



SIMULAÇÃO DE EVAPORADORES POR CONTATO DIRETO USANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Fábio Pereira de Aguiar Barros

Projeto de Final de Curso

Orientadores

Prof. Eduardo Mach Queiroz, D.Sc.
Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.
Ricardo Carvalho Rodrigues, M.Sc.

Dezembro de 2006

SIMULAÇÃO DE EVAPORADORES POR CONTATO DIRETO USANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Fábio Pereira de Aguiar Barros

Projeto Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico

Aprovado por:

Prof. Príamo Albuquerque Melo Jr., D.Sc.

Prof. Su Jian, D.Sc.

Prof. Verônica Maria de Araújo Calado, D.Sc.

Orientado por:

Prof. Eduardo Mach Queiroz, D.Sc.

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Ricardo Carvalho Rodrigues, M.Sc.

Rio de Janeiro, RJ-Brasil
Dezembro de 2006

BARROS, Fábio Pereira de Aguiar

Simulação de Evaporadores por Contato Direto usando Fluidodinâmica Computacional [Rio de Janeiro: UFRJ/EQ], 2006

xiii, 76 p.; il.(Projeto de Final de Curso)- Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2006. Orientadores: Eduardo Mach Queiroz e Paulo Laranjeira da Cunha Lage e Ricardo Carvalho Rodrigues

1. Evaporador por Contato Direto. 2. Coluna de Borbulhamento. 3. Fluidodinâmica Computacional. 4. Projeto de Final de Curso. (Graduação UFRJ/EQ). 5. Eduardo Mach Queiroz, Paulo Laranjeira da Cunha Lage e Ricardo Carvalho Rodrigues I.Título

Agradecimentos

À Deus por seu amor e seu sustento, a ele toda a minha gratidão

Aos meus pais Josias e Fátima e à minha avó Ciléa pelo apoio sempre presente

Aos meus orientadores Paulo Laranjeira da Cunha Lage e Ricardo Carvalho Rodrigues pela paciência e seriedade demonstradas ao longo de todo trabalho me dando a oportunidade de crescer profissionalmente de uma forma extraordinária tornando-se fundamentais para a minha carreira.

Ao amor da minha vida Luciana por compreender a minha ausência e por estar sempre a meu lado

Resumo do Projeto Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

SIMULAÇÃO DE EVAPORADORES POR CONTATO DIRETO USANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Fábio Pereira de Aguiar Barros

Dezembro, 2006

Orientadores: Prof. Eduardo Mach Queiroz, D.Sc.
Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.
Ricardo Carvalho Rodrigues, M.Sc.

O projeto e aumento de escala de evaporadores por contato direto ainda hoje é uma tarefa árdua sendo baseada principalmente em procedimentos e métodos empíricos ou semi-empíricos. Desta forma, abre-se uma enorme perspectiva para utilização da simulação fluidodinâmica no projeto deste tipo de equipamento. No presente trabalho fez-se uma primeira tentativa de simular a fluidodinâmica do evaporador por contato direto usando o código comercial CFX 10.0 da ANSYS. Os cálculos foram realizados para campos de escoamentos transientes, tridimensionais em colunas de borbulhamento com geometria cilíndrica. Os processos de transferência de calor e massa foram modelados utilizando resultados de um modelo Lagrangeano da literatura, desta forma foi possível incluir pela primeira vez a etapa de formação das bolhas em uma simulação CFD de colunas de borbulhamento. O mesmo modelo Lagrangeano foi responsável por fornecer os coeficientes de transferência de calor e massa para modelar o fluxo de calor e massa entre as fases ao longo da etapa de ascensão das bolhas. Os resultados da simulação CFD foram então comparados com dados experimentais mostrando boa concordância qualitativa para o processo de transferência de calor e massa na coluna.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1- INTRODUÇÃO	1
1.1- Aspectos Gerais	2
1.2- O Objetivo do Trabalho	3
CAPÍTULO 2- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1- Colunas de Borbulhamento	6
2.2- Caracterização da Hidrodinâmica da Coluna de Borbulhamento	7
2.2.1- O Processo de Borbulhamento	7
2.2.2- Parâmetros Hidrodinâmicos Importantes	7
2.2.3- Regimes de Borbulhamento	8
2.3- Modelagem Termofluidodinâmica	9
2.3.1- Coeficiente de Transferência de Calor na Fase Líquida	9
2.3.2- Coeficiente de Transferência de Calor e Massa na Fase Gasosa	9
2.3.3- Modelos Termofluidodinâmicos	10
2.4- Simulação Fluidodinâmica Aplicada a Colunas de Borbulhamento	11
CAPÍTULO 3- MODELAGEM MATEMÁTICA	14
3.1- Introdução	15
3.2- Modelo Euleriano	15
3.2.1- Equação para Conservação de Massa	16
3.2.2- Equação para Conservação de Quantidade de Movimento	17
3.2.3- Equação de Conservação de Energia	23
3.2.4- Condições Iniciais e de Contorno	24
3.2.5- Procedimento Numérico	24
3.3-Modelo Lagrangeano	25
3.3.1- Condições de Contorno	26
3.3.2- Procedimento Numérico para Resolução do Modelo de CAMPOS e LAGE (2000)	27
3.4- Transferência de Calor e Massa	27
3.4.1- Modelo Simplificado para a Transferência de Calor e Massa	27
3.4.2- Coeficiente de Transferência de Calor e Massa na Fase Gasosa	29
3.4.3- Procedimento Numérico para Resolução do Modelo Simplificado	31
3.5- Cálculo das Propriedades Físicas	31
3.6- Acoplamento entre o Modelo Euleriano e Lagrangeano	32

3.6.1- Introdução	32
3.6.2- Etapa de Formação das Bolhas	33
3.6.3- Etapa de Ascensão das Bolhas	35
3.6.3.1- Transferência de Massa	36
3.6.3.2- Transferência de Calor	37
3.6.3.3- Implementação da Transferência de Calor e Massa no CFX	38
CAPÍTULO 4- RESULTADOS E DISCUSSÃO	39
4.1- Introdução	40
4.2- Estudo da transferência de Calor e Massa Durante a Formação e Ascensão de uma Bolha Superaquecida em uma Coluna de Líquido	40
4.3- Simulação Fluidodinâmica: Comparação com Dados Experimentais	50
4.3.1- Introdução	50
4.3.2- Dados Experimentais	50
4.3.3- Dados de Propriedades Físicas das Substâncias	52
4.3.4- Implementação Numérica e Malhas de Discretização	52
4.3.5- Resultados e Discussão	54
CAPÍTULO 5- CONCLUSÕES E SUGESTÕES	60
CAPÍTULO 6- REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	63
APÊNDICE A- PROPRIEDADES FÍSICAS	68
APÊNDICE B- CORRELAÇÕES PARA OS PARÂMETROS DO ACOPLAMENTO EULERIANO-LAGRANGEANO	71
APÊNDICE C- LINEARIZAÇÃO DA EQUAÇÃO QUE CALCULA A TEMPERATURA INTERFACIAL	74

ÍNDICE DE FIGURAS

- Figura 2.1 – Fotografias dos regimes de escoamento em uma coluna de borbulhamento (a) regime homogêneo e (b) regime heterogêneo. 8
- Figura 4.1- Evolução temporal da temperatura média na bolha para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000). 42
- Figura 4.2- Evolução temporal da fração mássica de água média na bolha para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000). 43
- Figura 4.3- Perfil radial de velocidade para o caso 2 (a) e evolução temporal da velocidade radial (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000). 44
- Figura 4.4- Evolução temporal do coeficiente de transferência de calor para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000). 44
- Figura 4.5- Evolução temporal do coeficiente de transferência de massa para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000). 46
- Figura 4.6- Evolução temporal do raio da bolha para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000). 47
- Figura 4.7- Comparação entre o comportamento do grau de saturação para o modelo simplificado e o modelo de CAMPOS e LAGE (2000) para as etapas de formação (a) e ascensão (b). 48
- Figura 4.8- Comparação entre o comportamento da temperatura adimensional de água na bolha para o modelo simplificado e o modelo de CAMPOS e LAGE (2000) para as etapas de formação (a) e ascensão (b). 49
- Figura 4.9- Comparação entre o comportamento do raio da bolha para o modelo simplificado e o modelo de CAMPOS e LAGE (2000) para as etapas de formação (a) e ascensão (b). 50

Figura 4.10- Geometria utilizada para as simulações.	53
Figura 4.11- Detalhes da malha: discretização do plano xz ($y=0$) e xy ($z=0$).	54
Figura 4.12- Comportamento temporal da retenção gasosa.	55
Figura 4.13- Representação do campo da retenção gasosa no plano xz ($y=0$) entre os valores 0 e 20%.	56
Figura 4.14- Representação do campo de velocidade da fase líquida no plano yz ($x=0$) e isosuperfície para a retenção gasosa igual a 20%.	56
Figura 4.15- Representação do campo de velocidade superficial da fase líquida no plano xy ($z=14\text{cm}$).	57
Figura 4.16- Representação do perfil de fração mássica de água na fase gasosa sobre uma isosuperfície para a retenção gasosa igual a 20%.	57
Figura 4.17- Representação do perfil de temperatura da fase gasosa sobre uma isosuperfície para a retenção gasosa igual a 20%.	58
Figura 4.18- Representação do perfil de temperatura da fase líquida sobre uma isosuperfície para a fração de líquido na coluna igual a 90%.	59

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 3.1- Valores dos parâmetros do modelo k-ε.	22
Tabela 4.1- Condições Fixas para simulação da formação e ascensão de uma bolha em uma coluna de líquido.	41
Tabela 4.2- Valores das temperaturas da fase líquida na coluna e de injeção de gás.	41
Tabela 4.3- Valores para os coeficientes de transferência de calor.	47
Tabela 4.4- Valores para os coeficientes de transferência de massa.	46
Tabela 4.5- Erros entre os valores preditos pelo modelo simplificado e o modelo completo para o grau de saturação e temperatura adimensional.	48
Tabela 4.6- Condições experimentais para a simulação CFD.	51
Tabela 4.7- Características da geometria implementada na simulação fluidodinâmica.	52

NOMECLATURA

Letras Latinas

Símbolo	Descrição
A_b	área superficial da bolha (m^2)
$\langle A_{p,\beta} \rangle$	área média de ataque das partículas (m^2)
$C_{D,\beta}$	coeficiente de arrasto para a bolha isolada
C_p	Capacidade calorífica à pressão constante ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
$DA_{\alpha,\beta}$	densidade de área superficial (m^{-1})
D	Diâmetro
D_i	coeficiente de difusão da espécie i na mistura gasosa ($m^2\ s^{-1}$)
D_β^S	diâmetro médio de Sauter (m)
g	aceleração da gravidade ($m\ s^{-1}$)
hb	coeficiente de transferência de calor na fase dispersa ($W\ m^{-2}\ K^{-1}$)
\bar{h}_b	coeficiente de transferência de calor médio na fase dispersa ($W\ m^{-2}\ K^{-1}$)
h_a	entalpia da fase contínua
h_β	Entalpia da fase dispersa
K	energia cinética turbulenta ($m^2\ s^{-2}$)
k_b	coeficiente de transferência de massa na fase dispersa ($m\ s^{-1}$)
\bar{k}_b	coeficiente de transferência de massa médio na fase dispersa ($m\ s^{-1}$)
\dot{m}	taxa mássica
\overline{MM}_b	massa molecular média da mistura gasosa ($kg\ kmol^{-1}$)
P	pressão (Pa)
Q	taxa de calor ($J\ s^{-1}$)
\dot{q}	fluxo de calor ($J\ m^{-2}\ s^{-1}$)
Q_I	vazão volumétrica de ar injetado ($m^3\ s^{-1}$)
Q_b	taxa de calor do interior da bolha para a sua superfície ($J\ s^{-1}$)
R	constante dos gases ideais ($J\ kmol^{-1}\ K^{-1}$)
r	Raio da bolha (m)
r_α	fração Volumétrica da fase contínua
r_β	fração Volumétrica da fase dispersa

S_M	termo fonte de massa ($\text{kg s}^{-1} \text{m}^{-3}$)
S_E	Termo fonte de energia ($\text{J s}^{-1} \text{m}^{-3}$)
t	tempo
T	temperatura (K)
U	velocidade (m s^{-1})
V_b	volume da bolha
v	velocidade superficial (m s^{-1})
V_f	volume da zona de formação (m^{-3})
Y	fração mássica

Letras gregas

Símbolo	Descrição
ε	dissipação da energia turbulenta ($\text{m}^2 \text{s}^{-3}$)
λ	Condutividade térmica ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)
ν	viscosidade cinemática ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
ρ	densidade (kg m^{-3})
μ	viscosidade dinâmica (Pa s)
σ	tensão superficial (N m^{-1})

Subscritos

Símbolo	Descrição
0	relativo ao valor inicial de uma dada grandeza
+	valor bruto não negativo
–	relativo ao valor médio (quando acima do símbolo)
∞	partícula isolada
b	bolha
d	relativo ao distribuidor de ar
ev ou vap	relativo à massa vaporizada
f ou form	relativo à formação
G	fase gasosa
i	espécie química
I ou inj	injeção
L ou liq	relativo à fase líquida

lam	laminar
p	partícula
r	referência
turb	turbulento
α	relativo à fase contínua
β	relativo à fase dispersa
β,α	da fase dispersa para a fase contínua
β,s	da fase dispersa para a superfície
s,α	da superfície para a fase contínua

Sobrescritos

Símbolo	Descrição
+	valor bruto não negativo
DT	dispersão turbulenta
FA	força de arrasto
Sat	saturado
s	superfície ou interface

CAPÍTULO

1

Introdução

1.1- Aspectos Gerais

Do ponto de vista das operações unitárias, a evaporação pode ser definida como um processo de separação por aquecimento que envolve a remoção, mediante vaporização, do solvente presente em uma solução, obtendo-se um produto final mais concentrado.

Os equipamentos utilizados para tal objetivo são denominados evaporadores, que podem ser classificados em relação à forma pela qual a energia é transferida à solução evaporante. Geralmente a transmissão é efetuada indiretamente utilizando um meio que separa o fluido de aquecimento e a solução a ser concentrada. De forma alternativa, a transferência de calor pode ser realizada a partir da mistura direta entre solução e fluido de aquecimento. Os equipamentos que operam desta última forma são denominados evaporadores por contato direto (ECD).

Nos ECD's, o contato entre os fluidos é realizado por meio do borbulhamento ou gotejamento de um dos fluidos, denominado fase dispersa, no interior do outro, o qual denomina-se fase contínua. Os ECD's apresentam uma série de características e vantagens que tornam atraente a sua utilização em processos industriais, dentre as quais pode-se destacar: facilidade de construção, alcance de altas áreas interfaciais, a ausência de problemas de selagem devido à ausência de partes móveis, excelentes propriedades de transferência de calor e massa, fácil controle de temperatura e versatilidade de operação. Tais características têm promovido a disseminação de sua aplicação em vários processos industriais, com fortes perspectivas de utilização na indústria alimentícia.

Embora um ECD seja simples em sua construção e operação, o projeto e o *scale-up* podem ser tarefas árduas devido à complexidade dos fenômenos que ocorrem no processo de borbulhamento, os quais são fortemente dependentes das condições operacionais, propriedades físicas e dimensões geométricas da coluna. Além disso, cabe ressaltar que a hidrodinâmica é complexa e possui forte influência nas características de transporte do equipamento, KANTARCI *et al.* (2005) relataram que o *scale-up* de uma coluna de borbulhamento depende da quantificação de três fenômenos principais: (1) características da transferência de calor e massa, (2) características da mistura e (3) cinética química em sistemas reacionais (quando for pertinente). Desta forma, o projeto de colunas de borbulhamento se aproxima mais da arte do que da ciência. Por exemplo, um grande número de correlações está disponível para o coeficiente de dispersão axial, a queda de pressão, os coeficientes de transferência de calor e massa, etc. Porém, todas estas correlações possuem caráter empírico ou semi-empírico, cuja desvantagem do uso é a limitada faixa de

aplicabilidade devido à vasta quantidade de aplicações existentes para sistemas gás/líquido e a ampla faixa de condições operacionais nas quais os equipamentos operam.

Nos últimos trinta anos, muitos esforços têm sido feitos para dominar a tecnologia de projeto e *scale-up* de colunas de borbulhamento, surgindo um amplo horizonte para a utilização da simulação CFD no projeto de ECD's. Isto porque, com a correta descrição da fluidodinâmica e dos processos de transferência de calor e massa no processo, a tarefa de *scale-up* poderá ser realizada com o auxílio de simulações CFD.

O que impede a direta aplicação dos códigos CFD existentes ao processo de evaporação por contato direto é a sua multitudine de escalas de tamanho. Particularmente, o efeito dos grandes gradientes que afetam o transporte de massa e calor no interior das bolhas formadas no equipamento não está incorporado aos códigos existentes nas simulações de escoamentos bifásicos do tipo Euleriana-Euleriana, os quais consideram que as bolhas são instantaneamente formadas no mesmo. Embora, métodos de acompanhamento de fronteira livre possam ser modificados para incorporar a transferência de calor e massa pela interface das fases, tal tem que ser feito juntamente com a resolução das escalas do escoamento turbulento da fase contínua, requerendo um enorme esforço computacional. Há, portanto, a necessidade de se incorporar modelos para a transferência de calor e massa durante a formação de bolhas em simulações bifásicas do tipo Euleriana-Euleriana.

1.2- O Objetivo do Trabalho

O objetivo do presente estudo é simular a fluidodinâmica do processo de evaporação por contato direto em colunas de borbulhamento em regime homogêneo, incorporando os efeitos de transferência de calor e massa durante a formação das bolhas. As simulações serão realizadas através de um código comercial de fluidodinâmica, o CFX 10.0 da ANSYS. Um modelo de transferência de calor e massa durante a formação e ascensão de bolhas superaquecidas, previamente desenvolvido por CAMPOS e LAGE (2000), será usado para a obtenção dos coeficientes de transferência de massa e calor durante a ascensão das bolhas superaquecidas, que serão usados na simulação CFD. O comportamento da bolha durante a sua formação, predito por este modelo, foi acoplado à simulação fluidodinâmica Euleriana-Euleriana. Assim, o raio, a concentração de água e a temperatura da bolha ao final de sua formação tornaram-se parâmetros usados para estabelecer as condições de entrada do gás. Além disso, as taxas de calor e massa trocadas entre as fases ao longo desta etapa foram

utilizadas como termos fontes na simulação fluidodinâmica. Desta forma, incluiu-se pela primeira vez a etapa de formação das bolhas na simulação CFD Euleriana-Euleriana de um ECD. As simulações CFD foram realizadas e comparadas com dados experimentais obtidos no Laboratório de Termofluidodinâmica (LTFD) do PEQ/COPPE/UFRJ.

CAPÍTULO
2
Revisão Bibliográfica

2.1- Colunas de Borbulhamento

Na operação do ECD, durante a passagem das bolhas existe um fluxo natural de energia do interior da bolha para sua superfície, onde parte da energia é utilizada na vaporização do líquido, gerando um fluxo mássico de vapor d'água para o interior da mesma. O resto da energia disponível tem como destino aquecer o líquido, o que é de suma relevância, visto que, a temperatura do líquido influencia fortemente o processo de evaporação.

Uma das características marcantes deste processo é a existência de duas escalas de tempo, uma relacionada ao tempo de resposta do equipamento, ou seja, o tempo necessário para que este opere em regime estacionário e a outra está relacionada ao tempo de residência das bolhas no equipamento. Uma observação importante é que mesmo que o ECD esteja operando em regime estacionário, a fase dispersa terá comportamento transiente, tendendo a atingir o equilíbrio termo-mássico com a fase contínua durante o seu tempo de residência na coluna bifásica.

A ausência de superfície separando os fluidos de trabalho é uma característica importante no ECD, o contato direto entre os fluidos permite alcançar eficiências de transmissão de calor da ordem de 95% (WATSON, 1966). Por outro lado, não há qualquer problema de redução gradual da eficiência de troca térmica em virtude de incrustação ou corrosão, o que permite um desempenho uniforme do equipamento ao longo de sua vida útil. É preciso também destacar a flexibilidade operacional do equipamento no que tange aos valores das vazões de trabalho (BURDIK *et al.*, 1949).

Industrialmente o ECD tem sido utilizado para concentrar soluções de ácido sulfúrico (SWINDIN, 1949), soda cáustica, sulfato de alumínio, cloreto férrico (CRONAN, 1956), ácido fosfórico (WEISMAN, 1961), sulfato de sódio, cloreto de cálcio, cloreto de potássio, cloreto de magnésio e ortofosfatos (WILLIAMS, 1965). Dentre as aplicações potenciais estão àquelas relacionadas ao tratamento de soluções termolábeis (LUEDICKE *et al.*, 1979), uma vez que a evaporação em um ECD ocorre a temperaturas bem mais baixas do que a de ebulição na pressão do sistema. Isto abre um amplo campo de aplicação dos ECD's na indústria alimentícia. Alguns exemplos podem ser citados, tais como a concentração do leite (ZAIDA *et al.*, 1986) e a concentração de sucos de frutas (RIBEIRO JR. *et al.*, 2004a).

Vale ressaltar que por operar com contato direto entre os fluidos, a possibilidade de contaminação é uma desvantagem a ser considerada, limitando a aplicação do ECD a casos em que a contaminação pode ser tolerada ou eliminada. Outra desvantagem a ser destacada é

que, para viabilizar a mistura, as correntes devem operar a pressões próximas o que pode acarretar em custos adicionais ao processo (JACOBS, 1988).

2.2- Caracterização da Hidrodinâmica da Coluna de Borbulhamento

2.2.1- O Processo de Borbulhamento

O processo de borbulhamento consiste na geração de bolhas em orifícios submersos, podendo ser divididos em duas etapas: formação e ascensão. Na etapa de formação, a bolha presa ao orifício do distribuidor, cresce continuamente até que seja alcançado um certo volume crítico, quando ocorre, então, o desprendimento da bolha. Após o desprendimento, a bolha inicia o seu movimento através da fase líquida em direção ao topo da coluna, o que corresponde à etapa de ascensão. CLIFT et al. (1978) definem outras duas etapas, a de desprendimento onde há brusca mudança nas condições fluidodinâmicas internas devido ao término da injeção e a de afloramento na qual a bolha desaparece após atingir o topo da coluna de líquido. Embora a etapa de ascensão represente boa parte do tempo de residência da bolha no ECD, estudos experimentais (GRASSMANN e WYSS, 1962; BHAGADE et al., 1973; SCHMIDT 1977a e 1977b) evidenciam a importância da etapa de formação no processo de evaporação por contato direto.

2.2.2- Parâmetros Hidrodinâmicos Importantes

A hidrodinâmica da coluna de borbulhamento é complexa e extremamente dependente das condições operacionais, das propriedades físicas do sistema e da escala (tamanho e geometria do equipamento). Nesse tipo de equipamento, a fase gasosa é dispersa em uma fase contínua no qual o conjunto das bolhas ascendente influencia o campo de escoamento gerando zonas de circulação (MEWES e WIEMANN, 2003).

Sendo uma coluna de borbulhamento não-isotérmica, um evaporador por contato direto apresenta dois parâmetros hidrodinâmicos de suma importância, os quais acham-se diretamente relacionados: o regime de escoamento e a retenção gasosa, ϵ .

O regime de borbulhamento é função primordial da velocidade superficial do gás, U_G , e afeta diretamente os processos de transmissão de calor e massa (HEIJEN e VAN'T RIET,

1984; LIN e WANG, 2001). A retenção gasosa, definida como a fração volumétrica de gás presente na mistura, é usado no cálculo do tempo de residência da fase dispersa, e, juntamente com o diâmetro médio das bolhas, permite a determinação da área interfacial, constituindo, portanto, um parâmetro-chave do equipamento (SHAH *et al.*,1982; DECKWER e SCHUMPE, 1993).

2.2.3- Regimes de Borbulhamento

Durante a operação do ECD existem dois regimes principais de borbulhamento. O chamado regime homogêneo de borbulhamento caracteriza-se pela presença de bolhas pequenas, com pouca variação de tamanho, as quais ascendem ao longo de uma trajetória praticamente vertical com pequenas oscilações transversais. Há pouca interação entre as bolhas, sendo muito reduzida a extensão dos fenômenos de quebra e coalescência (LEE e TSUI, 1999). Por conseguinte, o tamanho das bolhas e a retenção gasosa dependem dos parâmetros de projeto do distribuidor e das propriedades físicas do sistema gás-líquido. A concentração de bolhas e, portanto, a retenção gasosa é uniforme na direção radial.

Com o aumento da velocidade superficial, tanto a frequência de formação quanto o diâmetro das bolhas aumentam, diminuindo a separação entre as mesmas, o que favorece a interação entre estas. Como resultado, os fenômenos de quebra e coalescência tornam-se significativos, resultando em uma grande variedade de tamanhos de bolha (BI e GRACE, 1996). O equipamento passa então a operar no regime heterogêneo. Nesse caso a distribuição do tamanho de bolhas no seio do equipamento difere totalmente daquela gerada pelo distribuidor, o qual, portanto tem a sua importância reduzida. A trajetória de ascensão das bolhas é completamente irregular.

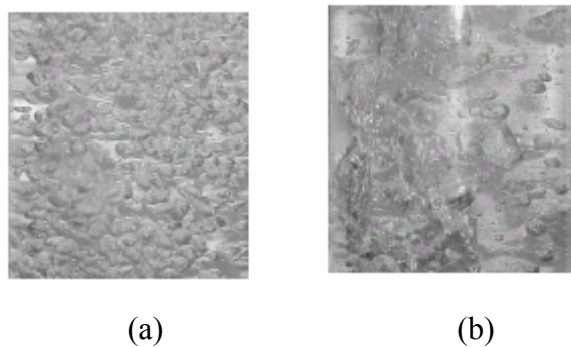


Figura 2.1- Fotografias dos regimes de escoamento em uma coluna de borbulhamento (a) regime homogêneo e (b) regime heterogêneo

2.3- Modelagem Termofluidodinâmica

2.3.1- Coeficiente de Transferência de Calor na Fase Líquida

São diversas as metodologias disponíveis para a obtenção do coeficiente de transferência de calor e massa na fase contínua. Neste trabalho, como a fase líquida é constituída somente de água, não há sentido em contabilizar a resistência à transferência de massa nesta fase. Os procedimentos envolvem soluções da teoria da camada limite, soluções numéricas e correlações empíricas. Existe na literatura uma gama de correlações empíricas para o cálculo destes coeficientes, RIBEIRO JR. (2005) realizou uma extensa revisão sobre as correlações disponíveis para o cálculo dos coeficientes de transporte de calor e massa. A correlação apresentada por CALDERBANK e MOO-YOUNG (1961) é uma escolha clássica para sistemas dispersos e SHAH *et al.* (1982) recomendam o uso destas correlações no projeto de colunas de borbulhamento. É importante ressaltar que as correlações de CALDEBANK e MOO-YOUNG (1961) para o cálculo dos coeficientes de transferência de calor e massa leva em conta somente as propriedades físicas da fase contínua. GRESTRICH *et al.* (1978) mostraram que em alguns casos estas correlações podem apresentar erros na ordem de 300 % e propuseram correlações a partir de dados experimentais encontrados na literatura que levam em conta também parâmetros operacionais de colunas de borbulhamento (altura de líquido, velocidade de injeção de gás e diâmetro da coluna e etc.).

2.3.2- Coeficiente de Transferência de Calor e Massa na Fase Gasosa

No que tange ao comportamento da transferência de calor e massa evidências experimentais e estudos teóricos (IGUCHI *et al.* 1992; KOMAROV *et al.*, 1998; GRASSMANN, 1962; HACKENBERG, 1965; TOKUNAGA, 1995, SCHMIDT, 1977a, 1977b) indicam que tanto para a transferência de calor quanto para a transferência de massa (para o processo de evaporação por contato direto) a maior resistência encontra-se na fase dispersa. Portanto, negligenciar tal resistência pode levar a erros consideráveis no cálculo do fluxo de calor e massa entre as fases.

Ao contrário do que ocorre com a fase líquida, não existe na literatura um conjunto grande de correlações para o cálculo dos coeficientes de transferência de calor e massa na fase dispersa, o que é devido a dificuldades experimentais de medições no interior das bolhas.

FILLA *et al.* (1975) destacaram algumas dificuldades técnicas para obtenção do coeficiente de transferência de massa na fase gasosa: 1) as taxas de transferência de massa quando a fase gasosa controla o processo são muito maiores do que quando a fase líquida as controla e 2) o tempo de contato entre as fases tem um limite superior imposto pela precisão necessária para se determinar a concentração residual da substância a ser difundida. FILLA *et al.* (1975) determinaram o coeficiente de transferência de massa para a fase gasosa em uma única bolha grande (regime de escoamento *slug*), propondo, então, dois modelos, um sem mistura interna e outro com mistura interna. Eles verificaram que o modelo que considerava a transferência de massa em uma fina camada nas intermediações da interface gás-líquido (com mistura interna) apresentou melhores resultados quando confrontado com os dados experimentais. Entretanto, as correlações utilizadas nestes modelos para o cálculo do coeficiente de transferência de massa na fase dispersa estavam submetidas a restritas faixas de aplicação. RODRIGUES (2005) relatou que o uso de correlações para o cálculo de coeficientes de transferência de massa na fase gasosa não é recomendado devido ao número reduzido de equações existentes e as estreitas faixas de aplicação das mesmas.

Em relação ao processo de transferência de calor na coluna de borbulhamento, poucos são os trabalhos disponíveis na literatura, sendo que a maioria preocupa-se em determinar o coeficiente de transferência de calor para a troca térmica entre a fase líquida e aparatos que visam o controle de temperatura no equipamento (coluna), principalmente em sistemas reacionais (muito importante em sistemas biotecnológicos). A determinação do coeficiente de transferência de calor na fase gasosa, através de modelos termofluidodinâmicos, é encontrada em alguns trabalhos da literatura. Entretanto, a maioria dos modelos possui aplicações restritas à etapa de ascensão, além de existirem outras limitações, tais como: desprezar a contribuição convectiva no interior das bolhas e considerar as propriedades físicas constantes ao longo do processo. Desta forma, a utilização dos coeficientes calculados por meio destes modelos fica prejudicada, tornando-se não aconselhável.

2.3.3- Modelos Termofluidodinâmicos

RIBEIRO JR. (2005) realizou uma extensa revisão sobre modelos matemáticos para a transferência simultânea de calor e massa em bolhas considerando as etapas de formação e ascensão. Como resultado de sua pesquisa concluiu que dentre os inúmeros modelos existentes na literatura o desenvolvido por CAMPOS e LAGE (2000b) para transferência

simultânea de calor e massa em bolhas é o mais recomendado, uma vez que o mesmo abrange ambas as etapas do processo de borbulhamento e inclui tanto a variação no tamanho das bolhas quanto os termos convectivos de transferência de calor e massa, sem ser excessivamente complexo.

2.4- Simulação Fluidodinâmica Aplicada a Colunas de Borbulhamento

Existem duas abordagens muito utilizadas para a simulação de escoamentos multifásicos utilizando fluidodinâmica computacional. Enquanto a fase contínua é sempre modelada como tal, a fase dispersa pode ser modelada de forma Lagrangeana (com acompanhamento das partículas individuais ou grupo de partículas) ou como uma ou mais fases contínuas adicionadas (abordagem Euleriana).

A abordagem Lagrangeana para a simulação de um escoamento multifásico com acoplamento bidirecional necessita da solução simultânea das equações de conservação da fase contínua na forma Euleriana e das equações correspondentes na forma Lagrangeana para milhares de partículas. Assim, a abordagem Lagrangeana não é muito utilizada devido ao enorme esforço computacional envolvido na simulação de escoamentos multifásicos.

A abordagem Euleriana-Euleriana descreve todas as fases como contínuas (MEWES e WIEMANN, 2003), sendo também de modelo multifluido (modelo de dois fluidos no caso bifásico). Neste caso, o escoamento é predito resolvendo-se equações de conservação médias para cada fase, sendo que as interações entre as fases são modeladas por meio de termos de transporte das grandezas conservadas entre as fases.

No que tange ao comportamento fluidodinâmico, resultados experimentais (KUMAR, DEVANATHAN, MOSLEMIAN *et al.*, 1994, DEVANATHAN, DUDUKOVIC, LAPIN *et al.* 1995) mostram que o escoamento dentro de uma coluna de borbulhamento é quase sempre dinâmico com comportamento caótico, ou seja, nunca alcança um estado estacionário. Assim, a princípio, o modelo para o escoamento dentro da coluna deve ser tridimensional transiente. KRISHNA e VAN BATEN (2001) verificaram que a simulação transiente 3D consegue prever adequadamente os aspectos do escoamento com relativo sucesso.

SOKOLICHIN e EIGENBERGER (1999) e BORCHERS, BUSH E SOKOLICHIN *et al.* (1999) desenvolveram simulações dinâmicas tridimensionais com um modelo Euleriano-Euleriano que resolvia as equações do movimento para mistura bifásica com ou sem

turbulência, incluída através do modelo $k-\varepsilon$ padrão, juntamente com a equação da continuidade para a fase gasosa com um termo de dispersão turbulenta desta fase. Foi assumida uma velocidade constante entre as fases. A comparação com dados experimentais mostrou que o modelo 3-D turbulento forneceu soluções dinâmicas independentes da malha com o modelo $k-\varepsilon$ prevendo bem os resultados experimentais. Portanto, eles recomendaram o uso do modelo $k-\varepsilon$ para a turbulência e simulações tridimensionais. A necessidade do uso de simulações tridimensionais transientes também foi constatada por outros autores (MUDDE E SIMONIN, 1999 e PFLEGER, GOMES, GILBERT *et al.*, 1999).

Diversos autores (MUDDE e SIMONIN, 1999 e PFLEGER, GOMES, GILBERT *et al.*, 1999, DEEN, SOLBERG e HJERTAGER, 2000, 2001) investigaram quais e como devem ser modeladas as forças de interação entre as fases (arrasto, sustentação, massa virtual, dispersão turbulenta).

A utilização ou não de um termo de dispersão das bolhas na equação da quantidade de movimento da fase gasosa ainda é ponto discordante entre diversos autores sendo que alguns o colocam e outros não. HUA e WANG (2000) levantaram a necessidade de adicionar um termo de dispersão também na equação de conservação de massa da fase gasosa.

A turbulência provocada pelas bolhas ainda é um ponto em estudo e discordante entre autores. Ainda não se conhece a sua real importância e há discordância de como modelá-la, se através de um modelo de comprimento de mistura ou através de uma modificação no modelo $k-\varepsilon$ para o escoamento bifásico.

PFLEGER, GOMES, GILBERT *et al.* (1999) investigaram o uso de um termo de dispersão na equação de conservação de massa da fase gasosa e concluíram que ele não era necessário. Tal conclusão também foi verificada por DEEN, SOLBERG e HJERTAGER (2001) o qual verificaram que a força de sustentação é essencial para modelar a dispersão das bolhas, não sendo necessária nenhuma força de dispersão ou termos de dispersão na equação de conservação de massa.

No que tange a modelagem da turbulência induzida pelo cisalhamento o modelo $k-\varepsilon$ dá bons resultados (SOKOLICHIN e EINGEBERGER, 1999), mas por vezes ele impede a resolução de algumas escalas do escoamento (DEEN, SOLBERG e HJERTAGER, 2001).

Não foi encontrado na literatura nenhum trabalho que incluísse na modelagem Euleriana-Euleriana a etapa de formação das bolhas o qual, conforme explicado anteriormente, é de suma relevância para a transferência de calor e massa em ECD's, não podendo ser em hipótese alguma ignorada.

RODRIGUES (2005) realizou uma extensa revisão a respeito da modelagem Euleriana e turbulência em colunas de borbulhamento e concluiu que a abordagem bifásica Euleriana pode ser aplicada com relativa confiança para descrever a fluidodinâmica de colunas de borbulhamento operando em regime homogêneo. Entretanto, ainda não existem modelos confiáveis para o regime de borbulhamento heterogêneo (dificuldade de inclusão dos termos de quebra e coalescência).

CAPÍTULO
3
Modelagem Matemática

3.1- Introdução

Conforme detalhado no Capítulo 2, a modelagem fluidodinâmica do processo de evaporação por contato direto deve envolver, de alguma forma, os fenômenos de transferência de calor e massa durante as etapas de formação e ascensão das bolhas. A modelagem do escoamento em colunas de borbulhamento vem sendo realizada por muitos autores com relativo sucesso usando a abordagem Euleriana-Euleriana. Em geral, os estudos restringem-se a determinação da hidrodinâmica no equipamento considerando as fases como sendo componentes puros e insolúveis entre si. A incorporação da transferência de calor e massa entre as fases vem sendo objeto de estudos recentes (MEWES e WIMANN, 2003), porém limitados à etapa de ascensão das bolhas

O modelo bifásico Euleriano empregado neste trabalho, implementado no CFX 10.0 da ANSYS, foi acoplado a um modelo Lagrangeano para formação e ascensão de bolhas. O modelo Lagrangeano permitiu a inclusão dos efeitos de transferência de calor e massa nas etapas de formação e ascensão. Nesta última etapa, isto foi feito através da utilização de coeficientes de transporte de calor e massa.

No presente capítulo, a modelagem do processo é dividida em três partes. A primeira destas é dedicada à descrição do modelo fluidodinâmico Euleriano para a transferência de calor e massa na coluna de borbulhamento. Na segunda parte, é descrito o modelo Lagrangeano utilizado não só para a obtenção das condições de entrada da fase dispersa para a simulação CFD da coluna de borbulhamento, mas também para o cálculo dos coeficientes de transferência de calor e massa ao longo da etapa de ascensão, além de ser utilizado para estimar o diâmetro da bolha, essencial para determinar a área para a troca de calor e massa entre as fases. Na terceira e última parte, o acoplamento entre os modelos Euleriano e Lagrangeano é descrito.

3.2) Modelo Euleriano

O modelo de dois fluidos usa equações médias de conservação de massa, energia e de quantidade de movimento para a descrição do escoamento bifásico. A descrição destas equações para a transferência de calor e massa para sistemas multifásicos não isotérmicos em escoamentos turbulentos é apresentada a seguir.

3.2.1) Equação para Conservação de Massa

Seja r_α a fração volumétrica da fase α em uma mistura com N fases. Pela sua definição, temos que:

$$\sum_{\alpha=1}^N r_\alpha = 1 \quad (3.1)$$

A conservação de massa total em cada fase pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha) = \dot{m}_{\alpha,\beta} DA_{\alpha,\beta} + S_{M,\alpha} \quad (3.2)$$

onde $DA_{\alpha,\beta}$ é densidade de área interfacial, ou seja, é a área interfacial dividida pelo volume da mistura bifásica, ρ_α é a densidade da fase contínua, U_α é a velocidade da fase contínua, $S_{M,\alpha}$ é um termo fonte gerador de massa por unidade de volume e $\dot{m}_{\alpha,\beta}$ é o fluxo mássico líquido trocado entre as fases e pode ser decomposto nas seguintes parcelas:

$$\dot{m}_{\alpha,\beta} = m_{\alpha,\beta}^+ - m_{\beta,\alpha}^+ \quad (3.3)$$

onde $m_{\alpha,\beta}^+$ é o fluxo mássico bruto que é transferido da fase β para a fase α (o sobrescrito + indica valor necessariamente não negativo) e $m_{\beta,\alpha}^+$ é o fluxo mássico bruto transferido da fase α para a fase β . A descrição do fluxo de massa entre as fases será vista na modelagem interfacial para a transferência de massa (seção 3.6.3.1).

A equação de conservação de massa para um componente i na fase α é descrita por:

$$\frac{\partial(r_\beta \rho_\beta Y_{\alpha,i})}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\beta \rho_\beta U_\beta Y_{\beta,i}) = \sum_{\alpha=1}^N m_{\beta,\alpha,i} DA_{\alpha,\beta} + S_{M,\beta,i} \quad (3.4)$$

onde $Y_{\alpha,i}$ é a fração mássica do componente i na fase contínua e $m_{\alpha,\beta,i}$ é o fluxo mássico bruto do componente i trocado entre as fases, sendo igual a:

$$m_{\alpha,\beta,i} = m_{\alpha,\beta,i}^+ - m_{\beta,\alpha,i}^+ \quad (3.5)$$

3.2.2) Equação de Conservação Quantidade de Movimento

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha \otimes U_\alpha) = -r_\alpha \nabla p_\alpha + \nabla \cdot \left\{ r_\alpha \mu_\alpha \left[\nabla U_\alpha + (\nabla U_\alpha)^T \right] \right\} \\ + r_\alpha \rho_\alpha g + M_\alpha + DA_{\alpha,\beta} \sum_{\beta \neq \alpha}^N (m_{\alpha,\beta}^+ U_\beta - m_{\beta,\alpha}^+ U_\alpha) \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde g é a aceleração da gravidade, μ é a viscosidade dinâmica e M_α representa a força total que age na fase α devido à interação com outras fases, dado por:

$$M_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha}^N M_{\alpha,\beta} \quad (3.7)$$

onde $M_{\alpha,\beta}$ representa a transferência de quantidade de movimento da fase β para a fase α devido às forças interfaciais. Estas forças são iguais e opostas, isto é, $M_{\alpha,\beta} = -M_{\beta,\alpha}$. O termo $m_{\alpha,\beta}^+ DA_{\alpha,\beta} U_\beta$ representa a transferência de quantidade de movimento que ocorre devido à transferência de massa da fase β para a fase α e $m_{\beta,\alpha}^+ DA_{\alpha,\beta} U_\alpha$ representa a transferência de quantidade de movimento que ocorre devido à transferência de massa da fase α para a fase β . Para fechar o equacionamento assume-se que as fases estão submetidas ao mesmo campo de pressão, isto é, $p_\alpha = p, \forall \alpha$.

No presente trabalho, a mistura multifásica é composta somente por duas fases ($N=2$) onde a fase β (gasosa) é dispersa em uma fase contínua α (líquida), o que torna $M_\alpha = M_{\alpha,\beta}$. As forças interfaciais têm origem em diversos fenômenos físicos. Entretanto, as únicas forças de interação entre as fases consideradas neste trabalho foram as forças de arrasto hidrodinâmico e de dispersão turbulenta, de forma que:

$$M_\alpha = M_{\alpha,\beta}^{FA} + M_{\alpha,\beta}^{DT} \quad (3.8)$$

A força de arrasto hidrodinâmico entre as fases é calculada pela seguinte equação:

$$M_{\alpha,\beta}^{FA} = \frac{1}{2} \rho_{\alpha} C_{D,\beta} |U_{\beta} - U_{\alpha}| (U_{\beta} - U_{\alpha}) \zeta_{\beta} \langle A_{p,\beta} \rangle \quad (3.9)$$

onde ζ_{β} é densidade numérica das partículas da fase β , $\langle A_{p,\beta} \rangle$ é o valor médio da área de seção reta de ataque das partículas da fase β , cujo coeficiente de arrasto é definido por:

$$C_{D,\beta} = \frac{M_{\alpha,\beta}^{FA}}{\frac{1}{2} \rho_{\alpha} (U_{p,\beta} - U_{\alpha})^2 A_{p,\beta}} \quad (3.10)$$

Como r_{β} é o volume de partículas por unidade de volume da mistura, pode-se escrever que:

$$\zeta_{\beta} = \frac{r_{\beta}}{\langle V_{p,\beta} \rangle} = \frac{r_{\beta}}{\int_0^{\infty} V_{p,\beta} \Omega_{\beta}(D) dD} \quad (3.11)$$

onde $\Omega_{\beta}(D)$ é a distribuição normalizada de tamanho das partículas usando o diâmetro das mesmas, D , como variável de distribuição. Por definição, a área média é calculada por:

$$\langle A_{p,\beta} \rangle = \int_0^{\infty} A_{p,\beta} \Omega_{\beta}(D) dD \quad (3.12)$$

Assumindo geometria esférica, o que é razoável para bolhas de pequeno diâmetro, temos:

$$A_{p,\beta} = \frac{\pi D^2}{4} \text{ e } V_{p,\beta} = \frac{\pi D^3}{6} \quad (3.13)$$

Logo,

$$\zeta_{\beta} \langle A_{p,\beta} \rangle = \frac{r_{\beta} \langle A_{p,\beta} \rangle}{\langle V_{p,\beta} \rangle} = \frac{3r_{\beta} \int_0^{\infty} D^2 \Omega_{\beta}(D) dD}{2 \int_0^{\infty} D^3 \Omega_{\beta}(D) dD} = \frac{3r_{\beta}}{2D_{\beta}^S} \quad (3.14)$$

e, portanto,

$$M_{\alpha,\beta}^{FA} = \frac{3}{4} r_{\beta} \rho_{\alpha} \frac{C_{D,\beta}}{D_{\beta}^S} |U_{\beta} - U_{\alpha}| (U_{\beta} - U_{\alpha}) \quad (3.15)$$

O coeficiente de arrasto para bolha isolada vem diretamente do balanço de forças que define a velocidade terminal de ascensão de uma bolha, sendo estimado de acordo com o modelo proposto por GRACE, WAIREGI e NGUYEN (1976) para partículas fluidas deformadas. Um dos parâmetros de entrada deste modelo fluidodinâmico é o diâmetro médio de Sauter das bolhas, D_{β}^S , cujo valor utilizado no presente trabalho foi o diâmetro da bolha ao final da sua formação como predito pelo modelo Lagrangeano desenvolvido por CAMPOS e LAGE (2000).

O modelo para o cálculo do coeficiente de arrasto proposto por GRACE, WAIREGI e NGUYEN (1976) para partículas fluidas deformada é descrito por:

$$C_{D,\beta}(elipse) = \frac{4}{3} \frac{g D_{\beta}}{U_T^2} \frac{\rho_{\alpha} - \rho_{\beta}}{\rho_{\alpha}} \quad (3.16)$$

onde a velocidade terminal, U_T é dada por:

$$U_T = \frac{\mu_{\alpha}}{\rho_{\alpha} D_{\beta}} M^{-0.149} (J - 0.857) \quad (3.17)$$

onde M é o número de Morton, sendo igual a:

$$M = \frac{\mu_{\alpha}^4 g (\rho_{\alpha} - \rho_{\beta})}{\rho_{\alpha}^2 \sigma^3} \quad (3.18)$$

$$J = \begin{cases} 0.94 H^{0.751} & 2 < H \leq 59.3 \\ 3.42 H^{0.441} & H > 59.3 \end{cases} \quad (3.19)$$

$$H = \frac{4}{3} Eo M^{-0.149} \left(\frac{\mu_\alpha}{\mu_{ref}} \right)^{-0.14} \quad (3.20)$$

onde Eo é o número de Eotvos e $\mu_{ref} = 0,0009 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ é a viscosidade da água em condições de referência.

A implementação do cálculo do coeficiente de arrasto no CFX 10.0 da ANSYS leva em conta automaticamente os regimes de bolha esférica, bolha deformada (elipsoidal) e bolha em forma de cogumelo (*spherical cap regime*) da seguinte forma:

$$C_{D,\beta}(dist) = \min(C_{D,\beta}(elipse), C_{D,\beta}(cap)) \quad (3.21)$$

$$C_{D,\beta} = \max(C_{D,\beta}(esfera), C_{D,\beta}(dist)) \quad (3.22)$$

onde:

$$C_{D,\beta}(esfera) = \max\left(\frac{Re}{24}(1 + 0,15 Re^{0,687}); 0,44\right) \quad (3.23)$$

$$C_{D,\beta}(cap) = \frac{8}{3} \quad (3.24)$$

Estes valores de C_D correspondem ao coeficiente de arrasto de bolhas isoladas.

É preciso também considerar o efeito de população (presença de outras partículas no escoamento) sendo, então, necessário aplicar um fator de correção sobre o coeficiente de arrasto, na forma:

$$C_{D,\beta} = r_\alpha^p C_{D,\infty} \quad (3.25)$$

onde $C_{D,\infty}$ é o coeficiente de arrasto em uma bolha isolada. Neste trabalho, o expoente p da equação (3.25) foi considerado igual a -2 com base no procedimento descrito por RIBEIRO JR. e LAGE (2004c). Os autores consideraram que a velocidade terminal da partícula escoando isolada deveria ser corrigida por funções que levariam em conta tanto o efeito de

parede quanto o efeito de população para então ser obtido o valor adequado para a velocidade terminal. Assumindo que a força de arrasto permanece constante para uma mesma velocidade terminal, independentemente dos efeitos de parede e de outras partículas, eles chegaram a conclusão de que o produto $U_T^2 C_{D,\infty}$ permanece constante, permitindo trazer fatores empíricos de correção de U_T para C_D e vice-versa. Desta forma, foi possível determinar o fator de correção p .

Portanto, a força de arrasto hidrodinâmico modificada para levar em conta o efeito de população pode ser descrita por:

$$M_{\alpha,\beta}^{FA} = \frac{3}{4} r_\beta r_\alpha^p \rho_\alpha \frac{C_{D,\infty}}{D_\beta^S} |U_\beta - U_\alpha| (U_\beta - U_\alpha) \quad (3.26)$$

A força de dispersão turbulenta é descrita por BERTODANO (1998):

$$M_a^{DT} = -C_{DT} \rho_\alpha k_\alpha \nabla r_\alpha \quad (3.27)$$

onde valores na faixa de 0,1 a 0,5 tem sido utilizados para C_{DT} com sucesso para escoamento com bolhas de diâmetro da ordem de poucos milímetros. O valor atribuído a C_{DT} neste trabalho foi igual a 0,3.

A viscosidade dinâmica efetiva da fase contínua, μ_α , na Eq. (3.5), para o caso de escoamentos turbulento, é dividida em uma parte laminar e outra turbulenta:

$$\mu_\alpha = \mu_{\alpha,lam} + \mu_{\alpha,turb} \quad (3.28)$$

$$\mu_{\alpha,turb} = C_\mu \rho_\alpha \frac{k_\alpha^2}{\varepsilon_\alpha} \quad (3.29)$$

A energia cinética turbulenta, k , e a taxa de dissipação de energia turbulenta, ε , foram calculadas através do modelo k - ε modificado, que é dado por:

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha k_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha k_\alpha) = r_\alpha (P_\alpha - \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha \Gamma_{\alpha,k} \nabla k_\alpha) \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha \varepsilon_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha \varepsilon_\alpha) = r_\alpha \frac{\varepsilon_\alpha}{k_\alpha} (C_{\varepsilon 1} P_\alpha - C_{\varepsilon 2} \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + \nabla \cdot (\Gamma_{\alpha,\varepsilon} \nabla k_\alpha) \quad (3.31)$$

Onde:

$$\Gamma_{\alpha,k} = \mu_{\alpha,lam} + \frac{\mu_{\alpha,turb}}{\sigma_k} \quad (3.32)$$

$$\Gamma_{\alpha,\varepsilon} = \mu_{\alpha,lam} + \frac{\mu_{\alpha,turb}}{\sigma_\varepsilon} \quad (3.33)$$

P_α é o termo de produção de energia turbulenta devido às forças viscosas, que são modelados usando:

$$P_\alpha = \mu_{turb,\alpha} \nabla \cdot (\nabla U_\alpha + \nabla U_\alpha^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot U_\alpha (3\mu_{turb,\alpha} \nabla U_\alpha + \rho_\alpha k_\alpha) \quad (3.34)$$

Foram utilizados os valores padrão para os parâmetros do modelo $k-\varepsilon$, que são apresentados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Valores dos parâmetros do modelo $k-\varepsilon$.

Constantes	Valores Adimensionais
$C_{\varepsilon 1}$	1,44
$C_{\varepsilon 2}$	1,92
σ_k	1,0
σ_ε	1,3
C_μ	0,8

Foi utilizado um modelo algébrico para a turbulência da fase dispersa, que assume que a sua viscosidade cinemática turbulenta, $\nu_{turb,\beta}$, é proporcional a viscosidade cinemática turbulenta da fase contínua, $\nu_{turb,\alpha}$ (*dispersed phase zero equation*):

$$v_{turb,\beta} = \frac{v_{turb,\alpha}}{\sigma} \quad (3.35)$$

onde σ representa o número de Prandtl turbulento que relaciona as viscosidades cinemáticas turbulentas. Para sistemas gás-líquido, o tempo de relaxação da bolha é pequeno quando comparado com a escala de tempo de dissipação da turbulência, de forma que o valor do número de Prandtl turbulento pode ser considerado igual a 1.

3.2.3) Equação de Conservação de Energia

A conservação de energia em cada fase pode ser escrita da seguinte forma:

Fase contínua:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \rho_\alpha h_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha (\rho_\alpha U_\alpha h_\alpha - \lambda_\alpha \nabla T_\alpha)) = DA_{\alpha,\beta} [\dot{q}_{\alpha,s} + m_{\alpha\beta}^+ h_{\beta,s} - m_{\beta\alpha}^+ h_{\alpha,s}] + S_{E,\alpha} \quad (3.36)$$

Fase dispersa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_\beta \rho_\beta h_\beta) + \nabla \cdot (r_\beta (\rho_\beta U_\beta h_\beta - \lambda_\beta \nabla T_\beta)) = DA_{\alpha,\beta} [\dot{q}_{\beta,s} + m_{\beta\alpha}^+ h_{\alpha,s} - m_{\alpha\beta}^+ h_{\beta,s}] + S_{E,\beta} \quad (3.37)$$

onde h_α e h_β representam as entalpias da fase contínua e dispersa respectivamente, T_α e T_β representam as temperaturas da fase contínua e dispersa respectivamente, λ_α e λ_β representam, respectivamente, as condutividades térmicas da fase contínua e dispersa respectivamente, $\dot{q}_{\alpha,s}$ e $\dot{q}_{\beta,s}$ são os fluxos de calor através da interfase entre as fases que efetivamente chega a fase contínua e dispersa, respectivamente, $S_{E,\alpha}$ e $S_{E,\beta}$ representam, respectivamente, termos fontes (de geração ou sumidouro) de energia nas fases contínua e dispersa, $m_{\alpha\beta}^+ h_{\beta,s}$ e $m_{\beta\alpha}^+ h_{\alpha,s}$ correspondem a termos de transporte de calor induzido pela

transferência de massa entre as fases, no qual $h_{\beta,s}$ e $h_{\alpha,s}$ são as entalpias das fases dispersa e contínua, respectivamente, calculadas nas condições da interface.

No caso da transferência de calor, ao contrário da transferência de massa, existe uma descontinuidade no fluxo térmico que atravessa a interface. Isto ocorre porque parte do calor cedido pela fase dispersa superaquecida é utilizado na vaporização da água na interface. Maiores detalhes de como os fluxos de calor e massa foram modelados estão apresentados mais adiante (seção 3.6.3.2).

3.2.4) Condições Iniciais e de Contorno

Para todas as simulações, a condição inicial foi a de repouso para a fase líquida, o valor da retenção gasosa foi igualado a zero, a temperatura da fase líquida foi considerada igual à temperatura de operação do estado pseudoestacionário de operação do evaporador para um dado conjunto de condições operacionais. A fase gasosa entra pela parte inferior da coluna através de uma fração total da área total disponível, seus valores serão detalhados mais adiante (seção 4.3.4). A condição de entrada da fase gasosa é condicionada à formação das bolhas cuja modelagem é descrita mais adiante (seção 3.6.2). No topo da coluna a condição de contorno imposta permitiu tanto a saída e/ou entrada da fase líquida quanto da fase gasosa. Entretanto, para evitar a saída da fase líquida nos instante iniciais foi imposto no topo da coluna um pequeno volume totalmente preenchido por ar na mesma temperatura da fase contínua e isento de vapor de água. Desta forma, com a entrada de gás na coluna, foi permitindo que ao longo da simulação a altura da fase líquida aumentasse paulatinamente até que houvesse fase contínua em quase toda a extensão da coluna. Nas paredes da coluna, empregou-se a condição de não escorregamento para ambas as fases.

3.2.5) Procedimento Numérico

As Equações 3.1 a 3.37 que compõem o modelo de dois fluidos foram resolvidas em conjunto com as condições de contorno e iniciais usando-se um código comercial de fluidodinâmica chamado CFX 10.0 da ANSYS. Este código computacional utiliza um método de solução baseado na técnica de volumes finitos.

3.3) Modelo Lagrangeano

A incorporação da etapa de formação das bolhas é realizada através do acoplamento da simulação tridimensional transiente do modelo Euleriano-Euleriano, com um modelo Lagrangeano desenvolvido por CAMPOS e LAGE (2000b) para a transferência simultânea de calor e massa durante a formação e ascensão de bolhas superaquecidas em uma coluna de líquido. O modelo Lagrangeano fornece os coeficientes de transferência de calor e massa no interior da fase dispersa e as condições de entrada do gás na simulação levando em conta os fenômenos de transferência de calor e massa ao longo da formação. A metodologia para o acoplamento entre o modelo Lagrangeano e Euleriano está exposta mais adiante (seção 3.6).

De acordo com este modelo, a bolha é considerada esférica durante todo o tempo de residência na fase líquida e os fluxos mássicos difusivos são apropriadamente descritos pela lei de Fick. Na etapa de formação, a injeção de gás é modelada como uma fonte pontual localizada no centro da bolha que emite gás nas condições de entrada. Variações nas propriedades físicas como variações no raio da bolha são levados em conta.

O modelo consiste das seguintes equações simplificadas da continuidade e pelos balanços diferenciais de massa e energia para a bolha:

$$\frac{\partial \rho_G}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_G v) = \rho_I Q_I \delta(r) \quad (3.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_G Y_i) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \rho_G \left(Y_i v - D_i \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) \right] = \rho_I Q_I Y_{i,I} \delta(r), \quad i=1,2 \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_G C_{pG} T) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_G v C_{pG} T) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \lambda_G \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \\ & \left(\langle C_{p1}^0 - C_{p2}^0 \rangle \right) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 T \rho_G D_1 \frac{\partial Y_1}{\partial r} \right) = \rho_I Q_I \delta(r) \sum_{i=1}^2 Y_{i,I} \langle C_{pi}^0 \rangle T_I \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde v (m s^{-1}) é a velocidade na direção radial; Q_I ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$) é a vazão volumétrica de injeção no orifício, Y_i e D_i ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$) são respectivamente a fração mássica e o coeficiente de difusão do componente i na mistura, respectivamente, T (K) é a temperatura; δ é a função delta de Dirac,

λ_G ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$) é a condutividade térmica da mistura gasosa e ρ_G (kg m^3) é a densidade da mistura gasosa. Os símbolos C_{pG} e $C_{p_i}^0$ referem-se, respectivamente, às capacidades caloríficas ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$) da mistura gasosa e do componente i puro. O índice I refere-se às condições de injeção, ao passo que o índice i refere-se, respectivamente, aos componentes (1) água e (2) ar. As Equações 3.38 a 3.40 são válidas para a etapa de formação e ascensão conforme citado anteriormente. Para a etapa de ascensão basta fazer $Q_I=0$.

3.3.1) Condições de Contorno

As condições de contorno para as Eqs. 3.38 a 3.40 são dadas pelas as equações de balanço de massa e de energia na superfície, os quais são obtidas integrando-se as equações de conservação para um volume de controle situado na superfície e tomando o limite das expressões obtidas quando a altura desse volume tende a zero. As equações de contorno são representadas nas expressões abaixo.

$$\frac{-\dot{m}_{ev}}{4\pi R^2} = \rho_G \left(v_s - \frac{dR}{dt} \right) \text{ em } r = R(t) \quad (3.40)$$

$$\rho_G D_{1,s} \left. \frac{\partial Y_I}{\partial r} \right|_{r=R(t)} = \frac{\dot{m}_{ev}}{4\pi R^2} (1 - Y_{I,s}) \text{ em } r = R(t) \quad (3.41)$$

$$-\lambda_G \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R(t)} = \frac{\dot{m}_{ev}}{4\pi R^2} \Delta H_{vap}(T_s) + h_{liq}(T_s - T_L) \text{ em } r = R(t) \quad (3.42)$$

onde o subscrito s indica a superfície da bolha, R (m) é o raio da bolha para um dado instante de tempo, \dot{m}_{ev} (kg s^{-1}) é a taxa de vaporização, $D_{1,s}$ ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$) é coeficiente de difusão do componente 1 nas condições da superfície, $Y_{I,s}$ é a fração mássica de água na superfície, ΔH_{vap} (J kg^{-1}) é o calor latente de vaporização e h_{liq} (W m^{-2}) é o coeficiente convectivo de transmissão de calor da superfície da bolha para o líquido, estimado a partir da correlação de CALDERBANK e MOO-YOUNG (1961).

De forma a prever o desprendimento da bolha do orifício e a sua ascensão, as Eqs. 3.38 a 3.40 tem que ser resolvidas juntamente com um modelo dinâmico da bolha. Conforme detalhado por RIBEIRO JR. *et al.* (2004b), para a etapa de formação, foi utilizado uma modificação do modelo de DAVIDSON e SCHULER (1960), enquanto que para a etapa de ascensão, um balanço de forças mais detalhado foi realizado, levando em consideração os efeitos inerciais, de massa virtual, empuxo e arrasto. O cálculo da fração mássica da água e da temperatura na superfície da bolha pode ser efetuado com a hipótese de equilíbrio interfacial.

3.3.2) Procedimento Numérico para Resolução do Modelo de CAMPOS e LAGE (2000)

As equações do modelo desenvolvido por CAMPOS e LAGE (2000) para a fase dispersa foram adimensionalizadas e discretizadas no espaço empregando-se o método dos volumes finitos, com fluxos convectivo-difusivos avaliados pelas funções de interpolação apresentadas por PATANKAR (1980). O sistema de equações diferenciais ordinárias resultante foi resolvido usando-se a subrotina DASSL (PETZOLD, 1989) cujas tolerâncias absoluta e relativa foram ajustadas para os valores 10^{-14} e 10^{-12} respectivamente. Maiores detalhes com relação à adimensionalização e à discretização das equações são apresentados por CAMPOS (1997).

3.4) Transferência de Calor e Massa

Para a simulação computacional dos processos de transferência em colunas de borbulhamento é necessário o estudo dos fluxos de calor e massa entre as fases durante ambas as etapas do borbulhamento, ou seja, formação e ascensão. Com esse objetivo será detalhada na próxima seção a metodologia utilizada para a avaliação e obtenção dos coeficientes de transferência de calor e massa nestas etapas.

3.4.1) Modelo Simplificado para a Transferência de Calor e Massa em Bolhas

A formulação matemática do modelo simplificado para a ascensão e formação de uma bolha em um sistema com uma única substância volátil está baseada na conservação de massa e de energia na bolha. O modelo é concebido a partir de uma análise a parâmetros

concentrados onde se assume que o gás está saturado na interface. Neste trabalho, o sistema ar-água foi considerado. Fazem parte do modelo os balanços de massa global, de massa do componente volátil (1) e de energia, dados, respectivamente, pelas Eqs. 3.43, 3.44 e 3.45.

$$\frac{d}{dt} \left[\overline{\rho}_b(t) V_b(t) \right] = \dot{m}_{vap}(t) + \dot{m}_{inj} \quad (3.43)$$

$$\frac{d}{dt} \left[\overline{Y}_{1,b}(t) \overline{\rho}_b(t) V_b(t) \right] = \dot{m}_{vap}(t) + Y_{inj,1} \dot{m}_{inj} \quad (3.44)$$

$$\frac{d}{dt} \left[\overline{\rho}_b(t) V_b(t) C_{p_b}(t) (\overline{T}_b(t) - T_r) \right] = -Q_b(t) + \dot{m}_{inj} C_{p_{inj}} (T_{inj} - T_r) \quad (3.45)$$

A este sistema de equações diferenciais, juntam-se duas outras equações: a equação de estado do gás ideal, Eq. 3.46, para o cálculo da sua densidade no interior da bolha, e a equação para o cálculo da temperatura da superfície, Eq. 3.47, que é obtida do balanço de energia na interface.

$$\overline{\rho}_b(t) = \frac{\overline{MM}_b(t) P}{R \overline{T}_b(t)} \quad (3.46)$$

$$T_s(t) = \overline{T}_b(t) - \frac{Q_b(t)}{h_b A_b(t)} \quad (3.47)$$

onde $\overline{\rho}_b$ (kg m^{-3}) é a densidade da mistura gasosa no interior da bolha, V_b (m^3) é o volume da bolha, C_{p_b} ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$) é a capacidade calorífica da mistura gasosa no interior da bolha, $C_{p_{inj}}$ ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$) é a capacidade calorífica da mistura gasosa injetada, \overline{h}_b (W m^{-2}) é o coeficiente de transferência de calor na fase gasosa, \overline{T}_b (K) é a temperatura da bolha, T_r (K) é a temperatura de referência, T_s (K) é a temperatura na interface, $\overline{Y}_{1,b}$ é fração mássica do volátil (água) na bolha, $Y_{l,inj}$ é fração mássica do volátil (água) na corrente de injeção, \dot{m}_{vap} (kg s^{-1}) é a vazão mássica do volátil (água) vaporizada, \dot{m}_{inj} (kg s^{-1}) é vazão mássica de gás injetado, Q_b (J s^{-1}) é taxa de calor fornecida pelo gás, ΔH_{vap} (J kg^{-1}) é o calor de vaporização do volátil (água),

\overline{MM}_b (kg kmol⁻¹) é o massa molecular média da mistura gasosa e R (J kmol⁻¹ K) é a constante dos gases ideais. O índice 1 refere-se ao volátil (água) e o índice 2 refere-se a um segundo componente ou mistura de composição constante (ar).

O modelo simplificado faz uso dos coeficientes de transferência de calor e de massa que estão presentes no modelo por meio das equações que definem a taxa de calor transportada no gás até a superfície da bolha, Eq. 3.48, a taxa de calor transportada no líquido a partir da interface, Eq. 3.49, e a taxa mássica de volátil evaporada, Eq. 3.50. Além disso, a taxa de calor transportada na fase gasosa até a superfície pode ser decomposta nas suas partes latente e sensível:

$$Q_b(t) = \dot{m}_{vap}(t) \Delta H_s^{vap}(t) + h_{liq} A_b(t) [T_s(t) - T_{liq}] \quad (3.48)$$

$$Q_{liq}(t) = h_{liq} A_b(t) [T_s(t) - T_{liq}] \quad (3.49)$$

$$\dot{m}_{vap}(t) = \overline{k}_b A_b(t) [\rho_s(t) Y_{liq}^{sat}(t) - \overline{\rho}_b(t) \overline{Y}_{1,b}(t)] \quad (3.50)$$

nestas equações, A_b (m²) é a área superficial da bolha, \overline{k}_b (m s⁻¹) é o coeficiente de transferência de massa na bolha, ρ_s (kg m⁻³) é densidade da mistura gasosa calculada na temperatura da superfície, Y_{liq}^{sat} é fração mássica de volátil (água) no gás saturado na temperatura da superfície, Q_{liq} (J s⁻¹) é a taxa de calor sensível que deixa a bolha e é utilizada para o aquecimento da fase líquida, h_{liq} (W m⁻² K⁻¹) é o coeficiente de transferência de calor na fase líquida estimado a partir da correlação de CALDERBANK e MOO-YOUNG (1961) e ΔH_s^{vap} (J kg⁻¹) é o calor de vaporização do volátil (água) calculado na temperatura da interface.

3.4.2) Coeficiente de Transferência de Calor e Massa na Fase Gasosa

O modelo detalhado de CAMPOS e LAGE (2000) para a transferência de calor e massa em bolhas foi utilizado para a determinação dos valores dos coeficientes de transferência de calor e massa durante as etapas de formação e ascensão de bolhas para a fase gasosa, respectivamente, h_b e k_b .

A solução simultânea das Eqs. 3.43 a 3.45 permitiu obter os perfis de temperatura e fração de água dentro da bolha, a taxa mássica de evaporação, o raio da bolha e o calor sensível cedido pela bolha para a fase líquida durante o processo de evaporação por contato direto em um sistema água-ar.

Tendo os perfis de temperatura e fração de água na bolha em mãos, foi possível obter os valores médios volumétricos da concentração de água ($c_{1,b}$) e da temperatura (\bar{T}_b) no interior da bolha ao longo do tempo, a saber:

$$c_{1,b}(t) = 3 [r_b(t)]^{-3} \int_0^{r_b(t)} Y_{1,b}(r,t) \rho_b(r,t) r^2 dr \quad (3.51)$$

$$\bar{T}_b(t) = \frac{\int_0^{r_b(t)} \rho_b(r,t) C_{pb}(r,t) T_b(r,t) r^2 dr}{\int_0^{r_b(t)} \rho_b(r,t) C_{pb}(r,t) r^2 dr} \quad (3.52)$$

Os coeficientes de transferência de calor e massa são definidos como sendo o quociente da divisão do fluxo da grandeza em questão (calor ou massa) pela força motriz (temperatura ou concentração). Desta forma, tendo-se em mãos os valores de $c_{1,b}$ e \bar{T}_b anteriormente definidos, foi possível calcular tais coeficientes utilizando as seguintes equações:

$$h_b(t) = \frac{Q_b(t)}{A_b [\bar{T}_b(t) - T_s(t)]} \quad (3.53)$$

$$k_b(t) = \frac{\dot{m}_{vap}(t)}{A_b [c_{1,s}(t) - c_{1,b}(t)]} \quad (3.54)$$

onde $c_{1,s}$ (kg m^{-3}) é a concentração de água na superfície e Q_b (J s^{-1}) é a soma das taxas de calor sensível e latente que a bolha cede para a fase líquida.

As Equações 3.54 e 3.55 foram utilizadas para obter os valores médios temporais de k_b e h_b os quais são parâmetros a serem efetivamente utilizados no modelo simplificado proposto. Para o cálculo da média temporal dos coeficientes os valores obtidos foram utilizados na integração trapezoidal ao longo do intervalo de tempo de ambas as etapas, desta forma, foram

obtidos valores de \bar{k}_b para a etapa de formação e ascensão bem como foram obtidos valores de \bar{h}_b para as etapas de formação e ascensão, a saber:

$$\bar{h}_b = \frac{1}{(t_f - t_i)} \int_{t_i}^{t_f} h_b(t) dt \quad (3.55)$$

$$\bar{k}_b = \frac{1}{(t_f - t_i)} \int_{t_i}^{t_f} k_b(t) dt \quad (3.56)$$

onde t_f e t_i , são respectivamente o tempo final e o tempo inicial da etapa de formação ou da etapa de ascensão.

O coeficiente convectivo de transmissão de calor para a fase contínua foi estimado a partir da correlação de CALDERBANK e MOO-YOUNG (1961):

$$h_{liq} = 0,31 \rho_L C_{pL} \left[\frac{(\rho_L - \rho_G) \mu_L g}{\rho_L^2} \right]^{1/3} \left(\frac{C_{pL} \mu_L}{\lambda_L} \right)^{-2/3} \quad (3.57)$$

3.4.3) Procedimento Numérico para Resolução do Modelo Simplificado

O sistema de equações algébrico-diferencial 3.43 a 3.45 foi resolvido usando-se a subrotina DASSL (PETZOLD, 1989) e a subrotina DLSARG da biblioteca IMSL foi utilizada para a resolução do sistema algébrico com o objetivo de promover a inicialização consistente da DASSL.

3.5) Cálculo das Propriedades Físicas

Todas as simulações foram efetuadas utilizando o sistema água-ar. As propriedades físicas das substâncias puras foram retiradas de LAGE (1992) e de HOLMAN (1983). O coeficiente de difusão binário água-ar como função da temperatura foi calculado por meio da relação desenvolvida por LAGE e RANGEL (1992). A lei dos gases ideais foi empregada para calcular a densidade da mistura gasosa e a condutividade térmica foi estimada pela equação de WASSILJEWА modificada por MASON e SAXENA (REID *et al.*, 1987). A capacidade

calorífica da mistura gasosa foi calculada considerando comportamento de solução ideal. Para cada componente, a capacidade calorífica média foi obtida a partir de sua definição, usando a temperatura do gás e a temperatura do líquido como limites. A massa molecular média da mistura gasosa foi calculada a partir da média ponderada pela fração molar das massas moleculares de cada substância. O equilíbrio interfacial foi calculado utilizando a equação de WAGNER para calcular a pressão de vapor d'água conforme descrito em REID *et al.* (1987).

3.6) Acoplamento entre o Modelo Euleriano e Lagrangeano

3.6.1) Introdução

A incorporação da etapa de formação das bolhas à modelagem da transferência de calor e massa na coluna de borbulhamento é realizada através do acoplamento entre o modelo Euleriano para a transferência de calor e massa na coluna de borbulhamento com o modelo Lagrangeano de CAMPOS e LAGE (2000) aplicado à transferência de calor e massa em uma bolha isolada.

Através do modelo Lagrangeano é possível obter a concentração de água, temperatura e o diâmetro da bolha ao final da formação, a taxa mássica evaporada por bolha e a taxa de calor sensível recebida pela fase líquida ao longo da formação. O modelo Lagrangeano possibilita também o cálculo dos coeficientes de transferência de calor e massa ao longo das etapas de formação e ascensão.

Os parâmetros fornecidos pela modelagem Lagrangeana para o acoplamento com a modelagem Euleriana são dependentes das condições operacionais da coluna (temperatura do líquido, temperatura de injeção de gás, vazão de alimentação, altura de borbulhamento, pressão na coluna, tipo de distribuidor, diâmetro da coluna e diâmetro do orifício). Então, ao se fornecer estes parâmetros para a simulação CFD transiente tridimensional tem-se que levar em consideração eventuais modificações nos mesmos ao longo da resolução das equações de transporte na simulação Euleriana. De todos os parâmetros listados anteriormente, o único que não permanecerá constante ao longo da evolução transiente da solução é a temperatura da fase líquida, desta forma, para o acoplamento Lagrangeano-Euleriano há de se ter o cuidado de fornecer correlações para cada parâmetro as quais devem levar em consideração a variação dos mesmos com a temperatura da fase líquida. Para atender esta demanda os valores dos parâmetros de acoplamento, obtidos com o modelo Lagrangeano, foram devidamente

correlacionados com a temperatura da fase líquida em uma dada faixa de valores. As correlações obtidas estão no apêndice B.

Resumidamente os seguintes parâmetros são obtidos com o modelo Lagrangeano para o acoplamento com o modelo Euleriano:

Parâmetros para a inclusão da etapa de formação: Massa evaporada por bolha ao longo da formação (M_{evap}), Quantidade de calor cedido pela bolha ao longo da formação (Q_{form}), Freqüência de formação das bolhas (f), Altura de desprendimento da bolha (Z_f)

Parâmetros para a etapa de ascensão: Raio da partícula (bolha) ao final da formação (r_{bf}) e os coeficientes médios de transferência de calor e massa.

Com estes parâmetros foi possível incluir a etapa de formação na modelagem Euleriana-Euleriana no qual a taxa mássica evaporada e a taxa de calor recebido pela fase líquida são incluídas no subdomínio “zona de formação”, que foi devidamente dimensionado usando a altura de desprendimento (juntamente com a área total da seção reta da coluna), calculada pelo modelo Lagrangeano. Além disso, os coeficientes de transferência de calor e massa são utilizados para o cálculo das taxas de transferência de calor e massa entre as fases ao longo da etapa de ascensão. Maiores detalhes sobre o acoplamento entre os modelos para as etapas de formação e ascensão estão descritos na próxima seção.

3.6.2- Etapa de Formação de Bolhas

Para incluir a transferência de calor e massa durante a formação de bolhas na modelagem Euleriana-Euleriana, o modelo Lagrangeano descrito na seção 3.3 foi utilizado para calcular a taxa mássica e a taxa de calor trocado entre as fases ao longo desta etapa. Em um primeiro momento foi definido no domínio de cálculo do modelo Euleriano uma zona de formação que é calculada por meio da altura no qual ocorre o desprendimento da bolha, ou seja, a distância que o centro de massa da bolha percorre até o exato momento em que a bolha está livre para ascender, multiplicado pela área da seção transversal da coluna. É importante salientar que a altura de desprendimento é um parâmetro fornecido pelo modelo Lagrangeano (seção 3.3), conforme descrito anteriormente.

Tendo-se em mãos a quantidade de água evaporada por bolha ao final da formação (M_{evap}), calculada a partir de resultados fornecidos pelo modelo Lagrangeano, foi possível calcular a taxa mássica total evaporada na etapa de formação ($\dot{M}_{evap,f}$), por meio da seguinte estratégia de cálculo:

$$\dot{M}_{evap,f} = M_{evap} \times f \times N_0 \quad (3.59)$$

onde M_{evap} (kg) é a massa total evaporada para o interior da bolha ao longo da formação, f (s^{-1}) é a frequência de formação e N_0 é o número de orifícios (que representa o número de bolhas formadas). Desta forma, tem-se que $\dot{M}_{evap,f}$ ($kg\ s^{-1}$) é a taxa total de massa evaporada ao longo da formação.

Da mesma forma é possível calcular a taxa de calor cedido pela fase gasosa à fase líquida, a saber:

$$\dot{Q}_{form} = Q_{sens} \times f \times N_0 \quad (3.60)$$

onde Q_{sens} (J) é a quantidade de energia total cedida por uma única bolha para a fase líquida, f é a frequência de formação e N_0 é o número de orifícios. Desta forma, \dot{Q}_{form} ($J\ s^{-1}$) é a taxa de calor cedida para a fase líquida ao longo da formação.

Com os valores das taxas de calor e massa trocados entre as fases na etapa de formação foi possível incluir esta mesma etapa na modelagem Euleriana-Euleriana. O efeito de troca de calor e massa na fase líquida foi modelado por meio de termos fontes no subdomínio V_f (zona de formação), o qual representa um termo “sumidouro” de massa e “gerador” de energia, os termos foram modelados da seguinte forma (tais termos foram devidamente incluídos no subdomínio formação nas Eqs. 3.2 e 3.36):

$$S_{M,\alpha,form} = \frac{-\dot{M}_{evap}}{V_f} \text{ (termo “sumidouro de massa”)} \quad (3.61)$$

$$S_{E,\alpha,form} = \frac{\dot{Q}_{form} + \dot{Q}_d}{V_f} \text{ (termo “gerador de energia”)} \quad (3.62)$$

onde Q_d representa a taxa de calor cedido pelo aparato distribuidor de gás para a fase líquida, segundo RIBEIRO JR. (2004b) em alguns casos dependendo da velocidade de injeção do gás esta parcela pode chegar a mais de 50 % do calor total recebido pela fase líquida. O valor de

Q_d foi obtido a partir de dados experimentais de RIBEIRO JR. (2004b) para um sistema água-ar (seção 4.3.2).

No que diz respeito ao comportamento da fase gasosa, optou-se por não incluir os efeitos da formação no subdomínio V_f e sim entrar com a fase gasosa na simulação com a sua condição ao final da formação (dados fornecidos pelo modelo Lagrangeano), ou seja, a temperatura de entrada da fase gasosa não foi a temperatura real de injeção e sim a temperatura após a fase dispersa trocar calor com a fase líquida na formação. O mesmo pode-se dizer a respeito da fração mássica de água, de modo que é preciso corrigir também a vazão mássica de água de entrada na coluna, pois agora, além da vazão de ar de entrada, deve-se acrescentar a taxa mássica evaporada na formação:

$$\dot{M}_{gás,f} = \dot{M}_{inj,ar} + \dot{M}_{evap} \quad (3.63)$$

onde $\dot{M}_{gás,f}$ (kg s^{-1}) é a vazão mássica de entrada na simulação Euleriana, $\dot{M}_{inj,ar}$ (kg s^{-1}) é a vazão mássica de entrada no modelo Lagrangeano (é a vazão real de gás que entra na coluna sem considerar o efeito da evaporação) e \dot{M}_{evap} (kg s^{-1}) é a taxa de massa evaporada ao longo da etapa de formação.

3.6.3- Etapa de Ascensão de Bolhas

A evaporação por contato direto tem uma natureza complexa, pois além de apresentar uma resistência térmica na fase contínua, há transferência simultânea de calor e massa no interior da fase dispersa e mudança de fase na interface, sendo que os fenômenos de transferência de calor e massa são acoplados. Em sistemas nos quais ocorre simultaneidade de transferência de calor e massa, ocorrem gradientes de temperatura e concentração ao mesmo tempo. Nestes sistemas a transferência de calor afeta a transferência de massa e vice-versa.

Vários modelos têm sido formulados para descrever a transferência de calor e massa através de interfaces. No modelo de dupla resistência, são desenvolvidas expressões globais para o fluxo de transferência de calor e massa a partir de expressões de fluxo em cada filme que separa o interior de cada fase da interface. As espessuras dos filmes não guardam relação entre si, dependendo das condições hidrodinâmicas reinantes. Neste modelo, as seguintes hipóteses são válidas: (1) fora dos filmes há completa turbulência, portanto as composições e a temperatura nas fases *bulk* são constantes; (2) existem finos filmes estagnados em cada fase

nas intermediações da interface, nos quais há gradientes de temperatura e concentração e a transferência de calor e massa neste filme se dá por mecanismos difusivos e (3) existência de equilíbrio termodinâmico na interface. Os fluxos através da interface podem ser calculados por meio do uso de coeficientes de transporte (de calor ou massa) em uma abordagem por parâmetros agrupados no qual todos os efeitos, a menos da força motriz, são agregados nestes coeficientes. Os coeficientes de transporte são funções da capacidade de difusão da espécie (representado por meio do coeficiente de difusão) e também pelas propriedades do fluido e pelas características do escoamento da mistura, responsável pelo comprimento característico da difusão.

3.6.3.1- Transferência de Massa

No caso da transferência de massa, existe somente a resistência ao fluxo mássico na fase gasosa (β), visto que a fase líquida (α) é constituída por um componente puro. Desta forma, o fluxo mássico através da interface pode ser equacionado da seguinte forma:

$$m_{\beta,\alpha} = \dot{m}_{\beta,\alpha,i} = k_{\beta,l}(\rho_{\beta,s}Y_{1,\beta,s} - \rho_{\beta}Y_{1,\beta}) \quad (3.64)$$

onde $k_{\beta,l}$ é o coeficiente de transferência de massa na fase dispersa, ρ_{β} é a densidade da fase dispersa calculada nas condições de temperatura e pressão desta fase, $\rho_{\beta,s}$ é a densidade da fase gasosa nas condições de superfície e $Y_{1,\beta,s}$ é a fração mássica do componente 1 (água) na interface, calculado por meio de equilíbrio termodinâmico nas condições da interface.

No caso do modelo Euleriano usado pelo CFX, o fluxo é modelado em termos de taxa mássica por unidade de volume da mistura. Desta forma, os termos de transporte de massa entre as fases presentes nas equações de conservação de massa e da espécie química devem ser multiplicados pela densidade de área superficial. Considerando partículas esféricas, a densidade de área interfacial (área interfacial dividida pelo volume da mistura), pode ser calculada da seguinte forma:

$$DA_{\alpha\beta} = \frac{6r_{\beta}}{D_{\beta}^s} \quad (3.65)$$

3.6.3.2- Transferência de Calor

No caso da transferência de calor, existe uma peculiaridade que é a descontinuidade do fluxo de calor na interface, ou seja, parte do calor cedido pela bolha é utilizado na vaporização da fase líquida. Desta forma, a interface assume papel primordial, pois é nas suas condições de temperatura e fração mássica que ocorre a vaporização. A troca de calor entre as fases pode se modelada conforme descrito abaixo.

O fluxo de calor cedido pela fase gasosa para a interface gás / líquido é:

$$\dot{q}_{s,\beta} = h_{\beta}(T_{\beta} - T_s) \quad (3.66)$$

O fluxo de calor da interface para o seio da fase líquida é:

$$\dot{q}_{\alpha,s} = h_{\alpha}(T_s - T_{\alpha}) \quad (3.67)$$

Sabe-se pela descontinuidade do fluxo na interface que:

$$\dot{q}_{s,\beta} \neq \dot{q}_{\alpha,s} \quad (3.68)$$

Pelo balanço de energia na interface (já que não há acúmulo de energia na mesma):

$$\dot{q}_{s,\beta} = \dot{q}_{\alpha,s} + \dot{q}_{latente} \quad (3.69)$$

onde

$$\dot{q}_{latente} = \dot{m}_{\alpha,\beta} \Delta H_{vap}^s \quad (3.70)$$

Da mesma forma que ocorre na transferência de massa, é preciso calcular a taxa de calor cedida por unidade de volume na mistura. Assim, os fluxos de calor devem ser multiplicados pela densidade de área superficial quando aplicados à equação de conservação de energia do modelo Euleriano.

3.6.3.3- Implementação da Transferência de Calor e Massa no CFX

No CFX 10.0 da ANSYS não existe nenhum modelo para a transferência simultânea de calor e massa em um sistema multifásico e multicomponente que considere a descontinuidade do fluxo de calor na interface. Desta forma, foi necessário abrir mão de um artifício para fazer com que o software considerasse tal descontinuidade. Partindo da hipótese de equilíbrio de fases e realizando um balanço de energia na interface é possível encontrar uma expressão para determinação da temperatura interfacial em função das outras variáveis envolvidas no processo (pressão, composição, temperatura da fase líquida, temperatura da fase gasosa e etc.).

Entretanto, devido a não linearidade presente em alguns termos da expressão resultante como por exemplo nos termos para o cálculo do calor latente de vaporização e da pressão de vapor, faz-se necessário utilizar um procedimento iterativo para encontrar o valor da temperatura interfacial.

Contudo a implementação de procedimentos iterativos no CFX 10.0 é uma tarefa custosa requerendo um tempo considerável de implementação. Para ultrapassar esta barreira optou-se por linearizar os termos não lineares da equação resultante e implementar, desta forma, uma expressão aproximada para o cálculo da temperatura interfacial utilizando o recurso *CFX Expression Language*. Maiores detalhes a respeito da linearização encontram-se no Apêndice C.

CAPÍTULO

4

Resultados e Discussão

4.1-Introdução

Este capítulo é dividido em duas seções de forma a facilitar o entendimento da metodologia utilizada. Na primeira parte, são abordados os resultados obtidos no estudo da transferência de calor e massa interfacial durante a formação e ascensão de uma bolha isolada em um processo de borbulhamento não isotérmico. O estudo permitiu avaliar o uso do modelo Lagrangeano na obtenção de parâmetros necessários para a simulação CFD (seção 3.6). A segunda parte é dedicada à comparação das simulações fluidodinâmicas com os resultados obtidos por RIBEIRO JR e LAGE (2004b). O principal objetivo foi de corroborar a validade do modelo fluidodinâmico empregado. Ainda nesta etapa, foi possível examinar o efeito e importância da formação através do acoplamento entre os modelos Lagrangeano e Euleriano.

Vale ressaltar que através do acoplamento realizado entre o modelo Lagrangeano e o modelo Euleriano foi possível incluir pela primeira vez a transferência de calor e massa durante a etapa de formação de bolhas em simulações Eulerianas.

4.2- Estudo da Transferência de Calor e Massa Durante a Formação e Ascensão de uma Bolha Superaquecida em uma Coluna de Líquido

Conforme explicitado anteriormente, o modelo detalhado desenvolvido por CAMPOS e LAGE (2000) foi utilizado para o cálculo dos valores médios dos coeficientes de transferência de calor e massa. Na Tab. 4.1 estão expostas as condições operacionais fixas utilizadas nas simulações. Na Tab. 4.2 estão expostos os casos estudados para verificar o comportamento das variáveis do processo frente a variações na temperatura de injeção de gás e temperatura do líquido na coluna. É importante ressaltar que as condições analisadas garantem regime de borbulhamento homogêneo.

Conforme a bolha ascende na coluna de líquido, um fluxo de calor é gerado devido à diferença de temperatura entre o ar superaquecido e a fase líquida. O calor possui dois destinos, uma parte é utilizada para aquecer o líquido e a outra parte é utilizada na vaporização da água na interface da bolha, portanto, um fluxo de massa é gerado para o interior da mesma. Com o decorrer do tempo a temperatura média na bolha diminui e a fração mássica média de água na bolha aumenta, desta forma, a bolha caminha em direção ao

equilíbrio térmico e à condição de saturação de vapor d'água, no qual a fração mássica de água na bolha é igual à fração de saturação na temperatura de equilíbrio e pressão do sistema, que é o maior valor possível para a fração mássica nestas condições de temperatura e pressão.

As Figuras 4.1 e 4.2 ilustram, respectivamente, o comportamento transiente da temperatura adimensional da bolha e do grau de saturação de água na bolha frente a variações da temperatura da fase líquida, casos 1 a 3, e frente a variações na temperatura de injeção de gás, casos 4 a 6. Em todas as figuras deste trabalho, quando for pertinente, o comportamento transiente é analisado em relação a τ , que representa o tempo de residência adimensional, $t/t_{residência}$. A temperatura adimensional e o grau de saturação são definidos respectivamente como: $(\bar{T}_b - T_{liq}) / (T_{inj} - T_{liq})$ e $\bar{Y}_{1,b} / Y_{sat}$.

Tabela 4.1- Condições fixas para simulação da formação e ascensão de uma bolha em uma coluna de líquido

Condições	Valores
Diâmetro do orifício do distribuidor, d_0 (mm)	0,50
Vazão mássica de ar injetado no orifício, M_I (kg/s)	$1,1094 \times 10^{-6}$
Pressão, P (kPa)	102,75
Massa inicial de água no evaporador (kg)	1,06
Altura de borbulhamento (cm)	28,025
Fração mássica de água no ar injetado, $(Y_{1,inj})$	0,003761

Tabela 4.2- Valores das temperaturas da fase líquida na coluna e de injeção de gás

Casos	T_{inj} (K)	T_{liq} (K)
1	500	310
2	500	330
3	500	360
4	360	340
5	600	340
6	840	340

Nas Figuras 4.1 e 4.2 percebe-se que tanto para o grau de saturação, quanto para a temperatura adimensional a variação temporal é inicialmente grande tornando-se suave ao final das etapas de formação e ascensão. A redução da temperatura média na bolha e o aumento da fração média de água na bolha promovem a diminuição tanto do fluxo de calor quanto do fluxo de massa. Assim, as taxas de variação da temperatura e da fração mássica de água são reduzidas, explicando a forma dos comportamentos transientes individuais do grau

de saturação e da temperatura adimensional, tanto para a etapa de formação, quanto para a etapa de ascensão.

No que tange ao comportamento da temperatura adimensional e do grau de saturação de água na bolha frente a variações na temperatura da fase líquida, é possível observar, nas Figs. 4.1(a) e 4.2 (a) (casos 1 a 3) que a etapa de formação é de extrema importância tanto para o processo de transferência de massa quanto para o processo de transferência de calor, o que está de pleno acordo com os resultados experimentais relatados no Capítulo 2. Ao final da etapa de formação nestes casos, os valores para a temperatura adimensional estão na faixa de 0,24 a 0,29 e os valores do grau de saturação estão na faixa de 0,69 a 0,77. Também é possível observar o mesmo comportamento para os casos 4 a 6, Figs. 4.1(b) e 4.2 (b), nos quais a temperatura de injeção de gás varia e a temperatura da fase líquida permanece constante. Nos casos 4 a 6 os valores para a temperatura adimensional estão na faixa de 0,23 a 0,29 e os valores do grau de saturação estão na faixa de 0,69 a 0,79 ao final da etapa de formação.

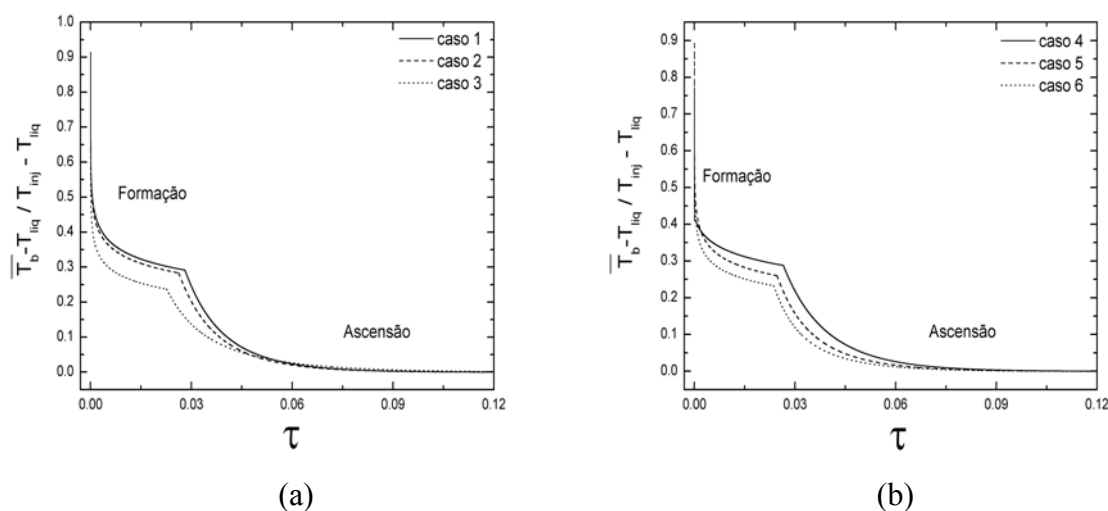


Figura 4.1. Evolução temporal da temperatura adimensional para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000).

Os “bicos” que aparecem nos perfis apresentados nas Fig. 4.1 e 4.2 para a temperatura adimensional e para o grau de saturação podem ser explicados pela interrupção da injeção de ar, o que gera uma variação abrupta no perfil radial de velocidade conforme pode ser visto na Fig. 4.3(b). Durante a etapa de formação, a injeção de ar quente compensa parcialmente a perda de calor da bolha para a fase líquida e promove a diluição da massa de água evaporada. Com o desprendimento, estes efeitos cessam, promovendo uma mudança nas taxas de

variação da temperatura e da fração mássica, explicando, assim, o surgimento dos bicos nos respectivos perfis.

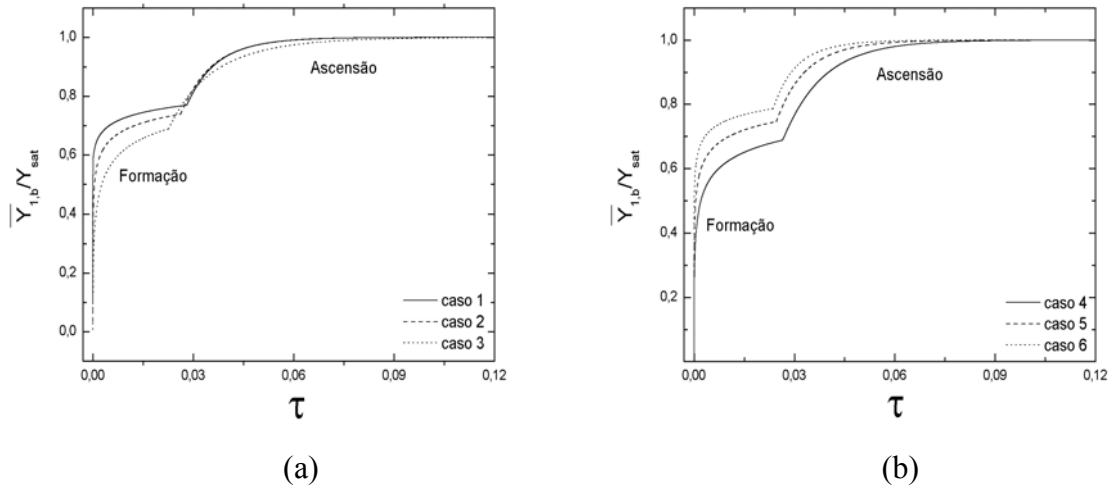


Figura 4.2. Evolução temporal do grau de saturação para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000).

As Figuras 4.4 e 4.5 ilustram, respectivamente, o comportamento transiente dos coeficientes de transferência de calor e massa frente a variações nas temperaturas da fase líquida e de injeção. Fica clara uma queda acentuada no início da etapa de formação para todos os casos analisados que se suaviza ao longo do tempo. Na etapa de formação, os valores dos coeficientes de transferência de calor variaram em média cerca de 2 ordens de grandeza, enquanto que os coeficientes de transferência de massa variaram em média cerca de 4 ordens de grandeza. As magnitudes dos valores máximos e mínimos de h_b e de k_b estão apresentadas nas Tab. 4.3 e 4.4, respectivamente. Por outro lado, para a etapa de ascensão, a variação de ambos os coeficientes em todos os casos estudados é bem menos intensa quando comparadas com as variações obtidas ao longo da formação.

O modelo desenvolvido por CAMPOS e LAGE (2000) leva em consideração tanto a contribuição do fluxo difusivo quanto a contribuição do fluxo convectivo na direção radial da bolha, conforme pode ser constatado nas Eqs. 3.38 e 3.40. A forte variação dos coeficientes ao longo da etapa de formação da bolha está relacionada primordialmente à importância da contribuição convectiva, a qual pode ser analisada por meio da evolução do perfil radial de velocidade interno à bolha com o tempo, que é mostrado, para o caso 2, na Fig. 4.3(a), nesta figura r_b representa o raio da bolha e r é a distância em relação ao centro.

No início da etapa de formação da bolha, o gás é injetado em uma bolha de pequeno volume, garantindo altas velocidades radiais e altos fluxos convectivos. Isto pode ser observado na Fig. 4.3(a), na qual o perfil radial de velocidade interno à bolha nos instantes iniciais apresenta altos valores. Com o aumento do volume da bolha e para uma vazão constante de injeção, a velocidade radial do gás é reduzida, desta forma, a velocidade diminui muito à medida que o tempo passa, sendo, ao final da formação ($\tau_{\text{form}} = 0,02618$), praticamente igual a zero. Este comportamento reduz a contribuição convectiva no transporte de calor e massa ao longo do tempo. Assim, tanto o coeficiente de transferência de calor quanto o coeficiente de transferência de massa tendem a diminuir. Quanto menor a bolha, maior é este efeito, levando a uma grande queda dos coeficientes durante a formação.

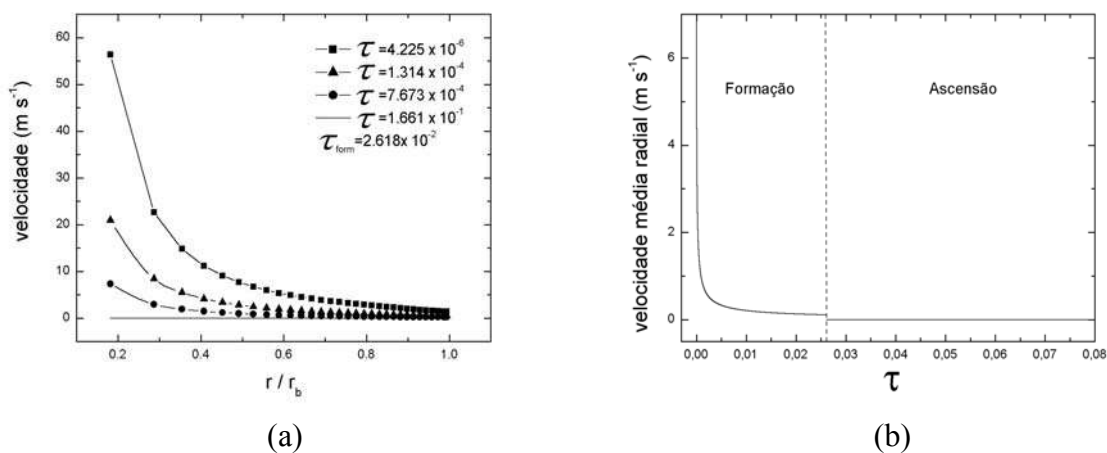


Figura 4.3. Perfil radial de velocidade para o caso 2 (a) e evolução temporal da velocidade média radial (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000).

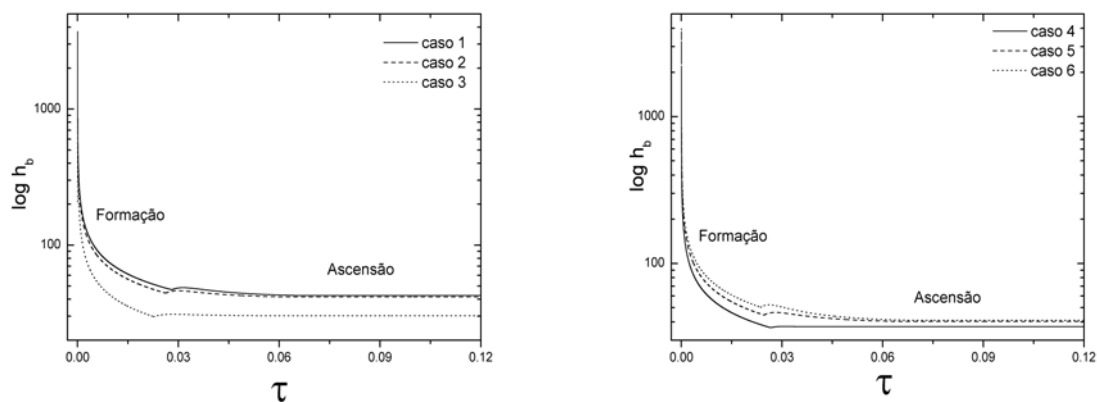


Figura 4.4 Evolução temporal de h_b para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000).

Após o desprendimento, a velocidade radial varia somente devido a variações do volume da bolha, ocasionada por variações em sua temperatura ou massa. A Figura 4.6 mostra a evolução temporal dos raios da bolha para os casos 1 a 6. Nos casos 1 a 3, a temperatura de injeção permanece constante e a temperatura de líquido varia. Observa-se que nos casos 1 e 2 houve uma contração da bolha nos instantes iniciais da etapa de ascensão e que para o caso 3, ao invés da contração, houve uma leve expansão no volume da bolha.

A contração do volume ocorre nos casos 1 e 2 devido a um aumento da densidade pela queda da temperatura média na bolha, o qual não é mais compensada pela injeção de ar, nestes casos a entrada de massa devido à vaporização não compensa o efeito da redução da temperatura. Curiosamente para o caso 3, ao invés da contração da bolha é observada uma leve expansão. Isto se deve ao alto valor da temperatura da fase líquida, que está acima da temperatura do estado pseudo-estacionário deste sistema, que além de promover uma menor contração promove também uma alta taxa de vaporização, que compensa a queda de temperatura da bolha aumentando o tamanho da mesma. É importante observar que a tendência geral é que o aumento da temperatura da fase líquida causa o aumento do raio ao final da etapa de formação.

Para os casos 4 a 6, nos quais a temperatura do líquido permanece constante, observa-se que quanto maior a temperatura de injeção de gás maior será o volume da bolha ao final da formação. Isto se deve, obviamente, aos maiores volumes de ar injetado para o interior da bolha, pois as simulações foram feitas a vazão mássica constante no orifício. Observa-se ainda que, para os casos 5 e 6, houve contração do raio ao longo da ascensão e que para o caso 4 ocorreu uma leve expansão. A contração ocorre devido a um aumento na densidade ocasionada pela redução considerável na temperatura da bolha: no caso 5, de 600 K para 340 K e no caso 6, de 840 K para 340 K. No caso 4, a temperatura de injeção não está muito acima da temperatura da fase líquida o que faz com que a redução da temperatura não seja tão acentuada quanto nos casos 5 e 6. Assim, a contração que deveria ocorrer devido ao aumento da densidade é compensada pela entrada de água na bolha devido à vaporização, acarretando em uma leve expansão da mesma.

Nos casos 1 a 6 a contração ou expansão do raio ocorre até que os fenômenos de transferência de calor e massa cessem, quando, então, o raio permanece constante, já que o modelo despreza a variação da pressão hidrostática.

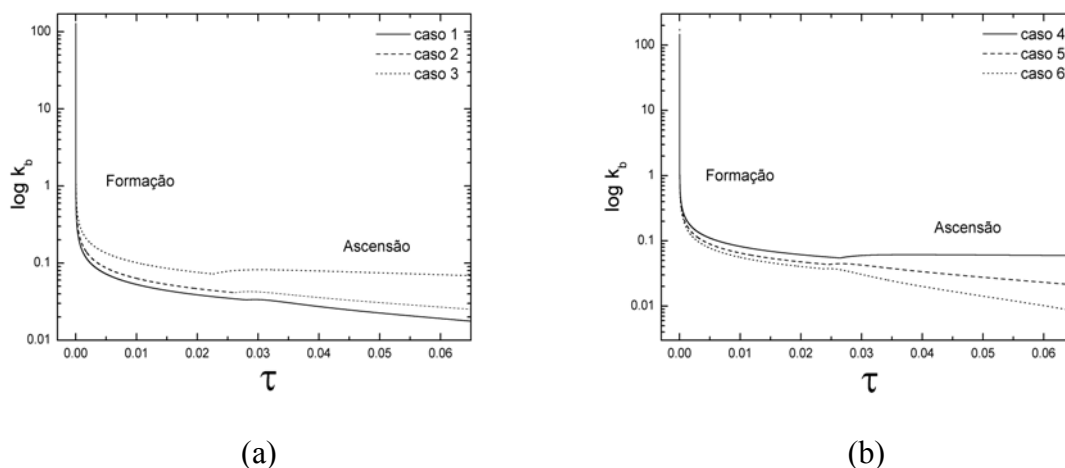


Figura 4.5. Evolução temporal de k_b para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000)

Para os casos estudados, observa-se que os coeficientes de transferência de calor praticamente não variaram na etapa de ascensão, conforme pode ser observado nos valores dos coeficientes de variação na Tab. 4.3. O coeficiente de variação é uma maneira de se expressar a variabilidade dos dados tirando a influência da ordem de grandeza dos mesmos, sendo definido como o desvio padrão dividido pela média. A análise estatística foi feita para, para um conjunto de 12.000 pontos por caso (1 a 6). Em todos os casos, observa-se que a dispersão dos valores dos coeficientes de transferência de calor em torno da média na ascensão não ultrapassou 11%. Em contrapartida, conforme pode ser observado na Tab. 4.4, o coeficiente de transferência de massa apresentou variações perceptíveis ao longo da etapa de ascensão, na faixa de 3-77%, sendo que o maior coeficiente de variação ocorre para o caso 6.

Tabela 4.3- Valores para os coeficientes de transferência de calor

Casos	Máximo h_b (W m ⁻² K ⁻¹)		Mínimo h_b (W m ⁻² K ⁻¹)		Média h_b (W m ⁻² K ⁻¹)		Desvio-Padrão		Coef. Var.(%)	
	Asc	Form	Asc	Form	Asc	Form	Asc	Form	Asc	Form
1	48,76	3720	42,72	47,10	44,93	81,31	2,32	816,7	5,17	1004
2	46,26	3530	41,74	44,50	43,39	76,62	1,74	781,2	4,00	1020
3	31,08	3237	29,87	29,88	30,51	53,47	0,30	720,8	0,98	1348
4	37,34	2027	36,60	36,62	37,21	61,94	0,11	508,5	0,30	820,8
5	46,44	3731	40,36	44,62	42,58	76,86	2,41	814,2	5,65	1059
6	52,34	3997	41,04	50,41	44,86	86,52	4,49	864,9	10,01	1000

Tabela 4.4-Valores para os coeficientes de transferência de massa

Casos	Máximo k_b ($m s^{-1}$)		Mínimo k_b ($m s^{-1}$)		Média k_b ($m s^{-1}$)		Desvio-Padrão		Coef. Var.(%)	
	Asc	Form	Asc	Form	Asc	Form	Asc	Form	Asc	Form
1	0,0338	116,44	0,0160	0,0335	0,0238	0,0605	0,0069	3,468	29,0	5735
2	0,0429	128,07	0,0241	0,0415	0,0329	0,0749	0,0071	3,768	21,6	5030
3	0,0823	148,74	0,0640	0,0726	0,0743	0,1220	0,0062	4,233	8,30	3454
4	0,0616	133,41	0,0549	0,0549	0,0606	0,0951	0,0021	3,431	3,40	3608
5	0,0449	146,06	0,0198	0,0436	0,0309	0,0796	0,0104	4,362	33,7	5479
6	0,0378	174,77	0,0070	0,0376	0,0182	0,0707	0,0141	5,297	77,1	7489

Para os casos analisados neste trabalho, a contração e a expansão durante a etapa de ascensão podem ser consideradas pequenas quando comparadas aos efeitos de variação do volume ao longo da etapa de formação. Como os valores de velocidades estão muito próximos de zero, como ilustrado para o caso 2 na Fig. 4.3(b), no qual a velocidade média radial foi calculada por meio da integral no volume da velocidade radial dividida pelo volume da bolha, pode-se concluir que o transporte de calor e massa interno à bolha na etapa de ascensão é predominantemente difusivo para todos os casos e, como o raio quase não varia, o comprimento característico da difusão também não. Além disso, as variações das propriedades físicas pelas variações de temperatura e concentração são menores nesta etapa. A conjunção destes fatores leva, no presente caso, a valores dos coeficientes de transferência de calor praticamente constantes na etapa de ascensão e a variações bem menos intensas nos coeficientes de transferência de massa.

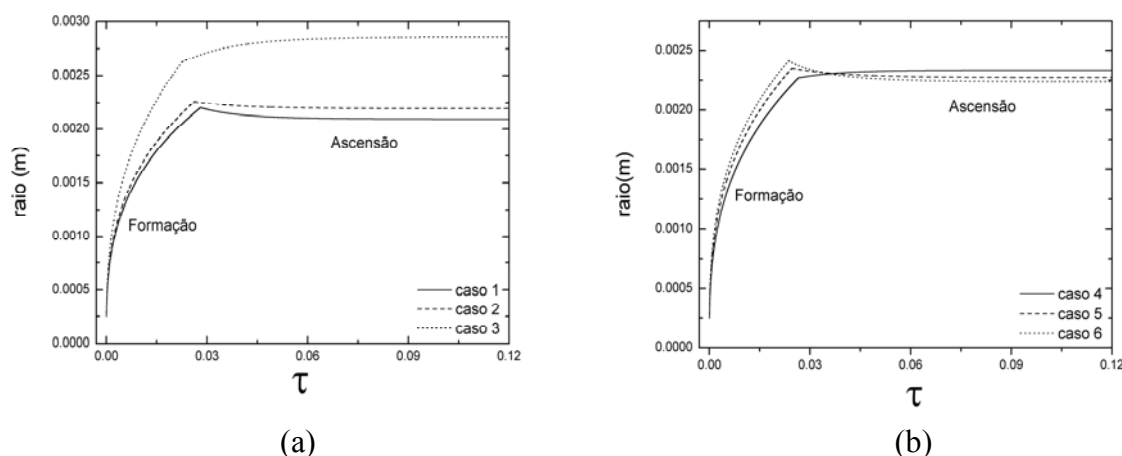


Figura 4.6. Evolução temporal de r_b para os casos 1 a 3 (a) e 4 a 6 (b) para o modelo de CAMPOS e LAGE (2000).

Na Tabela 4.5 estão apresentados os valores dos erros máximo e médio, obtidos quando comparados os resultados do modelo simplificado, com os resultados obtidos pelo modelo

detalhado, para as etapas de formação e ascensão de todos os casos analisados. No caso da fração mássica de água na bolha, os erros foram avaliados por meio do grau de saturação e no caso da temperatura média por meio da temperatura adimensional. O erro máximo foi obtido por meio da identificação do maior desvio absoluto e o erro médio foi obtido pela média aritmética dos desvios absolutos ao longo do tempo, em geral 15000 pontos foram utilizados para proceder a análise estatística, tanto para a temperatura adimensional quanto para o grau de saturação.

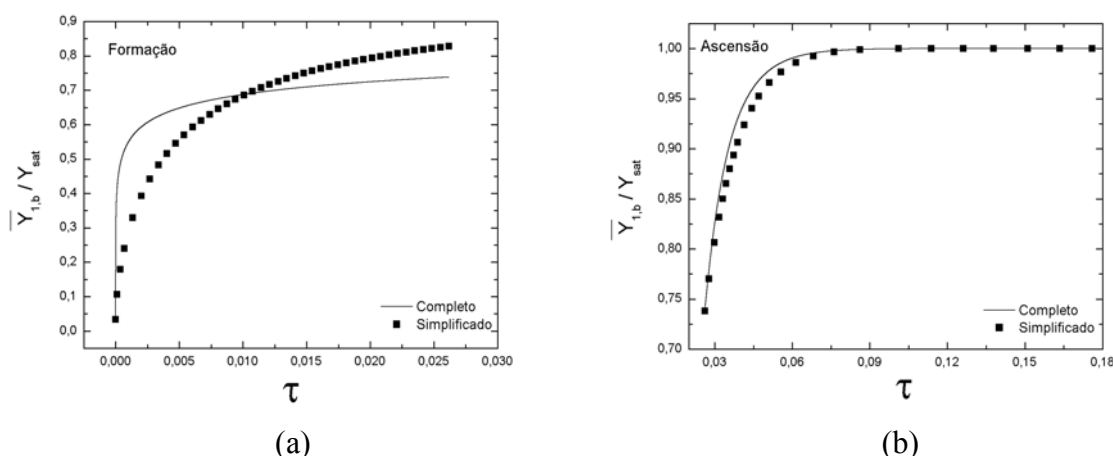


Figura 4.7. Comparação entre o comportamento do grau de saturação para o modelo simplificado e o modelo de CAMPOS e LAGE (2000) para as etapas de formação (a) e ascensão (b).

Nas Figuras 4.7, 4.8 e 4.9 estão ilustrados os comportamentos das variáveis do processo, para os modelos detalhado e simplificado, nas etapas de formação e ascensão. Os resultados apresentados nestas figuras foram obtidos para o caso 2.

Tabela 4.5- Erros entre os valores preditos pelo modelo simplificado e o modelo completo para $Y_{1,b}$ e T_b

Casos	Erro $Y_{1,b}$				Erro T_b			
	% Erro Máximo		% Erro Médio		% Erro Máximo		% Erro Médio	
	Asc	Form	Asc	Form	Asc	Form	Asc	Form
1	2,980	73,32	0,6760	59,64	0,7270	69,13	0,1530	54,97
2	2,441	31,00	0,5390	16,47	0,5810	34,38	0,1210	17,22
3	0,779	15,56	0,1500	8,489	0,2750	38,18	0,0540	18,26
4	0,286	20,95	0,0309	11,66	0,0838	45,22	0,0161	23,04
5	3,367	29,91	0,7450	15,60	0,7740	36,19	0,1620	17,11
6	5,731	40,72	1,4140	19,36	1,2160	38,32	0,2460	16,36

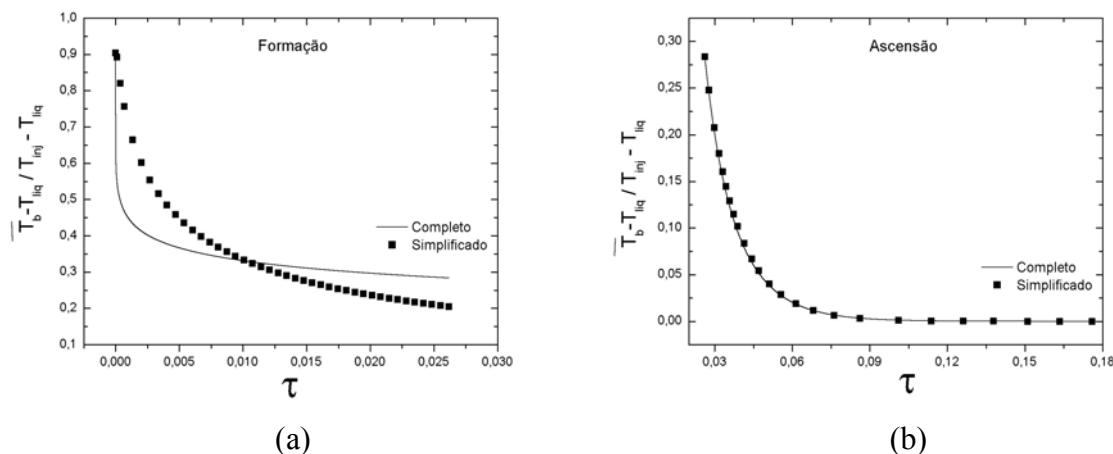


Figura 4.8. Comparação entre o comportamento da temperatura adimensional para o modelo simplificado e o modelo de CAMPOS e LAGE (2000) para as etapas de formação (a) e ascensão (b).

Para a etapa de formação, com exceção do raio da bolha, a utilização de valores médios constantes para os coeficientes de transferência de calor e massa levou a predição inadequada do comportamento transiente das variáveis quando da utilização do modelo simplificado. O caso 3 foi o que apresentou melhor desempenho na predição do comportamento da fração mássica apresentando erro médio inferior a 9%. Entretanto, para este mesmo caso, o erro de predição da temperatura média da bolha foi maior do que 18%. A melhor predição da temperatura foi obtida com o caso 6, com erro médio da ordem de 16%.

No que tange ao comportamento do raio, é possível observar através da Fig. 4.9, que o modelo simplificado mostrou boa concordância com os resultados apresentados pelo modelo completo ao longo da etapa de formação, para o caso 2. O mesmo comportamento foi observado para todos os outros casos. Isto se deve ao fato de que a queda de temperatura da bolha e a vaporização de água são efeitos pequenos em relação à injeção de gás durante a etapa de formação das bolhas. Os desvios apresentados, em relação ao modelo completo, para a temperatura média na bolha e para a fração de água na bolha na etapa de formação, podem ser justificados pela grande variação de ambos os coeficientes nesta etapa (k_b e h_b variam em 4 e 2 ordens de grandeza, respectivamente).

Para a etapa de ascensão, a utilização de valores médios para os coeficientes no modelo simplificado apresentou boa concordância com o comportamento predito para as variáveis utilizando o modelo detalhado. Isto se deve ao fato de que os coeficientes variam pouco na etapa de ascensão. Mesmo para o caso 6, em que houve um desvio significativo no valor do coeficiente de transferência de massa, o erro médio para o grau de saturação foi menor do que 2%, enquanto que o erro médio na temperatura adimensional foi inferior a 1%. Desta forma,

conclui-se que, com valores médios adequados para os coeficientes de transporte, é possível prever o comportamento do modelo completo apresentado por CAMPOS e LAGE (2000) utilizando um modelo simplificado a parâmetros concentrados para a etapa de ascensão da bolha. Deve-se ressaltar que o modelo de CAMPOS e LAGE (2000) já foi devidamente validado contra dados experimentais.

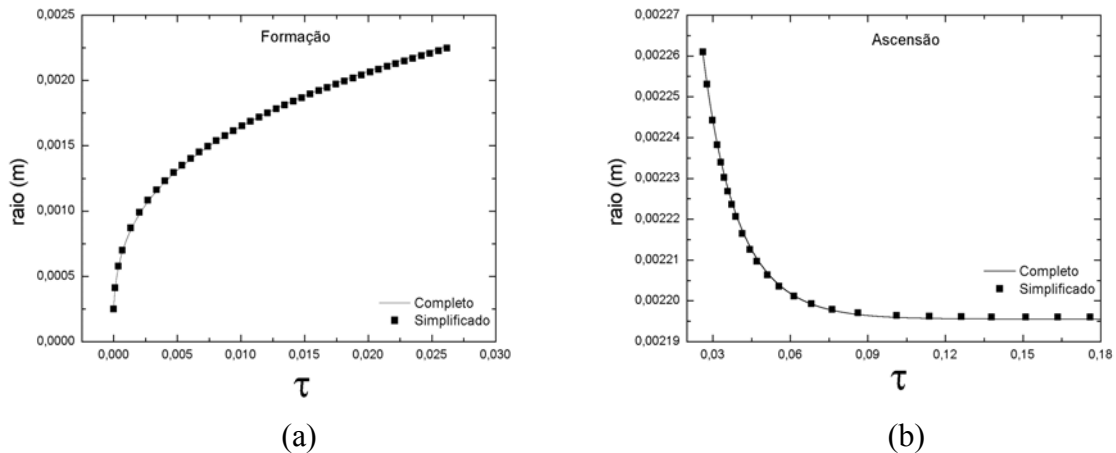


Figura 4.9. Comparação entre o comportamento de r_b para o modelo simplificado e o modelo de CAMPOS E LAGE (2000) para as etapas de formação (a) e ascensão (b).

4.3- Simulação Fluidodinâmica: Comparação com Dados Experimentais

4.3.1- Introdução

Nesta seção serão detalhados os resultados da simulação computacional utilizada na investigação da fluidodinâmica e da transferência de calor e massa entre as fases no processo de evaporação por contato direto. Os resultados foram comparados com o comportamento qualitativo observado por RIBEIRO JR. e LAGE (2004b) para o comportamento termo-mássico da coluna. Antes da discussão dos resultados obtidos, detalhes experimentais e da implementação numérica serão abordados.

4.3.2- Dados Experimentais

A simulação fluidodinâmica do processo de evaporação por contato direto em coluna de borbulhamento, não-isotérmica, operando em regime homogêneo, foi realizada de acordo com as condições experimentais de RIBEIRO JR. e LAGE (2004b) os quais em seu trabalho borbulharam gás superaquecido em uma coluna de líquido (água). Para tal processo utilizaram

uma coluna de borbulhamento cilíndrica de vidro com 7,3 cm de diâmetro e 0,70 m de altura. Os experimentos foram conduzidos com 3 valores distintos de velocidade superficial de gás e três tipos diferentes de distribuidores. Com os resultados foram elaborados estudos bastante completos sobre a influência do tipo de distribuidor e da velocidade superficial de gás sobre os parâmetros operacionais do evaporador (retenção gasosa, temperatura do gás no distribuidor, taxa de evaporação, distribuição de tamanho de bolhas e temperatura da fase líquida).

A Tabela 4.6 mostra as condições operacionais selecionadas, a partir do trabalho experimental de RIBEIRO JR. e LAGE (2004b), para realização da simulação CFD e comparação com dados experimentais. Para efeito de comparação somente foram utilizados os dados experimentais obtidos para o distribuidor tipo prato perfurado de aço inoxidável, constituído de 89 furos com 0,50 mm de diâmetro cada.

É importante ressaltar que os dados de operação foram determinados para o estado quase-estacionário do evaporador por contato direto, ou seja, o objetivo da simulação CFD, a princípio, foi o de simular o estado quase-estacionário do equipamento.

Tabela 4.6- Condições experimentais para a simulação CFD

Dados de Entrada da simulação	Valores
Velocidade de injeção a 340 K (m s^{-1})	2,24
Vazão lida no rotâmetro (L/h)	240
Tempo de operação do evaporador (min)	570
Temperatura de injeção- $T_{inj}(\text{K})$	503,4
Temperatura do líquido na coluna no estado quase-estacionário - $T_{liq}(\text{K})$	339
Vazão mássica de injeção na coluna - $M_{inj}(\text{kg s}^{-1})$	$0,9870 \times 10^{-4}$
Pressão- P (Pa)	$1,02730 \times 10^5$
Massa inicial de Líquido na coluna- $M_o(\text{kg})$	1,06
Calor cedido pelo distribuidor- $Q_d (\text{J s}^{-1})$	23.75

O comportamento de colunas de borbulhamento foi observado por RODRIGUES (2005), o qual constatou que devido às diferentes escalas de tempo da fase gasosa (da ordem de segundos) e da fase líquida (da ordem de horas), as simulações CFD de colunas de borbulhamento podem ser usadas para determinar o comportamento “instantâneo” do processo de borbulhamento.

4.3.3- Dados de Propriedades Físicas das Substâncias

Os valores e correlações das propriedades físicas utilizadas na simulação fluidodinâmica estão detalhados no Apêndice A, semelhantemente ao caso do modelo Lagrangeano. Quando pertinente, as correlações e equações para o cálculo das propriedades físicas foram implementadas no CFX 10.0 da ANSYS utilizando o *CFX Expression Language*.

4.3.4- Implementação Numérica e Malhas de Discretização

Para realizar a simulação para comparação com os dados experimentais foram adotadas as características geométricas da unidade experimental utilizada no trabalho de RIBEBIRO JR., e LAGE (2004b) a qual consiste de um cilindro com 0,73 cm de diâmetro e altura determinada pela “altura de borbulhamento” obtida a partir dos dados experimentais.

Tabela 4.7- Características da geometria implementada na simulação fluidodinâmica

Dados da Geometria	Valores (cm)
Altura da Coluna (H_c)	28,025
Diâmetro da Coluna (D_c)	0,73
Altura da zona de Formação (Z_f)	0,488

Com as dimensões geométricas devidamente estabelecidas partiu-se para a definição da malha para proceder com os cálculos computacionais no domínio geométrico. No presente trabalho, optou-se por trabalhar com malha estruturada com elementos hexaédricos para garantir um maior controle sobre o tamanho dos volumes utilizados. Cinqüenta mil seiscientos e noventa e quatro foi o número de volumes utilizados e cinqüenta e dois mil setecentos e noventa e quatro o número de nós. De forma a evitar o refinamento excessivo na região do distribuidor de gás devido à diferença de escala entre os furos do distribuidor e o comprimento global da coluna, a condição de contorno de entrada da fase gasosa pela parte inferior da coluna foi aplicada através de uma área correspondente a 76 % da área total disponível (área dos furos), como pode ser visto na Fig.4.10, maiores detalhes sobre a malha podem ser visualizados na Fig. 4.11. O topo da coluna foi tratado de forma a permitir tanto a entrada de gás quanto a saída de gás ou líquido. Entretanto, para evitar a saída da fase líquida, foi incluída uma pequena altura de gás acima do topo da coluna de líquido no instante inicial da simulação.

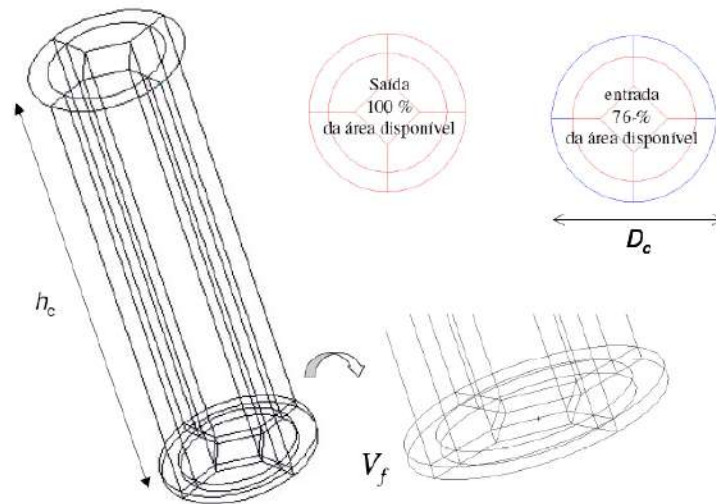


Figura 4.10- Geometria utilizada para as simulações.

O experimento selecionado (Tab. 4.6) para o processo de borbulhamento foi simulado usando as equações governantes apresentadas no Capítulo 3. Tendo sido selecionada a condição experimental, foram obtidas as correlações necessárias para a realização da simulação transiente CFD (Apêndice B). Estas correlações tiveram o objetivo de avaliar o comportamento de alguns parâmetros frente à variações na temperatura da fase líquida, conforme detalhado anteriormente na Seção 3.6. As correlações obtidas para os parâmetros podem ser divididas nas seguintes categorias: *parâmetros para a injeção de gás* (temperatura da fase gasosa ao final da formação, fração de água na fase gasosa ao final da formação e frequência de formação de bolhas); *condições para os termos fonte na etapa de formação* (massa evaporada por bolha na formação, calor cedido por bolha na formação) e *troca de calor e massa na ascensão* (coeficiente de transferência de calor para a fase gasosa, coeficiente de transferência de massa para a fase gasosa e raio da bolha ao final da formação).

A simulação foi transiente tridimensional com integração usando o método BDF de segunda ordem e passos de tempo de 0,0005s. Cada passo de integração foi considerado convergido quando os resíduos médios quadráticos de todas as equações de conservação foram inferiores a 10^{-5} , o que foi obtido com menos de 10 iterações para todos os resultados aqui apresentados.

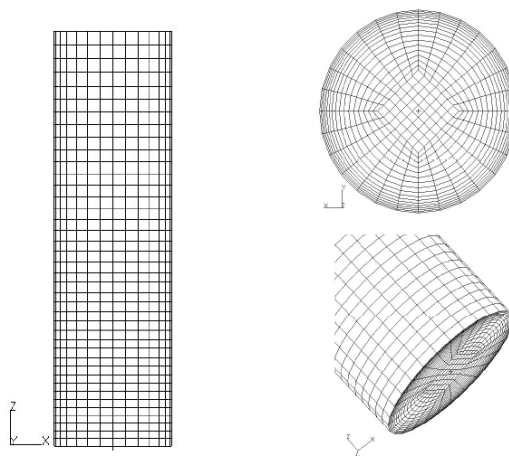


Figura 4.11- Detalhes da malha: discretização do plano xz ($y=0$) e xy ($z=0$).

4.3.5-Resultados e Discussão

A Figura 4.12 mostra o comportamento da média volumétrica da retenção gasosa na coluna ao longo do tempo. Do instante inicial aos 14,5s de simulação é possível observar o aumento contínuo da retenção gasosa média na coluna, indicando que tempos maiores de simulação são necessários para observar o comportamento fluidodinâmico adequado, porque, afinal de contas, a retenção gasosa não pode aumentar indefinidamente. Espera-se que a operação em estado quase-estacionário da coluna seja alcançada, no qual a retenção apresenta valor aproximadamente constante. Tal característica é relatada por RIBEIRO JR. e LAGE (2004b) em seu trabalho experimental.

Aos 14,5s a retenção gasosa alcançou o valor de 16,8%. Ainda que sejam necessários maiores tempos de simulação para uma análise mais apurada da fluidodinâmica, este alto valor para a retenção gasosa é um forte indicativo de que a modelagem da força de arrasto precisa ser revista, pois os valores para a retenção gasosa medidos por RIBEIRO JR. e LAGE (2004b) oscilam entre 7 e 11% com valor médio de 9%. No presente trabalho, o coeficiente de arrasto foi corrigido para considerar o efeito da população de acordo com as hipóteses de RIBEIRO JR. e LAGE (2004c), o qual utilizaram o modelo para a força de arrasto proposto por KARAMANEV (1994). Entretanto, o fator de correção proposto mostrou-se excessivamente alto, havendo um superdimensionamento dos efeitos provocados pela população (altos valores de coeficiente de arrasto). É preciso, desta forma, investigar a utilização de outros valores para o parâmetro de correção ou de outros modelos para determinar o coeficiente de arrasto, uma vez que a simulação CFD não utilizou a correlação de KARAMANEV (1994). Nesta discussão, há ainda que se considerar o fato de que a coluna

não está completamente “preenchida” pela fase líquida, ou seja, ainda há uma fração não desprezível de gás “retida” no topo da coluna, desta forma, ao se aplicar a média volumétrica ao longo de todo o domínio de cálculo, esta fração considerável de gás também contribui para o alto valor da retenção gasosa. Entretanto, desprezando-se o topo da coluna (pode-se partir do princípio que locais que possuam retenção gasosa acima de 80% representam ainda gás com a presença de líquido entranhado), a retenção na coluna assume o valor de 12,73 % que ainda está fora da faixa do erro experimental, mas é uma predição bem mais razoável.

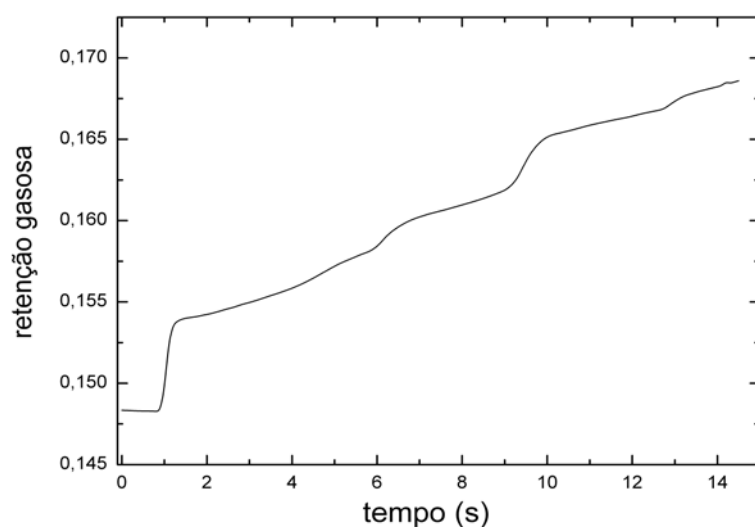


Figura 4.12- Comportamento temporal da retenção gasosa.

A Figura 4.13 ilustra o comportamento transiente da retenção gasosa no plano xz ($y=0$) na faixa de valores entre 0 e 20% entre os instantes 2 a 12 s de simulação. A Fig. 4.14 ilustra o comportamento transiente do campo de velocidade superficial da fase líquida no plano yz ($x=0$) e o comportamento transiente da isosuperfície para os valores de retenção gasosa iguais a 20%. É possível observar, nos instantes iniciais, que a pluma gasosa ascende no eixo central da coluna, sem praticamente nenhuma oscilação, arrastando a fase líquida. Ao chegar ao topo a tendência é de que a fase gasosa deixe a coluna e a fase líquida retorne para o fundo, este movimento tende a criar zonas de circulação as quais podem ser observadas na Fig. 4.14(a). As zonas de circulação alcançam tal magnitude que provocam oscilações na pluma, a qual passa a não mais se concentrar no eixo central da coluna. A Fig. 4.14(b) mostra claramente que a oscilação da pluma ocorre devido à presença de “grandes” zonas de circulação assimétricas na fase líquida.

A Figura 4.15, o qual mostra o comportamento da velocidade superficial da fase líquida no plano xy ($z=14\text{cm}$), permite observar o comportamento caótico da hidrodinâmica da coluna

de borbulhamento. Observa-se que não existe nenhum padrão temporal distinguível para o escoamento da fase líquida na coluna.

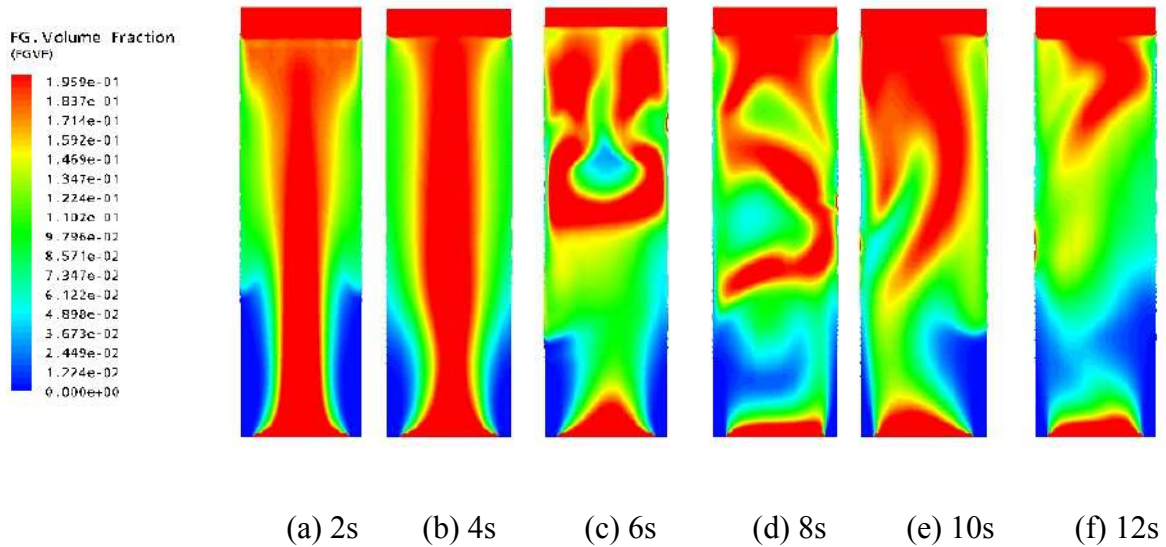


Figura 4.13- Representação do campo da retenção gasosa no plano xz (y=0) entre os valores 0 e 20%.

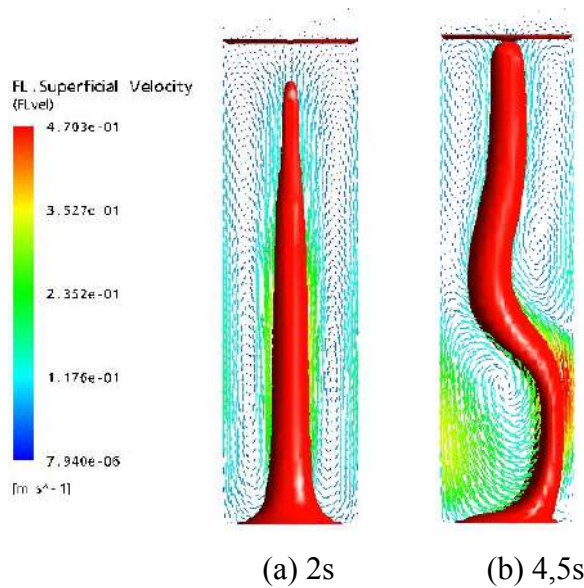


Figura 4.14- Representação do campo de velocidade da fase líquida no plano yz (x=0) e isosuperfície para a retenção gasosa igual a 20%.

A Figura 4.16 mostra o comportamento transiente da fração mássica de água na fase gasosa sobre uma isosuperfície para a retenção gasosa igual a 20%. Os resultados indicam que a fase dispersa alcança a saturação poucos centímetros acima da base da coluna, fato este, que está de pleno acordo com os resultados experimentais obtidos por RIBEIRO JR. e LAGE

(2005a), que constataram que a fase vapor deixa a coluna saturada de água e que a saturação se dá poucos centímetros acima do distribuidor. É importante, ressaltar, também, que aos 2s de simulação o perfil temporal da fração mássica de água na fase gasosa encontra-se plenamente estabelecido, ou seja, não é observado nenhum tipo de mudança qualitativa no comportamento da fração mássica de água na fase gasosa deste tempo em diante.

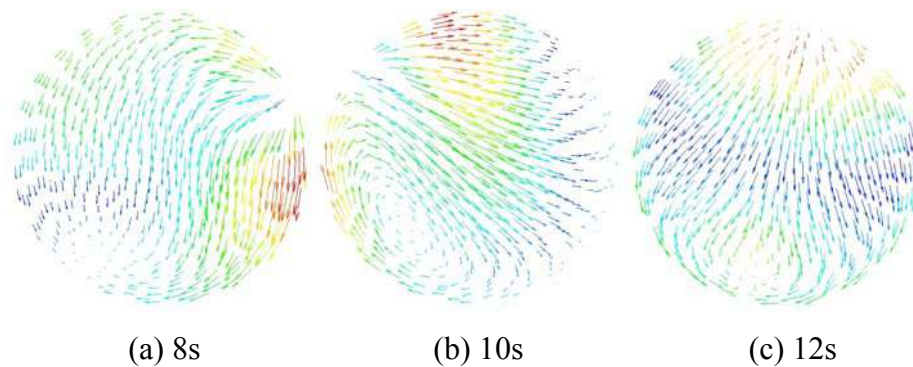


Figura 4.15- Representação do campo de velocidade superficial da fase líquida no plano xy ($z=14\text{cm}$).

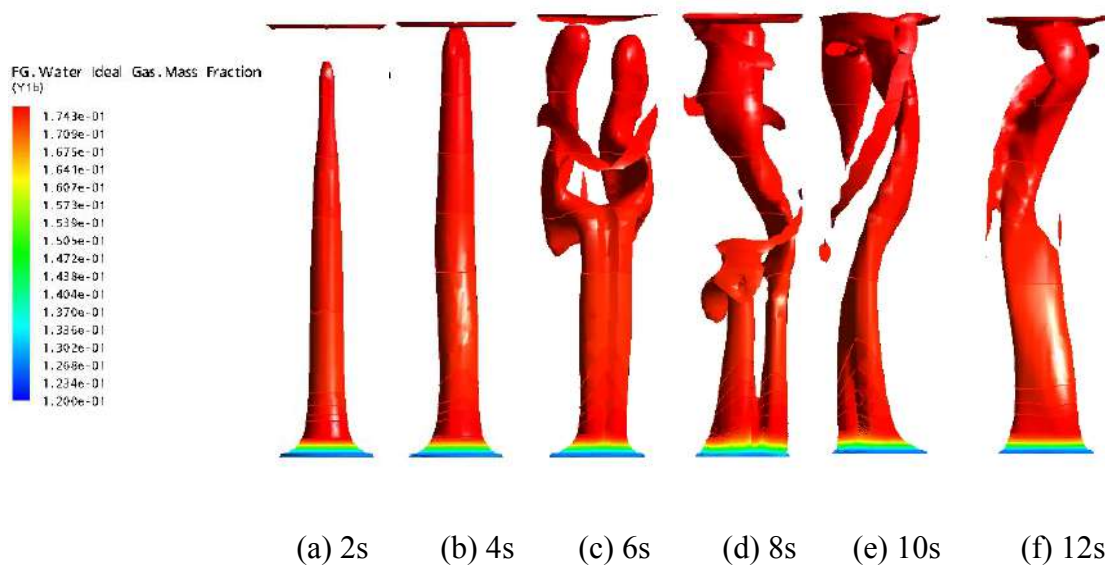


Figura 4.16- Representação do perfil de fração mássica de água na fase gasosa sobre uma isosuperfície para a retenção gasosa igual a 20%.

A Figura 4.17 e 4.18 mostram respectivamente o comportamento transiente da temperatura da fase gasosa e da fase líquida sobre uma isosuperfície para a retenção gasosa igual a 20% e sobre um isosuperfície para fração de fase líquida igual a 90%. Os resultados indicam que a temperatura da fase dispersa, semelhantemente ao que ocorre com a fração mássica, alcança a temperatura de equilíbrio poucos centímetros acima da base da coluna. É

importante ressaltar também que, aos 2s de simulação, o perfil temporal da temperatura da fase gasosa também encontra-se plenamente estabelecido, semelhantemente ao que ocorre a perfil da fração mássica. No que tange ao comportamento da temperatura da fase contínua a Fig. 4.18 permite observar que a mesma permanece constante ao longo de todo o tempo de simulação indicando que talvez seja mais interessante trabalhar com valores constantes tanto para os parâmetros utilizados para o acoplamento Euleriano-Lagrangeano quanto para as propriedades físicas da fase contínua.

O comportamento da temperatura e da fração mássica de água na fase gasosa demonstram que a inclusão da etapa de formação (através de termos fontes de calor e massa na fase líquida) e dos termos de troca de calor e massa entre as fases na etapa de ascensão (através da definição e uso dos coeficientes de transferência de calor e massa) é uma boa alternativa para a implementação do comportamento termo-mássico de um processo de evaporação por contato direto na simulação CFD da coluna de borbulhamento.

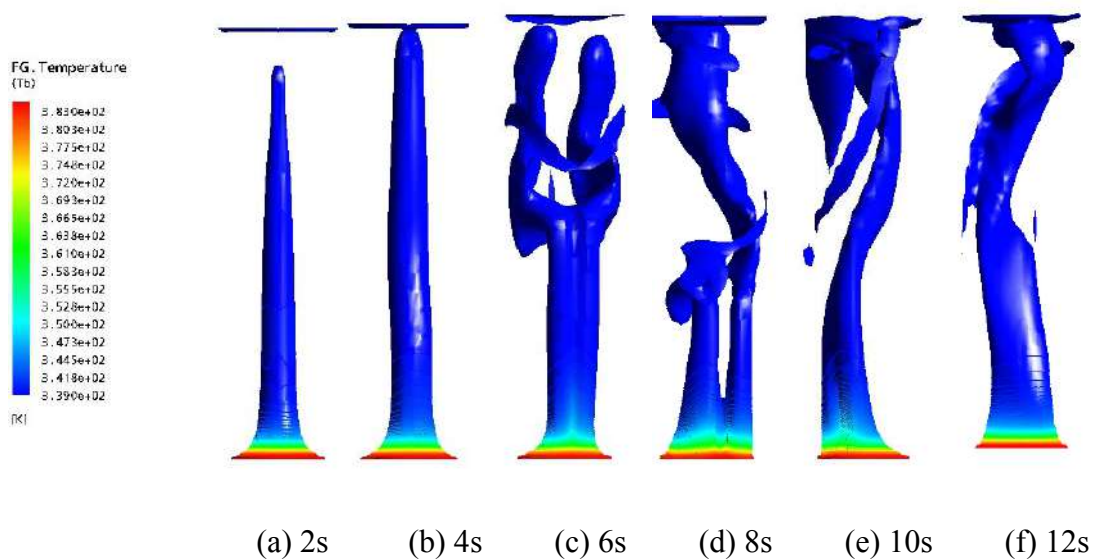


Figura 4.17- Representação do perfil de temperatura da fase gasosa sobre uma isosuperfície para a retenção gasosa igual a 20%.



(a) 2s (b) 4s (c) 6s (d) 8s (e) 10s (f) 12s

Figura 4.18- Representação do perfil de temperatura da fase líquida sobre uma isosuperfície para a fração de líquido na coluna igual a 90%.

CAPÍTULO

5

Conclusões e Sugestões

O projeto e o aumento de escala do evaporador por contato direto ainda é uma tarefa árdua, sendo baseada na utilização de métodos e correlações empíricas. Isto é devido à complexidade dos fenômenos que ocorrem no equipamento. Desta forma, surge um horizonte promissor para a utilização da simulação CFD para o projeto e aumento de escala de colunas de borbulhamento. No presente trabalho, fez-se uma primeira tentativa de simulação CFD do evaporador por contato direto com inclusão da etapa de formação de bolhas, o qual é de extrema importância para os fenômenos de transferência de calor e massa. A simulação foi implementada no software CFX 10.0 da ANSYS o qual não possui modelos que consideram a descontinuidade do fluxo de calor na interface para sistemas multifásicos e multicomponentes. Portanto, foi necessário lançar mão de um artifício para que o programa computacional pudesse reconhecer os fenômenos de transferência de calor e massa que ocorrem na interface.

De acordo com a comparação dos resultados dos modelos simplificado e detalhado verificou-se que a utilização de coeficientes médios de transferência de calor e massa para a etapa de formação é inadequada, visto que os mesmos possuem grandes variações nesta etapa associadas ao alto grau de variabilidade da contribuição convectiva. Contudo, para a etapa de ascensão, visto que o mecanismo de transporte de calor e massa é predominantemente difusivo, o raio varia pouco e as propriedades físicas do sistema também, a utilização de coeficientes médios promoveu boa concordância entre os resultados dos modelos.

Tendo-se em mãos os valores dos parâmetros fornecidos pelo modelo Lagrangeano foi possível proceder à simulação CFD, utilizando a estratégia o qual foi chamada de acoplamento Euleriano-Lagrangeano. Foi necessário usar correlações para todos os parâmetros de acoplamento em relação a variações da temperatura da fase líquida. Na base da coluna foi determinado um subdomínio denominado “zona de formação” para incluir os efeitos da etapa de formação sobre as fases líquida e gasosa.

Os resultados obtidos para a retenção gasosa na simulação indicaram que tempos maiores do que 14,5s (aproximadamente um mês e meio de tempo de simulação) são necessários para que alguma conclusão mais precisa possa ser feita a respeito do comportamento hidrodinâmico da coluna. Entretanto, foi possível observar que os valores da retenção gasosa estão altos e que tal fato pode estar associado ao modelo utilizado para o cálculo da força de arrasto, mais especificamente o fator de correção do efeito de população. Assim, fica a sugestão de que, nos próximos trabalhos, este ponto seja melhor avaliado.

No que tange ao comportamento termo-mássico, foi possível observar que os resultados da simulação apresentaram boa concordância qualitativa com os resultados experimentais, ou

seja, tanto o equilíbrio térmico quanto o equilíbrio mássico foram atingidos a pequenas distâncias (poucos centímetros acima) da base da coluna, o que foi observado por RIBEIRO JR. e LAGE (2005a) em seus experimentos.

Fica como sugestão para os próximos trabalhos a simulação em outras condições experimentais (velocidade de injeção do gás, temperatura do líquido, temperatura de injeção do gás, altura de borbulhamento e etc.) a fim de validar de forma mais abrangente a simulação. Além disso, é importante quantificar os efeitos da inclusão da etapa de formação, para tanto é necessário realizar simulações que não incluam esta etapa. Após devidamente validada, a modelagem desenvolvida para a simulação CFD pode ser utilizada para o estudo do aumento de escala de evaporadores por contato direto. Fica ainda a questão da necessidade de se utilizar ou não correlações para os parâmetros obtidos pelo modelo Lagrangeano com variação da temperatura da fase líquida. Como pouca ou nenhuma variação na temperatura da fase líquida foi observada na simulação CFD, a utilização de tais correlações talvez seja desnecessária. Isto tornaria a simulação bem mais “leve”, pois além de se utilizar valores constantes para os parâmetros do acoplamento, as correlações para os cálculos das propriedades físicas que variam com a temperatura da fase líquida seriam também eliminadas.

Referências Bibliográficas

- BERTODANO, M. A. L., (1998). “Two fluid model for two-phase turbulent jets”. Nucl. Eng. Des., vol. 179, pp. 65–74.
- BHAGADE, S.S., GIRADKAR, J.R., MENE, P.S., (1973). “Studies on heat transfer during bubble formation”. Indian Journal of Technology, vol. 11, pp. 281–283.
- BORCHERS, O., BUSH, C., SOKOLICHIN, A., EIGENNERGER, G. (1999), “Applicability of standart k- ϵ turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns. Part II. Comparison of detailed experiments and flow simulations”, Chemical Engineering Science, vol. 54, pp. 5927-5935.
- BURDICK, E. M., ANDERSON, C. O., DUNCAN, W. E., G. (1999), “Application of submerged combustion to processing of citrus waste products”, Chemical Engineering Science, vol. 45, n. 9, pp. 539-544.
- CALDERBANK, P.H., MOO-YOUNG, M.B., (1961). “The continuous phase heat and mass-transfer properties of dispersions”. Chemical Engineering Science, vol. 16, pp. 39–54.
- CAMPOS, F.B., 1997. “Problema de contorno livre na transferência simultânea de calor e massa durante a formação e ascensão de bolhas superaquecidas”. Rio de Janeiro, COPPE/UFRJ, 166p. (Dissertação, Mestrado em Engenharia Química).
- CAMPOS, F.B., LAGE, P.L.C., (2000). “Heat and mass transfer modelling during the formation and ascension of superheated bubbles”. International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 43, pp. 2883–2894.
- CAMPOS, F.B., LAGE, P.L.C., (2001). “Modeling and simulation of direct contact evaporators”. Brazilian Journal of Chemical Engineering, vol. 18, pp. 277–286.
- DEEN, N.G., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. H. (2000). “Numerical simulation of the gas-liquid flow in a square cross-sectioned bubble column”. CIHSA 14th Internetal Congress of Chemica and Process Engineering. Prega, Republica Tcheca, Agosto, 2000.
- DEEN, N.G., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. H. (2001). “Large eddy simulation of gas-liquid flow in a square cross-sectioned bubble column” . Chemical Engineering Science, vol 56, pp. 6341-6349
- DECKWER, W.-D. e SCHUMPE, A., 1993. “Improved tools for bubble column reactor design and scale-up”, Chemical Engineering Science, v. 48, n. 5, pp. 889-911.
- DEVANATHAN, N., DUDUKOVIC, M. P., LAPIN A. LÜBERT, A., (1995). “Chaotic flow in bubble column reactors”. Chemical Engineering Science, vol. 50, pp. 2661–2667.
- FILLA, M., DAVIDSON, J. F., BATES, J. F. ECCLES, M. A (1976). “Gas phase controlled mass transfer from a bubble”. Chemical Engineering Science, vol.31, pp.359-367.
- GRASSMAN, P. E WYSS, E. (1962). “Bestimmung von Wärme – und Stoffübergangszahlen zwische Dampfblase und Flüssigkeit”. Chemie Ingenieur Technik, vol. 34, pp. 755-759.

- GRACE, J. R., WAIREGI, T., NGUYEN, T. H. (1976) . “Shapes and velocities os single drops an bubbles moving freely through immiscible liquids”, Trans IchemE, vol. 54, pp. 167-173.
- GESTRICH,W., ESENWEIN,H., KRAUSS,W.(1978), “Liquid-side mass transfer coefficient in bubble layers”. Int. Chemical Engineering, vol. 18, n. 1,pp.38-47
- HACKENBERG, C. M. (1965). “Transferência de calor em bolhas”, Rio de Janeiro, COPPE/UFRJ, 104p. (Dissertação, Mestrado em Engenharia Química).
- HOLMAN, J. P. (1992). *Heat Transfer*.Singapore: McGraw-Hill, 7th ed, 713p.
- IGUCHI, M., MORITA, Z., TOKUNAGA, H., TATEMACHI, H. (1992). “Heat transfer between bubbles and liquid during cold gas injection”. ISI International, vol. 37, pp. 865-872.
- KANTRACI , N., BORAK, F., ULGEN, K.O., “Bubble column reactor”, Process Biochemistry, vol. 40, n. 7, pp.2263-2283.
- KARAMANEV, D.G. (1994). “Rise of gas bubbles in quiescent liquids”. AIChE Lournal, vol.40, pp. 1418-1421.
- KOMAROV, S. V. E SANO, M. (1998). “Bubble behaviour and heat transfer in preheated gas injection into liquid bath”. ISIJ International, vol. 38, pp. 1045-1052.
- KUMAR, S. B., DEVANATHAN, N., MOSLEMIAN, D, DUDUKOVIC, M. P. (1994). “ Effect of scale on liquid recirculation in bubble columns”. Chemical Engeneering Science, vol. 49, pp. 5637-5652.
- LAGE, P. L. C. (1992). “Vaporização de gotas multicomponentes em campos convectivos e radiantes”. Rio de Janeiro, COPPE/UFRJ, 232p. (Tese, Doutorado em Engenharia Química)
- LAGE, P.L.C., RANGEL, R.H., (1992). “On the role of internal radiation absorption in single droplet vaporisation”. Paper Numer AIAA-95-0106, AIAA.
- MEWES,D. WIEMANN, D. (2003). “Two-phase flow with mass transfer in bubble columns”. Chemical Engineering Science, vol. 26, pp. 862-868.
- MUDDE, R.F., SIMONIN, O. (1999). “Two and three-dimensional simulations of bubble plume using a two-fluid model”. Chemical Engineering Science, vol. 54, pp. 5061-5069
- PATANKAR, S.V., (1980). “Numerical heat transfer and fluid flow”. McGraw-Hill, New York, pp. 90–92.
- PFLEGER,D., GOMES, S., GILBERT, N. (1999). “Hydrodynamic simulation of laboratory scale bubble columns fundamentals studies of Eulerian-Eulerian modelling approach”, Chemical Engineering Science, vol. 54, pp. 5091-5099.

- PETZOLD, L.R., (1989). “DASSL code, version 1989, L316”. Computing and Mathematics Research Division, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore.
- REID, R.C., PRAUNSNITZ, J.M., POLING, B.E., (1987). “The Properties of Gases and Liquids”, fourth ed. McGraw-Hill, New York, pp. 530–532, 587–588.
- RIBEIRO JR., C.P., LAGE, P.L.C., BORGES, C.P.,(2004a). A combined gasstripping vapour permeation process for aroma recovery. *Journal of Membrane Science*, vol 238, pp. 9–19.
- RIBEIRO JR., C.P., LAGE, P.L.C., (2004b). Direct-contact evaporation in the homogeneous and heterogeneous bubbling regimes. Part I: experimental analysis”. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 47, pp. 3825–3840.
- RIBEIRO JR., C.P., LAGE, P.L.C., (2004c). “Direct-contact evaporation in the homogeneous and heterogeneous bubbling regimes. Part II: dynamic simulation”. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 47, pp. 3841–3854.
- RIBEIRO JR., C.P., LAGE, P.L.C., (2005a). “Modeling of direct contact evaporation using a simultaneous heat and multicomponent transfer model for superheated bubbles”. *Chemical Engineering Science*, vol. 60, n. 6, pp. 1761-1772.
- RIBEIRO JR., C.P., *Desenvolvimento de um Processo Combinado de Evaporação por Contato Direto e Permeação de Vapor para Tratamentos de Sucos de Fruta*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2005
- RODRIGUES, R.C., *Estudo do Aumento de Escala do Processo de Esgotamento de Aromas em Colunas de Borbulhamento Usando Fluidodinâmica Computacional*”. Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2005
- SCHMIT, H., (1977a). “Bubble formation and heat transfer during dispersion of superheated steam in saturated water—II: bubble size and bubble detachment at single orifices”. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 20, pp. 647–654.
- SCHMIT, H., (1977b). “Bubble formation and heat transfer during dispersion of superheated steam in saturated water—II: heat transfer from superheated steam bubbles to saturated water during bubble formation”. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 20, pp. 635–646.
- SHAH, Y.T., KEBLAR, B.G., GODBOLE, S.P., DEKWER, W.D., “Design parameters estimations for bubble column reactors”, *A.I.C.H.E Journal*, vol.28, n. 1, pp.353-379
- SOKOLICHIN, A., EIGEBERGER, G., (1994). “Gas-liquid flow in bubble columns and loops reactors: Part I. Detailed modelling and numerical simulation”. *Chemical Engineering Science*, v.49, n.24B ,pp. 5735-5746.
- SOKOLICHIN, A., EIGEBERGER, G., (1999). “Applicability of standard k-ε turbulence model to the dynamic simulation of bubbles columns: Part I. Detailed numerical simulations”. *Chemical Engineering Science*, v.54, n.13-14 ,pp. 2273-2284.

TOKUNAGA, H., IGUCHI, TATEMACHI, H. (1995). "Heat transfer between bubbles and molten wood's metal". ISI International, vol. 35, pp. 21-25.

APÊNDICE
A
Propriedades Físicas

A.1) Ar (LAGE, 1992)

A.1.1) Calor específico a pressão constante

$$C_p(T) = 1007 \sum_{i=0}^3 C_i \left(\frac{T}{T_0} \right)^i \quad (\text{A.1})$$

C_p em J kg^{-1} ; T em K, $T_0=300\text{K}$; $C_0=1,009525$; $C_1=-5,214242 \times 10^{-2}$; $C_2=4,630513 \times 10^{-2}$; $C_3=-5,841480 \times 10^{-3}$; $300 \leq T \leq 1300\text{K}$.

A.1.2) Viscosidade dinâmica

$$\mu(T) = 18,46 C_0 x^{\sum_{i=1}^3 C_i x^{i-1}} \quad (\text{A.2})$$

μ em 10^{-6} Pa s; $x = T/T_0$; $T_0=300$ K; $C_0=1,003114$; $C_1=0,810887$; $C_2=-5,21621 \times 10^{-2}$; $C_3=4,639058 \times 10^{-3}$; $300 \leq T \leq 1300\text{K}$.

A.1.3) Condutibilidade Térmica

$$\lambda(T) = 0,0262 C_0 x^{\sum_{i=1}^3 C_i x^{i-1}} \quad (\text{A.3})$$

λ em $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$; $x = T/T_0$; $T_0=300$ K; $C_0=0,994157$; $C_1=1,082668$; $C_2=-0,159730$; $C_3=2,076809 \times 10^{-3}$; $300 \leq T \leq 1200\text{K}$.

A.2) Água no estado gasoso (LAGE, 1992)

A.2.1) Calor específico a pressão constante

$$C_p(T) = C_{p0} \sum_{i=0}^N C_i \left(\frac{T}{T_0} \right)^i \quad (\text{A.4})$$

C_p em J kg^{-1} ; T em K. Para $373,5 \leq T \leq 1073\text{K}$; $C_{p0}=2038$ K; $T_0=300\text{K}$; $N=4$; $C_0=1,922100$; $C_1=-2,050344$; $C_2=1,553686$; $C_3=-0,488159$; $C_4=5,68267 \times 10^{-2}$. Para $T < 373,15$ K; $C_{p0}=1864$ K; $T_0=273,15$ K; $N=3$; $C_0=-0,477218$; $C_1=4,124515$; $C_2=-3,931562$; $C_3=1,282700$.

A.2.2) Condutibilidade térmica

$$\lambda(T) = \lambda_0 C_0 x^{\sum_{i=1}^3 C_i x^{i-1}} \quad (\text{A.5})$$

λ em $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$; $x = T/T_0$. Para $373,15 \leq T \leq 973,00\text{K}$; $\lambda_0=0,0245$; $T_0=373,15$ K; $C_0=0,993620$; $C_1=0,993620$; $C_2=0,325260$; $C_3=-6,380585 \times 10^{-2}$. Para $T < 373,15$ K; $\lambda_0=0,0176$; $T_0=273,15$ K; $C_0=0,996324$; $C_1=1,474153$; $C_2=-1,063928$; $C_3=0,583928$.

A.2.3) Coeficiente de difusão no ar

$$D = \frac{2,284853 \times 10^{-3}}{P} \left(\frac{T}{273} \right)^{1,7724} \quad (\text{A.6})$$

D em $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$; T em K; P em bar; $273 \leq T \leq 1493 \text{K}$

A.2) Água no estado líquido

A.2.1) Calor específico a pressão constante, densidade e condutibilidade térmica

Foram utilizados os dados experimentais apresentados por HOLMAN (1992) para $10 \leq T \leq 104,4 \text{ } ^\circ\text{C}$, efetuando-se interpolações lineares para qualquer temperatura na qual o dado experimental não estivesse disponível.

A.2.2) Viscosidade dinâmica (LAGE, 1992)

$$\mu(T) = 1,7525 \times 10^{-3} \exp \left[\sum_{i=0}^3 C_i \left(\frac{273}{T} \right)^i \right] \quad (\text{A.7})$$

μ em 10^{-6} Pa s ; T em K; $C_0 = -5,176522$; $C_1 = 6,356569$; $C_2 = -5,930576$; $C_3 = 4,751530$; $273 \leq T \leq 603 \text{K}$.

A.2.3) Tensão superficial

Foram utilizados os dados experimentais por VARGAFTIK (1975) para $0 \leq T \leq 120 \text{ } ^\circ\text{C}$, efetuando-se interpolações lineares para qualquer temperatura na qual o dado experimental não estivesse disponível.

A.2.4) Pressão de vapor (REID et al., 1987)

$$\ln \left(\frac{P_{sat}}{P_c} \right) = (1-x) (-7,7645x + 1,4583x^{1,5} - 2,77580x^3 - 1,23303x^6) \quad (\text{A.8})$$

$P_c = 218,4 \text{ atm}$; $x = 1 - T/T_c$; $T_c = 647,3 \text{ K}$; $275 \leq T \leq 647,3 \text{ K}$

APÊNDICE
B
Correlações para os
Parâmetros do Modelo
Lagrangeano

B.1) Condições de Injeção de Gás

B.1.1) Temperatura da fase gasosa ao final da formação (T_{bf})

$$T_{bf} = \frac{A_1 - A_2}{1 + e^{(T_{liq} - x_0)/dx}} + A_2 \quad (B.1)$$

onde $A_1=314,6$; $A_2= 416,24$; $x_0=308,46$; $dx=38,756$ e o valor de T_{bf} ao final da formação é 384,42 K

B.1.2) Fração de água na fase gasosa ao final da formação ($Y_{1,b,f}$)

$$Y_{1,b,f} = y_0 + A_0 e^{R_0 T_{liq}} \quad (B.2)$$

onde $y_0=0,00569$; $A=2,867 \times 10^{-8}$; $R_0=0,04526$ e o valor de $Y_{1,b,f}$ ao final da formação é 0,1266

B.1.3) Frequência de formação de bolhas (f)

$$f = A + B T_{liq} \quad (B.3)$$

onde o valor de f ao final da formação é 28,2497 s⁻¹

B.2) Condições para os termos fonte

B.2.1) Massa evaporada por bolha na formação (M_{evap})

$$M_{evap} = y_0 + A_0 e^{R_0 T_{liq}} \quad (B.4)$$

onde $y_0=-8,386 \times 10^{-8}$; $A=8,317 \times 10^{-14}$; $R_0=0,05319$ e o valor de M_{evap} ao final da formação é 5,52x 10⁻⁶

B.2.2) Calor sensível cedido por bolha na formação (Q_{sens})

$$Q_{sens} = \frac{A_1 - A_2}{1 + e^{(T_{liq} - x_0)/dx}} + A_2 \quad (B.5)$$

onde $A_1=0,00707$; $A_2= -6,6188$; $x_0=465,8$; $dx=21,05$ e o valor de Q_{sens} ao final da formação é - 8.833 x 10⁻³ J

B.3) Troca de calor e massa na ascensão

B.3.1) Coeficiente de transferência de calor para a fase gasosa (h_b)

$$h_b = \frac{A_1 - A_2}{1 + e^{(T_{liq} - x_0)/dx}} + A_2 \quad (B.6)$$

onde $A_1= 48,75$; $A_2= 9,259$; $x_0=364,8$; $dx=13,78$ e o valor de h_b ao final da formação é $42.2046 \text{ W m}^{-2} \text{ K}$

B.3.2) Coeficiente de transferência de massa para a fase gasosa (k_b)

$$k_b = k_o \left(\frac{T_{liq}}{T_o} \right)^{a+b \left(\frac{T_{liq}}{T_o} \right) + c \left(\frac{T_{liq}}{T_o} \right)^2} \quad (\text{B.7})$$

onde $k_o=17,04$; $T_o= 439,8$; $A=77,2$; $B= -222,9$ $C=197,7$ e o valor de k_b ao final da formação é 0.04645 m s^{-1}

B.3.3) Raio da bolha ao final da formação (r_{bf})

$$r_{bf} = \frac{A_1 - A_2}{1 + e^{(T_{liq} - x_0) / dx}} + A_2 \quad (\text{B.8})$$

onde $A_1= 0,0021754$; $A_2= 0,015810$; $x_0=423,47$; $dx=18,480$ e o valor de r_{bf} ao final da formação é $0,002314 \text{ m}$

APÊNDICE C Linearização da Equação que Calcula a Temperatura Interfacial

Pelo modelo simplificado proposto, a temperatura da superfície é calculada da seguinte forma:

$$T_s(t) = \overline{T_b}(t) - \frac{q_b(t)}{h_b} \quad (C.1)$$

onde T_b é a temperatura média da fase gasosa, h_b é o coeficiente de transferência de massa na fase gasosa, q_b é o fluxo de calor sensível do interior da bolha para a superfície, o qual é calculado da seguinte forma:

$$q_b(t) = \dot{m}_{vap}(t) \Delta H_s^{vap}(t) + h_{liq} [T_s(t) - T_{liq}] \quad (C.2)$$

onde ΔH_s^{vap} é o calor latente de vaporização, \dot{m}_{vap} é o fluxo de massa evaporado, que é calculado de acordo com a seguinte equação:

$$\dot{m}_{vap}(t) = \overline{k_b} [\rho_s(t) Y_s^{sat}(t) - \overline{\rho_b}(t) \overline{Y_{1,b}}(t)] \quad (C.3)$$

Substituindo (C.3) em (C.2):

$$q_b = \left\{ \overline{k_b} [\rho_s(t) Y_s^{sat}(t) - \overline{\rho_b}(t) \overline{Y_{1,b}}(t)] \right\} \Delta H_s^{vap}(t) + h_{liq} [T_s(t) - T_{liq}] \quad (C.4)$$

A partir de agora para evitar que a notação fique carregada será omitido “(t)”. A partir de manipulação algébrica é possível obter a seguinte expressão:

$$q_b = \overline{k_b} \rho_s Y_s^{sat} \Delta H_s^{vap} - \overline{k_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} \Delta H_s^{vap} + h_{liq} (T_s - T_{liq}) \quad (C.5)$$

Substituindo a (C.5) em (C.1):

$$T_s = \overline{T_b} + \left[\frac{-\overline{k_b} \rho_s Y_s^{sat} \Delta H_s^{vap} + \overline{k_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} \Delta H_s^{vap} - h_{liq} (T_s - T_{liq})}{h_b} \right] \quad (C.6)$$

Manipulando a equação mais um pouco é possível desmembrá-la em 4 termos:

$$T_s = \overline{T_b} - \frac{\overline{k_b}}{h_b} \rho_s Y_s^{sat} \Delta H_s^{vap} + \frac{\overline{k_b}}{h_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} \Delta H_s^{vap} - \frac{h_{liq}}{h_b} (T_s - T_{liq}) \quad (C.7)$$

Os termos não lineares da equação em T_s serão nomeados da seguinte forma:

$$F1 = \frac{\overline{k_b}}{h_b} \rho_s Y_s^{sat} \Delta H_s^{vap} \quad (C.8)$$

$$F_2 = \frac{\overline{k_b}}{h_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} \Delta H_s^{vap} \quad (C.9)$$

É importante observar que Y_s^{sat} e ΔH_s^{vap} são termos não lineares com a temperatura

O objetivo agora é linearizar F1 e F2, para tanto, será utilizada a série de Taylor truncada no segundo termo em torno do ponto T_{so} :

$$F_1(T_s) = F_1(T_{so}) + \left(\frac{dF_1}{dT_s} \right)_{T_s=T_{so}} (T_s - T_{so}) = b_1 + a_1(T_s - T_{so}) \quad (C.10)$$

$$F_2(T_s) = F_2(T_{so}) + \left(\frac{dF_2}{dT_s} \right)_{T_s=T_{so}} (T_s - T_{so}) = b_2 + a_2(T_s - T_{so}) \quad (C.11)$$

As derivadas nas eq.(C.10) e (C.11) foram obtidas no software MAPLE 10.0 da Maplesoft considerando todas as outras variáveis constantes com exceção de T_s .

Podemos substituir as eq. (C.10) e (C.11) na eq.(C.7)

$$T_s = \overline{T_b} - \frac{\overline{k_b}}{h_b} [b_1 + a_1(T_s - T_{so})] + \frac{\overline{k_b}}{h_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} [b_2 + a_2(T_s - T_{so})] - \frac{h_{liq}}{h_b} (T_s - T_{liq}) \quad (C.12)$$

A partir de manipulações algébricas é possível isolar T_s :

Abrindo os termos:

$$\begin{aligned} T_s = \overline{T_b} - \frac{\overline{k_b}}{h_b} b_1 - \frac{\overline{k_b}}{h_b} a_1 T_s + \frac{\overline{k_b}}{h_b} a_1 T_{so} + \frac{\overline{k_b}}{h_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} b_2 + \frac{\overline{k_b}}{h_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} a_2 T_s \\ - \frac{\overline{k_b}}{h_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} a_2 T_{so} - \frac{h_{liq}}{h_b} T_s + \frac{h_{liq}}{h_b} T_{liq} \end{aligned} \quad (C.13)$$

Isolando os termos que contém T_s no lado esquerdo:

$$\begin{aligned} T_s + \frac{\overline{k_b}}{h_b} a_1 T_s - \frac{\overline{k_b}}{h_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} a_2 T_s + \frac{h_{liq}}{h_b} T_s = \overline{T_b} - \frac{\overline{k_b}}{h_b} (b_1 - a_1 T_{so}) \\ + \frac{\overline{k_b}}{h_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} (b_2 - a_2 T_{so}) + \frac{h_{liq}}{h_b} T_{liq} \end{aligned} \quad (C.14)$$

Colocando T_s em evidência:

$$T_s \left[1 + \frac{\overline{k_b}}{h_b} a_1 - \frac{\overline{k_b}}{h_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} a_2 + \frac{h_{liq}}{h_b} \right] = \overline{T_b} - \frac{\overline{k_b}}{h_b} (b_1 - a_1 T_{so}) + \frac{\overline{k_b}}{h_b} \overline{\rho_b} \overline{Y_{1,b}} (b_2 - a_2 T_{so}) + \frac{h_{liq}}{h_b} T_{liq} \quad (C.15)$$

Fazendo:

$$C = \left[1 + \frac{\bar{k}_b}{h_b} a_1 - \frac{\bar{k}_b}{h_b} \bar{\rho}_b \bar{Y}_{1,b} a_2 + \frac{h_{liq}}{h_b} \right] \quad (C.16)$$

$$D = \frac{\bar{k}_b}{h_b} (b_1 - a_1 T_{so}) \quad (C.17)$$

$$E = \frac{\bar{k}_b}{h_b} \bar{\rho}_b \bar{Y}_{1,b} (b_2 - a_2 T_{so}) \quad (C.18)$$

Logo a equação (C.15) pode ser reescrita para obter a expressão linearizada resultante para o cálculo da temperatura interfacial:

$$T_s = \frac{\bar{T}_b - D + E + \frac{h_{liq}}{h_b} T_{liq}}{C} \quad (C.19)$$