vazão de ar tem uma influência direta sobre o processo de transferência de massa, obtendo-se um aumento no fluxo molar da espécie química CO<sub>2</sub> da fase líquida para a fase gasosa, para altas vazões de ar. É importante mencionar que o fluxo molar é avaliado na interface gás-líquido.

Na Figura 4.30 é apresentada a relação entre o coeficiente convectivo de transferência de massa e a altura da coluna. É bastante apreciável a influência da velocidade de entrada de ar sobre o coeficiente convectivo de transferência de massa,  $h$ , obtendo-se maiores valores deste para altas vazões de ar. As curvas para as três vazões estudadas (40, 60 e 80 l/min) apresentam a mesma tendência.

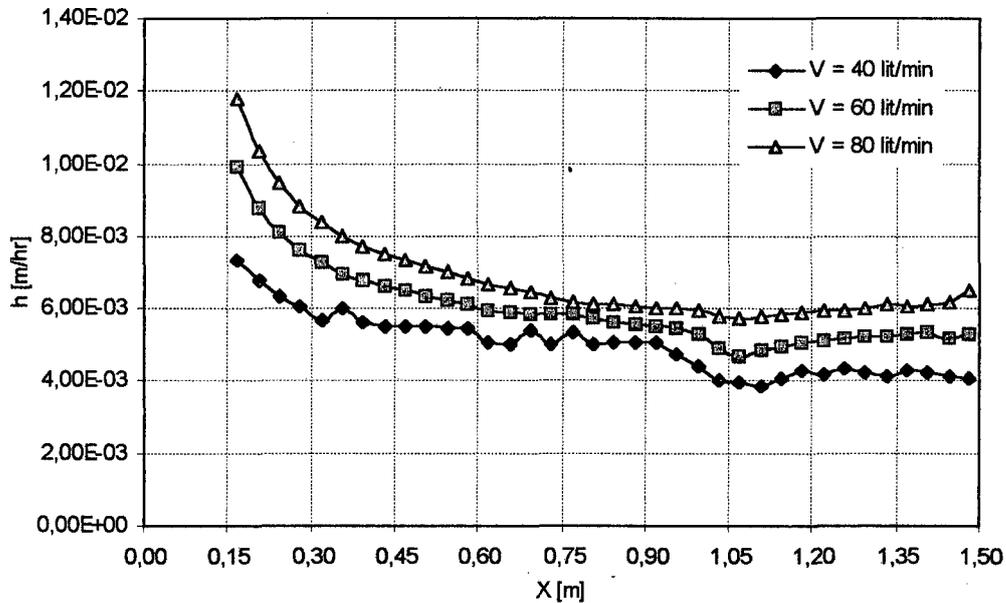


Figura 4.30 – Coeficiente convectivo de transferência de massa, para diversas alturas da coluna de absorção e diversas vazões de ar.

A relação entre o número de Sherwood e a altura da coluna é apresentada na Figura 4.31. Pode-se notar que, a medida que aumenta a altura, aumenta o número de Sherwood local. Para maiores vazões de ar, considerando-se uma mesma altura, o número de Sherwood é maior, sendo que a relação torna-se linear.

O efeito da velocidade sobre o processo de transferência de massa pode ser observado a partir da Figura 4.32. A medida que se aumenta o número de Reynolds, o número de Sherwood aumenta, obtendo-se uma relação linear. Isto permite visualizar a influência que tem a velocidade do ar sobre o processo de transferência de massa, sendo este favorecido por altas velocidades.

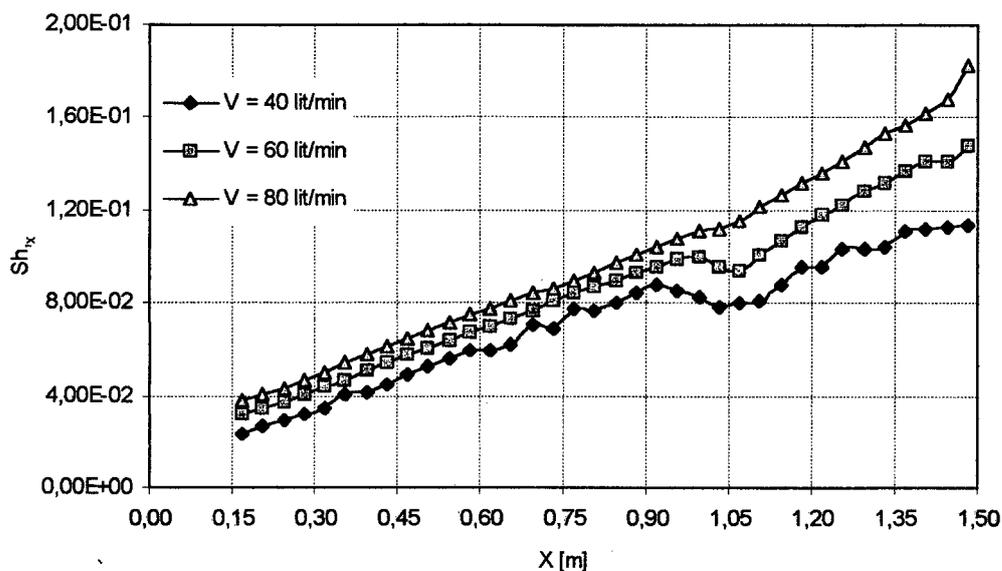


Figura 4.31 - Variação do número de Sherwood local com a altura da coluna de absorção, para as diversas vazões de ar estudadas.

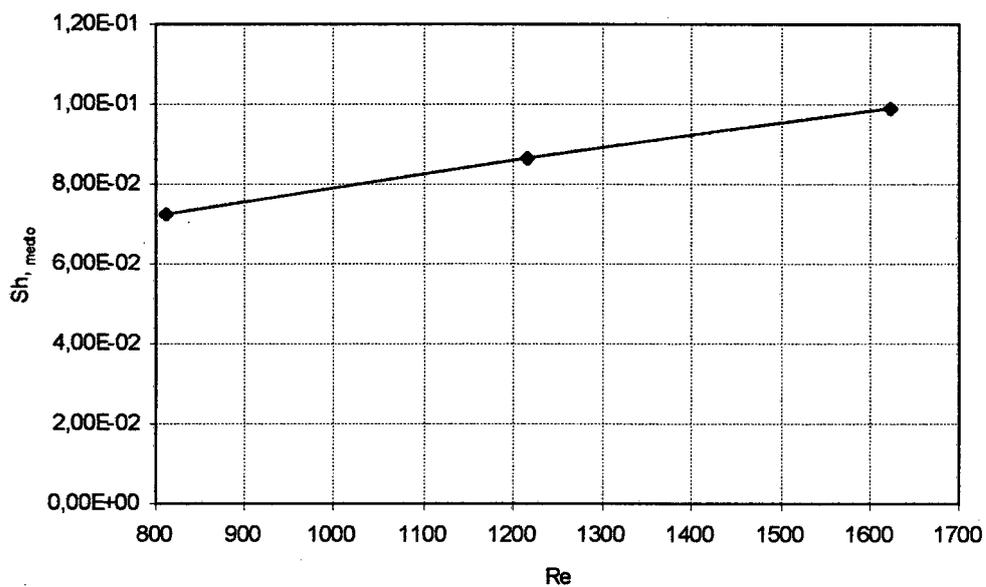


Figura 4.32 - Efeito da velocidade do ar sobre o processo de transferência de massa em uma coluna de absorção, para o problema  $CO_2$ -ar- $H_2O$ .

A análise dos desvios é realizada para as alturas  $x=0,15$  m;  $x=0,45$  m;  $x=0,75$  m;  $x=1,05$  e  $x=1,35$  m, para as três vazões de ar estudadas 40, 60 e 80 l/min.

O desvio é calculado com base nos dados experimentais, relativamente à concentração de  $\text{CO}_2$  na interface gás-líquido, sendo este valor apresentado na Figura 4.33, para diversas vazões e posições axiais da coluna. Conforme se pode verificar, quanto menor a vazão e maior a altura da coluna, maior é o valor do desvio obtido entre os resultados numéricos e os dados experimentais.

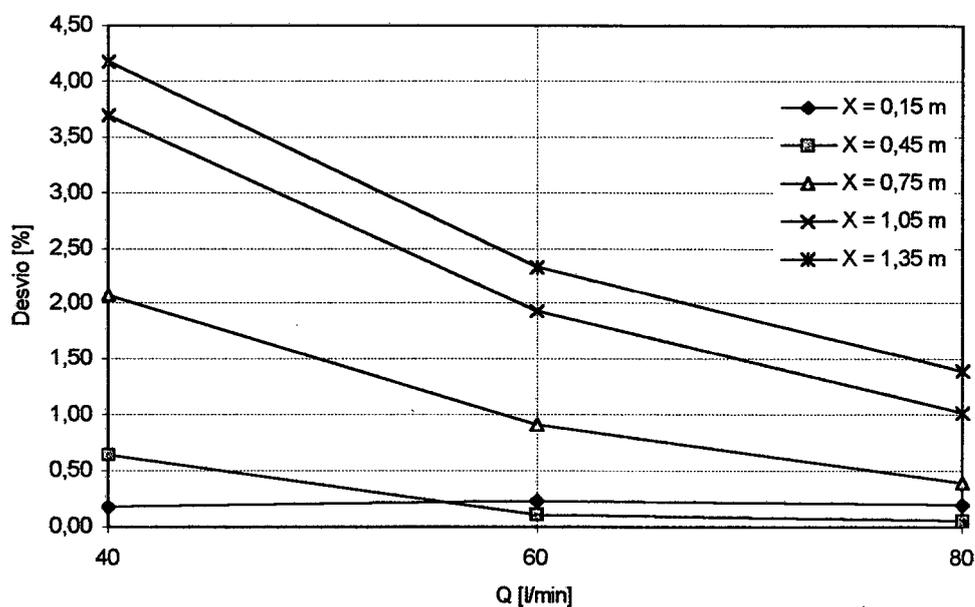


Figura 4.33 - Desvio relativo obtido entre a solução numérica e os dados experimentais, em diversas alturas da coluna de parede molhada, para diversas vazões de ar.

O desvio relativo máximo obtido entre a solução numérica e os dados experimentais coletados na coluna de absorção, levando-se em conta as três vazões de ar estudadas e os pontos de amostragem selecionados, não ultrapassa 5%.

#### 4.5 - INFLUÊNCIA DA TEMPERATURA NO PROCESSO DE UMIDIFICAÇÃO EM UMA COLUNA DE ABSORÇÃO AR-ÁGUA.

É resolvido o problema de absorção isotérmica, em uma coluna de parede molhada, para várias temperaturas (35 °C, 40°C e 50°C), utilizando-se o esquema numérico descrito no Capítulo III. São obtidos os perfis de velocidade, concentração e o fluxo mássico da água na fase gasosa. Os resultados obtidos são comparados com os resultados experimentais.

No estudo é avaliada também a influência da vazão de ar, para uma vazão de água constante, sobre o fenômeno de transferência de massa, sendo estudadas as vazões de ar de 55; 69 e 83 l/min.

##### 4.5.1 EQUIPAMENTOS E PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS

Na Figura 4.34 é apresentado um esquema do equipamento empregado. A coluna de parede molhada possui um diâmetro de 0,024 m e 1,5 m de comprimento.

A realização do experimento é feita escoando-se água por gravidade, pela parede interna do tubo, em forma de filme, e o ar em contracorrente pelo núcleo da coluna. São medidas as temperaturas de bulbo úmido e bulbo seco, na entrada e saída da coluna,

com objetivo de se conhecer a concentração de água presente no ar e assim estabelecer o ganho de umidade pelo comprimento da coluna.

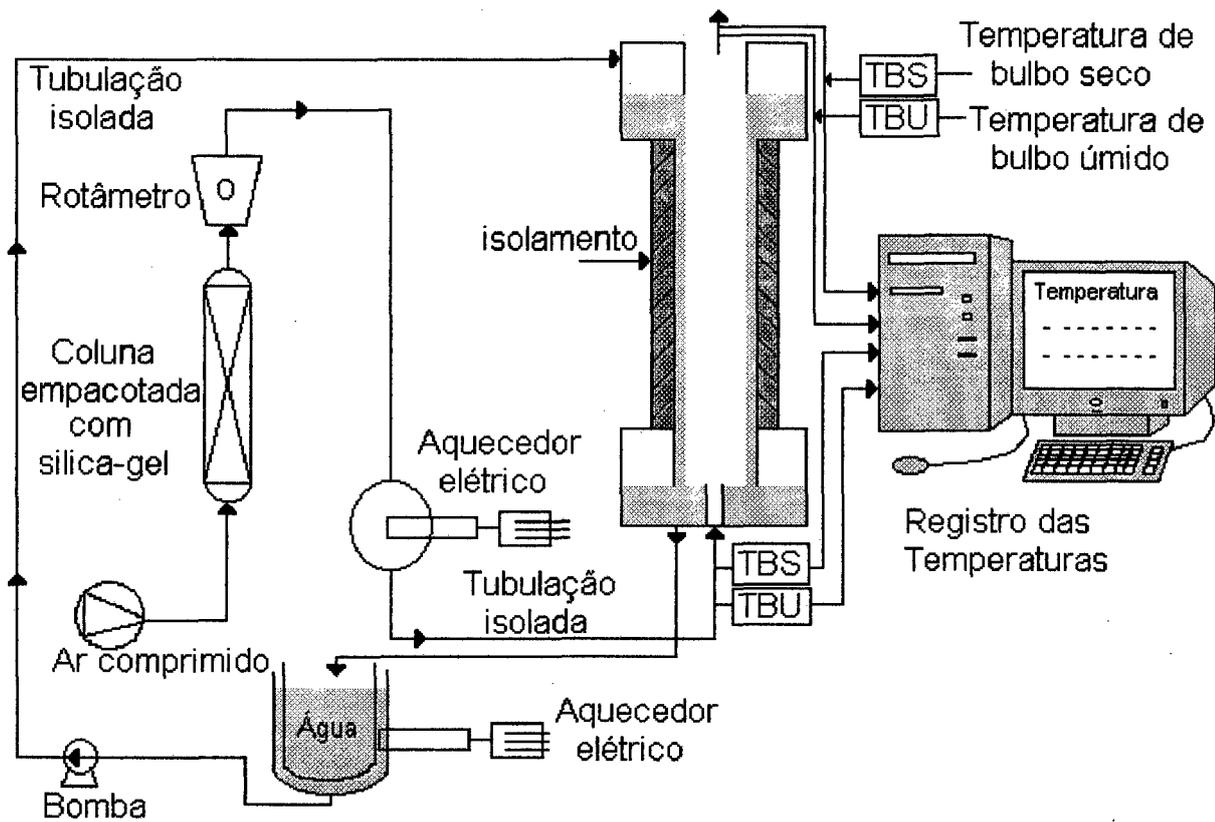


Figura 4.34 - Esquema simplificado do equipamento empregado.

## 4.5.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA.

Na Figura 4.35 é apresentado o diagrama esquemático do domínio do problema, com a especificação das condições de contorno. As condições de contorno prescritas na entrada são: componente do vetor velocidade  $u$  igual a velocidade média do ar, medida experimentalmente na entrada da coluna. A componente do vetor velocidade  $v$  é considerada nula, sendo que a fração mássica é prescrita igual a zero. É resolvida metade do domínio do problema físico, devido à simetria.

Na fronteira sul, é imposta a condição de contorno de simetria (derivada nula); na fronteira norte, é prescrita a componente do vetor velocidade  $u$  igual à velocidade da água que desce pelo tubo, tomando como base a vazão da água experimental de  $5,593 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$ . A componente do vetor velocidade  $v$  é prescrita nula, sendo a fração mássica tomada como o valor de saturação do ar pela água na temperatura trabalhada, considerando-se constante na interface. Na saída da coluna, é imposta a condição de contorno de saída (derivada nula).

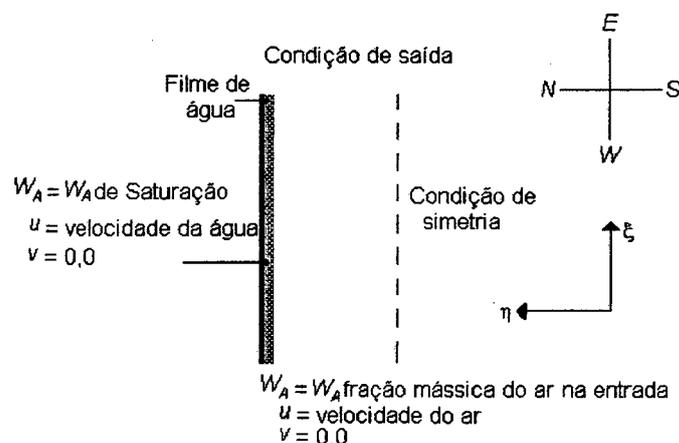


Figura 4.35 - Especificação das condições de contorno.

Na Tabela 4.8 são apresentados os valores das propriedades físicas empregadas na solução do problema, nas temperaturas de 35 °C, 40°C e 50°C. As propriedades: massa específica, viscosidade da mistura e da difusividade são calculadas a partir das equações (4.1), (4.2) e (4.4), respectivamente. A concentração de saturação de ar pela água é avaliada mediante a equação (4.19), na respectiva pressão de vapor.

Tabela 4.8 - Valores das propriedades físicas empregadas.

Temperatura [°C]	Propriedade	Valor	Unidade
35	Fração mássica de saturação de ar pela água	0,0354	kg H <sub>2</sub> O/ kg <sub>solução</sub>
	$\mu$	$2,10 \cdot 10^{-5}$	kg/ms
	$D_{H_2O-ar}$	$2,73 \cdot 10^{-5}$	m <sup>2</sup> /s
	$\rho$	1,12	kg/m <sup>3</sup>
40	Fração mássica de saturação de ar pela água	0,0466	kg H <sub>2</sub> O/ kg <sub>solução</sub>
	$\mu$	$2,19 \cdot 10^{-5}$	kg/ms
	$D_{H_2O-ar}$	$2,80 \cdot 10^{-5}$	m <sup>2</sup> /s
	$\rho$	1,10	kg/m <sup>3</sup>
50	Fração mássica de saturação de ar pela água	0,0795	kg H <sub>2</sub> O/ kg <sub>solução</sub>
	$\mu$	$2,45 \cdot 10^{-5}$	kg/ms
	$D_{H_2O-ar}$	$2,93 \cdot 10^{-5}$	m <sup>2</sup> /s
	$\rho$	1,04	kg/m <sup>3</sup>

Os perfis do vetor velocidade, obtidos na base e no topo da coluna de absorção, utilizando-se a metodologia numérica, com malha 40x20 uniformemente espaçada, para a vazão de água constante, são apresentados esquematicamente na Figura 4.36. Nesta figura observa-se que no topo da coluna, na interface gás-líquido (lado esquerdo da

Figura 4.36), tem-se uma velocidade com sentido contrário ao escoamento de ar; e, no centro do tubo, tem-se a velocidade máxima (lado direito da Figura 4.36).

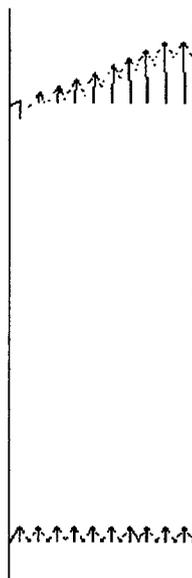


Figura 4.36 - Perfil de velocidade na base e no topo da coluna de absorção

É avaliada a influência da temperatura sobre o processo de transferência de massa de água da fase líquida para a fase gasosa. Para isto, são realizados ensaios experimentais variando a temperatura, e mantendo-se o fluxo de ar constante. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 4.37, para um fluxo de 69 l/min e as alturas  $x=0,36$  m;  $x=0,77$  m;  $x=1,11$  m e  $x=1,50$  m. Pode-se observar, em todas as alturas estudadas, que quanto maior a temperatura, maior é a fração mássica da água no ar. A fração mássica aumenta com o aumento da altura da coluna de parede molhada.

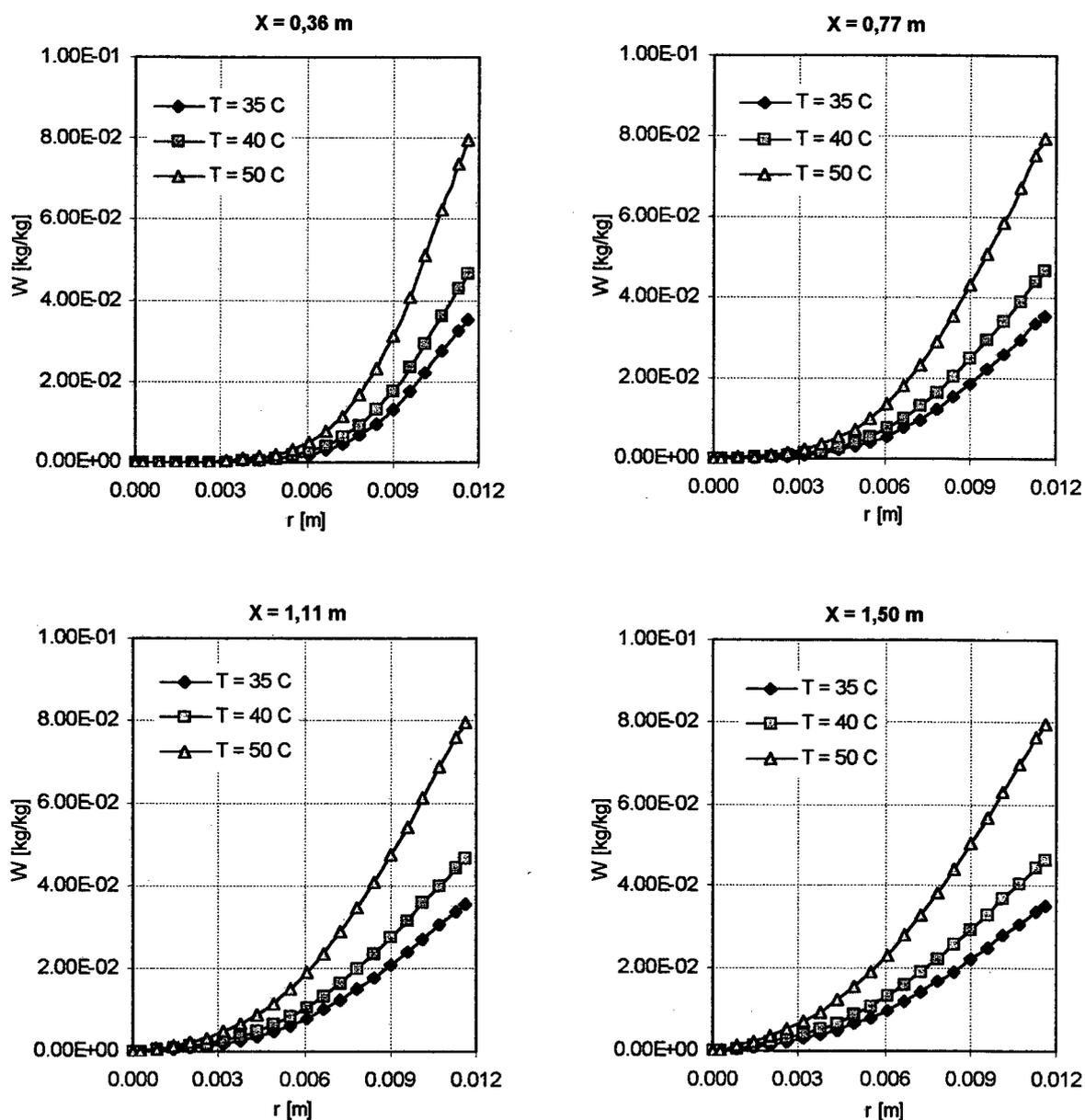


Figura 4.37 - Perfis de fração mássica na fase gasosa para uma vazão de ar de 69 l/min, em diversas alturas da coluna de absorção e para as temperaturas de 35 °C, 40 °C e 50 °C.

Os perfis de concentração apresentam uma variação mais pronunciada para baixas alturas, comparativamente a alturas mais elevadas. Isto pode ser notado mais claramente na Figura 4.38, a qual apresenta os perfis de fração mássica da água para quatro alturas da coluna, para uma vazão de 69 l/min e temperatura de 40 °C. Quanto maior a altura da coluna, para a mesma posição radial, maior é a concentração de água na face gasosa.

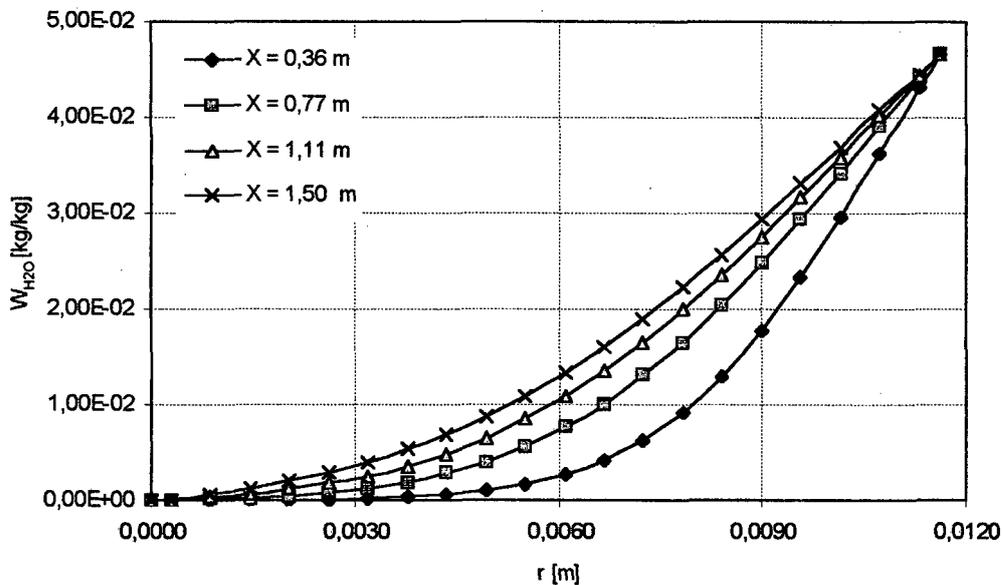


Figura 4.38 - Perfis de fração mássica da água na fase gasosa para diversas alturas, vazão de 69 l/min e 40 °C.

É também estudada a influência da temperatura para outras vazões, obtendo-se um comportamento semelhante ao já descrito. A Figura 4.39 permite visualizar a influência da vazão de ar sobre a fração mássica com relação ao raio da coluna, na

posição  $x = 0,77$  m e para uma temperatura de  $35$  °C. Para baixas vazões de ar, a concentração de água é maior devido ao maior tempo de contato entre ambas as fases.

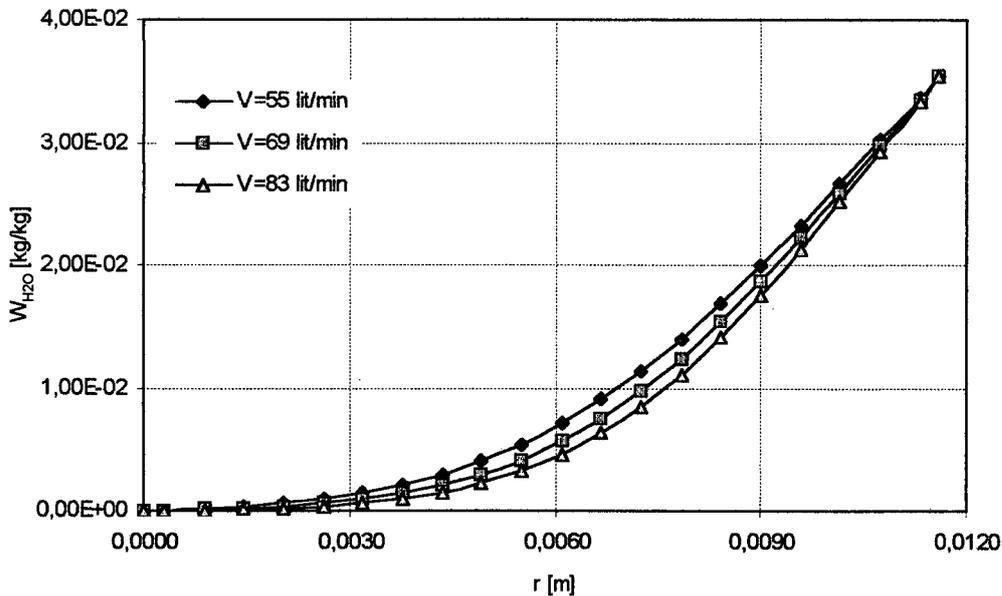


Figura 4.39 - Perfis de fração mássica na fase gasosa, para uma altura na coluna de absorção de 0,77m, e temperatura de  $35$  °C, para diversas vazões de ar.

A Figura 4.40 ilustra o fluxo mássico de água na interface gás-líquido para diferentes temperatura, para vazão de ar de 69 l/min. A transferência de massa da água da fase líquida para a fase gasosa é maior na base da coluna de absorção e, a medida que se incrementa a altura, diminui o fluxo. Esta tendência se verifica para as três temperaturas estudadas. Pode-se observar também que o fluxo é maior nas temperaturas mais elevadas, o que indica uma maior absorção da água pelo ar.

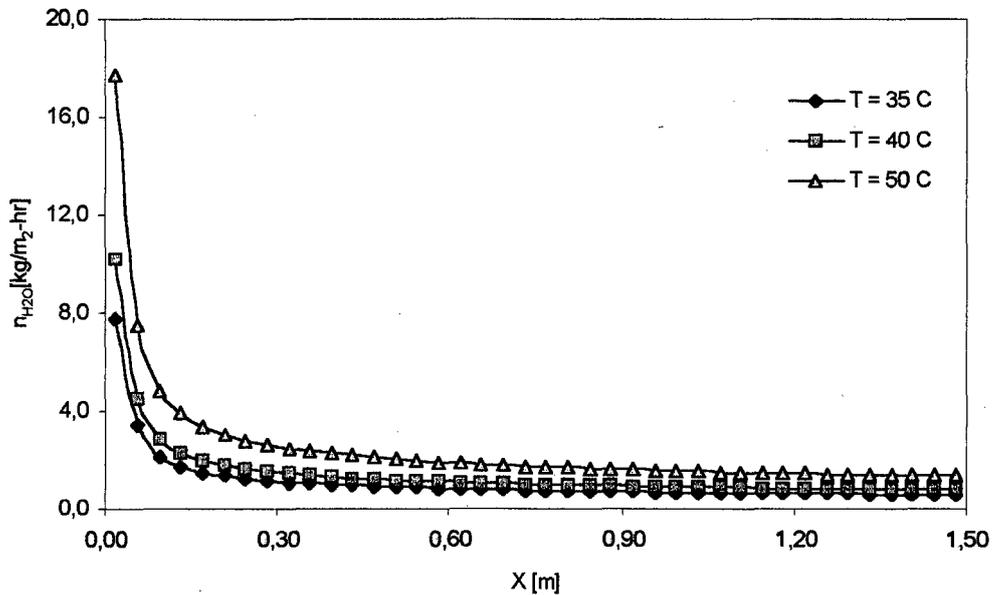


Figura 4.40 - Fluxo mássico de água na interface, para diversas alturas da coluna e diversas temperaturas, para vazão de ar de 69 l/min.

A Tabela 4.9 apresenta a fração mássica média obtida na saída da coluna, bem como, o desvio relativo obtido para diferentes vazões de ar e temperaturas. O desvio é calculado com relação à fração mássica experimental medida na saída da coluna de absorção.

Para todas as vazões de ar e temperaturas estudadas, o desvio relativo é inferior a 24%, comparativamente aos dados experimentais.

Tabela 4.9 Fração mássica média na saída da coluna e desvio relativo para diferentes vazões de ar e temperaturas.

Vazão [l/min]	Temperatura [°C]	$W_{H_2O\ exp}$ [kg/kg]	$W_{H_2O\ num}$ [kg/kg]	Desvio relativo [%]
55	35	0,0291	0,0223	23,44
	40	0,0328	0,0294	10,37
69	35	0,0253	0,0213	15,81
	40	0,0335	0,0282	15,82
	50	0,0403	0,0485	20,35
83	35	0,0253	0,0205	18,97
	40	0,0334	0,0271	18,74

A seguir são apresentadas as principais conclusões e sugestões deste trabalho.

## CAPÍTULO V - CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O objetivo principal deste trabalho é o desenvolvimento de um algoritmo numérico, utilizando o Método de Volumes Finitos, que permita a solução do problema de transferência de massa em colunas de absorção. O Método de Volumes Finitos, tradicionalmente, vem sendo empregado na solução de problemas térmicos. Para validar o modelo, são resolvidos três problemas típicos de absorção gás-líquido, comparando-se os resultados obtidos numericamente com soluções encontradas na literatura e com resultados obtidos da experimentação.

O primeiro dos problemas resolvido é a absorção da amônia de uma mistura gasosa amônia-hidrogênio, por uma mistura líquida amônia-água. Na discretização do domínio de cálculo, o tamanho das malhas empregadas é igual ao utilizado no estudo feito por Martins e Pereira (1996), malha 80x40 na fase gasosa e 80x15 na fase líquida. O desvio máximo na solução de ambas fases é inferior a 10%, com relação à solução numérica obtida por Martins e Pereira (1996).

Outro caso estudado é a dessorção de gás carbônico de uma mistura líquida de dióxido de carbono-água, para o ar. Neste caso, é empregada uma malha 40x20 tanto para a fase líquida, como para a fase gasosa. Os erros encontrados na simulação da fase gasosa não atingiram a 5% comparativamente aos resultados experimentais

obtidos. Os erros encontrados na solução da fase líquida, entretanto, são maiores que os obtidos na solução da fase gasosa. Este comportamento pode ser atribuído à hipótese assumida de que a concentração medida na fase líquida corresponde exatamente ao valor da concentração de  $\text{CO}_2$  na interface gás-líquido. Esta hipótese basea-se no fato que o filme é bastante fino e a amostragem por seringa é representativa da concentração da interface. Quanto maior a vazão de ar utilizada, maior é o fluxo molar de dióxido de carbono, da fase líquida para a fase gasosa.

O terceiro dos problemas estudados é a umidificação do ar pela água, avaliando-se a influência da temperatura sobre o processo de transferência de massa. Observa-se que a transferência de massa do componente em estudo é favorecida com o aumento da temperatura, apresentando um maior fluxo mássico de água na interface. Para todas as temperaturas estudadas, o erro relativo não ultrapassa 24 %, sendo este dependente da posição dos termopares de bulbo seco e úmido, na saída e entrada da coluna.

O comportamento de outras variáveis, como vazão, altura e posição radial no processo de transferência de massa também é avaliado, estabelecendo-se que a transferência de massa da água para o ar é favorecida pelo aumento da altura e da posição radial. Este comportamento é observado para todas as temperaturas estudadas. Analisando-se a influência da vazão, pode-se notar que a transferência de massa é maior perto da interface, sendo que para altas vazões obtém-se um maior gradiente de concentração da espécie de interesse e conseqüentemente um maior fluxo mássico de água na interface.

Analisando-se os resultados obtidos, pode-se concluir que o uso do Método de Volumes Finitos apresenta-se adequado à solução de problemas de transferência de massa em colunas de absorção.

Como sugestões para trabalhos futuros nas colunas de absorção existentes no LABMASSA/EQA/UFSC, recomenda-se que sejam utilizados outros métodos de amostragem para a determinação da concentração de  $\text{CO}_2$  na interface, preferencialmente métodos ópticos que não perturbem o escoamento do filme líquido. Outro procedimento experimental que pode ser utilizado é a instalação de pequenos capilares de vidro em U conectados a tubos de ensaio, ao longo da altura da coluna, com a finalidade de coletar as amostras sem a interferência causada pela introdução de agulhas no escoamento do filme líquido.

Uma extensão do presente trabalho é o tratamento do processo de absorção estudado, considerando o caso não isotérmico. O estudo da influência do diâmetro da coluna no processo de absorção pode ser feito utilizando-se colunas de diferentes diâmetros.

Para o estudo do problema térmico em um processo não isotérmico é recomendável a instalação de medidores de temperatura tipo agulhas ao longo da altura da coluna, conectados a uma placa de aquisição de dados. Na atualidade só são tomados dados de temperatura de bulbo úmido e seco na entrada e na saída da coluna, sendo necessário o uso de uma interpolação linear para conhecer os dados intermédios.

Com respeito à metodologia numérica, é recomendável o uso de uma função de interpolação mais completa, buscando minimizar os erros de difusão numérica.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDBERG, J. W., Non-isothermal absorption of gases into falling liquid films, M. S. Thesis, University of Texas at Austin, Austin, TX, 1982.
- ANDBERG, J. W. e VLIET. G. C., Design guidelines for Water LiBr absorbers, ASHRAE Transactions 89, 220, 1983.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E. e LIGHFOOT, E. N., Transport Phenomena, Editora John Wiley & Sons, New York, 1960.
- BORTOLI, A. L. de, O Uso de Variáveis Co-localizadas na Solução de escoamentos Supersônicos sobre Corpos de Geometrias Arbitrárias, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1990.
- FOUST, A. S., WENZEL, L. A. CLUMP, C. W. e MAUS, L., Princípios das Operações Unitárias, 2<sup>a</sup> ed., Editora Guanabara Dois S. A, Rio de Janeiro, 1982.
- GEANKOPLIS, C.J, Transport Processes and Unit Operations, 2<sup>a</sup> ed, Editora Allyn and Bacon Series in Engineering, U.S.A, 1983.
- GROSSMAN, G., Simultaneous Heat and Mass Transfer in Film Absorption Under Laminar Flow, Int. J. Heat Mass Transfer v.26, p. 357-371, 1983.
- IBRAHIM, G. A. e VINNICOMBE, G. A., A Hybrid Method to Analyse the Performance of Falling Film Absorbers, International Journal of Heat and Mass Transfer, v.36, n.5, p.1383-1390, 1993.

- KING, C. L., Procesos de Separación. Editorial REVERTE, S. A. , España, 1980.
- MAJUMDAR, S., Role of Underrelaxation in Momentum Interpolation for Calculation of Flow with Non-Staggered Grids, Numerical Heat Transfer, 13, p.125-132, 1988.
- MALISKA, C. R., A Solution Method for Three-Dimensional Parabolic Fluid Flows Problems in Non-Orthogonal Coordinates, Ph.D.Thesis, University of Waterloo, Canada, 1981.
- MALISKA, C. R., Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional - Coordenadas Generalizadas, Monografia submetida como requisito para o concurso de Professor Titular na área de Ciências Térmicas, Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC, 1992.
- MALISKA, C. R., Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, LTC - Livros Técnicos e Científicos S.A., Rio de Janeiro, Brasil, 1995.
- MARCHI, C. H., MALISKA, C.R. e BORTOLI, A.L. de, The Use of Co-located Variables in the Solution of Supersonic Flows, COBEM 89 - X Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 1989.
- MARTINS, G. e PEREIRA, J. T. V., Absorption of Ammonia from a Gaseous Mixture with Hydrogen in a Wetted Wall Absorber in Laminar Natural Convection, VI ENCIT / VI LATCYM, p.1245-1250, Florianópolis-SC, 1996.
- PATANKAR, S. V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Co., Washington, USA, 1980.
- PATANKAR e SPALDING, D. B., A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows, International Journal for Heat and Mass Transfer, v. 15, p. 1787-1806, 1972.

- PERIC, M., KESSLER, R. e SCHEUERER, G., Comparison of Finite-Volume Numerical Methods with Staggered and Co-located Grids, Computers and Fluids, v.16, p. 389-403, 1988.
- PERRY, R. H. e GREEN, D.W., Perry's Chemical Engineers' Handbook, 6<sup>a</sup> ed, Editora McGraw-Hill, New York, 1984.
- RAITHBY, G. D. e TORRANCE, K. E., Upstream-Weighted Differencing Schemes and their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow, Computers and Fluids, v. 2, p.191-206, 1974.
- RAITHBY, G. D., Predictions of Dispersion by Surface Discharge, Basin Investigation and Modelling Section, Canada Centre for Inland Waters, Burlington, Ontario, Canada, 1976.
- REID, R. C., PRAUSNITZ, J. e SHERWOOD, T. K., The Properties of Gases and Liquids, 3a. ed., McGraw-Hill, New York, USA, 1977.
- SCHNEIDER, G. E., A Novel Co-located Finite Difference Procedure for the Numerical Computation of Fluid Flow, AIAA - 4<sup>th</sup> Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference, Boston, Massachusetts, 1986.
- SCHNEIDER, G. E. e ZEDAN, M. A., Modified Strongly Implicit Procedure for the Numerical Solution of Field Problems, Numerical Heat Transfer, v.11, p. 363-390, 1987.
- SHIH, T. M., TAN, C. H. e HWANG, B. C., Effects of Grid Staggering on Numerical Schemes, Int. Journal for Numerical Methods in Fluids, v.9, p.193-212, 1989.
- SILVA, A. F. C. da, Um Procedimento em Volumes Finitos para a Solução de Escoamentos de Qualquer Velocidade, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1991.

- SILVA, A., ULSON DE SOUZA, A. A., ULSON DE SOUZA, S. M. A. G. e VALLE, J. A. B., Simulação da Transferência de Massa em uma Coluna de Absorção CO<sub>2</sub>-Água, Utilizando o Método de Volumes Finitos, VI ENCIT / VI LATCYM, p.1257-1262, Florianópolis-SC, 1996.
- TREYBAL, R. E. , Operaciones Con Transferencia de Masa, Editorial Hispano Americana S. A., Buenos Aires, 1973.
- ULRICH, G. D., A Guide to Chemical Engineering Process Design and Economics, Editora John Wiley & Sons, USA, 1984.
- ULSON DE SOUZA, A. A., Um Esquema para Minimização da Difusão Numérica na Solução de escoamentos em Geometrias Arbitrárias, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1992.
- ULSON DE SOUZA, S. M. A. G., Um Esquema Numérico Utilizando Variáveis Colocalizadas com Função de Interpolação Completa para a Solução de Problemas de escoamento de Fluidos, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1992.
- VAN DOORMAAL, J. P. e RAITBY, G. D., Enhancements of the SIMPLEC Method for Predicting Incompressible Fluid Flows, Numerical Heat Transfer, v.7, p. 147-163, 1984.
- VOGEL, A. I., Química Analítica Quantitativa, 2<sup>a</sup>. edição, Editorial Kapelusz S.A, Buenos Aires, 1960.
- WELTY, J. R., WICKS, C. E. e WILSON, R. E., Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer, 3<sup>a</sup> ed., Editora John Wiley & Sons, Singapore, 1984.
- WILHELM, E., BATTINO, R. e WILCOCK, R. J., Low-Pressure Solubility of Gases in Liquid Water, Chemical Reviews, v.77, n.2, p.219-162, 1977.

- YANG, R. e CHEN J. H., A Numerical Study of the Non-Absorbable Effects on the Falling Liquid Film Absorption, Wärme-und Stoffübertragung, v.26, p.219-223, 1991.
- YANG, R. e JOU, D., Heat and Mass Transfer of Absorption Process for the Falling Film Flow Inside a Porous Medium, Int. J. Heat Mass Transfer, v.38, n.6, p. 1121-1126, 1995.
- YANG, R. e WOOD, B. D., A Numerical Modeling of on Absorption Process on a Liquid Falling Film, Solar Energy, Vol. 48, pp. 195-198, 1992.
- ZARZYCKI, R. e CHACUK, A., Absorption, Fundamentals and Applications, Editorial B.P.C.C. Wheatons Ltd, Great Britain, 1993.