

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE**

**CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM REATOR DE  
CLORAÇÃO DE ETENO PARA PRODUÇÃO DE EDC**

**Autora:** Angela Lucínia Urtiga Vasconcelos

**Orientador:** José Jailson Nicácio Alves

**Campina Grande – Paraíba**

**Julho de 2011**

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE**

**CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM REATOR DE  
CLORAÇÃO DE ETENO PARA PRODUÇÃO DE EDC**

**Autora:** Angela Lucínia Urtiga Vasconcelos

**Orientador:** José Jailson Nicácio Alves

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

**Campina Grande – Paraíba**

**Julho de 2011**



FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCCG

V331m Vasconcelos, Angela Lucinia Urtiga.  
Modelagem e Simulação de um Reator de Cloração de Eterno Para  
Produção de EDC / Angela Lucinia Urtiga Vasconcelos. — Campina  
Grande, 2011.  
86 f. : il. Col.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade  
Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia.

Referências.

Orientador: Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves.

1. Fluidodinâmica Computacional. 2. Reator. 3. EDC. 4. Eteno. I.  
Título.

CDU – 66.092.4(043)

Angela Lucinia Urtiga Vasconcelos

## MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM REATOR DE CLORAÇÃO DE ETENO PARA PRODUÇÃO DE EDC

Dissertação de Mestrado aprovada em 08/07/2011, pela banca examinadora constituída dos seguintes professores:



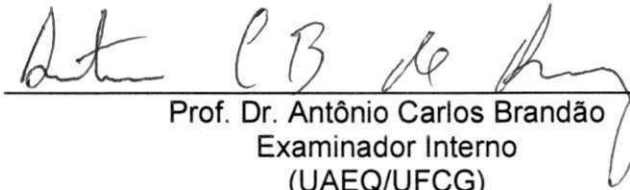
---

Prof.<sup>a</sup>. Dr. José Jailson Nicácio Alves  
- Orientador -  
(UAEQ/UFCG)



---

Prof.<sup>a</sup>. Dr. Júlio Inácio Holanda Tavares Neto  
Examinador Externo  
(Braskem)



---

Prof. Dr. Antônio Carlos Brandão  
Examinador Interno  
(UAEQ/UFCG)



---

Prof. Dra. Bianca Viana de Sousa  
Examinador Interno  
(UAEQ/UFCG)

Campina Grande – PB  
2011

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço em primeiro lugar a Deus e Nossa Senhora, por tudo em minha vida.

Aos meus pais, Luiz Gonzaga Sales Vasconcelos e Azuilda Urtiga Vasconcelos, por todo apoio, força, dedicação e carinho.

Aos meus irmãos, André Luiz Urtiga Vasconcelos e Andreza Lilian Urtiga Vasconcelos, pela amizade e companheirismo.

Aos familiares e amigos.

Ao professor e orientador José Jailson Nicácio Alves pelo apoio e paciência.

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

A todos que contribuíram direta ou indiretamente com o desenvolvimento deste trabalho.

## RESUMO

O reator de cloração de eteno utilizado na produção de 1,2-dicloroetano (EDC) é um reator do tipo coluna de bolhas. O processo no reator de cloração de eteno ocorre a partir da injeção da fase gasosa, eteno, através de três espargidores localizados na base da coluna no meio líquido, uma mistura de EDC e cloro dissolvido. A reação de cloração direta do eteno realizada no reator é instantânea, portanto, a etapa limitante do processo é a transferência de massa do eteno gasoso para o EDC líquido. Atualmente verifica-se a perda de eteno não reagido no topo do reator o que diminui o rendimento do processo, já que o eteno é uma matéria-prima de alto custo. Deste modo, esta dissertação tem por objetivo fazer a modelagem e simulação do reator de cloração de eteno e analisar através de técnicas estatísticas quais fatores são mais influentes sobre a fração volumétrica de eteno no topo do reator. A fluidodinâmica computacional foi empregada na modelagem e simulação do reator. As simulações tridimensionais do reator foram realizadas com o pacote computacional ANSYS-CFX 12 que utiliza o método dos volumes finitos na discretização das equações diferenciais que governam o escoamento em reatores de coluna de bolhas. A seqüência das simulações foi realizada a partir do planejamento fatorial  $2^4$ . O planejamento fatorial  $2^4$  foi utilizado na análise da influência de quatro fatores (diâmetro dos furos dos espargidores de eteno, diâmetro do reator, vazão de EDC e vazão de eteno) em dois níveis e suas combinações sobre a fração volumétrica de eteno no topo do reator. O planejamento e todas as análises estatísticas foram realizados no software Minitab 16. A partir dos resultados das simulações foi realizada a análise estatística dos dados levando a conclusão que dentre os fatores estudados aqueles que apresentaram uma maior influência sobre a fração volumétrica do gás eteno no topo do reator foram o diâmetro do reator, a vazão de eteno e a interação destes dois fatores. Portanto, o aumento do diâmetro do reator diminui a fração volumétrica do gás eteno no topo do reator, mas o aumento da vazão de eteno provoca o aumento da fração volumétrica do gás eteno no topo do reator.

**PALAVRAS-CHAVE:** fluidodinâmica computacional, reator, EDC, eteno.

## ABSTRACT

The ethylene chlorination reactor used in the production of 1,2-dichloroethane (EDC) is a bubble column reactor. The ethylene chlorination reactor is a process which consist in injection from the gas phase (ethylene) through three sparger located at the base of the column in the liquid medium formed by chlorine and EDC dissolved. The direct chlorination reaction of ethylene held in the reactor is instantaneous, so that limiting step of the process is the mass transfer of ethylene gas to EDC in the liquid phase. Currently there is no loss of ethylene reacted in the top reactor section which reduces the yield of the process, since the ethylene raw material is a high cost. Thus, the objective of this dissertation is to make the modeling and simulation of reactor chlorination of ethylene and to analyze through statistical techniques which factors are most influential on the volume fraction of ethylene in the top of the reactor. The computational fluidynamics was used in modeling and simulation of reactor. The three-dimensional simulations of the reactor were performed using the ANSYS CFX-12 that uses the finite volume discretization of the differential equations governing the flow in bubble column reactors. The sequence of simulations was performed from the  $2^4$  factorial design. The  $2^4$  factorial design was used to analyze the influence of four factors (diameter of holes from the sprinkler of ethylene, the reactor diameter, flow rate and flow of EDC Ethylene) on two levels and their combinations on the volume fraction of ethylene in the top of the reactor. The planning and all statistical analysis were performed in Minitab 16 software. From the results of the simulations was performed the statistical analysis of data leading to the conclusion that among the factors studied who had a major influence on the volume fraction of ethylene gas on top of the reactor were the diameter of the reactor, the ethylene flow and interaction these two factors. Therefore, increasing the diameter of the reactor decreases the volume fraction of ethylene gas at the top of the reactor, but the increased flow of ethylene increases the gas volume fraction of ethylene in the reactor top.

**KEYWORDS:** computational fluid dynamics, reactor, EDC, ethylene.

## SUMÁRIO

RESUMO.....	iv
ABSTRACT .....	v
LISTA DE FIGURAS .....	viii
LISTA DE TABELAS.....	xi
NOMENCLATURA.....	xii
1. Introdução .....	1
1.1    Apresentação do Trabalho .....	2
1.2    Objetivos.....	3
1.2.1    Objetivo geral.....	3
1.2.2    Objetivos específicos .....	3
2. Revisão Bibliográfica .....	4
2.1    Reator de coluna de bolhas .....	4
2.1.1    Fluidodinâmica do reator de coluna de bolhas.....	5
2.1.2    Transferência de massa no reator de coluna de bolhas .....	6
2.1.3    Efeito da velocidade superficial do gás.....	7
2.1.4    Efeito das propriedades da fase líquida.....	8
2.1.5    Efeito das propriedades das bolhas de gás .....	9
2.1.6    Efeito das dimensões da coluna, dos distribuidores e das condições operacionais	9
2.2    Descrição do processo de cloração de eteno para obtenção de EDC....	10
2.3    Fluidodinâmica computacional .....	12
2.3.1    Modelagem matemática .....	13
2.4.2    Volumes finitos .....	31
2.4.3    Experiências e pesquisas sobre coluna de bolhas em fluidodinâmica computacional	32
2.5    Planejamento Experimental .....	34
2.5.1    Planejamento Fatorial $2^k$ .....	35
3. Metodologia Numérica.....	37
3.1    Metodologias da Fluidodinâmica Computacional .....	37
3.1.1    Geometria/ Malha .....	37



3.1.2	Pré-Processamento .....	37
3.1.3	Solver .....	38
3.1.4	Pós-Processamento .....	38
4.	Resultados e Discussão .....	39
4.1	Modelagem em CFD .....	39
4.1.1	Construção da geometria .....	39
4.1.2	Geração da malha numérica .....	42
4.1.3	Pré-Processamento .....	46
4.2	Planejamento fatorial $2^4$ .....	47
4.3	Resultados dos experimentos .....	48
5.	Conclusões .....	64
	Propostas para Trabalhos Futuros .....	65
	Referências Bibliográficas .....	66

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Regimes de fluxo de gás em coluna de bolhas.....	5
Figura 2. Esquema do Reator de Cloração de Eteno .....	11
Figura 3. Geometria do Reator de Cloração de Eteno.....	40
Figura 4. Geometria dos Espargidores de Eteno. ....	41
Figura 5. Geometria dos Espargidores de Eteno. ....	41
Figura 6. Malha Numérica do reator com detalhe do plano de simetria.....	42
Figura 7. Malha Numérica do reator com detalhe próximo as paredes.....	43
Figura 8. Malha Numérica do reator com detalhe próximo aos espargidores de eteno..	43
Figura 9. Malha Numérica do reator com detalhe do inflation.....	44
Figura 10. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 17. ....	49
Figura 11. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 1. ....	49
Figura 12. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 2. ....	50
Figura 13. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 3. ....	50

Figura 14. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 4. ....	51
Figura 15. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 5. ....	51
Figura 16. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 6. ....	52
Figura 17. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 7. ....	52
Figura 18. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 8. ....	53
Figura 19. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 9. ....	53
Figura 20. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 10. ....	54
Figura 21. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 11. ....	54
Figura 22. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 12. ....	55
Figura 23. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 13. ....	55
Figura 24. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 14. ....	56

Figura 25. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 15. ....	56
Figura 26. Perfil da Fração Volumétrica de Eteno ao longo do Reator no plano de simetria do experimento 16. ....	57
Figura 27. Estimativa dos efeitos dos fatores. ....	60
Figura 28. Gráfico da probabilidade normal dos efeitos. ....	61
Figura 29. Gráfico da interação dos fatores B e D ....	62
Figura 30. Gráfico de Pareto para os dados experimentais. ....	62

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Características da malha numérica da geometria 1.....	44
Tabela 2. Características da malha numérica da geometria 2.....	45
Tabela 3. Características da malha numérica da geometria 3.....	45
Tabela 4. Características da malha numérica da geometria 4.....	45
Tabela 5. Propriedades dos Fluidos a 25°C .....	46
Tabela 6. Condições de Contorno.....	47
Tabela 7. Fatores analisados em três níveis.....	47
Tabela 8. Planejamento Fatorial. ....	48
Tabela 9. Resultados dos Experimentos .....	58
Tabela 10. Constantes dos Contrastes para o planejamento $2^4$ .....	59

## NOMENCLATURA

### Letras latinas

$A_{\alpha\beta}$	área interfacial por unidade de volume
$B$	soma das forças de campo
$B_B$	taxa de natalidade devido a quebra das partículas grandes
$B_C$	taxa de natalidade devido a coalescência de partículas menores;
$C_D$	coeficiente de arraste para partícula, $[\text{kg m}^3 \text{s}^{-1}]$
$C_D(\text{cap})$	coeficiente de arraste para partícula em forma de <i>cap</i> , $[\text{kg m}^3 \text{s}^{-1}]$
$C_D(\text{elipse})$	coeficiente de arraste para partícula em forma de <i>elipse</i> , $[\text{kg m}^3 \text{s}^{-1}]$
$C_D(\text{esfera})$	coeficiente de arraste para partícula em forma de <i>esfera</i> , $[\text{kg m}^3 \text{s}^{-1}]$
$C_{D\infty}$	coeficiente de arraste de uma única partícula, $[\text{kg m}^3 \text{s}^{-1}]$
$C_{\epsilon 1}$	constante do modelo de turbulência $(k - \epsilon)$ , [ ]
$C_{\epsilon 2}$	constante do modelo de turbulência $(k - \epsilon)$ , [ ]
$d$	diâmetro, [mm]
$d_b$	diâmetro das bolhas, [mm]
$d_\beta$	diâmetro das bolhas da fase $\beta$
$D_B$	taxa de mortalidade devido a quebra em partículas menores
$D_C$	taxa de mortalidade devido a coalescência com outras partículas

$E_o$	número de Eotvos, [ ]
$\vec{g}$	vetor gravidade, [m s <sup>-2</sup> ]
$k$	geração de turbulência, [ ]
$M_c$	força de arraste, [N = kg m s <sup>-2</sup> ]
$M_\alpha$	forças interfaciais, [N = kg m s <sup>-2</sup> ]
$M_{\alpha\beta}$	somatório de todas as forças interfaciais, [N = kg m s <sup>-2</sup> ]
$M_{\alpha\beta}^D$	força de arraste ( <i>Drag force</i> ), [N = kg m s <sup>-2</sup> ]
$M_{\alpha\beta}^L$	força <i>lift</i> ( <i>lift force</i> ), [N = kg m s <sup>-2</sup> ]
$M_{\alpha\beta}^{LUB}$	força de lubrificação da parede ( <i>wall lubrication force</i> ), [N = kg m s <sup>-2</sup> ]
$M_{\alpha\beta}^{VM}$	força de massa virtual ( <i>virtual mass force</i> ), [N = kg m s <sup>-2</sup> ]
$M_{\alpha\beta}^{TD}$	força de dispersão turbulenta ( <i>turbulence dispersion force</i> ), [N = kg m s <sup>-2</sup> ]
$M_s$	força de pressão sólida ( <i>solids pressure force</i> ), [N = kg m s <sup>-2</sup> ]
$n(v, t)$	densidade numérica das partículas de tamanho $v$ no tempo $t$ ;
$p'$	pressão modificada, [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-2</sup> ]
$p_\alpha$	pressão da fase $\alpha$ , [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-2</sup> ]
$P_k$	produção de turbulência, [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-3</sup> ]
$Re_m$	número de Reynolds modificado, [ ]

$r_{dm}$	máximo empacotamento da fase dispersa, [ ]
$S_M$	fonte de momento, [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-2</sup> ]
$S_{M\alpha}$	fonte de massa devido a forças externas, [N = kg m s <sup>-2</sup> ]
$t$	tempo, [s]
$\vec{U}$	vetor velocidade, [m s <sup>-1</sup> ]
$\vec{U}_\alpha$	vetor velocidade da fase $\alpha$ , [m s <sup>-1</sup> ]
$\vec{U}_d$	vetor velocidade da fase dispersa, [m s <sup>-1</sup> ]
$\vec{U}_c$	vetor velocidade da fase contínua, [m s <sup>-1</sup> ]
$u$	flutuação da velocidade, [m s <sup>-1</sup> ]

### Letras gregas

$\varepsilon$	taxa de dissipação da turbulência, [m <sup>2</sup> s <sup>-3</sup> ]
$\varepsilon_\alpha$	fração volumétrica da fase $\alpha$ , [ ]
$\rho$	densidade, [kg m <sup>-3</sup> ]
$\rho_\alpha$	densidade da fase $\alpha$ , [kg m <sup>-3</sup> ]
$\sigma_k$	constante do modelo de turbulência ( $k - \varepsilon$ ), [ ]
$\sigma_\varepsilon$	constante do modelo de turbulência ( $k - \varepsilon$ ), [ ]
$\mu$	viscosidade dinâmica, [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]



$\mu_\alpha$	viscosidade dinâmica da fase $\alpha$ , [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]
$\mu_c$	viscosidade dinâmica da fase contínua, [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]
$\mu_d$	viscosidade dinâmica da fase dispersa, [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]
$\mu_t$	viscosidade turbulenta, [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]
$\mu_{eff}$	viscosidade efetiva, [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]
$\delta$	matriz identidade, [ ]

### Sobrescrito

$\bar{A}$	vetor A
$\overline{A}$	média temporal de A
$A^T$	matriz transposta de A

### Subscrito

b	bolhas
c	fase contínua
d	fase dispersa
m	propriedade média
t	turbulento
$\alpha$	fase contínua
$\beta$	fase dispersa

*eff*      efetivo

### **Siglas**

CFD      Fluidodinâmica Computacional (Computational Fluid Dynamics)

FVM      Método dos Volumes Finitos (Finite Volume Method)

MUSIG      Multi-Size-Group

PDE      Equação Diferencial Parcial (Partial Differential Equation)

# Capítulo 1

## Introdução

Devido à globalização, as indústrias estão pressionadas a aumentar a qualidade de seus produtos, a elevar os índices de produtividade, a gerar eficiência e a melhoria de seus processos, a garantir a otimização dos custos e a sustentabilidade do negócio, que lhe permitam permanecer lucrativa no mercado cada vez mais competitivo e exigente.

O reator de cloração de eteno é um equipamento utilizado na indústria de produção de polímeros. As principais matérias-primas são o eteno e o cloro que participam da reação de cloração direta do Eteno para a produção de 1,2-dicloroetano (EDC). O reator em questão é um reator do tipo coluna de bolhas que possui uma fluidodinâmica bastante complexa devido à presença da fase gasosa na fase líquida.

Quando não se dispõe de um modelo matemático de determinado equipamento, como é o caso do reator de cloração de eteno, a operação é basicamente realizada com base no julgamento de engenharia, ou seja, na experiência adquirida ao longo dos anos de operação, através da análise dos sintomas e efeitos de cada modificação sobre o processo. No caso deste reator, cada alteração realizada pode acarretar em perdas de produtividade e/ou qualidade do produto final. Para assegurar o acesso ao mercado globalizado as indústrias precisam de produtos e serviços de qualidade, além disso, os custos têm que ser mantidos no menor nível possível.

Atualmente verifica-se a perda de eteno não reagido no topo do reator de cloração de eteno o que conseqüentemente reduz o rendimento do processo, já que o Eteno é uma matéria-prima de alto custo.

A modelagem e simulação através da fluidodinâmica computacional é extremamente útil em situações onde se desconhece o perfil do escoamento e é difícil a aferição. O estudo do comportamento fluidodinâmico de um equipamento, como o reator de cloração de eteno, é fundamental quando se busca obter o melhor rendimento.

## **1.1 Apresentação do Trabalho**

A apresentação do trabalho desenvolvido durante esta dissertação está dividida e cinco capítulos:

**Capítulo 1. Introdução** – Este capítulo apresenta uma breve descrição do equipamento utilizado nos estudos desta dissertação de mestrado, além dos objetivos do trabalho.

**Capítulo 2. Revisão Bibliográfica** – Neste capítulo apresenta-se uma descrição mais detalhada do reator de cloração de eteno como também uma revisão dos principais artigos sobre coluna de bolhas, que foram utilizados como base para o desenvolvimento deste trabalho. Além disso, são apresentadas revisões sobre a fluidodinâmica computacional, sobre a modelagem matemática pertinente ao trabalho, sobre as equações que governam o fenômeno e o sobre a técnica dos volumes finitos.

**Capítulo 3. Metodologia Numérica** – A metodologia numérica utilizada deste trabalho é explanada neste capítulo. Este capítulo apresenta uma breve descrição sobre o método do planejamento experimental do tipo fatorial utilizado para analisar o efeito dos fatores individuais e suas correlações.

**Capítulo 4. Resultados e Discussão** – Neste capítulo são definidas as condições de contorno e dos parâmetros das simulações. Além disso, são apresentados e discutidos os resultados como também é feita a análise dos fatores envolvidos no trabalho através do planejamento fatorial.

**Capítulo 5. Conclusões** – Neste capítulo são apresentadas as principais conclusões obtidas neste trabalho.

## **1.2 Objetivos**

### **1.2.1 Objetivo geral**

O objetivo desta dissertação de mestrado foi analisar através das técnicas da fluidodinâmica computacional (CFD) e do planejamento experimental fatorial o efeito que determinados fatores podem provocar no perfil de fração volumétrica de eteno no interior do reator de cloração de eteno.

### **1.2.2 Objetivos específicos**

O objetivo principal foi determinar os fatores mais influentes sobre o perfil de fração volumétrica de eteno de modo a diminuir a perda de eteno não reagido no topo do reator, já que esta matéria-prima possui alto custo.

Os fatores estudados foram: a vazão de entrada do gás eteno, a vazão de entrada do 1,2-dicloroetano (EDC), o diâmetro do reator e o diâmetro dos furos dos distribuidores (ou espargidores) de eteno.

## Capítulo 2

### Revisão Bibliográfica

#### 2.1 Reator de coluna de bolhas

O reator de coluna de bolhas, como o próprio nome diz, é uma coluna cilíndrica na qual o gás é injetado, em forma de bolhas, através de distribuidores em uma fase líquida ou suspensão líquido-sólido. O reator de coluna de bolhas pertence à classe geral dos reatores multifásicos que consiste em três principais categorias, ou seja, o reator de leito gotejante (leito fixo ou recheado), o reator de leito fluidizado e o reator de coluna de bolhas (KANTARCI et al., 2005). Eles são utilizados principalmente em processos químicos envolvendo reações tais como a oxidação, a cloração, a alquilação, a polimerização e a hidrogenação, na fabricação de combustíveis sintéticos por conversão de gás e em processos bioquímicos como a fermentação e o tratamento biológico de águas residuais (SHAH et al., 1982, apud KANTARCI et al., 2005, p. 2264).

O reator de coluna de bolhas oferece uma série de vantagens em relação a outros reatores com o mesmo objetivo, tornando-se, portanto uma escolha atraente para vários processos multifásicos, especialmente em processos que envolvam reações altamente exotérmicas. Eles apresentam excelentes características de transferência de calor e massa, pouca manutenção e baixos custos operacionais, devido a ausência de partes móveis e a sua estrutura compacta, e a durabilidade do catalisador ou material de recheio é alta (DEGALEESAN et al., 2001). O reator de coluna de bolhas pode ser operado em regime semibatelada ou contínuo, onde a velocidade superficial do líquido é, pelo menos uma ordem de grandeza, menor do que a velocidade superficial do gás. Portanto, é o fluxo de gás que controla a hidrodinâmica das diferentes fases neste sistema.

Devido à importância industrial e ampla área de aplicação dos reatores de coluna de bolhas o design, o scale-up e a investigação de importantes parâmetros

hidrodinâmicos e operacionais, que caracterizam o seu funcionamento, ganharam atenção considerável nos últimos 20 anos (KANTARCI et al., 2005).

### 2.1.1 Fluidodinâmica do reator de coluna de bolhas

O comportamento fluidodinâmico do reator de coluna de bolhas é extremamente complexo, além de, depender fortemente do regime de fluxo prevalecente e ter um efeito significativo sobre sua operação e desempenho (KANTARCI et al., 2005).

O regime de fluxo é classificado em três tipos: o regime homogêneo, o regime heterogêneo e o regime pistonado. Basicamente, a formação e a estabilidade destes regimes dependem das velocidades superficiais do gás, do distribuidor de gás e da geometria do reator. A Figura 1 mostra um esquema qualitativo dos escoamentos homogêneo e heterogêneo (SILVA, 2008).

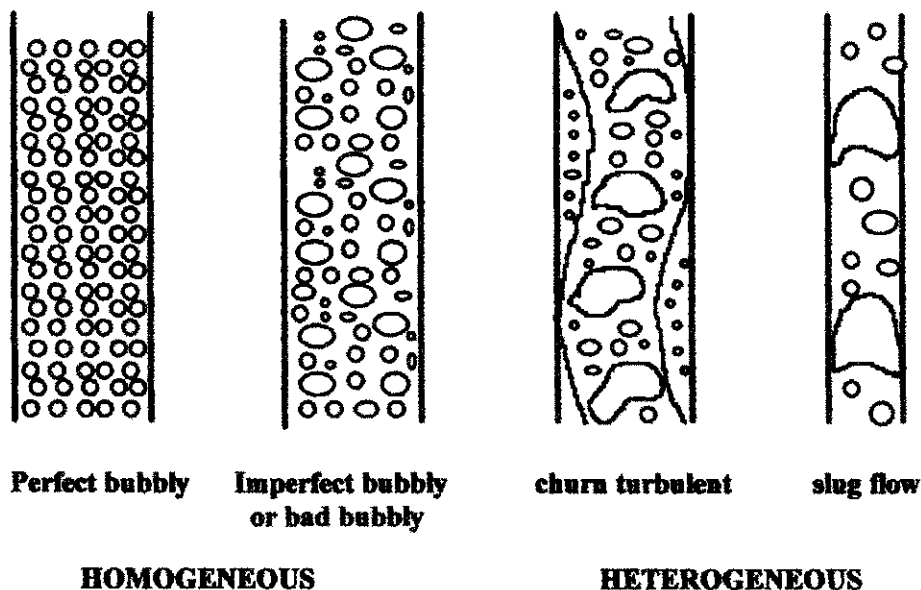


Figura 1. Regimes de fluxo de gás em coluna de bolhas. (Fonte: Bouaifi et al. (2001))

O regime homogêneo é observado quando a velocidade superficial do gás é baixa (SCHUMPE e GRUND, 1986). Este regime de fluxo é caracterizado por bolhas de pequenos tamanhos, onde, a distribuição das bolhas e a retenção gasosa são radialmente uniformes. Além disso, as bolhas possuem pouca interação entre si. Desta forma, os fenômenos de quebra e coalescência de bolhas podem ser desprezados, não havendo

uma forte recirculação de líquido na coluna. O tamanho das bolhas é praticamente dependente do design do distribuidor e das propriedades do sistema (THORAT e JOSHI, 2004). O gas holdup no regime homogêneo aumenta linearmente como aumento da velocidade superficial do gás (KAWAGOE et al., 1976).

O regime heterogêneo é mantido à altas velocidades superficiais do gás. Este regime é caracterizado por um distúrbio no regime homogêneo provocado pelo movimento turbulento das bolhas de gás e pela recirculação de líquido resultando em um fluxo instável com grandes bolhas, com pequenos tempos de residência, formadas por coalescência de bolhas menores (KANTARCI et al., 2005). Devido a quebra e a coalescência de bolhas, vários tamanhos de bolhas são observados. O regime de fluxo heterogêneo é frequentemente observado em reatores de grandes diâmetros, em escala industrial (HYNDMAN et al., 1997). Embora, o coeficiente de transferência de massa ser menor no regime heterogêneo quando comparado ao regime homogêneo (KANTARCI et al., 2005).

O regime pistonado é observado em colunas de pequenos diâmetros, como as de escala de laboratório, quando a velocidade superficial do gás é alta (HYNDMAN et al., 1997). Neste regime, o tamanho das bolhas aproximam-se do diâmetro da coluna, sendo separadas da parede por um fino filme líquido.

A detecção do regime de transição, que é observado quando ocorre à transição do regime homogêneo para o regime turbulento, é muito importante, pois, mudanças significativas são observadas no comportamento hidrodinâmico do sistema. À medida que a transição acontece existe um fluxo de líquido para cima no centro da coluna e outro fluxo de líquido para baixo próximo da parede. Resultando em um maior fluxo de gás pelo centro da coluna formando um perfil transversal de retenção gasosa que favorece a recirculação do líquido (KANTARCI et al., 2005).

### **2.1.2 Transferência de massa no reator de coluna de bolhas**

A taxa global de transferência de massa por unidade de volume em colunas de bolhas é governada pelo coeficiente de transferência de massa do líquido,  $k_L a$



assumindo que a resistência do gás é negligenciada. No reator de coluna de bolhas a variação em  $k_l a$  deve-se primeiramente a variações na área interfacial FAN et al., 1985, apud KANTARCI et al., 2005, p. 2275)..

A transferência de massa da fase gasosa para fase líquida é a etapa mais importante do processo. O coeficiente volumétrico de transferência de massa é um parâmetro importante na caracterização e design dos reatores gás-líquido. No entanto, poucas pesquisas são encontradas tratando o coeficiente de transferência de massa da fase líquida ( $k_l$ ) e a área interfacial ( $a$ ) separadamente em reatores de coluna de bolhas (BOUAIFI et al., 2001). A maioria das pesquisas realizadas são limitadas pela determinação do coeficiente de transferência de massa volumétrico,  $k_l a$ , que é produto do coeficiente de transferência de massa da fase líquida ' $k_l$ ' e da área interfacial ' $a$ '. Infelizmente, esse parâmetro é global e não é suficiente para fornecer uma compreensão dos mecanismos de transferência de massa. A separação dos parâmetros ' $k_l$ ' e ' $a$ ' deve ser considerada para uma melhor compreensão dos mecanismos de transferência de massa como também identificar qual parâmetro ( $k_l$  ou  $a$ ) controla a transferência de massa (KANTARCI et al., 2005)..

### **2.1.3 Efeito da velocidade superficial do gás**

De acordo com o modelo em CFD, desenvolvido para descrever a transferência de massa do ar para água em colunas de bolhas operando nos regimes homogêneo e heterogêneo, a transferência de massa por unidade de volume,  $k_l a$ , aumenta com o aumento da velocidade superficial do gás (KRISHNA e VAN BATEN, 2003).

A partir de medidas do coeficiente de transferência de massa iônico de soluções eletrolíticas em uma coluna de bolhas usando uma técnica eletroquímica foi observado que o coeficiente de transferência de massa médio aumentou continuamente com a velocidade do gás (VERNA e RAI, 2003).

O método da pressão dinâmica foi utilizado para medir o coeficiente volumétrico de transferência de massa, de forma que, foi concluído que a razão entre

$k_1a$  e a fração volumétrica do gás (gas holdup) é independente da velocidade superficial do gás para pressões acima de 1 Mpa (LETZEL et al., 1999).

O coeficiente volumétrico de transferência de massa e a distribuição de tamanhos das bolhas de gás utilizando quatro gases diferentes e duas misturas de líquidos orgânicos foram investigados levando a conclusão de que a taxa de transferência de massa por unidade de volume aumenta com o aumento da velocidade do gás (BEHKISH et al., 2002).

#### **2.1.4 Efeito das propriedades da fase líquida**

Experimentos em meio viscoso foram realizados e mostrou-se que o coeficiente volumétrico de transferência de massa diminui com o aumento da viscosidade do líquido (BEHKISH et al., 2002).

Altas viscosidades do líquido provocam um aumento na fração volumétrica de bolhas grandes, o que diminui a área interfacial entre o gás e o líquido e conseqüentemente o coeficiente volumétrico de transferência de massa (KANTARCI et al., 2005).

O coeficiente de transferência de massa foi investigado em vários líquidos orgânicos e foi observado que os valores de  $k_1a$  aumentaram com o aumento da densidade do gás (OZTURK et al., 1987).

Experimentos em meio viscoso foram realizados, de forma a analisar o efeito de tensoativos sobre a transferência de massa, o que levou a conclusão de que o coeficiente volumétrico de transferência de massa aumentou devido a presença de tensoativos no meio. Os tensoativos favoreceram à criação de pequenas bolhas e a redução da coalescência (MULLER e DAVIDSON, 1995).

Um trabalho experimental para estimar o coeficiente volumétrico de transferência de massa em uma coluna de bolhas foi realizado. Diferente da maioria dos trabalhos publicados trabalhou-se com altas concentrações e altas velocidades

superficiais do gás levando a conclusão de que os valores dos coeficientes volumétricos de transferência de massa acompanharam a evolução da fração volumétrica do gás e que a relação  $k_1 a / \varepsilon_g$  depende do número de Schmidt da fase líquida (VANDU e KRISHNA, 2004).

### **2.1.5 Efeito das propriedades das bolhas de gás**

Os valores dos coeficientes de transferência de massa são proporcionais ao volume e ao diâmetro médio das bolhas (FUKUMA et al., 1987).

As altas concentrações de sólidos no reator, favorece a coalescência das bolhas, desta forma grandes bolhas são formadas, o que limita a transferência de massa na coluna. Para as colunas de bolhas de escala industrial, a presença de pequenas bolhas deve ser preferida e a presença de bolhas grandes devem ser evitadas para alcançar uma alta taxa de transferência de massa efetiva (BEHKISH et al., 2002).

No regime heterogêneo a transferência de massa é significativamente reforçada pelas tendências de quebra e coalescência de bolhas (KRISHNA e VAN BATEN, 2003).

### **2.1.6 Efeito das dimensões da coluna, dos distribuidores e das condições operacionais**

A relação  $k_1 a / \varepsilon_g$  apresentou um ligeiro aumento com o diâmetro da coluna (VANDU e KRISHNA, 2004).

Através de simulações realizadas em CFD foi possível mostrar que no regime homogêneo o coeficiente volumétrico de transferência de massa diminuiu com o diâmetro da coluna. Isto devido ao aumento da circulação de líquido que tendem a acelerar as bolhas no núcleo central da coluna, reduzindo o tempo de contato gás-líquido (KRISHNA e VAN BATEN, 2003).

O coeficiente de transferência de massa é independente da altura inicial do leito. Os maiores valores de coeficiente de transferência de massa foram obtidos com o distribuidor de prato perfurado (VERNA e RAI, 2003).

A transferência de massa em uma coluna de bolhas de ar-água a pressões de 0,1-1 MPa foi analisada. A pressão não apresenta nenhum efeito significativo sobre a fração volumétrica do gás (gas-holdup) e sobre o coeficiente volumétrico de transferência de massa (VAFOPULOS et al., 1975).

Trabalhou-se na faixa de pressão de 0,1-0,4 MPa, de forma que, foi observado um aumento tanto na área interfacial quanto no coeficiente volumétrico de transferência de massa com a pressão (WILKINSON e HARINGA, 1994).

Experimentos com a pressão variando de 0,1 a 0,8 MPa foram realizados levando a conclusão de que o coeficiente volumétrico de transferência de massa aumenta com a pressão, devido o aumento da área interfacial entre o gás e o líquido (BEHKISH et al., 2002).

Para pressões acima de 5 MPa tanto a área interfacial quanto o coeficiente volumétrico de transferência de massa são afetados pela pressão, entretanto, o coeficiente de transferência de massa da fase líquida é independente da pressão. Quando a vazão mássica de gás é constante, a área interfacial e o coeficiente volumétrico de transferência de massa diminuem com o aumento da pressão. No entanto, para uma pressão fixa, eles aumentam com aumento da vazão mássica do gás (MAALEJ et al., 2003).

## **2.2 Descrição do processo de cloração de eteno para obtenção de EDC**

O EDC (1,2-dicloroetano), nas condições normais de temperatura e pressão, é um líquido oleoso de cor clara com odor adocicado de clorofórmio. É utilizado na fabricação do MVC, intermediário da produção do PVC, na extração de produtos naturais como esteróides, vitamina A, cafeína, nicotina, etc.

O EDC é obtido a partir de um processo no qual a reação de cloração direta de eteno é empregada. Como representada pela equação (1)



Existem vários métodos industriais para realizar esta reação: a reação entre eteno e cloro em um meio de EDC em um reator de tanque agitado, o contato dos dois gases com uma corrente de EDC em circulação em um reator recheado ou não, o borbulhamento de eteno gasoso em cloro líquido e a adição de cloro líquido e eteno líquido (BALASUBRAMANIAN et al., 1966). O método industrial do reator estudado consiste no borbulhamento do gás eteno em uma mistura de EDC e cloro líquido.

O reator de cloração de eteno estudado consiste basicamente de um tubo cilíndrico vertical em aço carbono com 13,5m de altura e 1,70m de diâmetro, que se comunica com o trocador de calor, de cascos e tubos, através do topo do reator, na parte superior, e pelo "U" de reação na parte inferior como mostrado na Figura 2. Por ser uma reação exotérmica o reator de cloração de eteno é acoplado a um trocador de calor montado na vertical.

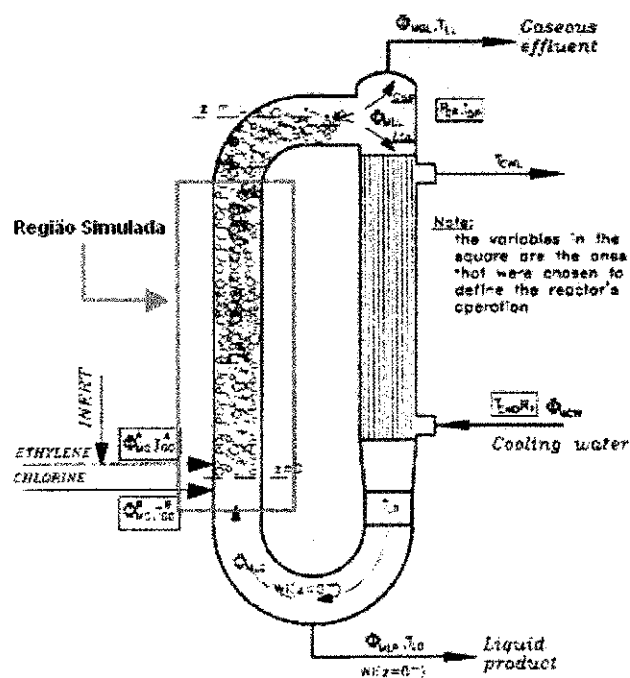


Figura 2. Esquema do reator de cloração de eteno. (Fonte: Orejas (2001))

O cloro líquido entra no sistema de reação pela parte horizontal do “U” de reação, e o eteno pela base da parte vertical. A reação de adição de cloro no eteno é catalisada por cloreto férrico anidro ( $\text{FeCl}_3$ ).

O cloro no estado líquido entra no reator através de 5 espargidores (ou distribuidores) de 76,2 mm de diâmetro contendo um total de 298 furos de 8 mm de diâmetro orientados em co-corrente ao fluxo do reator.

A entrada do eteno gasoso no reator é feita através de 3 espargidores (ou distribuidores) de 101,6 mm de diâmetro que contém um total de 204 furos de 6 mm de diâmetro distribuídos uniformemente e orientados no mesmo sentido do fluxo de massa circulante de EDC.

Com a finalidade de facilitar o contato entre o cloro, o eteno e o catalisador é necessário que antes de entrar e operação todo o sistema reator e trocador de calor estejam cheios de EDC líquido até nível normal de operação. A massa líquida circula continuamente entre o reator e o trocador de calor não sendo necessário bombeamento mecânico, pois tal circulação tem como agente propulsor o efeito termosifão formado pela diferença de temperatura e conseqüente diferença de densidade entre a parte mais quente (mais leve) e a mais fria (mais pesada).

A reação de cloração de eteno é rápida, ou seja, o processo é controlado pela transferência de massa (WACHI e MORIKAWA, 1986). Portanto, neste trabalho não foi considerada a reação química, apenas a dissolução do eteno no EDC.

O reator em questão tem capacidade de  $19 \text{ m}^3$  e capacidade de produção de 54000 ton de EDC por ano.

### **2.3 Fluidodinâmica computacional**

A fluidodinâmica computacional (CFD) é uma ferramenta computacional utilizada para simular o comportamento de sistemas que envolvam escoamento de fluidos, transferência de calor e massa, e de outros processos físicos. Esta ferramenta

tem como escopo a solução de equações governantes de fenômenos físicos sobre uma região de interesse a partir de condições de contorno especificadas nessa região.

O conjunto de equações que descrevem o escoamento dos fluidos são as equações de Navier-Stokes, que são derivadas dos três princípios básicos da física: o princípio da conservação da massa (equação da continuidade), o princípio da conservação da quantidade de movimento (equação da quantidade de movimento) e o princípio da conservação de energia (equação da energia) (FERREIRA et al., 1999). Estas equações dão forma a um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares acopladas (PDEs), que foram derivadas no início do século XIX e não possuem uma solução analítica geral, mas podem ser discretizadas e resolvidas numericamente (DIONÍSIO, 2008).

A fluidodinâmica computacional é usada por engenheiros e cientistas em várias aplicações, tais como:

- Processos industriais: tanques de mistura, reatores químicos;
- Construção civil: ventilação de edifícios;
- Saúde e segurança: investigação dos efeitos do fogo e do fumo;
- Motores industriais: modelagem da combustão, aerodinâmica de carros;
- Eletrônicos: transferência de calor no interior e em torno de circuitos;
- Meio ambiente: dispersão de poluentes em água ou ar;
- Energia: otimização do processo de combustão;
- Medicina: fluxo de sangue no interior dos vasos sanguíneos;

### **2.3.1 Modelagem matemática**

A modelagem matemática é desenvolvida a partir dos princípios de conservação de massa, energia e quantidade de movimento. Neste trabalho o processo foi considerado isotérmico, pois, o calor gerado pela reação de cloração direta de eteno realizado no reator é igual ao calor retirado do sistema pelo trocador de calor. Portanto, o fenômeno de transferência de energia não foi considerado.

### 2.3.1.1 Equações de Conservação

As equações que representam a conservação de massa, também conhecida como equação da continuidade, e a conservação da quantidade de movimento são dadas pelas equações 2 e 3 respectivamente:

- Equação da continuidade:

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

- Equação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{U}) + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \otimes \vec{U}) = \nabla \cdot \left( -p \delta + \mu \left( \nabla \vec{U} + (\nabla \vec{U})^T \right) \right) + S_M \quad (3)$$

### 2.3.1.2 Escoamento multifásico

O escoamento multifásico é aquele em que mais de um fluido está presente em diferentes fases. Os fluidos se encontram misturados em escala macroscópica com uma interface discernível entre eles. É através desta interface que os fluidos podem interagir por meio de forças interfaciais e transferência de calor e massa.

Neste tipo de escoamento cada fluido pode ter seu próprio campo de escoamento ou compartilhar o mesmo campo de escoamento. Existem duas abordagens para os modelos de transporte multifásico: a Euleriana e a Lagrangeana. Na abordagem Euleriana o campo de escoamento é obtido considerando os fluidos envolvidos como contínuos, enquanto que na abordagem Lagrangeana, o campo de escoamento é obtido pelo cálculo de elementos de fluido individuais. Para um sistema bifásico, como é o caso do reator de coluna de bolhas estudado, existe dois modelos baseados nas abordagens anteriores: o modelo de escoamento Eurliano-Eurliano e o modelo de escoamento Eurliano-Lagrangiano.



No modelo Euleriano-Euleriano as duas fases são consideradas contínuas, mesmo que uma delas seja dispersa como a fase gasosa. Segundo Santos (2005) neste tipo de modelo as bolhas de gás não são consideradas individualmente, pelo contrário, elas são consideradas como uma média de todas as bolhas contidas em um volume da malha numérica como um fluido interpenetrante com a fase contínua. De forma que, não há um aumento do esforço computacional com o aumento do número de bolhas, favorecendo sua utilização em sistemas onde há altas frações volumétricas de bolhas de gás como é o caso do reator de coluna de bolhas estudado.

No modelo Euleriano-Lagrangiano as bolhas de gás são consideradas individualmente em um meio líquido (contínuo). De acordo com Santos (2005) este tipo de abordagem é recomendado quando há poucas bolhas e quando a fase dispersa apresenta diferentes propriedades como tamanho, composição química, entre outras.

O modelo de escoamento multifásico do tipo Euleriano-Euleriano é dividido em dois tipos: o modelo homogêneo e o modelo heterogêneo.

No modelo homogêneo a fase contínua e fase dispersa compartilham o mesmo campo de velocidade, bem como outros fatores como a turbulência, a temperatura e o campo de pressão.

No modelo heterogêneo a fase contínua e a fase dispersa apresentam, dentre outros fatores, campos de velocidade diferentes, embora compartilhem do mesmo campo de pressão. Neste tipo de modelo o campo de velocidade é obtido através da solução das equações da continuidade e quantidade de movimento.

Nesta dissertação utilizou-se o modelo de escoamento multifásico Euleriano-Euleriano com modelagem heterogênea para o campo de velocidade.

O modelo de escoamento multifásico Euleriano-Euleriano heterogêneo apresenta as equações de conservação para cada fase da seguinte forma:

- Equação da quantidade de movimento:

A equação 4 é a equação da conservação da quantidade de movimento na fase  $\alpha$ .

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_\alpha \rho_\alpha \bar{U}_\alpha) + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha (\rho_\alpha \bar{U}_\alpha \otimes \bar{U}_\alpha)) = -\varepsilon_\alpha \nabla p_\alpha + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mu_\alpha (\nabla \bar{U}_\alpha + (\nabla \bar{U}_\alpha)^T)) + \sum_{\beta=1}^{N_p} (\Gamma_{\alpha\beta}^+ v_\beta - \Gamma_{\beta\alpha}^+ v_\alpha) + S_{M\alpha} + M_\alpha \quad (4)$$

Onde,

$\bar{U}_\alpha$  é o vetor velocidade da fase  $\alpha$ ;

$p_\alpha$  é a pressão da fase  $\alpha$ ;

$\rho_\alpha$  é a densidade da fase  $\alpha$ ;

$\mu_\alpha$  é a viscosidade da fase  $\alpha$ ;

$\varepsilon_\alpha$  é a fração volumétrica da fase  $\alpha$ ;

$S_{M\alpha}$  são as forças externas;

$M_\alpha$  é a força total imposta à fase  $\alpha$  devido à interação com as outras fases e é dada através da equação 5:

$$M_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} M_{\alpha\beta} \quad (5)$$

Como as forças entre um par de fases são de mesma magnitude e de direções opostas, o somatório em todas as fases se anula como na equação 6:

$$M_{\alpha\beta} = -M_{\beta\alpha} \Rightarrow \sum_{\alpha} M_\alpha = 0 \quad (6)$$

A força interfacial total atuante entre as fases é composta por várias contribuições que podem surgir de diversos fenômenos físicos independentes, como força de arraste  $M_{\alpha\beta}^D$ , força lift  $M_{\alpha\beta}^L$ , força de lubrificação da parede  $M_{\alpha\beta}^{LUB}$ , força de massa virtual  $M_{\alpha\beta}^{VM}$ , força de dispersão turbulenta  $M_{\alpha\beta}^{TD}$  e a força de pressão do sólido  $M_S$ , que é usada somente se a fase particulada é um sólido denso.

$$M_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}^D + M_{\alpha\beta}^L + M_{\alpha\beta}^{LUB} + M_{\alpha\beta}^{VM} + M_{\alpha\beta}^{TD} + M_S + \dots \quad (7)$$

E  $\sum_{\beta=1}^{N_p} (\Gamma_{\alpha\beta}^+ v_\beta - \Gamma_{\beta\alpha}^+ v_\alpha)$  representa a transferência de momento induzida pela transferência de massa entre as fases.

Neste trabalho utilizou-se apenas a força de arraste e a força de dispersão turbulenta.

- Equação da continuidade:

A equação 8 é a equação da continuidade da fase  $\alpha$ .

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_\alpha \rho_\alpha) + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \rho_\alpha \bar{U}_\alpha) = S_{MS\alpha} + \sum_{\beta=1}^{N_p} (\Gamma_{\alpha\beta}^+) \quad (8)$$

Onde,

$\sum_{\beta=1}^{N_p} (\Gamma_{\alpha\beta}^+)$  é a taxa de fluxo mássico por unidade de volume da fase  $\beta$  para a fase  $\alpha$ ;

### 2.3.1.3 Equações de fechamento

As equações de fechamento são utilizadas, pois, existem mais incógnitas do que equações.

As equações de fechamento são aplicadas nas equações da continuidade e da quantidade de movimento separadamente.

Para a equação da continuidade, a equação de fechamento é dada pela soma das frações volumétricas da fase contínua e dispersa, que deve ser igual a 1.

$$\sum_{\alpha=1}^{N_p} \varepsilon_\alpha = 1 \quad (9)$$

Para a equação da quantidade de movimento, as equações de fechamento são dadas pela transferência de quantidade de movimento entre as fases provocadas pela força de arraste e pela força de dispersão turbulenta.

A força de arraste agindo sobre a fase contínua ( $\alpha$ ) devido à fase dispersa ( $\beta$ ) é representada pela equação 10.

$$M_c = \frac{C_D}{8} A_{\alpha\beta} \rho_\alpha |U_\beta - U_\alpha| (U_\beta - U_\alpha) \quad (10)$$

Onde,  $A_{\alpha\beta}$  é a área interfacial por unidade de volume que é dada pela equação (11).

$$A_{\alpha\beta} = \frac{6 \varepsilon_\beta}{d_\beta} \quad (11)$$

Existem vários modelos para calcular o coeficiente de arraste ( $C_D$ ). Neste trabalho foi utilizado o modelo de Ishii-Zuber.

No modelo de Ishii-Zuber o cálculo do coeficiente de arraste ( $C_D$ ) depende do formato das partículas ou bolhas, que podem ser esféricas ou distorcidas. Além disso, as partículas de formato distorcido subdividem-se em duas formas: elipsoidal e cap.

O coeficiente de arraste para partículas esféricas ( $C_D(esfera)$ ) depende do número de Reynolds modificado e é dado pela equação 12.

$$C_D(esfera) = \frac{24}{Re_m} (1 + 0,15 Re_m^{0,687}) \quad (12)$$

Onde, o número de Reynolds modificado é calculado de acordo com a equação 13.

$$\text{Re}_m = \frac{\rho_c |U_d - U_c| d_b}{\mu_m} \quad (13)$$

Com

$$\frac{\mu_m}{\mu_c} = \left(1 - \frac{\varepsilon_d}{r_{dm}}\right)^{-2,5 r_{dm} \mu_c} \quad (14) \quad \text{e} \quad \mu_m = \frac{\mu_d + 0,4 \mu_c}{\mu_d + \mu_c} \quad (15)$$

Onde,

$\vec{U}_d$  é o vetor velocidade da fase dispersa;

$\vec{U}_c$  é o vetor velocidade da fase contínua;

$d_b$  é o diâmetro da bolha;

$\mu_d$  é a viscosidade da fase dispersa;

$\mu_c$  é a viscosidade da fase contínua;

$\varepsilon_d$  é a fração volumétrica da fase dispersa;

$r_{dm}$  é o valor do máximo empacotamento da fase dispersa;

O coeficiente de arraste para partículas distorcidas é aproximadamente constante e independente do número de Reynolds, embora dependa da forma das partículas através número adimensional de Eötvös, que mede a relação entre as forças gravitacionais e a tensão superficial. O coeficiente de arraste para partículas elipsoidais ( $C_D(\textit{ellipse})$ ) é dado pela multiplicação de um fator pelo coeficiente de arraste de uma única partícula como representado pela equação 16.

$$C_D(\textit{ellipse}) = E(\varepsilon_d) C_{D\infty} \quad (16)$$

Onde o coeficiente de arraste de uma única partícula é dado pela equação 17 e o fator de multiplicação pela equação 18.

$$C_{D\infty} = \frac{2}{3} E_O^{1/2} \quad (17)$$

$$E(\varepsilon_d) = \frac{(1 + 17,67 f(\varepsilon_d)^{6/7})}{18,67 f(\varepsilon_d)} \quad (18)$$

Onde,

$$E_o = \frac{g \Delta \rho d_b^2}{\sigma} \quad (19) \quad \text{e} \quad f(\varepsilon_d) = \frac{\mu_c}{\mu_m} (1 - \varepsilon_d)^{1/2} \quad (20)$$

O coeficiente de arraste para partículas com o formato cap ( $C_D(\text{cap})$ ) é dado pela equação 21.

$$C_D(\text{cap}) = (1 - \varepsilon_d)^2 C_{D\infty} \quad (21)$$

Onde,

$$C_{D\infty} = \frac{8}{3}$$

O coeficiente de arraste é escolhido da seguinte forma:

$$\text{Se } C_D(\text{esfera}) \geq C_D(\text{elipse}), C_D = C_D(\text{esfera})$$

$$\text{Se } C_D(\text{esfera}) < C_D(\text{elipse}), C_D = \min(C_D(\text{esfera}), C_D(\text{cap}))$$

#### 2.3.1.4 Turbulência

A turbulência consiste em flutuações locais na velocidade das partículas do fluido em escoamento em relação ao tempo e ao espaço. É um fenômeno que tem como características principais o escoamento tridimensional, instável, caótico e irregular. A difusividade em fluxos turbulentos aumenta, assim como também há um acréscimo na transferência de quantidade de movimento. Escoamentos turbulentos são dissipativos, ou seja, a energia é transmitida a partir de turbilhões com escalas maiores para os turbilhões com escalas menores até ser transformada em energia interna. O regime de

escoamento é caracterizado como turbulento quando as forças viscosas de um fluido são pequenas quando comparadas com as forças inerciais, ou seja, é indicado por um número de Reynolds muito alto.

As equações de Navier-Stokes descrevem bem os escoamentos lineares e turbulentos sem a necessidade de informações adicionais. Porém, a aplicação direta das equações de Navier-Stokes em escoamentos turbulentos, conhecida como Simulação Numérica Direta (Direct Numerical Simulation (DNS)), exige uma malha numérica muito refinada com escalas de comprimento muito menores do que as que são utilizadas normalmente em uma análise numérica, o que gera um esforço computacional muito grande. Para a modelagem da turbulência utiliza-se modelos estatísticos de turbulência que foram desenvolvidos para contabilizar os efeitos da turbulência sem recorrer a uma malha numérica excessivamente refinada ou a Simulação Numérica Direta.

O modelo de turbulência utilizado neste trabalho foi o modelo k-epsilon ( $k - \epsilon$ ), sendo utilizado somente para a fase contínua. O modelo tem como base a hipótese da viscosidade turbulenta (eddy viscosity model), que sugere que a turbulência consiste de pequenos turbilhões que estão constantemente se formando e se dissipando, e as tensões de Reynolds são consideradas como sendo proporcionais aos gradientes de velocidades médias como na equação 22.

$$-\rho \overline{u \otimes u} = \mu_t (\nabla U + (\nabla U)^T) - \frac{2}{3} \delta (\rho k + \mu_t \nabla \cdot U) \quad (22)$$

Onde  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta.

No modelo k-epsilon,  $k$  é a energia cinética turbulenta definida como a variância das flutuações na velocidade, tendo dimensões ( $L^2 T^{-2}$ ).  $\epsilon$  é o termo de dissipação da viscosidade turbulenta (taxa em que as flutuações da velocidade desaparecem), e tem dimensões de  $k$  por unidade de tempo ( $L^2 T^{-3}$ ).

O modelo k-epsilon introduz duas novas variáveis no sistema de equações. Portanto, o sistema de equações com a introdução do modelo k-epsilon fica dessa forma:

- Equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{U}) = 0 \quad (23)$$

- Equação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{U}) + \nabla \cdot (\rho \bar{U} \otimes \bar{U}) - \nabla \cdot (\mu_{eff} \nabla \bar{U}) = -\nabla p' + \nabla \cdot (\mu_{eff} \nabla \bar{U}) + B \quad (24)$$

Onde B é a soma das forças de campo,  $\mu_{eff}$  é a viscosidade efetiva turbulenta e  $p'$  é a pressão modificada, que é calculada pela equação 25.

$$p' = p + \frac{2}{3} \rho k \quad (25)$$

A viscosidade efetiva é dada pela equação 26:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (26)$$

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (27)$$

Os valores de k e  $\varepsilon$  vêm diretamente das equações diferenciais de energia cinética de transporte turbulento e fluxo de dissipação de turbulência:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (28)$$



$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \varepsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (29)$$

Onde  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  são constantes,  $P_k$  é a produção de turbulência devido à flutuação das forças viscosas, sendo modelado por:

$$P_k = \mu_t \nabla U \cdot (\nabla U + \nabla U^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot U (3 \mu_t \nabla \cdot U + \rho k) + P_{kb} \quad (30)$$

Para escoamentos incompressíveis,  $\nabla \cdot U$  é muito pequeno e o segundo termo do lado direito da equação 30 não contribui significativamente com o produto. Para escoamentos compressíveis,  $\nabla \cdot U$  é grande somente em regiões com altos gradientes de velocidade, como em zonas de choques. O termo  $3 \mu_t$  é baseado na suposição “frozen stress”, isto previne que o valor de  $k$  e  $\varepsilon$  fiquem muito grandes em zonas de choques.

### 2.3.1.5 Modelo MUSIG

O modelo MUSIG (Multiple Size Group) foi desenvolvido para lidar com escoamentos multifásicos polidispersos. Por polidisperso, pode-se entender que a fase dispersa tem uma grande variação no tamanho. Um dos atributos do escoamento multifásico polidisperso é que os diferentes tamanhos da fase dispersa interagem uns com os outros através dos mecanismos de quebra e coalescência. O cálculo da distribuição dos tamanhos da fase polidispersa, incluindo os efeitos de quebra e coalescência é realizado pelo método do balanço populacional.

O ponto de partida do modelo MUSIG é a equação de balanço populacional, que representa a continuidade das partículas de tamanho  $v$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} n(v, t) + \frac{\partial}{\partial x^i} (U^i(v, t) n(v, t)) = B_B - D_B + B_C - D_C \quad (31)$$

Onde,

- $n(v, t)$  é a densidade numérica das partículas de tamanho  $v$  no tempo  $t$ ;  
 $B_B$  é a taxa de natalidade devido a quebra das partículas grandes;  
 $D_B$  é a taxa de mortalidade devido a quebra em partículas menores;  
 $B_C$  é a taxa de natalidade devido a coalescência de partículas menores;  
 $D_C$  é a taxa de mortalidade devido a coalescência com outras partículas;

Estas taxas podem ser expressas como:

$$B_B = \int_m^{\infty} g(r; m) n(r, t) dr \quad (32)$$

$$D_B = n(m, t) \int_0^m g(m; r) dr \quad (33)$$

$$B_C = \frac{1}{2} \int_0^m Q(m-r; r) n(m-r, t) n(m, t) dr \quad (34)$$

$$B_B = n(m, t) \int_0^{\infty} Q(m; r) n(r, t) dr \quad (35)$$

Onde  $g(m; r)$  representa a taxa de quebra específica (a taxa em que cada partícula de massa  $m$  quebra em partículas de massa  $r$  e  $m-r$ ),  $Q(m; r)$  representa a taxa de coalescência específica (a taxa em que cada partícula de massa  $m$  coalesce com partículas de massa  $r$  para formar partículas de massa  $m+r$ )

A próxima etapa do modelo MUSIG é discretizar a equação 31 em grupos de tamanhos.  $N_i$  representa a densidade numérica do grupo de tamanho  $i$  e é dado pela equação 36.

$$N_i(t) = \int_{m_{i-1/2}}^{m_{i+1/2}} n(m, t) dm \quad (36)$$

Definindo a fração mássica e a fração volumétrica como  $m_i$  e  $\varepsilon_i$ , respectivamente, e reconhecendo que  $m_i N_i = \rho_i \varepsilon_i$ . Agora integrando a equação 31 e multiplicando por  $m_i$ , tem-se que:

$$\frac{\partial (m_i N_i(t))}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^i} (U_i^i(t) N_i(t)) = S_i \quad (37)$$

ou

$$\frac{\partial (\rho_i \varepsilon_i(t))}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho_i \varepsilon_i U_i^i) = S_i \quad (38)$$

Definindo a fração de tamanho como  $f_i = \varepsilon_i / \varepsilon_d$ , a equação 38 pode ser expressa pela equação 39, que é a equação da fração de tamanho utilizada pelo modelo MUSIG.

$$\frac{\partial (\rho_d \varepsilon_d f_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho_d \varepsilon_d U_d^i f_i) = S_i \quad (39)$$

Uma simplificação desta equação é supor que todos os grupos de tamanhos compartilham a mesma densidade  $\rho_d$  e velocidade  $U_d^i$  produzindo o modelo MUSIG homogêneo:

$$\frac{\partial (\rho_d \varepsilon_d f_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho_d \varepsilon_d U_d^i f_i) = S_i \quad (40)$$

A contribuição da taxa de natalidade devido à quebra de partículas maiores no termo fonte,  $S_i$ , da equação 40, é dada pela equação 41.

$$B_{Bi} = m_i \int_{m_i - \Delta/2}^{m_i + \Delta/2} B_B dm = m_i \sum_{j>i} g(m_j; m_i) N_j = \rho_d \varepsilon_d \left( \sum_{j>i} g(m_j; m_i) f_j \right) \quad (41)$$

Da mesma forma, a contribuição da taxa de mortalidade devido à quebra em partículas menores é dada pela equação 42.

$$D_{Bi} = \rho_d \varepsilon_d \left( f_i \sum_{j<i} g(v_i; v_j) \right) \quad (42)$$

O termo fonte total devido à quebra de partículas é zero quando somado sobre todos os grupos de tamanho.

$$\sum_i (B_{Bi} - D_{Bi}) = 0 \quad (43)$$

A discretização do termo fonte devido a coalescência de partículas é definido pela matriz mássica  $X_{jki}$  como a fração mássica devido a coalescência entre os grupos  $j$  e  $k$  que entra no grupo  $i$ :

$$X_{jki} = \begin{cases} \frac{(m_j + m_k) - m_{i-1}}{m_i - m_{i-1}} & \text{if } m_{i-1} < m_j + m_k < m_i \\ \frac{m_{i+1} - (m_j + m_k)}{m_{i+1} - m_i} & \text{if } m_i < m_j + m_k < m_{i+1} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (44)$$

A contribuição da taxa de natalidade devido à coalescência de partículas pequenas no termo fonte,  $S_i$ , da equação 40, é dada pela equação 45.

$$\begin{aligned} B_{Ci} &= m_i \int_{v_{i-1/2}}^{v_{i+1/2}} B_C dv = m_i \left( \frac{1}{2} \sum_{j \leq i} \sum_{k \leq i} Q(v_j; v_k) X_{jki} N_j N_k \right) \\ &= (\rho_d \varepsilon_d)^2 \left( \frac{1}{2} \sum_{j \leq i} \sum_{k \leq i} Q(v_j; v_k) X_{jki} f_j f_k \frac{m_j + m_k}{m_j m_k} \right) \end{aligned} \quad (45)$$

Da mesma forma, a contribuição da taxa de mortalidade devido à coalescência em grupos maiores é dada pela equação 46.

$$D_{Ci} = (\rho_d \varepsilon_d)^2 \left( \sum_j Q(v_i; v_j) f_i f_j \frac{1}{m_j} \right) \quad (46)$$

Esta formulação garante que o termo fonte total devido à coalescência é zero quando somado sobre todos os grupos de tamanho:

$$\sum_i (B_{Ci} - D_{Ci}) = 0 \quad (47)$$

Isto provém da exigência de  $Q(v_j; v_j) = Q(v_d; v_i)$  juntamente com as seguintes propriedades da matriz de fração mássica para todos  $j, k$ :

$$\sum_i X_{jki} = 1 \quad (48)$$

Os grupos de tamanhos podem ser discretizados por três métodos: por igualdade de massa, por igualdade de diâmetro ou por massa geométrica. Em cada caso, o diâmetro mínimo, o diâmetro máximo e o número de grupos de tamanho devem ser especificados para o fluido polidisperso. Em todos os casos, o diâmetro e a massa de um grupo particular são relacionados por:

$$m = \frac{\pi}{6} \rho_d d^3 \quad (49)$$

Se a densidade do fluido não for constante, uma densidade de referência constante deve ser utilizada na equação 49 para garantir que os grupos de tamanhos são independentes da densidade local.

Neste trabalho o método de discretização utilizado para os grupos de tamanhos foi por igualdade de diâmetro.

No método de discretização por igualdade de diâmetro, o diâmetro do grupo  $i$  é calculado pela equação 50:

$$d_i = d_{\min} + \Delta d \left( i - \frac{1}{2} \right) \quad (50)$$

$$\Delta d = \frac{d_{\max} - d_{\min}}{N} \quad (51)$$

A massa do grupo é calculada pela equação 49.

Neste trabalho utilizou-se o modelo de Luo e Svendsen (Luo and Svendsen Model) para a modelagem da quebra das partículas e o modelo de Prince e Blanch (Prince and Blanch Model) para a modelagem da coalescência entre as partículas.

Os modelos para quebra de partículas são expressos como função da fração de quebra que é dado por:

$$f_{BV} = \frac{m_j}{m_i} \quad (52)$$

O modelo teórico de Luo e Svendsen foi desenvolvido para quebra de gotas e bolhas em suspensões turbulentas. O modelo é baseado na teoria da turbulência isotrópica e da probabilidade. O modelo é representado pela equação 53.

$$g(v_i; f_{BV} v_i) = 0.923 F_B (1 - \varepsilon_d) \left( \frac{\varepsilon_c}{d_i^2} \right)^{1/3} \int_{\xi_{\min}}^1 \frac{(1 + \xi)^2}{\xi^{11/3}} e^{-\chi} d\xi \quad (53)$$

Onde,

$$\chi = \frac{12(f_{BV}^{2/3} + (1 - f_{BV})^{2/3} - 1)\sigma}{\beta \rho_c \varepsilon_c^{2/3} d_i^{5/3} \xi^{11/3}} \quad (54)$$

$\xi$  é o tamanho adimensional dos vórtices no subdomínio inercial da turbulência isotrópica e  $\beta = 2$ . O limite inferior de integração é dado por:

$$\xi_{\min} = 11.4 \frac{\eta}{d_i} \quad (55)$$

Onde,

$$\eta = \left( \frac{1}{\varepsilon_C} \nu_C^3 \right)^{1/4} \quad (56)$$

Além disso,

$F_B$  é o coeficiente de calibração

$\varepsilon_C$  é a taxa de dissipação turbulenta da fase contínua

$\nu_C$  é a viscosidade cinemática da fase contínua

$\sigma$  é o coeficiente de tensão superficial

O modelo de Prince e Blanch assume que a coalescência de duas bolhas ocorre em três etapas. Em primeiro lugar, as bolhas colidem mantendo um pequena quantidade de líquido, também chamado de filme, entre elas. Esta pequena quantidade de líquido é então drenada até que o filme líquido que separa as bolhas atinja uma espessura crítica. Por fim, o filme líquido se rompe e as bolhas coalescem.

O fenômeno da coalescência é, portanto, modelado pela taxa de colisão de duas bolhas e pela eficiência de colisão relativa ao tempo necessário para a coalescência:

$$Q(v_i; v_j) = (\theta_{ij}^r + \theta_{ij}^b + \theta_{ij}^s) \eta_{ij} \quad (57)$$

A eficiência de colisão é modelada através da comparação do tempo necessário para coalescência,  $t_{ij}$ , com o tempo de contato real durante a colisão,  $\tau_{ij}$ :

$$\eta_{ij} = e^{-t_{ij}/\tau_{ij}} \quad (58)$$

$$t_{ij} = \left( \frac{\rho_c \varepsilon_{ij}^3}{16\sigma} \right)^{1/2} \ln \left( \frac{h_0}{h_f} \right) \quad (59)$$

$$\tau_{ij} = \frac{\varepsilon_{ij}^{2/3}}{\varepsilon_c^{1/3}} \quad (60)$$

Onde,

$h_0$  é a espessura inicial do filme líquido

$h_f$  é a espessura crítica do filme líquido

$\varepsilon_{ij}$  é o raio equivalente, que é dado pela equação 61

$$\varepsilon_{ij} = \left( \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\varepsilon_i} + \frac{1}{\varepsilon_j} \right) \right)^{-1} \quad (61)$$

A contribuição da turbulência na frequência de colisão é dada pela equação 62.

$$\theta_{ij}^T = F_{CT} S_{ij} (u_{ti}^2 + u_{tj}^2)^{1/2} \quad (62)$$

Onde  $F_{CT}$  é um fator de calibração, a área transversal das partículas em colisão é definida pela equação 63 e a velocidade trurbulenta pela equação 64.

$$S_{ij} = \frac{\pi}{4} (d_i + d_j)^2 \quad (63)$$

$$u_{ti} = \sqrt{2} \varepsilon_c^{1/3} d_i^{1/3} \quad (64)$$

A contribuição da força de empuxo sobre a frequência de colisão é modelada pela equação 65.

$$\theta_{ij}^B = F_{CB} S_{ij} |U_{rj} - U_{ri}| \quad (65)$$



Onde,

$$U_{ri} = \sqrt{\frac{2.14\sigma}{\rho_c d_i} + 0.505 g d_i} \quad (66)$$

$F_{CB}$  é um fator de calibração. A contribuição do cisalhamento na frequência de colisão é atualmente negligenciada.

#### 2.4.2 Volumes finitos

O método dos volumes finitos (MVF) é uma das técnicas de discretização das equações diferenciais parciais mais utilizadas em fluidodinâmica computacional. Diferentemente de outros métodos, que estão baseados em deduções matemáticas, esta técnica está fundamentada em uma abordagem física do problema representado pelas equações diferenciais parciais.

O primeiro passo do método dos volumes finitos consiste em dividir (ou discretizar) o domínio de solução em um número finito de volumes de controle, onde, o conjunto dos volumes de controle é chamado de malha numérica. No centróide de cada volume de controle localiza-se um nó computacional, no qual estão localizadas as variáveis de interesse (ou dependentes). O próximo passo consiste na integração das equações diferenciais parciais que representam o escoamento do fluido em todos os volumes de controle obtidos pela discretização do domínio. Nesta integração, é aplicado o teorema da divergência de Gauss para transformar as integrais em volume dos divergentes dos fluxos advectivos e difusivos em integrais em área dos fluxos normais à superfície dos volumes de controle, para tanto, as integrais devem estar em sua forma conservativa.

Os valores das variáveis são armazenados no centróide de cada volume de controle, para se obter os valores nas superfícies ou fronteiras dos volumes de controle é necessário utilizar as funções de interpolação ou aproximações funcionais. Além disso, as funções de interpolação são responsáveis pela conectividade das variáveis entre os

volumes de controle. Como resultado, as equações finais levam a um sistema de equações algébricas.

O método dos volumes finitos pode ser aplicado a qualquer tipo de malha, estruturada ou não-estruturada, portanto, adapta-se bem em geometrias complexas. Além disso, as precisões das aproximações e da representação dos fluxos através das superfícies dos volumes de controle tornam o método dos volumes finitos popular.

#### **2.4.3 Experiências e pesquisas sobre coluna de bolhas em fluidodinâmica computacional**

Krishna e Van Baten (2003) desenvolveram um modelo em CFD que descreve a hidrodinâmica e a transferência de massa entre ar e água em uma coluna de bolhas operando no regime homogêneo e heterogêneo. De acordo com os autores, as simulações revelaram algumas características dos regimes de escoamento homogêneo, heterogêneo e de transição sobre a fração volumétrica do gás e a transferência de massa. Eles compararam as simulações com os dados experimentais e concluíram que a transferência de massa para uma população de bolhas grandes é significativamente favorecida devido a freqüente quebra e coalescência de bolhas menores. Também destacaram, nas simulações em CFD, a forte influência do diâmetro da coluna sobre a hidrodinâmica e a transferência de massa.

Michele e Hempel (2002) implementaram um modelo em CFD para reproduzir a medida espacial dos sólidos, a distribuição de gás e campo de fluxo de líquido, visando o desenvolvimento de uma ferramenta para cálculos de scale-up. Segundo os autores, os cálculos realizados em CFD provaram a importância da correta modelagem da interação direta do gás disperso e da fase sólida no escoamento trifásico. A implementação da lei de arraste na transferência da quantidade de movimento entre o gás e o sólido não só deu resultados corretos na fluidização à baixas velocidades superficiais do gás, mas também, foi capaz de reproduzir o efeito adverso do aumento da velocidade superficial do gás sobre o escoamento que havia sido demonstrado experimentalmente na literatura.

Dhotre, Ekambara e Joshi (2004) desenvolveram um modelo bidimensional em CFD para predição do padrão de escoamento em reatores de coluna de bolhas e analisar

a variação do perfil de fração volumétrica do gás (gas-holdup) com relação a altura da coluna e da geometria do distribuidor. O perfil de fração volumétrica gás previsto pelas simulações em CFD concordaram com os dados experimentais para a coluna de 0.385 m de diâmetro.

Dionísio (2008) analisou através das técnicas de CFD a influência de parâmetros e aproximações geométricas sobre o escoamento bifásico (gás-líquido) em colunas de bolhas de escala de laboratório. Foi observado que a inclusão de distribuidores de fase gasosa na malha computacional acarretou em melhor predição dos perfis de fração volumétrica de gás nas colunas, resolvendo os problemas de aproximações geométricas arbitrárias sobre a forma de se distribuir o gás pela coluna em casos que a simples injeção uniforme apresenta problemas. A utilização dessa abordagem, no entanto, deve ser cuidadosamente considerada devido ao aumento do esforço computacional. Também foi observada uma mudança notável no comportamento do perfil de velocidade axial da fase líquida devido à utilização de uma recirculação externa à coluna (External Loop), acarretando um decréscimo no valor total de fração volumétrica de gás na coluna (Total gas hold-up). No equipamento com o “External loop”, o perfil de velocidade axial do líquido é ascendente em todo o corpo principal da coluna, diferindo das colunas cilíndricas verticais que possuem fluxo ascendente no centro da coluna e descendente nas regiões próximas às paredes. Os resultados mostraram que a metodologia utilizada no trabalho é adequada e capaz de prever comportamentos importantes nos equipamentos bifásicos em questão.

Santos (2005) estudou a influência de parâmetros na fluidodinâmica do gás-líquido, como: vazão de entrada do gás, tamanho das bolhas, influência da fase contínua, análise da influência de três modelos de arraste nos perfis médios de fração volumétrica do gás e de velocidade axial do líquido, além de corroborar os modelos com dados experimentais da literatura. Através dos resultados de simulação verificou-se que quanto maior a velocidade de entrada do gás, maior o gradiente nos perfis de velocidade axial e de fração volumétrica. O efeito do diâmetro das bolhas depende das características da fase contínua. Dentre os modelos de arraste testados, os de Grace e Ishii-Zuber foram os que apresentaram melhor concordância com os dados experimentais. Os efeitos da fase contínua foram avaliados para dois diâmetros de bolhas 4,13 e 6,75 mm. Foi observado, para o caso com menor diâmetro, que os valores

dos perfis de fração volumétrica para o sistema mais viscoso foram superiores aos do sistema menos viscoso, enquanto que para o caso com diâmetro das bolhas de 6,75 mm foi observado o contrário, ou seja, os valores da fração volumétrica foram maiores para o sistema menos viscoso. Foi observada boa concordância com dados experimentais para os casos com velocidade de entrada de gás de 2 cm/s e 5 cm/s para o sistema menos viscoso e de 2 cm/s para o sistema mais viscoso.

## **2.5 Planejamento Experimental**

Para Montgomery (1997), o planejamento experimental é um método estatístico em que se realiza um teste, ou uma série de testes, cujo objetivo é realizar mudanças propositalmente nas variáveis de entrada de um processo, de modo a observar e identificar mudanças correspondentes na saída, o que produzirá informação que pode levar à melhoria do processo. Os objetivos do experimento podem incluir:

- Determinar quais variáveis são mais influentes nos resultados;
- Atribuir valores às variáveis influentes de modo a otimizar os resultados;
- Atribuir valores às variáveis influentes de modo a minimizar a variabilidade dos resultados;
- Atribuir valores às variáveis influentes de modo a minimizar a influência de variáveis incontroláveis;

Segundo Montgomery (2004), os métodos de planejamento experimental podem ser usados tanto no desenvolvimento do processo quanto na solução de problemas do processo, para melhorar o seu desempenho ou obter um processo que seja robusto ou não sensível a fontes externas de variabilidade.

Conforme Montgomery (2004), o planejamento experimental é uma ferramenta de engenharia criticamente importante para melhorar um processo de fabricação. Tem, também, aplicação extensiva no desenvolvimento de novos processos. A aplicação dessas técnicas bem cedo no desenvolvimento do processo pode resultar em

- Produção melhorada
- Variabilidade reduzida e conformidade mais próxima da nominal
- Tempo de desenvolvimento reduzido
- Custos totais reduzidos

De acordo com Montgomery (2004), os métodos de planejamento experimental podem, também, desempenhar um papel importante nas atividades do planejamento de engenharia, onde novos produtos são desenvolvidos e os existentes, melhorados. Algumas aplicações do planejamento experimental estatístico no planejamento de engenharia incluem

- Avaliação e comparação de configurações de planejamento básicas
- Avaliação de materiais alternativos
- Determinação dos parâmetros-chave do planejamento do produto que têm impacto sobre o desempenho

O uso do planejamento experimental nessas áreas pode resultar em capacidade melhorada de fabricação do produto, desempenho de campo e confiabilidade acentuados, menor custo e menor tempo de desenvolvimento do produto.

### **2.5.1 Planejamento Fatorial $2^k$**

Para Montgomery (2004), o planejamento fatorial é uma técnica utilizada quando se tem duas ou mais variáveis (ou fatores) e deseja-se medir os efeitos (ou influências) destas variáveis na resposta de um processo. Especificamente, o planejamento fatorial permite que em cada tentativa completa ou replicação do experimento, sejam investigadas todas as combinações possíveis dos níveis dos fatores. Calado e Montgomery (2003) afirmam que o planejamento fatorial é a única maneira de prever a interação entre os fatores.

Segundo Calado e Montgomery (2003), geralmente o planejamento fatorial é realizado em dois níveis, no máximo três. Isto porque, o uso de mais níveis aumenta

excessivamente o número de pontos experimentais, fato esse que se quer evitar quando se propõe um planejamento.

De acordo com Montgomery (2004), certos tipos especiais de planejamento fatorial são muito úteis no desenvolvimento e melhoria do processo. Um desses é um planejamento fatorial com  $k$  fatores, cada um com dois níveis. Como cada replicação completa do planejamento tem  $2^k$  rodadas, o arranjo é chamado um planejamento fatorial  $2^k$ . Conforme Calado e Montgomery (2003), no caso de se ter 4 variáveis,  $2^4 = 16$ , significando com isso que 16 experimentos devem ser realizados. Esse tipo de planejamento tem uma análise grandemente simplificada e é particularmente útil nos estágios iniciais de um trabalho experimental, quando se têm muitas variáveis a se investigar. Esse procedimento fornece o menor número de corridas com os quais os  $k$  fatores podem ser estudados em um planejamento fatorial completo. Conseqüentemente, esses planejamentos são largamente usados em experimentos de varredura de fatores.

Montgomery (2004) afirma que o efeito de um fator é definido como a mudança na resposta produzida por uma mudança no nível do fator. Isso é chamado efeito principal, porque se refere aos fatores principais no estudo.

Segundo Montgomery (2004), em alguns experimentos, a diferença na resposta entre os níveis de um fator não é a mesma em todos os níveis dos outros fatores. Quando isso ocorre, há uma interação entre os fatores. Quando uma interação é muito grande, os efeitos principais correspondentes têm pouco significado. Uma interação significativa pode mascarar a significância dos efeitos principais.

Conforme Montgomery (2004), na medida em que cresce o número de fatores em um experimento fatorial, cresce também o número de efeitos que podem ser estimados. Na maioria das situações, o princípio da escassez de efeitos se aplica; isto é, o sistema é, usualmente, dominado pelos efeitos principais e pelas interações de ordem inferior. Interações de três ou mais fatores são, em geral, desprezíveis. Portanto, quando o número de fatores é moderadamente grande,  $k \geq 4$  ou 5, uma prática comum é rodar apenas uma replicação do planejamento  $2^k$  e, então, combinar as interações de ordem maior como uma estimativa do erro.

## Capítulo 3

### Metodologia Numérica

#### 3.1 Metodologias da Fluidodinâmica Computacional

A metodologia utilizada em CFD é uma seqüência de procedimentos tais como:

- Construção da geometria
- Geração da malha computacional
- O pré-processamento
- O solver
- O pós-processamento.

##### 3.1.1 Geometria/ Malha

Este processo interativo é a primeira etapa. O objetivo é produzir uma malha computacional que será utilizada no pré-processador para as definições das condições de contorno. Antes da malha ser construída, uma geometria sólida que represente o sistema em estudo é necessária. A geometria e a malha podem ser criadas em CAD2Mesh ou em outra ferramenta de criação. As principais etapas são:

1. Definir ou criar a geometria da região de interesse.
2. Criar regiões de escoamento de fluido e regiões sólidas
3. Definir as propriedades e refinar a malha computacional

##### 3.1.2 Pré-Processamento

O Pré-Processamento é uma etapa interativa que consiste na modelagem física do problema de escoamento, na qual são realizadas as seguintes etapas:

- Definição dos fenômenos físicos e químicos
- Definição das propriedades dos fluidos, tais como, densidade, viscosidade, etc
- Aplicação das condições de contorno
- Escolha dos modelos adequados ao processo

### 3.1.3 Solver

A etapa em que o problema é resolvido é chamada Solver. Os resultados são produzidos em um processo não interativo da seguinte forma:

1. As equações parciais diferenciais são integradas sobre todos os volumes de controle da região de interesse. Isto é equivalente a aplicar as leis de conservação básicas, como massa e momento, para cada volume de controle.
2. As equações integrais são convertidas em um sistema de equações algébricas através de aproximações dos termos das integrais.
3. As equações algébricas são resolvidas iterativamente.

Uma aproximação iterativa é necessária por causa da natureza não-linear das equações. Quando a solução se aproxima da solução exata a simulação converge.

### 3.1.4 Pós-Processamento

O Pós-Processamento é uma etapa interativa de análise, visualização e apresentação dos resultados e inclui desde valores pontuais até animações complexas.

- Visualização da geometria e volumes de controle;
- Visualização de vetores que mostram a direção e a magnitude do escoamento;
- Visualização das variações de variáveis escalares, como temperatura e pressão, através do domínio;
- Cálculos numéricos;
- Gráficos;
- Animações;



## Capítulo 4

### Resultados e Discussão

#### 4.1 Modelagem em CFD

A modelagem e simulação do reator de cloração de eteno foi realizada na região destacada em vermelho na Figura 1. Esta região consiste em uma coluna cilíndrica na qual a mistura líquida de cloro e EDC entra em contato com eteno gasoso, que é injetado no reator através de três distribuidores (ou espargidores) localizados na base desta coluna. Como a reação é instantânea, a etapa limitante do processo é a transferência de massa do eteno para o EDC. Portanto, a reação química de cloração direta do eteno não foi considerada.

A metodologia numérica foi realizada em cinco etapas principais: a construção da geometria, a geração da malha numérica, o pré-processamento, o solver e o pós-processamento.

As simulações foram realizadas com os seguintes programas computacionais:

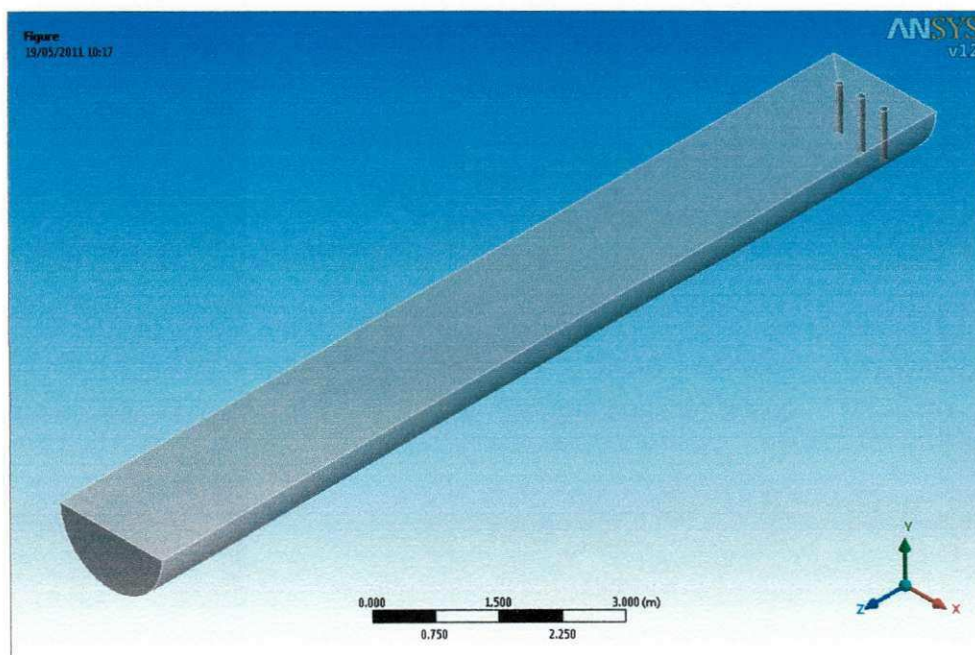
- Construção da geometria: ANSYS Geometry-Design Modeler 12
- Geração da malha numérica: ANSYS CFX-Mesh 12
- Pré-processamento: ANSYS CFX-Pré 12
- Solver: ANSYS CFX-Solver 12
- Pós-processamento: ANSYS CFX-Post 12

##### 4.1.1 Construção da geometria

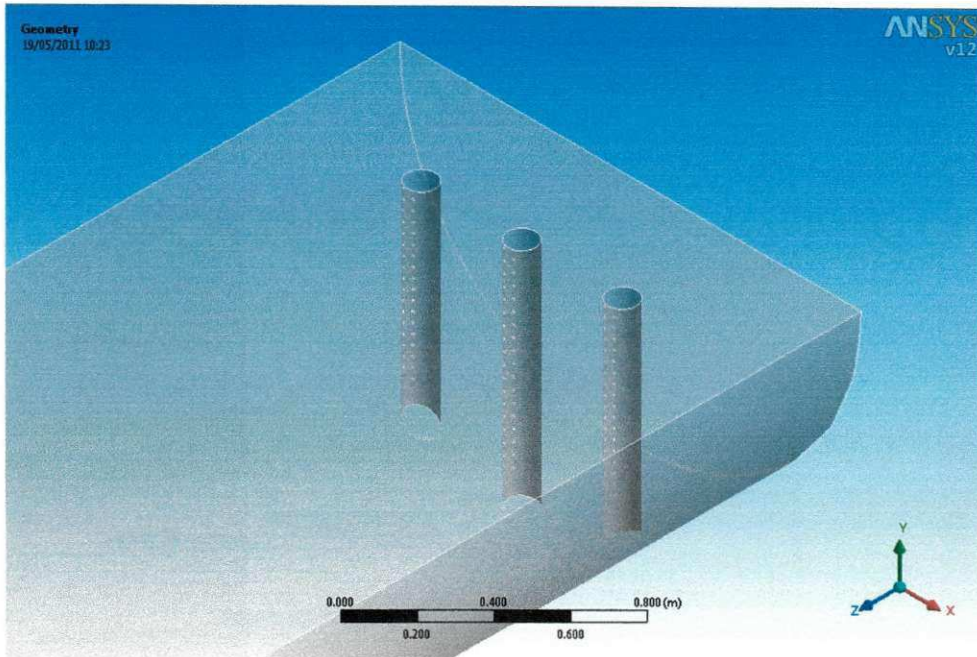
As características geométricas do reator de cloração de eteno são as seguintes:

- Diâmetro do reator = 1,7 m
- Altura do reator = 13,5 m
- Diâmetro dos espargidores de Eteno = 0,1016 m
- Distância entre os espargidores de Eteno = 0,37 m
- Número de furos em cada espargidor de Eteno = 68
- Diâmetro dos furos = 0,006 m

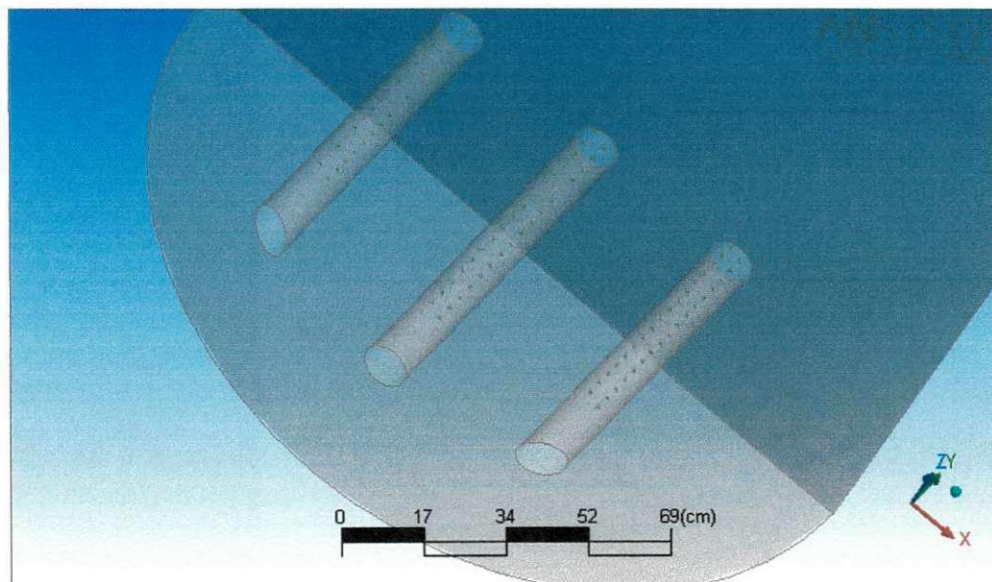
A Figura 3 mostra a geometria do reator de cloração de eteno. Para diminuir o tempo de simulação foi considerada a simetria do reator. Por sua vez as Figuras 4 e 5 mostram a geometria dos espargidores de eteno. Os espargidores são formados por tubos cilíndricos posicionados transversalmente ao corpo do reator. Nas paredes dos espargidores existem diversos furos distribuídos em função de permitir uma melhor dispersão do eteno no reator.



**Figura 3. Geometria do reator de cloração de eteno.**  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)



**Figura 4. Geometria dos espargidores de eteno.  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)**

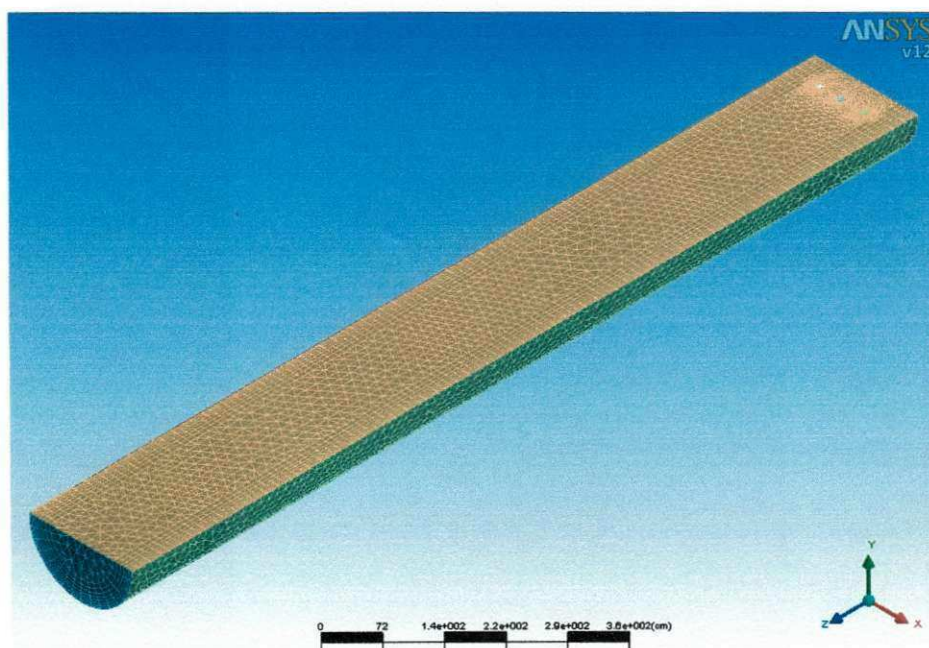


**Figura 5. Geometria dos espargidores de eteno.  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)**

#### 4.1.2 Geração da malha numérica

Como mencionado no Capítulo 3, o domínio de solução é dividido em um número finito de volumes de controle, onde, o conjunto dos volumes de controle é chamado de malha numérica.

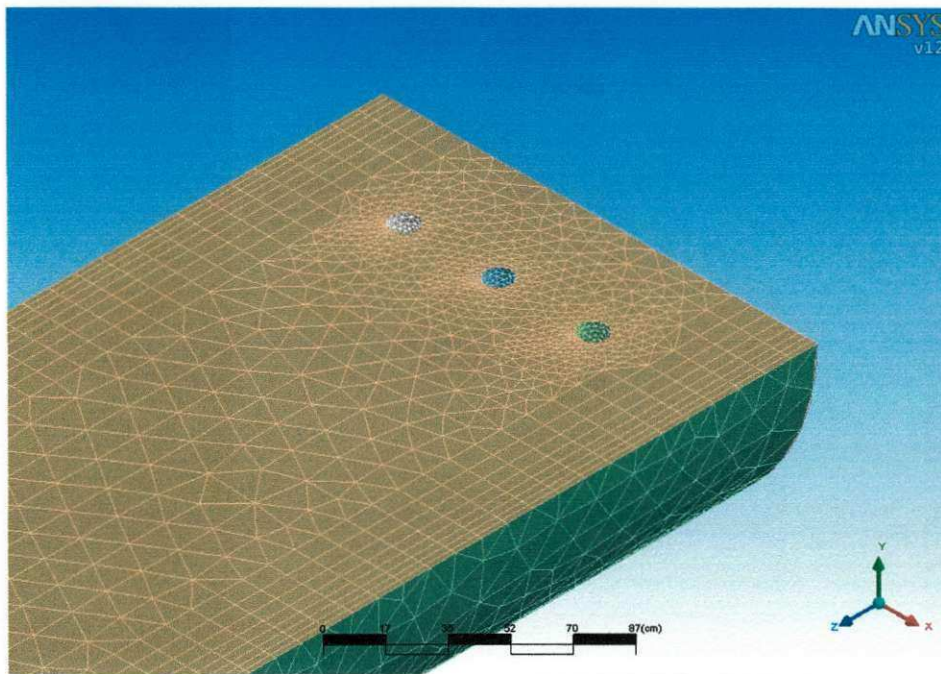
As Figuras 6 a 9 mostram a malha numérica para diferentes partes e em diferentes posições do reator de cloração de eteno. Pode-se observar na Figura 8 que a região próxima dos espargidores de eteno é mais refinada do que o restante do corpo do reator. Além disso, a Figura 9 mostra um refinamento da malha próximo à parede do reator conhecido como função inflation. A função inflation é responsável pelo refinamento da malha nas proximidades de paredes e consiste em posicionar as camadas de elementos prismáticos paralelamente a superfícies sólidas.



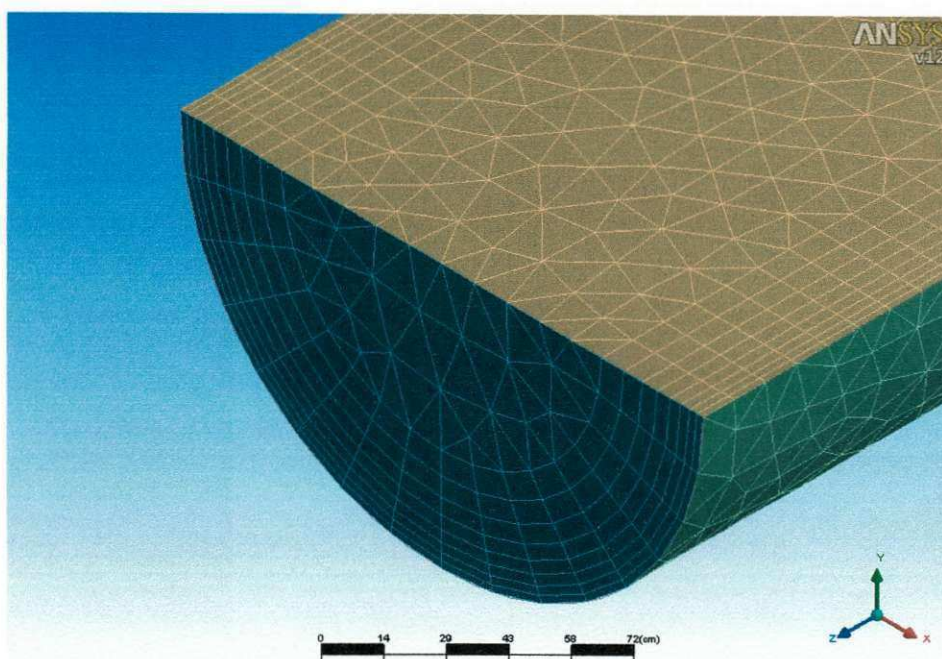
**Figura 6. Malha numérica do reator com detalhe do plano de simetria.  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)**



**Figura 7. Malha numérica do reator com detalhe próximo as paredes.**  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)



**Figura 8. Malha numérica do reator com detalhe próximo aos espargidores de eteno.**  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)



**Figura 9. Malha numérica do reator com detalhe do inflation.**  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)

Neste trabalho foram construídas quatro geometrias e conseqüentemente quatro malhas numéricas, pois, dois dos fatores utilizados no planejamento fatorial são geométricos como o diâmetro dos furos dos espargidores de eteno e o diâmetro do reator.

A malha numérica correspondente a geometria 1 na qual o diâmetro dos furos dos espargidores de eteno é de 5,4 mm e o diâmetro do reator é de 1,53 m possui as seguintes características apresentadas na Tabela 1.

**Tabela 1. Características da malha numérica da geometria 1.**

<b>Número de Nós</b>	51707
<b>Número de elementos tetraedros</b>	104371
<b>Número de elementos piramidais</b>	546
<b>Número de elementos prismáticos</b>	56732
<b>Número total de elementos</b>	161649

A malha numérica correspondente a geometria 2 na qual o diâmetro dos furos dos espargidores de eteno é de 6,6 mm e o diâmetro do reator é de 1,53 m possui as seguintes características apresentadas na Tabela 2.

**Tabela 2. Características da malha numérica da geometria 2.**

<b>Número de Nós</b>	51782
<b>Número de elementos tetraedros</b>	104554
<b>Número de elementos piramidais</b>	539
<b>Número de elementos prismáticos</b>	56864
<b>Número total de elementos</b>	161957

A malha numérica correspondente a geometria 3 na qual o diâmetro dos furos dos espargidores de eteno é de 5,4 mm e o diâmetro do reator é de 1,87 m possui as seguintes características apresentadas na Tabela 3.

**Tabela 3. Características da malha numérica da geometria 3.**

<b>Número de Nós</b>	53316
<b>Número de elementos tetraedros</b>	130534
<b>Número de elementos piramidais</b>	509
<b>Número de elementos prismáticos</b>	50430
<b>Número total de elementos</b>	181473

A malha numérica correspondente a geometria 4 na qual o diâmetro dos furos dos espargidores de eteno é de 6,6 mm e o diâmetro do reator é de 1,87 m possui as seguintes características apresentadas na Tabela 4.

**Tabela 4. Características da malha numérica da geometria 4.**

<b>Número de Nós</b>	52765
<b>Número de elementos tetraedros</b>	128083
<b>Número de elementos piramidais</b>	523
<b>Número de elementos prismáticos</b>	50268
<b>Número total de elementos</b>	178874

### 4.1.3 Pré-Processamento

Nas simulações utilizou-se o sistema bifásico EDC-Eteno, sendo o EDC (Dicloroetano) a fase contínua e o Eteno a fase dispersa.

As propriedades físico-químicas das substâncias utilizadas estão dispostas na Tabela 5.

**Tabela 5. Propriedades dos Fluidos a 25°C**

	<b>EDC</b>	<b>Eteno</b>
<b>Massa Específica [kg/m<sup>3</sup>]</b>	1253	1,178
<b>Viscosidade [Pa s]</b>	0,0008	$1,14 \times 10^{-15}$
<b>Tensão Interfacial [N/m]</b>		0,038

#### 4.1.3.1 Modelos

Neste trabalho os seguintes modelos foram utilizados na especificação das simulações:

- Modelo baseado na formulação Euleriana-Euleriana para fluxos dispersos;
- Modelo de Ishii-Zuber para a força de Arraste;
- Modelo k-ε de turbulência para a fase contínua;
- Modelo MUSIG (Multi-Size-Group) de balanço populacional para distribuição do tamanho das bolhas;
- Modelo de Lopez de Bertodano para a força de dispersão turbulenta;
- Modelo de Sato Enhanced Eddy Viscosity para transferência de turbulência;

#### 4.1.3.2 Condições de Contorno

A simulação foi configurada para o regime permanente devido as suas características de funcionamento contínuo na sua operação na planta industrial.

As condições de contorno estão dispostas na Tabela 6.



**Tabela 6. Condições de Contorno.**

<b>Local</b>	<b>Tipo</b>	<b>Especificações</b>
<b>Base da Coluna</b>	Entrada de EDC	Vazão de EDC Fração Volumétrica de EDC = 1 Fração Volumétrica de Eteno = 0
<b>Espargidores</b>	Entrada de Eteno	Vazão de Eteno Fração Volumétrica de EDC = 0 Fração Volumétrica de Eteno = 1
<b>Topo da Coluna</b>	Saída	Pressão Relativa = 0 Pa
<b>Simetria</b>	Simetria	-
<b>Parede</b>	Parede Lisa	Condição de não escorregamento

#### 4.2 Planejamento fatorial 2<sup>4</sup>

O Planejamento fatorial foi utilizado neste trabalho, pois os efeitos dos fatores individuais e suas combinações sobre a fração volumétrica de eteno no topo do reator foram investigados. O Planejamento fatorial adotado foi o 2<sup>4</sup> que tem quatro fatores em dois níveis. Os quatro fatores analisados foram o diâmetro de furos dos espargidores de eteno, o diâmetro do reator, a vazão de EDC e a vazão de eteno.

A Tabela 7 mostra os valores das variáveis (ou fatores) de interesse consideradas na simulação nos níveis -1, 0 e 1.

As simulações foram realizadas, seguindo o planejamento fatorial mostrado na Tabela 8.

**Tabela 7. Fatores analisados em três níveis.**

<b>Fatores</b>	<b>Níveis</b>		
	-1	0	+1
A = Diâmetro dos furos (m)	0,0054	0,006	0,0066
B = Diâmetro do reator (m)	1,53	1,7	1,87
C = Vazão de EDC (kg/s)	1463,742	1626,38	1789,018
D = Vazão de eteno (kg/s)	1,2668	1,4076	1,5484

**Tabela 8. Planejamento fatorial.**

<b>Experimento</b>	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>D</b>
1	-1	-1	-1	-1
2	+1	-1	-1	-1
3	-1	+1	-1	-1
4	+1	+1	-1	-1
5	-1	-1	+1	-1
6	+1	-1	+1	-1
7	-1	+1	+1	-1
8	+1	+1	+1	-1
9	-1	-1	-1	+1
10	+1	-1	-1	+1
11	-1	+1	-1	+1
12	+1	+1	-1	+1
13	-1	-1	+1	+1
14	+1	-1	+1	+1
15	-1	+1	+1	+1
16	+1	+1	+1	+1

### **4.3 Resultados dos experimentos**

A Figura 10 representa o perfil de fração volumétrica do gás eteno no plano de simetria para o caso em que todos os fatores estão nas condições atuais, ou seja, de acordo com o modelo real do reator.

As Figuras de 11 a 26 representam respectivamente os perfis de fração volumétrica do gás eteno no plano de simetria dos experimentos de 1 a 16.

## Experimento padrão

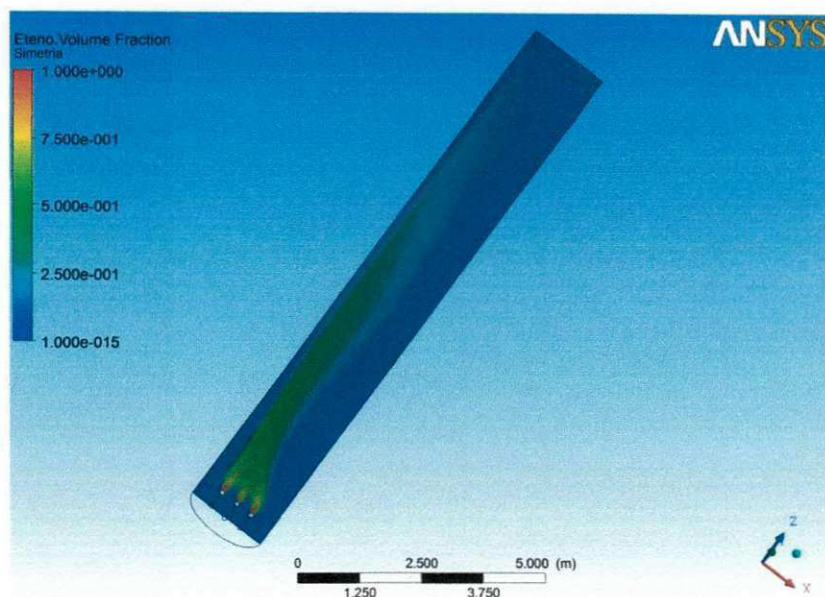


Figura 10. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento padrão. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento padrão foi de:

$$X_{Eteno} = 0,0029146$$

## Experimento 1

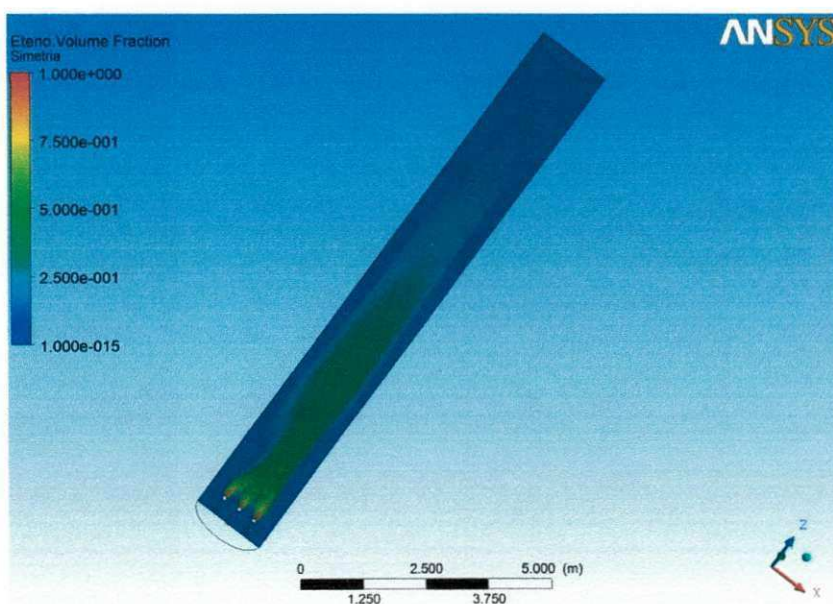


Figura 11. perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 1. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 1 foi de:

$$X_{Eteno} = 1 \times 10^{-15}$$

### Experimento 2

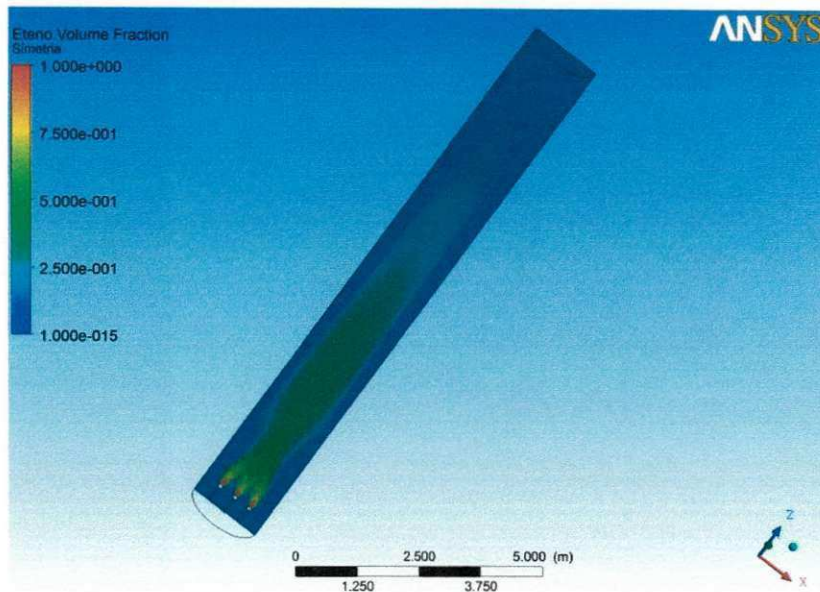


Figura 12. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 2. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 2 foi de:

$$X_{Eteno} = 1 \times 10^{-15}$$

### Experimento 3

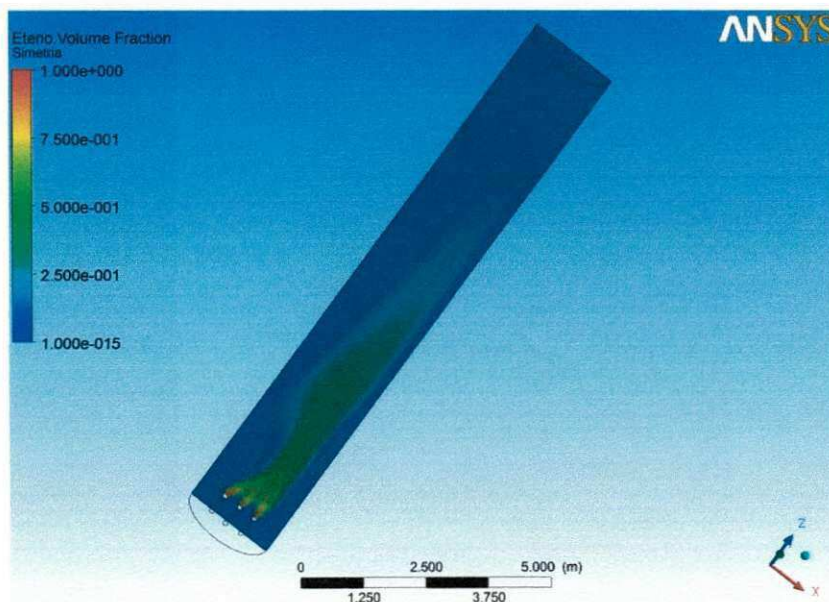


Figura 13. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 3. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 3 foi de:

$$X_{Eteno} = 1 \times 10^{-15}$$

#### Experimento 4

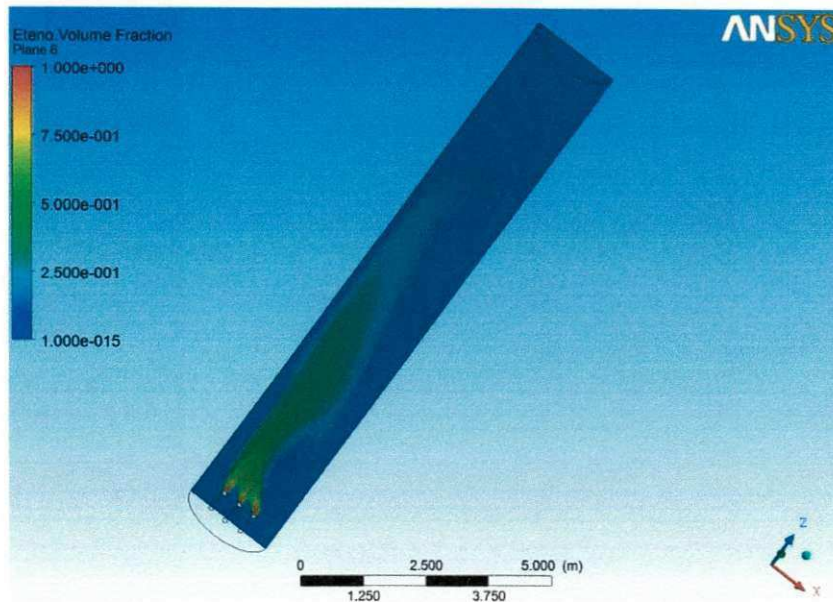


Figura 14. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 4. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 4 foi de:

$$X_{Eteno} = 1 \times 10^{-15}$$

#### Experimento 5

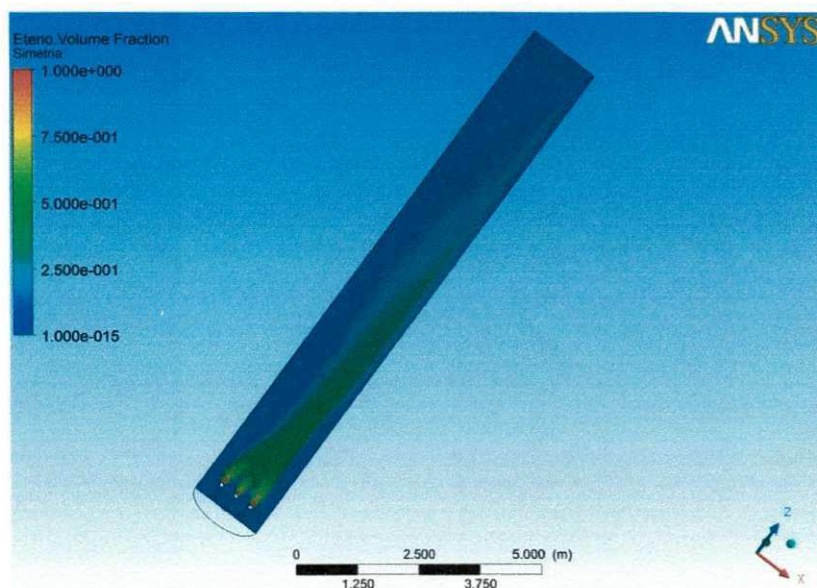


Figura 15. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 5. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 5 foi de:

$$X_{Eteno} = 0,00641304$$

### Experimento 6

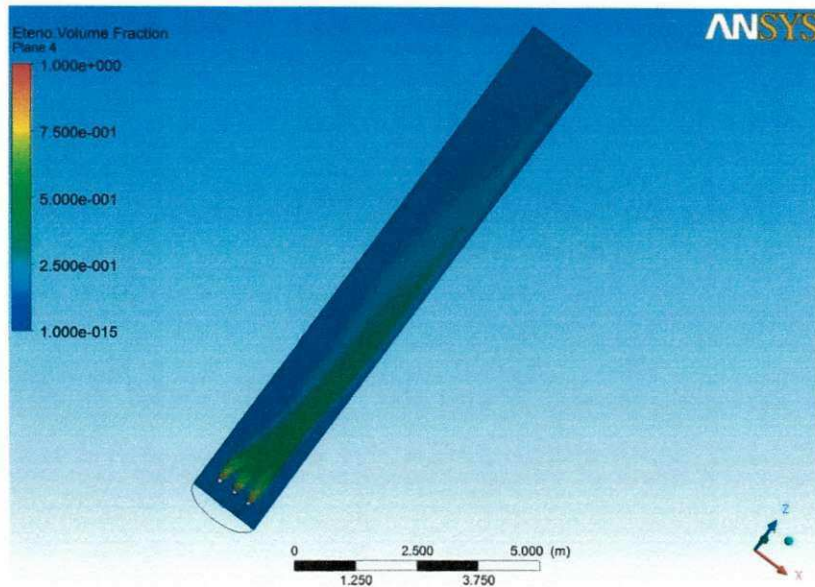


Figura 16. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 6. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 6 foi de:

$$X_{Eteno} = 0,00632181$$

### Experimento 7

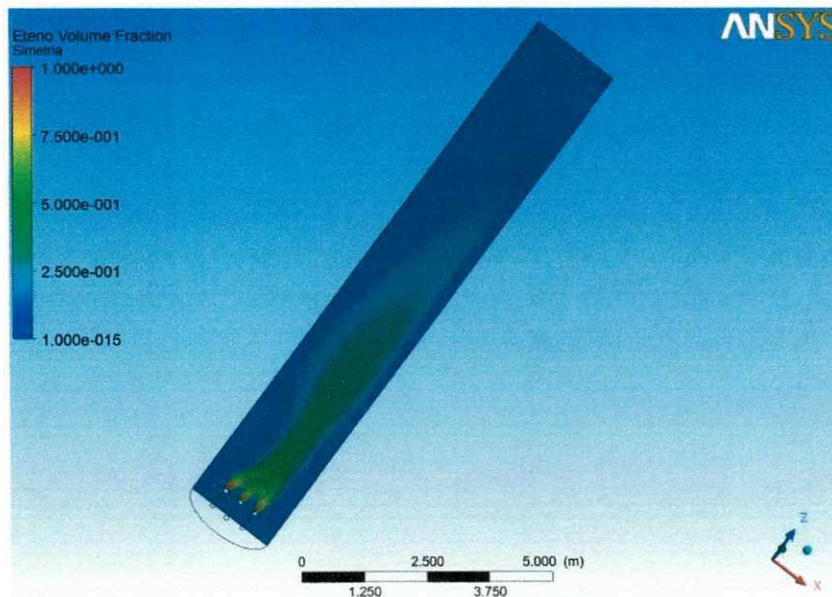


Figura 17. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 7. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 7 foi de:

$$X_{Eteno} = 1 \times 10^{-15}$$

### Experimento 8

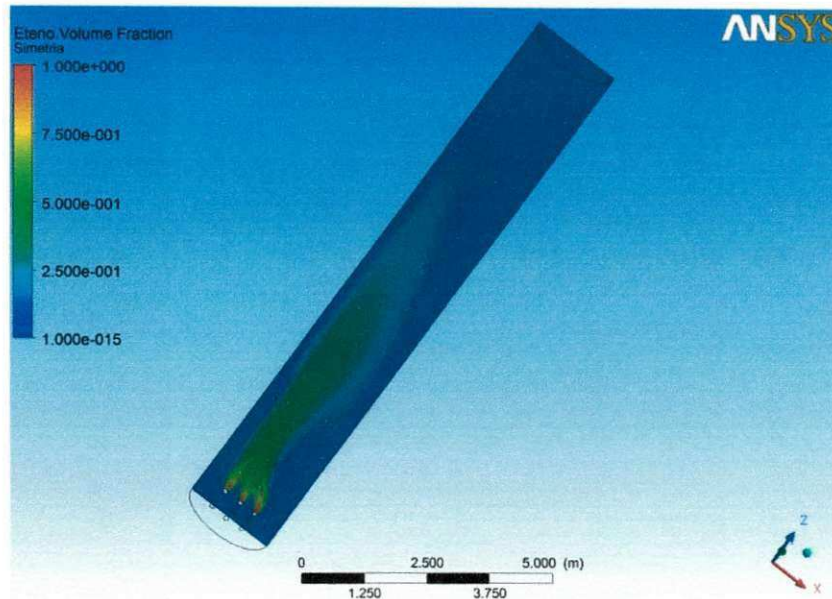


Figura 18. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 8. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 8 foi de:

$$X_{Eteno} = 1 \times 10^{-15}$$

### Experimento 9

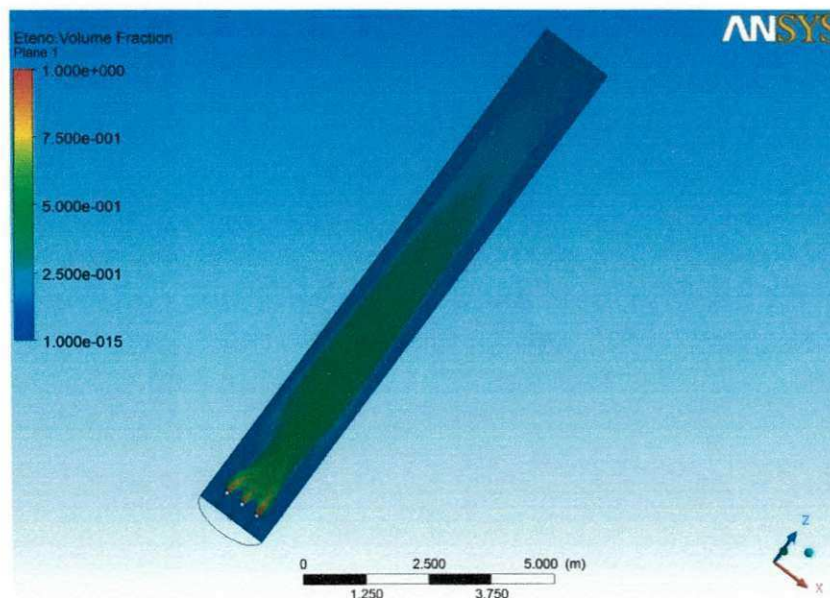


Figura 19. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 9. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 9 foi de:

$$X_{Eteno} = 0,0172436$$

### Experimento 10

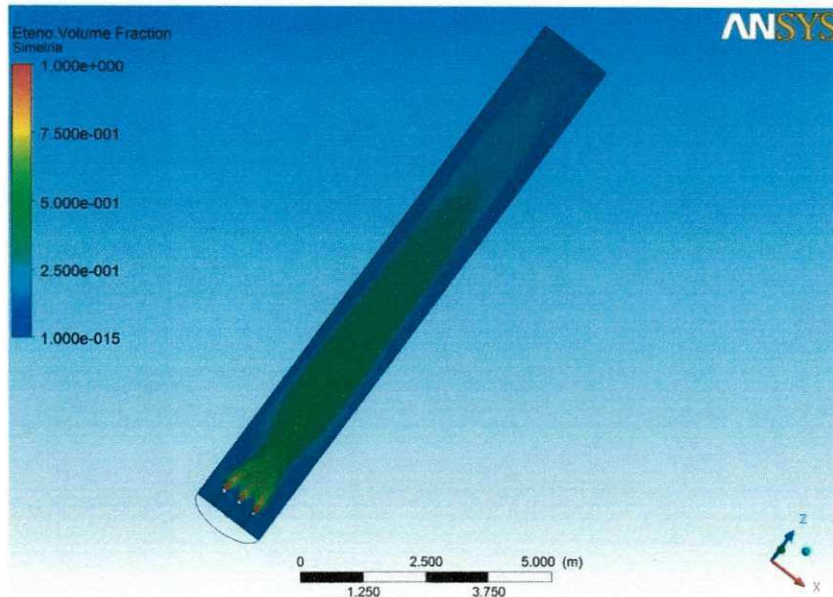


Figura 20. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 10. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 10 foi de:

$$X_{Eteno} = 0,0178227$$

### Experimento 11

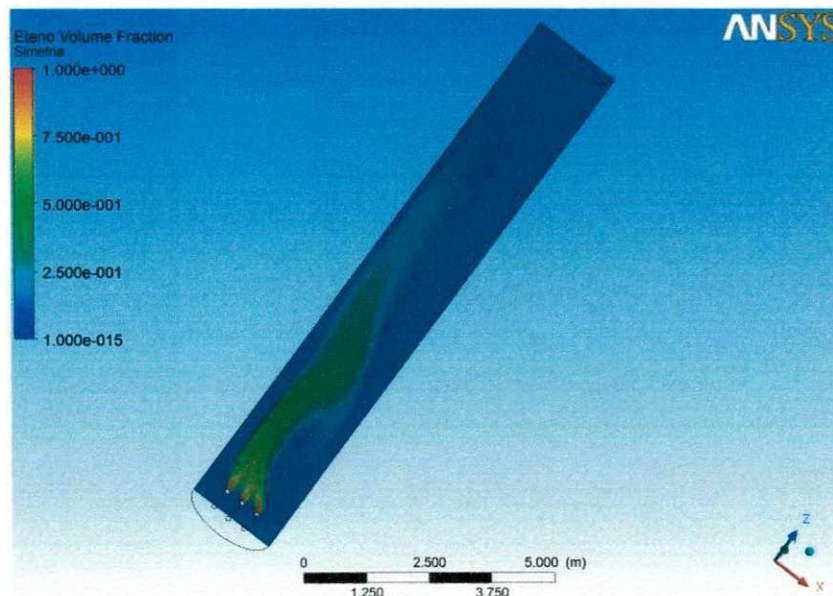


Figura 21. Perfil da Fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 11. (Fonte: Resultado da Pesquisa)



A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 11 foi de:

$$X_{Eteno} = 1 \times 10^{-15}$$

### Experimento 12

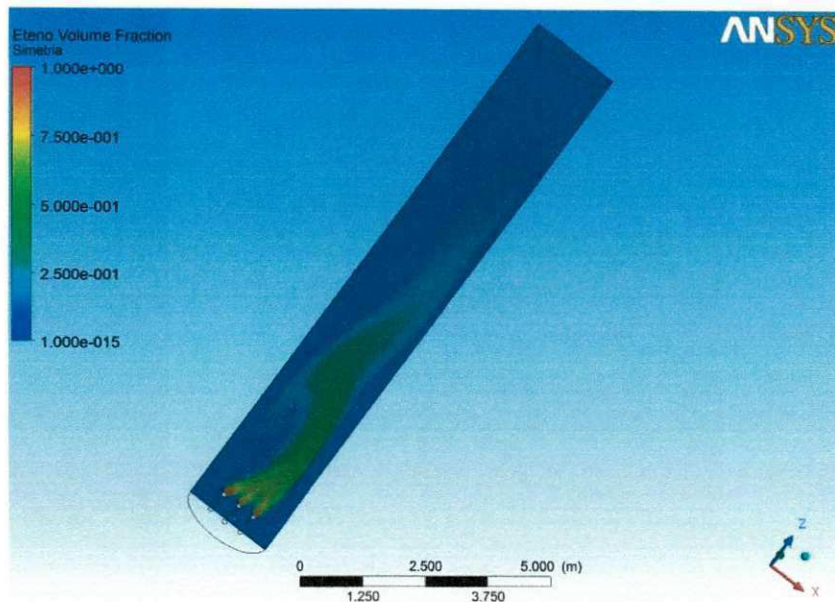


Figura 22. Perfil da Fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 12. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 12 foi de:

$$X_{Eteno} = 1 \times 10^{-15}$$

### Experimento 13

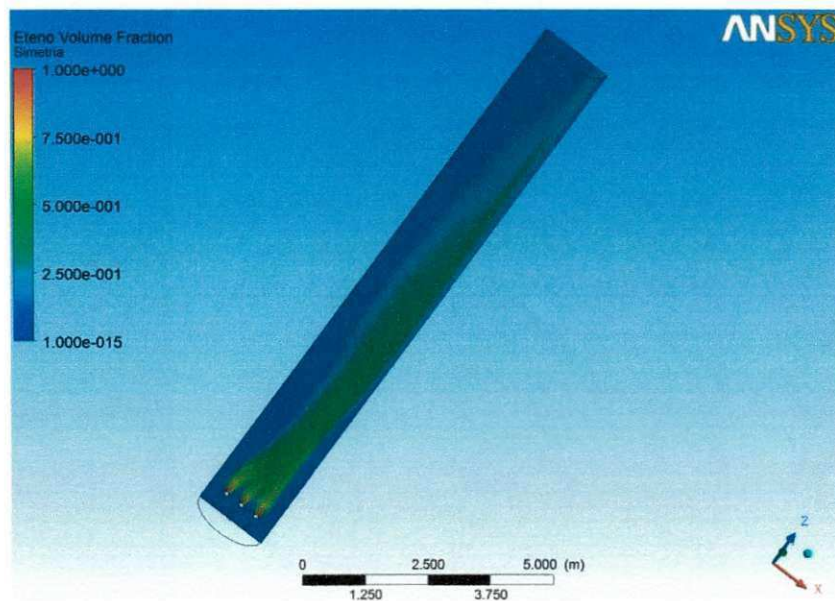


Figura 23. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 13. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 13 foi de:

$$X_{Eteno} = 0,0358804$$

### Experimento 14

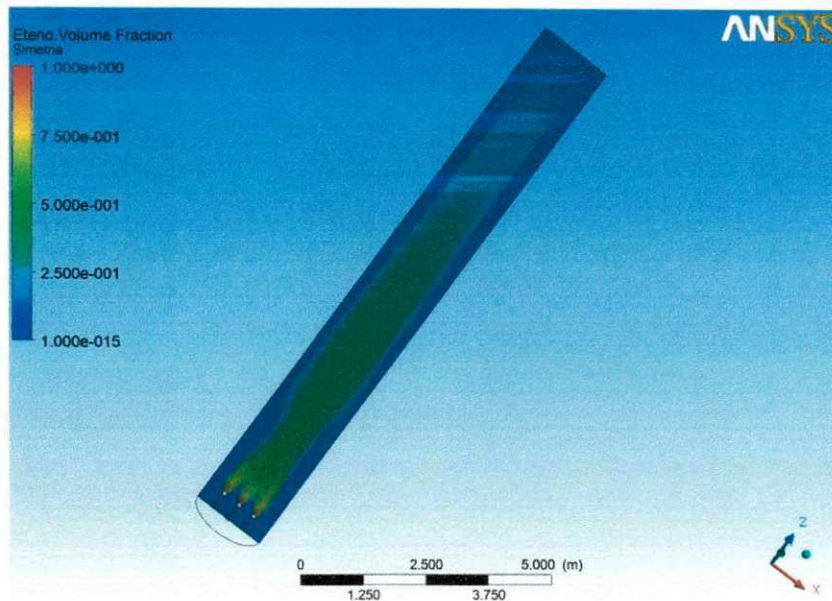


Figura 24. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 14. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 14 foi de:

$$X_{Eteno} = 0,0216359$$

### Experimento 15

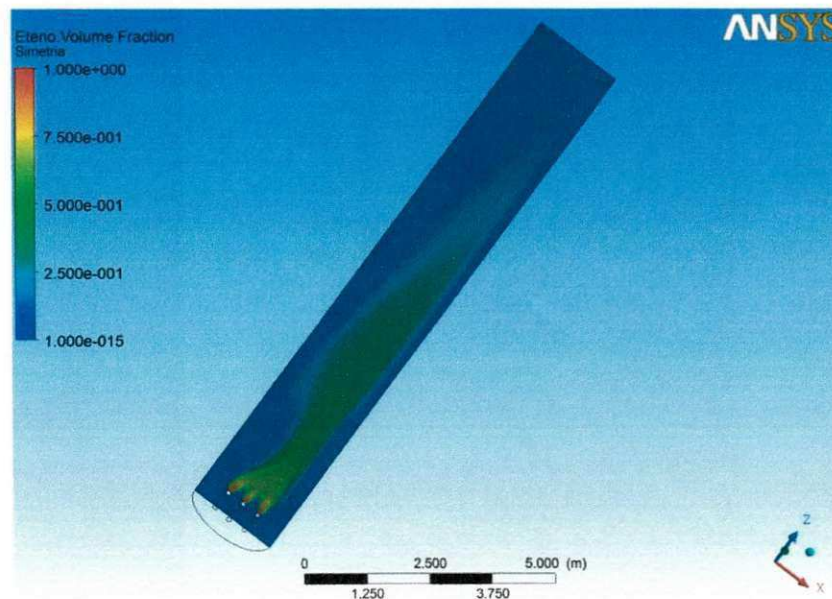


Figura 25. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 15. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 15 foi de:

$$X_{Eteno} = 1 \times 10^{-15}$$

### Experimento 16

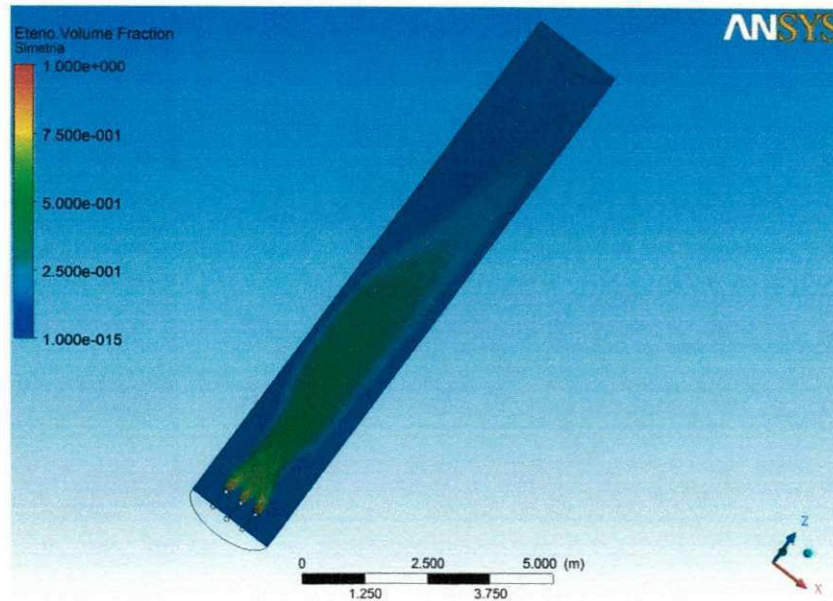


Figura 26. Perfil da fração volumétrica de eteno ao longo do reator no plano de simetria do experimento 16. (Fonte: Resultado da Pesquisa)

A fração volumétrica de eteno no topo do reator para o experimento 16 foi de:

$$X_{Eteno} = 1 \times 10^{-15}$$

A partir das Figuras 11 a 26 foi possível observar que os perfis da fração volumétrica do gás eteno no plano de simetria quando o diâmetro do reator estava no nível -1 apresentou-se de forma uniforme axialmente. Enquanto que nos casos em que o diâmetro estava no nível +1 os perfis da fração volumétrica do gás eteno apresentaram-se de forma não uniforme axialmente o que favorece a recirculação de líquido no interior da coluna.

Os resultados da fração volumétrica de eteno no topo do reator ( $X_{Eteno}$ ) estão dispostas na Tabela 9.

**Tabela 9. Resultados dos Experimentos**

<b>Experimento</b>	$X_{Eteno}$
1	$1 \times 10^{-15}$
2	$1 \times 10^{-15}$
3	$1 \times 10^{-15}$
4	$1 \times 10^{-15}$
5	0,00641304
6	0,00632181
7	$1 \times 10^{-15}$
8	$1 \times 10^{-15}$
9	0,0172436
10	0,0178227
11	$1 \times 10^{-15}$
12	$1 \times 10^{-15}$
13	0,0358804
14	0,0216359
15	$1 \times 10^{-15}$
16	$1 \times 10^{-15}$

**Tabela 10. Constantes dos Contrastes para o planejamento 2<sup>4</sup>**

Experimento		A	B	AB	C	AC	BC	ABC	D	AD	BD	ABD	CD	ACD	BCD	ABCD
1	(1)	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	+1
2	a	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	-1	-1
3	b	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	+1	-1
4	ab	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1
5	c	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1
6	ac	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1
7	bc	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1
8	abc	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
9	d	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1
10	ad	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1
11	bd	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1
12	abd	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1
13	cd	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
14	acd	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1
15	bcd	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1
16	abcd	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1

A Tabela 10 é a tabela dos sinais mais e menos para o planejamento 2<sup>4</sup>. Os sinais nas colunas dessa tabela podem ser usados para estimar os efeitos dos fatores. A estimativa de qualquer efeito principal ou interação é determinada pela multiplicação das combinações fator-nível na segunda coluna da Tabela 10 pelos sinais na coluna correspondente do efeito principal ou interação, somando-se, então, os resultados para se obter um contraste, e dividindo-se o contraste pela metade do número total de experimentos. Expressa matematicamente como a equação 67,

$$Efeito = \frac{Contraste}{n 2^{k-1}} \quad (67)$$

Como ilustração, a estimativa do efeito do fator A é

$$A = \frac{1}{8} [a + ab + ac + abc + ad + abd + acd + abcd - (1) - b - c - d - bc - bd - cd - bcd]$$

$$= \frac{1}{8} \left[ \begin{array}{l} 1 \times 10^{-15} + 1 \times 10^{-15} + 0,00632181 + 1 \times 10^{-15} + 0,0178227 + 1 \times 10^{-15} + 0,0216359 + \dots \\ 1 \times 10^{-15} - 1 \times 10^{-15} - 1 \times 10^{-15} - 0,00641304 - 1 \times 10^{-15} - 0,0172436 - 1 \times 10^{-15} - \dots \\ 0,0358804 - 1 \times 10^{-15} \end{array} \right]$$

$$A = -0,001720$$

Assim, o efeito do aumento do diâmetro dos furos dos espargidores em 10% é o de diminuir em 0,001720 a fração volumétrica do gás eteno no topo do reator.

O conjunto completo das estimativas dos efeitos é dado na Figura 27.

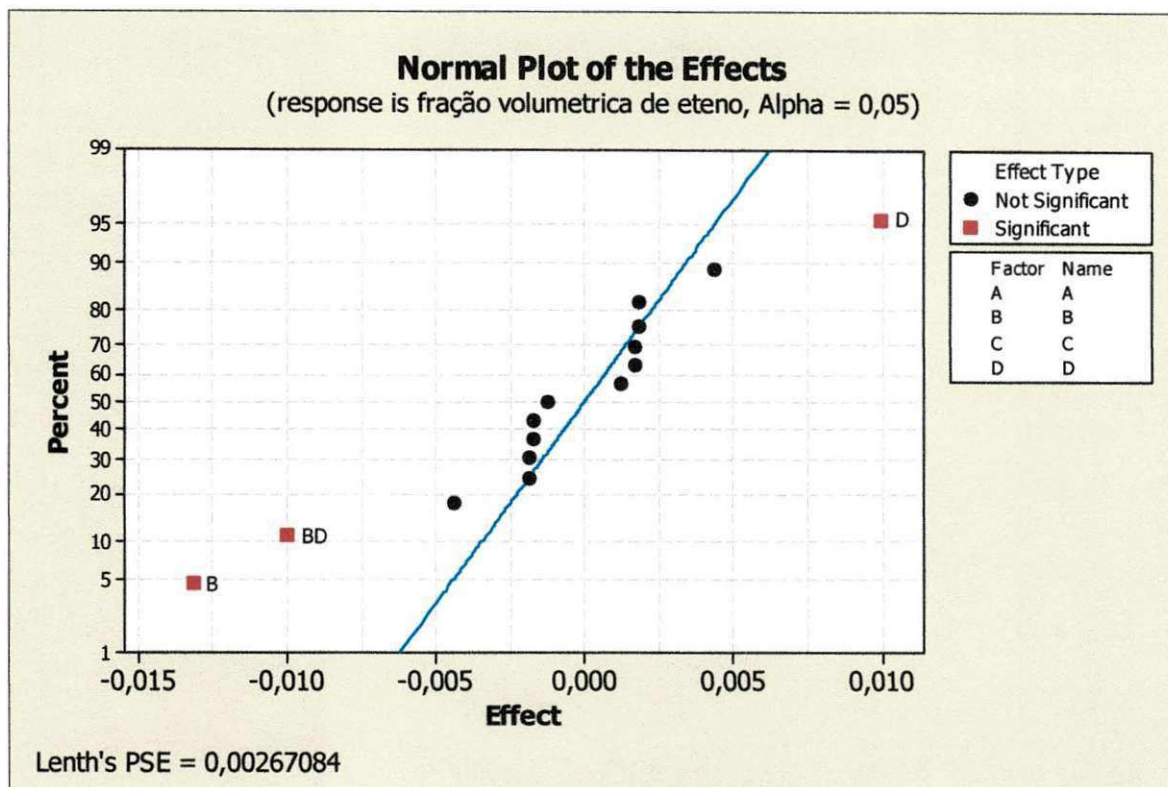
Term	Effect	Coef
Constant		0,006582
A	-0,001720	-0,000860
B	-0,013165	-0,006582
C	0,004398	0,002199
D	0,009981	0,004990
A*B	0,001720	0,000860
A*C	-0,001864	-0,000932
A*D	-0,001697	-0,000848
B*C	-0,004398	-0,002199
B*D	-0,009981	-0,004990
C*D	0,001214	0,000607
A*B*C	0,001864	0,000932
A*B*D	0,001697	0,000848
A*C*D	-0,001842	-0,000921
B*C*D	-0,001214	-0,000607
A*B*C*D	0,001842	0,000921

Figura 27. Estimativa dos efeitos dos fatores.  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)

Um método muito útil para avaliar a significância dos fatores em um experimento  $2^k$  é a construção do gráfico da probabilidade normal das estimativas dos efeitos como mostrado na Figura 28.

Como o erro experimental não foi considerado já que temos apenas uma medida para cada experimento o grau de liberdade do termo erro é zero, neste caso, o gráfico de probabilidade normal (percentagem versus os efeitos não normalizados) produzido pelo minitab apresenta uma reta que passa pelo ponto (50, 0) com uma inclinação de  $1/Lenth's PSE$ .

Os efeitos desprezíveis são normalmente distribuídos e estão próximos a reta num gráfico de probabilidade normal. Já os efeitos significantes localizam-se distante da reta, ou seja, os valores absolutos localizam-se fora da margem de erro.



**Figura 28. Gráfico da probabilidade normal dos efeitos.**  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)

Claramente, os efeitos principais de B e D e a interação BD são significantes, uma vez que se localizam distantes da reta que passa pelos outros pontos e seus valores absolutos estão fora da margem de erro que é de 0,00687.

Como  $B = -0,013165$ , o efeito do aumento do diâmetro do reator é a diminuição da fração volumétrica do gás eteno no topo do reator. No entanto,  $D = 0,009981$ , de modo que, o efeito do aumento da vazão de Eteno é o aumento da fração volumétrica do gás eteno no topo do reator.

A Figura 29 é um gráfico da interação BD. Este gráfico indica que o efeito do aumento da vazão de eteno em altos níveis do diâmetro do reator é insignificante, mas o aumento da vazão de eteno em baixos níveis do diâmetro do reator aumenta a fração volumétrica do gás eteno no topo do reator. Obtêm-se baixas frações volumétricas do gás eteno no topo do reator com diâmetro do reator e vazão de eteno menores.

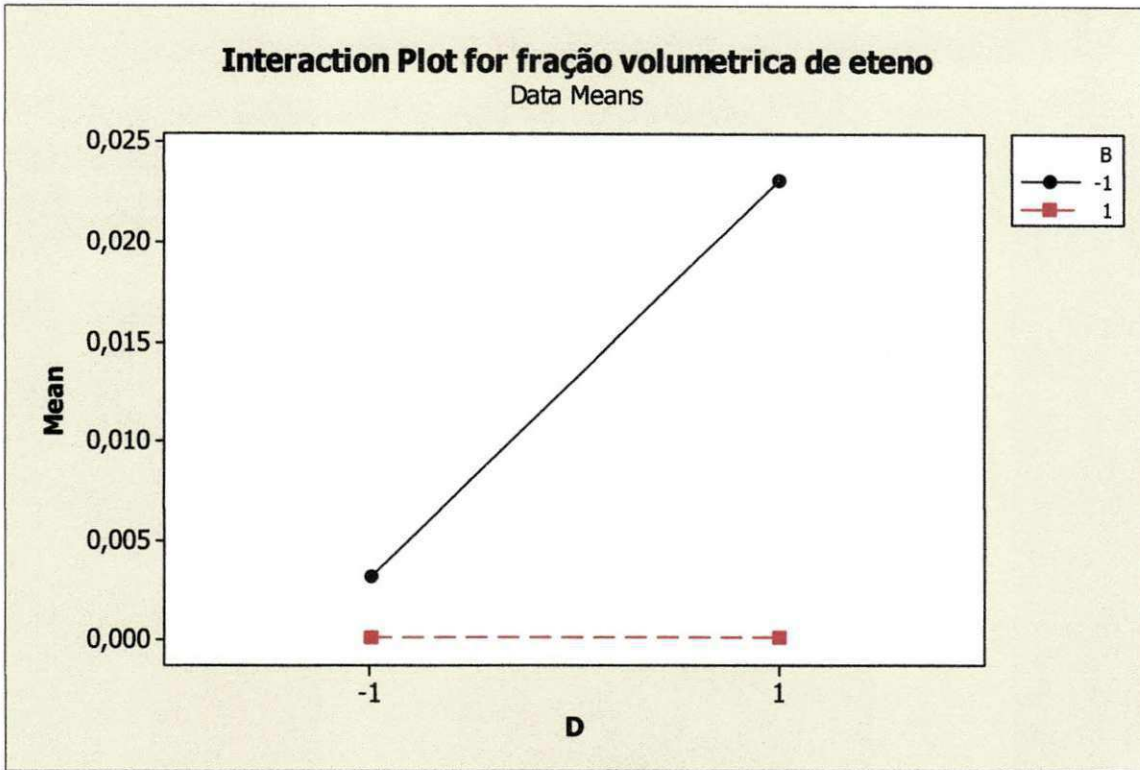


Figura 29. Gráfico da interação dos fatores B e D.  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)

A Figura 30 representa o Gráfico de Pareto.

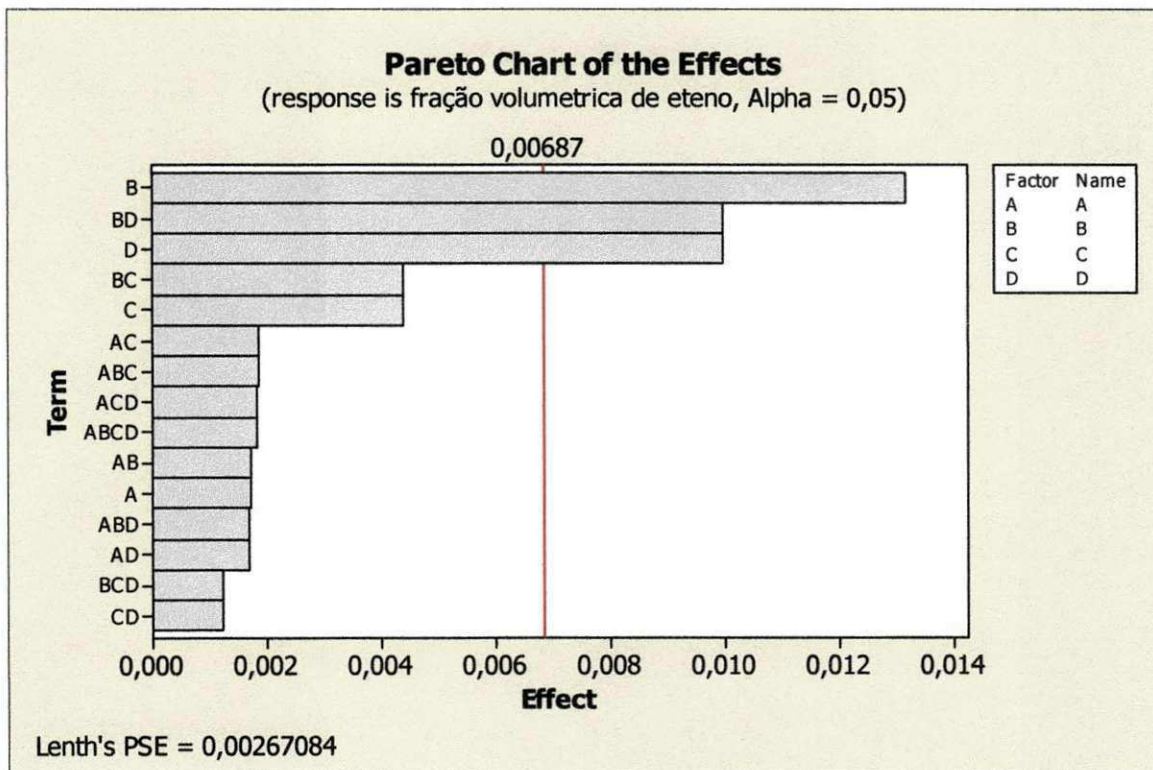


Figura 30. Gráfico de Pareto para os dados experimentais.  
(Fonte: Resultado da Pesquisa)



O gráfico de Pareto mostra quais os fatores são significantes e a ordem de significância dos mesmos. O valor 0,00687 representa a margem de erro, ou seja, os efeitos que possuem valores absolutos maiores do que a margem de erro são significativos e os efeitos que possuem valores absolutos menores são desprezíveis.

De acordo com o gráfico de Pareto é possível observar que o fator B (diâmetro do reator) é o mais influente sobre a fração volumétrica do gás eteno no topo do reator seguido do fator D (vazão de eteno) e da interação dos fatores BD.

## Capítulo 5

### Conclusões

A partir dos resultados dos experimentos e estatísticos foi possível concluir que:

- ✓ Dentre os fatores estudados aqueles que apresentaram uma maior influência sobre a fração volumétrica do gás eteno no topo do reator foram os fatores principais B, D e a interação BD.
- ✓ O efeito do aumento do fator B (diâmetro do reator) é a diminuição da fração volumétrica do gás eteno no topo do reator.
- ✓ O efeito do aumento do fator D (vazão de eteno) é o aumento da fração volumétrica do gás eteno no topo do reator.
- ✓ A partir da análise da interação dos fatores B e D pode-se concluir que se obtêm baixas frações volumétricas do gás eteno no topo do reator com diâmetro do reator e vazão de eteno menores.
- ✓ A partir do gráfico de Pareto pôde-se analisar que dentre os fatores influentes a ordem de significância é dada da seguinte forma: o fator B é o mais significativo seguido do fator D e da interação BD.

## Propostas para Trabalhos Futuros

- ✓ Estudar o efeito de outros fatores não considerados neste trabalho, por exemplo, número, posição e forma de distribuição dos furos nos distribuidores de eteno.
- ✓ Realizar novos estudos geométricos nas colunas de bolhas com outros tipos de distribuidores de fase gasosa.
- ✓ Realizar estudos considerando o regime transiente.
- ✓ Realizar estudos com a geometria do reator mais complexa. Por exemplo, realizar simulações considerando o sistema resfriamento e sistema de recirculação de líquido.
- ✓ Realizar um estudo sobre a influência da vaporização do cloro no seio da massa reacional e seu efeito sobre a fração volumétrica ou concentração de eteno no topo do reator.
- ✓ Realizar estudos considerando a alimentação de cloro gasoso ao invés de cloro líquido no reator.

## Referências Bibliográficas

ALVES, J. J. N. **Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante**, Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Química/UNICAMP, 1998 a.

BALASUBRAMANIAN, S. N.; RIHANI, D. N.; DORAISWAMY, L. K. **Film model for ethylene dichloride formation**. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* v. 5, p. 184 – 188, 1966.

BEHKISH, A.; MEN, Z.; INGA, R. J.; MORSI, B. I. **Mass transfer characteristics in a large-scale slurry bubble column reactor with organic liquid mixtures**. *Chemical Engineering Science* 2002; 57:3307-24.

BOUAIFI, M.; HEBRARD, G.; BASTOUL, D.; ROUSTAN, M. **A comparative study of gas holdup, bubble size, interfacial area and mass transfer coefficients in stirred gas-liquid reactors and bubble columns**. *Chemical Engineering Processing* 2001; 40:97-111.

BUWA, V. V.; RANADE, V. V. **Dynamics of gas-liquid flow in a rectangular bubble column: experiments and single/multi-group CFD simulations**. *Chemical Engineering Science* 2002; 57:47 15-36.

CALADO, V.; MONTGOMERY, D. C. **Planejamento de Experimentos usando o Statistica**. Rio de Janeiro, Brasil. E-papers Editora, 1ª edição, 2003.

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

DEGALEESAN, S.; DUDUKOVIC, M.; PAN, Y. **Experimental study of gas-induced liquid-flow structures in bubble columns**. *AIChE Journal* 2001; 47:1913-31.

DHOTRE, M. T.; EKAMBARA, K. JOSHI, J. B. **CFD simulation of sparger design and height to diameter ratio on gas hold-up profiles in bubble column reactors.** Experimental Thermal and Fluid Science 2004; 28:407-21.

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

FAN, L. S.; MATSUURA, A.; CHERN, S. S. **Hydrodynamics characteristics of a gas-liquid-solid fluidized bed containing a binary mixture of particles.** AIChE Journal 1985;31:1801-10.

FERREIRA, V. G.; MELLO, O. D.; OLIVEIRA, J. N.; FORTUNA, A. O. **Tópicos Teóricos e Computacionais em Escoamento de Fluidos.** Notas do Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, UFSCar, 1999.

FORRET, A.; SCHWEITZER, J. M.; GAUTHIER, T.; KRISHNA, R.;SCHWEICHC, D. **Influence of scale on the hydrodynamics of bubble column reactors: an experimental study in columns of 0.1, 0.4 and 1m diameters.** Chemical Engineering Science v. 58, p. 719 – 724, 2003.

FUKUMA, M.; MUROYAMA, K.; MOROOKA, S. **Properties of bubble swarm in a slurry bubble column.** Journal of Chemical Engineering of Japan 1987; 20:28-33

KAWAGOE, K.; INOUE, T.; NAKAO, K.; OTAKE, T. **Flow-pattern and gas holdup conditions in gas-sparged contactors.** International Journal of Chemical Engineering 1976; 16:176-83.

KRISHNA, R.; VAN BATEN, J. M. **Mass transfer in bubble columns.** Catal Today 2003;79-80:67-75.

KULKARNI, A.A., EKAMBARA K., JOSHI, J. B., **On the development of flow pattern in a bubble column reactor: Experiments and CFD**, Chemical Engineering Science, Elsevier, p.p. 1049-1072, 2006.

LETZEL, H.; SHOUTEN, M. J. C.; KRISHNA, R.; VAN DEN BLEEK, C. M. **Gas holdup and mass transfer in bubble column reactors operated at elevated pressure.** Chemical Engineering Science 1999;54:2237-46.

MAALEJ, S.; BENADDA, B.; OTTERBEIN, M. **Interfacial area and volumetric mass transfer coefficient in a bubble reactor at elevated pressures.** Chemical Engineering Science 2003; 58:2365-76.

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

Manual do CFX® 12 – Solver Theory/Multiphase Theory

Monografia de Processo da área de DCE da BRASKEM SA.

MICHELE, V.; HEMPEL, D. C. **Liquid flow and gas holdup-measurement bubble and CFD modeling for two-and-three-phase bubble columns.** Chemical Engineering Science 2002; 57:1899-908.

MONTGOMERY, D. C. **Design and Analysis of Experiments.** Library of Congress Cataloging-in-Publication Data, John Wiley & Sons, Inc, Arizona, Estados Unidos, 4ª edição, 1997.

MONTGOMERY, D. C. **Introdução ao Controle Estatístico da Qualidade.** Rio de Janeiro, Brasil. LTC Editora, 4ª edição, 2004.

MULLER, F. L.; DAVIDSON, F. **On the effects of surfactants on mass transfer to viscous liquids in bubble columns.** Chemical Engineering Research and Design 1995; 73:291.

OREJAS, J. A., **Modelling and Simulation of a Bubble-column Reactor with External Loop: Application to Direct Chlorination of Ethylene,** Chemical Engineering Science, Elsevier, p.p. 5299-5309, 1999.

OREJAS, J. A., **Model Evaluation for an Industrial Process of Direct Chlorination of Ethylene in a Bubble-column Reactor with External Recirculation Loop**, Chemical Engineering Science, Elsevier, p.p. 513-522, 2001.

OZTURK, S. S.; SCHUMPE, A.; DECKWER, W. D. **Organic liquids in a bubble column: holdups and mass transfer coefficients**. AIChE Journal 1987;33:1473-80.

PERRY'S CHEMICAL ENGINEERS'HANDBOOK, 7th ed, The McGraw-Hill Companies, Inc., 1997.

SANTOS, C. M.; **Simulação Tridimensional com Sistema Gás-Líquido em Colunas de Bolhas**, Dissertação de Mestrado, Faculdade de Engenharia Química/UNICAMP, 2005.

SCHUMPE, A.; GRUND, G. **The gas disengagement technique for studying gas holdup structure in bubble columns**. Canadian Journal Chemical Engineering 1986; 64:891-6.

SILVA, L. F. L. R. **Uma revisão sobre colunas de borbulhamento**. Rio de Janeiro, 2008. Disponível em <<http://notasemefd.blogspot.com/2008/09/uma-revisao-sobre-colunas-de.html>>. Acesso em: 7 jul. 2010.

THORAT, B. N.; JOSHI, J. B. **Regime transition in bubble columns: experimental and predictions**. Experimental Thermal and Fluid Science 2004; 28:423-30.

VAFOPULOS, I.; SZTATESCNY, K.; MOSER, F. **Der einfluß des partial-und gesamtdruckes auf den stoffaustausch**. Chemical Engineering Technology 1975; 47:681-786.

VANDU, C. O.; KRISHNA, R. **Volumetric mass transfer coefficients in slurry bubble columns operating in churn-turbulent flow regime**. Chemical Engineering Processing 2004; 43:987-95.

VERMA, A. K.; RAI, S. **Studies on surface to bulk ionic mass transfer in bubble column.** Chemical Engineering Journal 2003; 94:67-72.

VIAL, C., PENCIN S., WILD G., MIDOUX N., **A simple method for regime identification and flow characterization in bubble columns and airlift reactors,** Chemical Engineering and Processing, Elsevier, p.p. 135-151, 2000.

WACHI, S.; MORIKAWA, H., **Liquid-Phase Chlorination of Ethylene and 1,2-Dichloroethane,** Journal of Chemical Engineering of Japan, v.19, no. 5, 1986.

WILD, G.; PONCIN, S.; LI, H.; OLMOS, E. **Some Aspects of the Hydrodynamics of Bubble Columns,** International Journal Of Chemical Reactor Engineering, v.1 Review R7, 2003.