

CÁLCULO DO TENSOR DE DISPERSÃO TOTAL EM ARRANJOS PERIÓDICOS BIDIMENSIONAL E TRIDIMENSIONAL

CLEUZIR DA LUZ¹, ANA MARIA TISCHER² e JULIA VILLAIN MARTINHAGO³

¹ Orientador, Departamento de Engenharia de Alimentos e Engenharia Química, UDESC Oeste/CEO
cleuzir@udesc.br

² Acadêmica do Curso de Engenharia Química – UDESC Oeste/CEO

³ Acadêmica do Curso de Engenharia de Alimentos – UDESC Oeste/CEO

Palavras-chave: Adsorção; Arranjos bidimensional e tridimensional; Dispersão total; Modelagem Matemática; Método da Média no Volume.

A dinâmica do processo de adsorção em uma coluna de leito fixo pode ser predito através da modelagem matemática e simulação numérica, estas são ferramentas fundamentais para a compreensão e análise dos processos nas indústrias. A dispersão em meios porosos é um fenômeno importante em sistemas naturais e artificiais e é um dos principais coeficientes de transportes das equações governantes de transporte de massa. Segundo Wood (2007) uma apropriada representação da estrutura geométrica, potencialmente complexa, é muito importante para a obtenção de previsões razoáveis do termo de dispersão hidrodinâmica. A importância de estudar arranjos mais complexos é justificável, pois o meio poroso de uma coluna de leito fixo tem seu arranjo com os mais variados tipos de empacotamentos. Considerando que a estrutura geométrica dos poros de uma coluna de adsorção de leito fixo tem influência no cálculo dos tensores de transporte, um estudo de arranjos de malhas pode ser feito. É fundamental fazer uma análise do melhor arranjo ou tipo de malha que deve ser usada como domínio de cálculo do chamado problema de fechamento, no qual é encontrados com aplicação do Método da Média no Volume na modelagem matemática e usado para o cálculo do tensor de dispersão total. Neste trabalho são apresentados dois arranjos espacialmente periódicos, bidimensional e tridimensional (Fig. 1), que representam o meio poroso, a fim de determinar numericamente o tensor de dispersão total. A malha (domínio de cálculo) dos arranjos, foram construída e analisada no software *Pointwise V17.3R4*. O problema de fechamento foi resolvido pelo software livre *OpenFOAM*®, *version 2.2.2*, e corroborado com dados da literatura (Figs. 2 e 3). O escoamento foi resolvido usando o esquema de acoplamento *SIMPLE*, generalizado para a solução de escoamentos incompressíveis, turbulentos e estacionários, sendo a solução do escoamento laminar um caso particular da implementação. Estes arranjos pode ser considerado simétrico axialmente. Assim, pode-se considerar como domínios de cálculo parte das célula unitárias, conforme mostra as geometrias da Fig. 1.

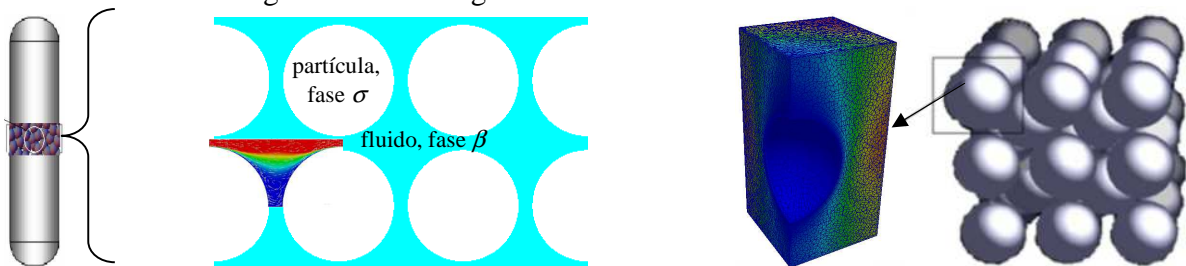


Fig. 1 – Modelos de meio poroso espacialmente periódicos, arranjos de cilindros e esferas em linha.

Para encontrar o campo de velocidade do escoamento, resolve-se as equações de Navier-Stokes sobre este arranjos. Os parâmetros utilizados para o cálculo são os mesmos usados por um

trabalho da literatura: $\varepsilon = 0,37$, $\rho = 1.000 \text{ kg/m}^3$, $\mu = 1,0 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ e $\mathcal{D}_{i\beta} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$. Nas Fig. 2 (a)-(c) são mostrados os comportamentos da velocidade na direção longitudinal, v_z , para baixo ($Re_p=0,1$), médio ($Re_p=6$) e alto ($Re_p=200$) números de Reynolds, arranjos de cilindros e esferas.

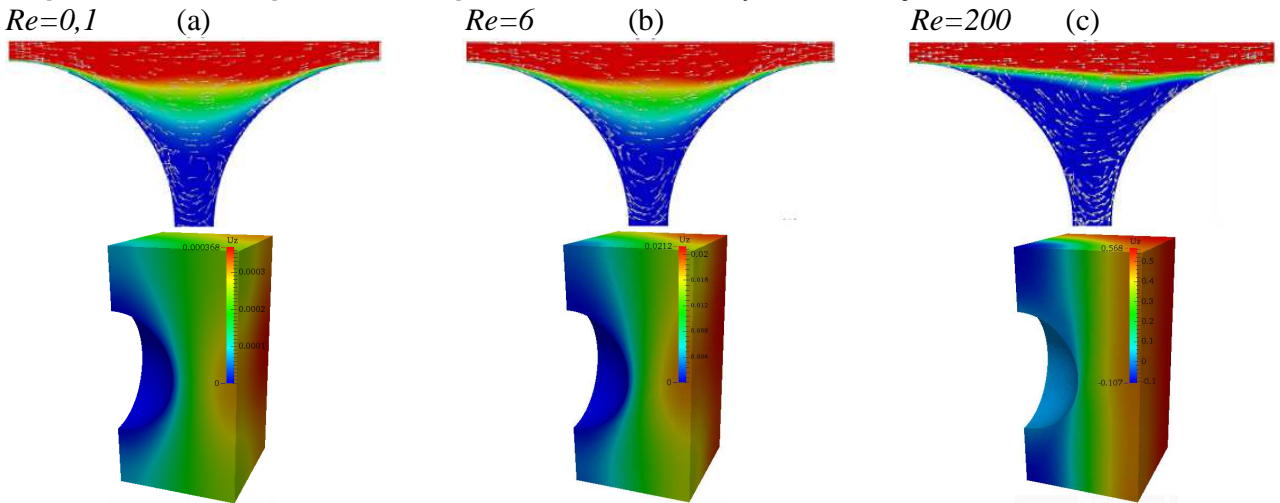


Fig. 2 – Três campos de velocidade v_{β} para arranjos bidimensionais e tridimensional de cilindros em linha e esferas em linha: (a) $Re=0,1$; (c) $Re=6$; (e) $Re=200$, mostrado para v_z .

Verifica-se, semelhantemente para ambos os arranjos, que para $Re_p=0,1$ e $Re_p=6$, Figs. 2 (a)-(b), que ocorre um escoamento laminar na maior parte do domínio, sendo que na parte onde as partículas (fase σ) estão mais próximas ocorre uma recirculação, visível para o caso bidimensional. Para $Re_p=200$, Fig. 2 (c), nota-se que o campo de velocidade começa a mudar sua trajetória e forma duas recirculações, tem-se um regime laminar transiente. O comportamento do escoamento da fase β é condizente com os estudos de Eidsath *et al.* (1983), Wood (2007) e com a física do problema. Na Fig. 3 é mostrado um gráfico do coeficiente de dispersão longitudinal normalizado ($D_{izz}/\mathcal{D}_{i\beta}$) versus o número de Peclet da partícula e comparados com dados experimentais e teóricos da literatura. Os resultados deste trabalho para arranjos de cilindros e esferas em linha, apresentaram boa concordância com os dados experimentais e teóricos. Porém para números de Peclet maiores que 1×10^5 observa-se uma divergência, na qual pode ser causada pelos efeitos de turbulência, tornando-se importante, não podendo ser negligenciada na obtenção de v_{β} , (números de Peclet altos).

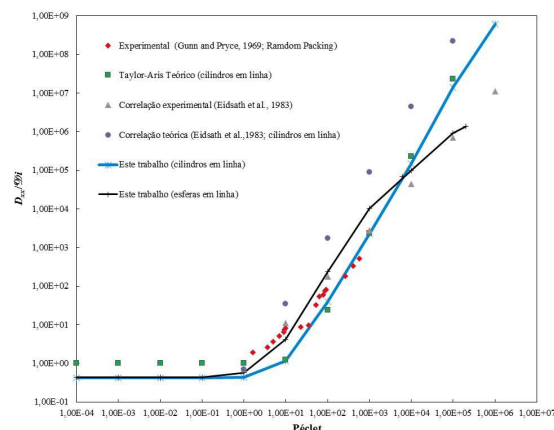


Fig. 3 – Comparação dos resultados teóricos e experimentais da dispersão longitudinal com o número de Peclet para arranjos de cilindros e esferas em linha.

Claramente notou-se diferença entre o coeficiente de dispersão longitudinal obtido sobre os arranjos de cilindros e esferas em linha, sendo que o segundo parece estar mais próximo do fenômeno físico, já que a geométrica da fase σ em geral é tridimensional.