

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARIGÁ – UEM
Centro de Tecnologia – Departamento de Engenharia Química
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

**ESTUDO DE MODELOS DE PERDA DE CARGA EM COLUNA DE
LEITO FIXO PARA SISTEMAS GASOSOS**

Thiago Baldasso de Godói
Especialista em Engenharia de Produção, Unicesumar, 2012
Orientadora: Prof.^a Dr.^a Maria Angélica S. D. Barros

Dissertação de Mestrado submetida à
Universidade Estadual de Maringá, como parte
dos requisitos à obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia Química, área de Desenvolvimento
de Processos.

Maringá – PR - Brasil

Julho de 2016

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
(Biblioteca Central - UEM, Maringá - PR, Brasil)

G588e Godoi, Thiago Baldasso de
Estudo de modelos de perda de carga em coluna de
leito fixo para sistemas gasosos / Thiago Baldasso
de Godoi. -- Maringá, PR, 2016.
110 f. : il. col. fig. tabs

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Maria Angélica S. D.
Barros.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Maringá, Centro de Tecnologia, Departamento de
Engenharia Química, Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Química, 2016.

1. Queda de pressão (Engenharia química). 2.
Leito poroso. 3. Fluxo gasoso. 4. Estimativa de
densidade de gases. 5. Estimativa de viscosidade de
gases. I. Barros, Maria Angélica S. D., orient. II.
Universidade Estadual de Maringá. Centro de
Tecnologia. Departamento de Engenharia Química.
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.
III. Título.

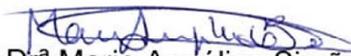
CDD 23.ed. 660.284235

MRP-003560

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

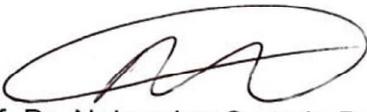
Esta é a versão final da Dissertação de Mestrado apresentada por Thiago Baldasso de Godói perante a Comissão Julgadora do Curso de Mestrado em Engenharia Química em 28 de julho de 2016.

COMISSÃO JULGADORA


Profª Drª Maria Angélica Simões Dornellas de Barros
Orientador / Presidente


Prof. Dr. Carlos Eduardo Borba
Membro


Prof. Dr. Esdras Penêdo de Carvalho
Membro


Prof. Dr. Nehemias Curvelo Pereira
Membro

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, por me conceder saúde e muita disposição para buscar meus objetivos, superar os obstáculos e resolver as dificuldades da melhor forma possível, sem nunca me deixar facultar o sorriso e a esperança.

Sou muito grato a minha família, Osmarino, Dirce, Tatiane, Kenzo, por apoiarem minha decisão em trilhar caminhos tortuosos em curto prazo, com vistas a um futuro que se apresentará melhor.

À meus amigos, que de perto ou de longe, vibraram positivamente nos momentos em que precisei recarregar as baterias. Aos ouvidos que me foram concedidos e conselhos que me foram prestados.

À professora orientadora Maria Angélica, por exercer os diversos papéis de um professor: um formador, orientador, uma amiga e alguém que não se limita a enxergar apenas os passos de mais um aluno, mas sim os passos do Thiago.

Aos amigos do LATI, Pedro Arroyo, Leonardo Oliveira, Paola Gashi, Joziane Gimenes, Artur Lemes, Regiane Ferreira, por compartilharmos muito conhecimento técnico, cafés e experiência de vida!

Ao professor Esdras, pelo apoio e suporte prestado na pesquisa.

À turma de mestrado ingressante do segundo semestre de 2014.

Ao Departamento de Engenharia Química e todos os seus colaboradores.

À CAPES pelo apoio financeiro.

God grant me the serenity
To accept the thing I cannot change;
The courage to change the thing I can;
And the wisdom to know the difference.
(REINHOLD NIEBUHR)

ESTUDO DE MODELOS DE PERDA DE CARGA EM COLUNA DE LEITO FIXO PARA SISTEMAS GASOSOS

AUTOR: THIAGO BALDASSO DE GODOI

ORIENTADORA: MARIA ANGÉLICA S. D. BARROS

Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Universidade Estadual de Maringá; Av. Colombo, 5790, Bl. E-46; CEP: 87020-900

Maringá-PR, Brasil, defendida em 28, de julho de 2016. 109 p.

RESUMO

Esta dissertação tem por objetivo testar modelos alternativos ao modelo de Ergun para predição de queda de pressão durante o escoamento de correntes gasosas em leitos empacotados. Neste contexto, iniciou-se com o desenvolvimento do balanço de quantidade de movimento em seu formato geral, simplificando os termos com bases em outras pesquisas disponíveis na literatura. Obteve-se como resultado que a queda de pressão em colunas de leito fixo pode ser estimada pelo emprego de equações de fator de atrito de meios porosos, como o modelo de Ergun.

No caso específico de colunas de adsorção de dióxido de carbono, uma revisão bibliográfica de Shafeeyan *et al.* (2014) das últimas três décadas revelou que 30% das pesquisas consideram o modelo de Ergun e 56% desprezam este fenômeno. Diante disso, pesquisaram-se 26 outros modelos alternativos a Ergun, que correlacionam características do leito e do fluido, tais como porosidade, formato da partícula, influência das paredes da coluna, velocidade da corrente gasosa, densidade e viscosidade.

Foram pesquisados também modelos preditivos capazes de fornecer boas estimativas para as propriedades de transporte para gases puros e misturas, compostos por moléculas polares e apolares. Comprovou-se que o modelo de Peng-Robinson é eficaz na determinação da densidade, o modelo de Lucas na estimativa da viscosidade de compostos puros e de Chung *et al.* para misturas gasosas apolares.

Simulou-se, por meio de um estudo de caso disponível na literatura, a queda de pressão durante o escoamento dos gases puros, nitrogênio, oxigênio e hélio e uma mistura gasosa, composta por nitrogênio e oxigênio com composições variadas. As propriedades

de transporte foram simuladas pelo modelo de Peng-Robinson e Chung et al. Os desvios relativos médios entre dados experimentais e simulados para a queda de pressão demonstram a potencialidade do modelo de Rose e Rizk em prever dados experimentais, gerando melhores estimativas que o modelo de Ergun.

Palavras-chave: queda de pressão, leito poroso, fluxo gasoso, densidade, viscosidade.

STUDY OF PRESSURE DROP MODELS IN FIXED BED FOR GASES SYSTEMS

AUTHOR: THIAGO BALDASSO DE GODOI

SUPERVISORS: MARIA ANGÉLICA S. D. BARROS

Masters Thesis; Chemical Engineering Graduate Program; State University of Maringá;

Avenue Colombo, 5790, Bl. E-46; CEP: 87020-900

Maringá-PR, Brazil, presented on 28th july 2016. 109 p.

ABSTRACT

This dissertation has the aim to test alternative models to the Ergun's model for predicting pressure drop during the flow of gaseous currents in packed beds. In this context, this work was initiated with the development of the momentum balance in its general format, simplifying the terms on the basis of other researches available in the literature. It was obtained as a result that the pressure drop in fixed column beds can be estimated by making use of friction factor equations for porous media, such as Ergun's model.

In the specific case of carbon dioxide adsorption columns, a bibliographic review made for Shafeeyan et al. (2014) from last three decades revealed that 30% of research studies regarded Ergun's model and 56% neglect this phenomenon. Therefore, it was investigated 26 other alternative models to Ergun's that would correlate characteristics of the bed and the flow, such as porosity, particle shape, influence of the column walls, gaseous current velocity, density and viscosity.

It was also investigated predictive models capable of providing good estimates of properties for transport of pure gases and mixtures, composed by polar and apolar molecules. It was confirmed that Peng-Robinson's model is effective in the determination of density, Lucas' model is in the estimate of viscosity of pure compounds and Chung et al.'s for apolar gaseous mixtures.

It was performed a simulation, by means of a case study available in the literature, the pressure drop during the flow of the pure gases, nitrogen, oxygen and helium, and a gaseous mixture composed by nitrogen and oxygen with various compositions. The properties of transport were simulated by Peng-Robinson's and Chung et al.'s models.

The relative average deviations between experimental and simulated data for pressure drop have demonstrated the potentiality of Rose and Rizk's model in predicting experimental data, which generates better estimates than Ergun's model.

Key words: pressure drop, porous bed, gaseous flux, density, viscosity.

ÍNDICE

1.0 INTRODUÇÃO	1
2.0 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
2.1 PROCESSOS PARA A REMOÇÃO DE COMPONENTES DE CORRENTES DE GASOSAS	3
2.2 ADSORÇÃO	4
2.2.1 ADSORVENTES	5
2.2.1.1 Zeólitas	5
2.3 COLUNAS DE ADSORÇÃO	5
2.4 FLUIDODINÂMICA DE COLUNAS DE ADSORÇÃO EM LEITO FIXO	6
2.4.1 MODELO DISCRETO DE PARTÍCULA	9
2.4.2 EQUAÇÕES DE REGIME PERMANENTE	18
2.4.2.1 Equações de regime permanente sem o efeito da parede	20
2.4.2.2 Equações de regime permanente com o efeito da parede	27
2.4.3 ESTIMATIVA DAS PROPRIEDADES DO FLUIDO	32
2.4.3.1 Densidade	32
2.4.3.1.1 Densidade de gases puros	32
2.4.3.1.2 Densidade de misturas gasosas	34
2.4.3.2 Viscosidade	35
2.4.3.2.1 Variáveis que interferem na viscosidade	36
2.4.3.2.2 Modelos preditivos da viscosidade de compostos gasosos	37
2.4.3.2.2.a Correlação de Lee et al. (1966)	37
2.4.3.2.2.b Correlação de Lucas (1980)	38
i. Correlação de Lucas para gases puros a baixas densidades	39
ii. Correlação de Lucas para gases puros a altas densidades	40
iii. Correlação de Lucas para misturas gasosas a baixas densidades	41
iiii. Correlação de Lucas para misturas gasosas com altas densidades	42
2.4.3.2.2.c Correlação de Chung et al. (1988)	43
i. Correlação de Chung et al. para gases puros a baixas densidades	43
ii. Correlação de Chung et al. para gases puros a altas densidades	45
iii. Correlação de Chung et al. para misturas gasosas a baixas densidades	46
iiii. Correlação de Chung et al. para misturas gasosas a altas densidades	48
3.0 METODOLOGIA	50
3.1 ESTIMATIVA DA DENSIDADE	50

3.2 ESTIMATIVA DA VISCOSIDADE	52
3.3 TESTE DAS EQUAÇÕES DE REGIME PERMANENTE	53
3.4 VARIAÇÃO DA QUEDA DE PRESSÃO COM A VELOCIDADE	55
4.0 RESULTADOS E DISCUSSÃO	56
4.1 DENSIDADE DE GASES PUROS E MISTURAS	56
4.2 ESTIMATIVAS DA VISCOSIDADE	60
4.3 TESTE DAS EQUAÇÕES DE REGIME PERMANENTE	67
4.3.1 <i>QUEDA DE PRESSÃO EM FLUXOS DE GASES PUROS E MISTURAS</i>	69
4.3.2 <i>RESTRICÇÕES DOS MODELOS</i>	76
4.3.3 <i>INFLUÊNCIA DA PAREDE</i>	76
4.3.4 <i>VARIAÇÃO DA QUEDA DE PRESSÃO COM A VELOCIDADE</i>	77
5.0 CONCLUSÃO	81
6.0 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	83
ANEXOS	91

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 - Correlações teóricas para predizer a queda de pressão de sistemas particulados que desconsideram o efeito da parede, faixas de aplicação e considerações.	22
Tabela 2 - Correlações teóricas para predizer a queda de pressão de sistemas particulados que consideram o efeito da parede, faixas de aplicação e considerações.	28
Tabela 3 - Coeficientes para calcular $Ei = ai + bi\omega + ci\rho r^4 + dik$	46
Tabela 4 - Condições operacionais estudadas na predição da densidade.	51
Tabela 5 - Condições operacionais estudadas na predição da viscosidade.	52
Tabela 6 - Condições operacionais estudadas na predição da perda de carga.....	54
Tabela 7 - Características dos sistemas simulados.	54
Tabela 8 - Estimativa da densidade pelo modelo de Peng-Robinson em condições similares as condições experimentais de Tood e Webley (2005).	60
Tabela 9 - Desvios relativos médios para viscosidade obtidos para cada modelo estudado.	66
Tabela 10 - Estimativa da viscosidade dos gases pelo modelo de Chung <i>et al.</i> nas mesmas condições operacionais que os dados experimentais de Tood e Webley (2005).....	67
Tabela 11 - Desvios relativos médios para todos os modelos testados.	68
Tabela 12 - Modelos com desvios relativos médios menores que 20%.	73
Tabela 13 - Modelos com melhores capacidades preditivas para escoamento de gases puros, misturas gasosas e inerte.	75
Tabela 14. Dados experimentais de densidade de Mollerup (1985) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 310 K e pressões diversas para o metano.	91
Tabela 15. Dados experimentais de densidade de Gokmenoglu <i>et al.</i> (1996) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 313,15 K e pressões diversas para o dióxido de carbono.	91
Tabela 16. Dados experimentais de densidade de Span <i>et al.</i> (1996) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 295 K e pressões diversas para o nitrogênio.	92
Tabela 17. Dados experimentais de densidade de Stewart <i>et al.</i> (1991) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 295 K e pressões diversas para o oxigênio.	92
Tabela 18. Dados experimentais de densidade de Gururaja <i>et al.</i> (1967) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 298 K e pressão de 1 bar para uma mistura composta de oxigênio e nitrogênio.....	93
Tabela 19. Dados experimentais de densidade de Esper <i>et al.</i> (1989) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 300 K e pressões diversas para uma mistura composta de metano e dióxido de carbono.	93
Tabela 20. Dados experimentais de viscosidade de Ever <i>et al.</i> (2002) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 293,15 K e pressões diversas para o metano.....	94

Tabela 21 - Dados experimentais de viscosidade de Ever <i>et al.</i> (2002) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 373,15 K e pressões diversas para o metano.	95
Tabela 22 - Dados experimentais de viscosidade de Iwasaki e Takahashi (1981) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 298,15 K e pressões diversas para o dióxido de carbono.	95
Tabela 23 - Dados experimentais de viscosidade de Iwasaki e Takahashi (1981) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 323,15 K e pressões diversas para o dióxido de carbono.	96
Tabela 24 - Dados experimentais de viscosidade de Giri <i>et al.</i> (2011 apud Quiñones-Cisneros <i>et al.</i> , 2012) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 373,15 K e pressões diversas para o sulfeto de hidrogênio.	97
Tabela 25 - Dados experimentais de viscosidade de Giri <i>et al.</i> (2011 apud Quiñones-Cisneros <i>et al.</i> , 2012) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 423,15 K e pressões diversas para o sulfeto de hidrogênio.	98
Tabela 26 - Dados experimentais de viscosidade de Kestin e Leidenfrost. (1959) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 298,15 K e pressões diversas para nitrogênio.	99
Tabela 27 - Dados experimentais de viscosidade de Kestin e Leidenfrost. (1959) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 298,15 K e pressões diversas para oxigênio.	99
Tabela 28 - Dados experimentais de viscosidade de Assael <i>et al.</i> (2001) e estimados pelos modelos de Lucas, Chung e Lee na temperatura de 294,0 K e pressões diversas para a mistura representante do gás natural.	100
Tabela 29 - Dados experimentais de viscosidade de Assael <i>et al.</i> (2001) e estimados pelos modelos de Lucas, Chung e Lee na temperatura de 322,9 K e pressões diversas para a mistura representante do gás natural.	100
Tabela 30 - Dados experimentais de viscosidade de Assael <i>et al.</i> (2001) e estimados pelos modelos de Lucas, Chung e Lee na temperatura de 353,4 K e pressões diversas para a mistura representante do gás natural.	101
Tabela 31 - Dados experimentais de viscosidade de Gururaja <i>et al.</i> (1967) e estimados pelos modelos de Lucas, Chung e Lee na temperatura de 298 K e pressão de 1 bar para a mistura constituída de nitrogênio e oxigênio.	101
Tabela 32 - Dados experimentais de queda de pressão de Tood e Webley (2005) e estimados pelos modelos dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento de oxigênio puro no leito poroso.	102
Tabela 33 - Dados experimentais de queda de pressão de Tood e Webley (2005) e estimados pelos modelos dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento de oxigênio (90%) e nitrogênio em um leito poroso.	103
Tabela 34 - Dados experimentais de queda de pressão de Tood e Webley (2005) e estimados pelos modelos dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento de oxigênio (22%) e nitrogênio em um leito poroso.	105

Tabela 35 - Dados experimentais de queda de pressão de Tood e Webley (2005) e estimados pelos modelos dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento de oxigênio (10%) e nitrogênio em um leito poroso..... 108

Tabela 36 - Dados experimentais de queda de pressão de Tood e Webley (2005) e estimados pelos modelos dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento de hélio puro no leito poroso. 109

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 - Esquema geral para previsão do comportamento fluidodinâmico de colunas de leito fixo.	9
Figura 2 - Queda de pressão para o fluxo de 2% de oxigênio em hélio em coluna de leito fixo de zeólita 13X, com comprimento de 44,5cm e velocidade intersticial de 81,14 cm/s.....	12
Figura 3 - Erro relativo entre a pressão experimental e pressão estimada pelo modelo simplificado de balanço de quantidade de movimento em função do tempo e do comprimento do leito.....	13
Figura 4 - Queda de pressão como função da velocidade intersticial.	15
Figura 5 - Comparação dos perfis de temperatura sob três modelos diferentes durante o fluxo de gás em altas pressões.....	17
Figura 6 - Densidade a 310 K e pressão de 1 a 75 bar estimada pela equação de Peng-Robinson para o metano. Dados experimentais reportados por Mollerup (1985).	56
Figura 7 - Densidade a 313,15 K e pressão de 10 a 60 bar estimada pela equação de Peng-Robinson para o dióxido de carbono. Dados experimentais reportados por Gokmenoglu <i>et al.</i> (1996).	56
Figura 8 - Densidade a 310,93 K e pressão de 1,00 a 55,16 bar estimada pela equação de Peng-Robinson para o sulfeto de hidrogênio. Dados experimentais reportados por Reamer <i>et al.</i> (1950).	57
Figura 9 - Densidade a 295 K e pressão de 1 a 60 bar estimada pela equação de Peng-Robinson para o nitrogênio. Dados experimentais reportados por Span <i>et al.</i> (2000).	57
Figura 10 - Densidade a 295 K e pressão de 1 a 60 bar estimada pela equação de Peng-Robinson para o oxigênio. Dados experimentais reportados por Stewart <i>et al.</i> (1991).	57
Figura 11 - Densidade para a mistura contendo dióxido de carbono (47,6% molar) e metano a 300 K e pressão de 1,20 a 58,29 bar estimada por Peng-Robinson. Dados experimentais reportados por Esper <i>et al.</i> (1989).	58
Figura 12 - Densidade a 295 K e pressão de 1 a 60 bar estimada por Peng-Robinson para o oxigênio. Dados experimentais reportados por Stewart <i>et al.</i> (1991).	59
Figura 13 - Viscosidade do CH ₄ : (▲) experimental a 293,15 K; (■) experimental a 373,15 K. Viscosidades calculadas: (----)Chung <i>et al.</i> ; (—) Lucas. Dados experimentais reportados por Evers <i>et al.</i> (2002).	61
Figura 14 - Viscosidade do CO ₂ puro: (▲) experimental a 298,15 K; (■) experimental a 323,15 K. Viscosidades calculadas: (----)Chung <i>et al.</i> ; (—) Lucas. Dados experimentais reportados por Iwasaki e Takahashi (1981).	61
Figura 15 - Viscosidade do H ₂ S puro: (▲) experimental a 373,15 K; (■) experimental a 423,15 K. Viscosidades calculadas: (----)Chung <i>et al.</i> ; (—) Lucas. Dados experimentais reportados por Giri <i>et al.</i> (2011 apud Quiñones-Cisneros <i>et al.</i> , 2012).	61

Figura 16 - Viscosidade do N ₂ puro: (▲) experimental a 298,15 K. Viscosidades calculadas: (----)Chung <i>et al.</i> ; (—) Lucas. Dados experimentais reportados por Kestin e Leidenfrost. (1959).	62
Figura 17 - Viscosidade do O ₂ puro: (▲) experimental a 298,15 K. Viscosidades calculadas: (----)Chung <i>et al.</i> ; (—) Lucas. Dados experimentais reportados por Kestin e Leidenfrost. (1959).	62
Figura 18 - Viscosidade para mistura modelo de gás natural: (▲) experimental a 294,0 K; (■) experimental a 322,9 K; (●) experimental a 353,4 K. Viscosidades calculadas: (.....)Chung <i>et al.</i> ; (—) Lucas; (- - -) Lee <i>et al.</i> . Dados experimentais reportados por Assael <i>et al.</i> (2001).	64
Figura 19 - Viscosidade para mistura composta por N ₂ e O ₂ com composição variada: (▲) experimental a 298 K. Viscosidades calculadas: (.....)Chung <i>et al.</i> ; (—) Lucas; (- - -) Lee <i>et al.</i> . Dados experimentais reportados por Gururaja <i>et al.</i> (1967).	64
Figura 20 - Desvio relativo médio entre dados estimado pelos modelos e dados experimentais de Tood e Webley (2005) para escoamento de uma corrente gasosa contendo 100% de O ₂	70
Figura 21 - Desvio relativo médio entre dados estimado pelos modelos e dados experimentais de Tood e Webley (2005) para escoamento de uma corrente gasosa contendo 90% de O ₂ e 10% de N ₂	70
Figura 22 - Desvio relativo médio entre dados estimado pelos modelos e dados experimentais de Tood e Webley (2005) para escoamento de uma corrente gasosa contendo 22% de O ₂ e 78% de N ₂	71
Figura 23 - Desvio relativo médio entre dados estimado pelos modelos e dados experimentais de Tood e Webley (2005) para escoamento de uma corrente gasosa contendo 10% de O ₂ e 90% de N ₂	71
Figura 24 - Desvio relativo médio entre dados estimado pelos modelos e dados experimentais de Tood e Webley (2005) para escoamento de uma corrente gasosa contendo 99,99% He.	72
Figura 25 - Dados experimentais de Tood e Webley (2005) e simulação com os modelos de melhor ajuste para o sistema contendo 100% de O ₂	78
Figura 26 - Dados experimentais de Tood e Webley (2005) e simulação com os modelos de melhor ajuste para o sistema contendo 90% O ₂ e 10% de N ₂	78
Figura 27 - Dados experimentais de Tood e Webley (2005) e simulação com os modelos de melhor ajuste para o sistema contendo 22% O ₂ e 78% de N ₂	78
Figura 28 - Dados experimentais de Tood e Webley (2005) e simulação com os modelos de melhor ajuste para o sistema contendo 10% O ₂ e 90% de N ₂	79
Figura 29 - Dados experimentais de Tood e Webley (2005) e simulação com os modelos de melhor ajuste para o sistema contendo 100% He.	79

NOMENCLATURA

Letras Gregas:

α = dependência das propriedades críticas do modelo de Peng e Robinson com a temperatura;

α_{NV} = raiz da equação de Navier-Stokes;

α_L = parâmetro do modelo de Lucas;

β_{NV} = raiz da equação de Navier-Stokes;

β_L = parâmetro do modelo de Lucas;

Γ = termo de acúmulo de massa devido a adsorção;

ε = porosidade do leito;

ε_R = correlação para estimar a porosidade do modelo de Freund nos casos em que a influência da parede deve ser considerada;

ε_{atr} = energia potencial de atração entre as moléculas;

η_{lee} = viscosidade estimada pelo modelo de Lee *et al.* (μP);

η^* = parâmetro modelo de Chung;

η^{**} = parâmetro modelo de Chung;

η_{ch} = viscosidade estimada pelo modelo de Chung para gases puros em altas densidades (μP);

η_{ch}^o = viscosidade estimada pelo modelo de Chung para gases puros em baixas densidades (μP);

η_{lu} = viscosidade para gases puros em altas densidades estimado pelo modelo de Lucas (μP);

η_{lu}^o = viscosidade para gases puros em baixas densidades estimado pelo modelo de Lucas (μP);

η_m = densidade de misturas gasosas em baixas densidades estimada pelo modelo de Chung (μP);

κ = fator de correção para substâncias altamente polares como álcoois;

μ = momento dipolar (debyes);

μ_r = momento dipolar reduzido, considerando a correção para a pressão e temperatura;

μ_{rm} = momento dipolar reduzido, considerando a correção para a pressão e temperatura para misturas gasosas, estimado por meio do modelo de Chung;

ξ = inverso da viscosidade (μP)⁻¹;

ξ = parâmetro de ajuste experimental, função do empacotamento do leito;
 ξ_{ij} = parâmetros de interação binária entre as moléculas do modelo de Chung;
 ρ = densidade do fluido (kg/m^3);
 ρ_a = densidade da fase adsorvida;
 ρ_g = densidade da fase gasosa (kg/m^3);
 σ = um diâmetro característico entre as moléculas, também conhecido por diâmetro de colisão (Å°);
 σ_m = estimativa do diâmetro característico entre as moléculas, também conhecido por diâmetro de colisão, estimado por meio das regras de mistura de Chung (Å°);
 τ = tensões cisalhantes;
 ζ_{ij} = parâmetros de interação binária entre as moléculas do modelo de Chung;
 φ = esfericidade do meio poroso;
 φ = parâmetro de otimização do modelo de Morelus;
 ω = fator acêntrico;
 Φ_D = fator de forma do modelo de Morelus;
 Ω_v = integral de colisão para a viscosidade, levando em conta os detalhes da trajetória que as moléculas descrevem em uma colisão binária;

Latim básico:

a = forças atrativas ou repulsivas do modelo de Peng e Robinson ($\text{m}^6\text{Pa/mol}^2$);
 A = parâmetro da equação de Ergun;
 A^* = constante do modelo de Peng Robinson;
 a_c = constante do modelo de Pen e Robinson ($\text{m}^6\text{Pa/mol}^2$);
 A_{ch} = constante do modelo de Chung;
 A_E = parâmetro de Esfield para correção do efeito da parede;
 A_F = parâmetro ajustável do modelo de Foumeny;
 a_L = parâmetro do modelo de Lucas;
 A_L = parâmetro do modelo de Lucas;
 A_M = parâmetro da equação de Morelus;
 A_N = parâmetro de correção para tipo de escoamento e formato da partícula do modelo de Nemeç;
 A_R = parâmetro de Freund para correção do efeito da parede;

A_w = parâmetro de Freund para correção do efeito da parede e tipo de partícula;
 b_g = forças do campo gravitacional;
 B = Parâmetro da equação de Ergun;
 b = volume excluído (m^3/mol);
 B^* = constante do modelo de Peng Robinson;
 B_{ch} = constantes do modelo de Chung;
 B_E = parâmetro de Esfield para correção do efeito da parede;
 B_F = parâmetro que insere a influência da parede no modelo de Foumeny;
 b_L = parâmetro do modelo de Lucas;
 B_M = parâmetro da equação de Morelus;
 B_N = parâmetro de correção para tipo de escoamento e formato da partícula do modelo de Nemeç;
 B_R = parâmetro de Freund para correção do efeito da parede;
 B_w = parâmetro de Freund para correção do efeito da parede e tipo de partícula;
 c_L = parâmetro do modelo de Lucas;
 C_{ch} = constante do modelo de Chung;
 $C_{p,g}$ = capacidade calorífica do gás;
 D = diâmetro da coluna (m);
 D_{ch} = constante do modelo de Chung;
 d_{eq} = diâmetro equivalente da partícula (m);
 d_L = parâmetro do modelo de Lucas;
 d_p = diâmetro médio da partícula (m);
 E_i = parâmetro modelo de Chung;
 E_{ch} = constante do modelo de Chung;
 e_L = parâmetro do modelo de Lucas;
 F_C = fator para correção que considera a estrutura molecular e os efeitos polares das moléculas;
 F_{ch} = constante do modelo de Chung;
 F_{cm} = fator para correção que considera a estrutura molecular e os efeitos polares em misturas gasosas;
 F_p^0 = fatores de correção para quantificar os efeitos quânticos e da polaridade sobre a viscosidade do modelo de Lucas;
 $F_{p_i}^0$ = fator de correção do modelo de Lucas para o gás puro em baixas densidades;

F_{pm}^0 = fator de correção do modelo de Lucas para a mistura gasosa em baixas densidades;

F_Q^0 = fatores de correção para quantificar os efeitos quânticos e da polaridade sobre a viscosidade do modelo de Lucas;

F_{Qi}^0 = fator de correção do modelo de Lucas para o gás puro em baixas densidades;

F_{Qm}^0 = fator de correção do modelo de Lucas para a mistura gasosa em baixas densidades;

F_P = fatores de correção para quantificar os efeitos quânticos e da polaridade sobre a viscosidade do modelo de Lucas em altas densidades;

f_{PD} = fator de atrito do meio poroso;

F_Q = fatores de correção para quantificar os efeitos quânticos e da polaridade sobre a viscosidade do modelo de Lucas em altas densidades;

g = aceleração da gravidade (m/s^2);

G_1 = parâmetro modelo de Chung;

G_2 = parâmetro modelo de Chung;

Ga = número de Gálio;

G_{ch} = constante do modelo de Chung;

Ga_p^* = número de Galio particulado;

H_{ch} = constante do modelo de Chung;

K = constante de Boltzmann;

K_I = constante do modelo de Darcy;

K_{1M} = parâmetro de otimização do modelo de Morelus;

K_{2M} = parâmetro de otimização do modelo de Morelus;

K_{3M} = parâmetro de otimização do modelo de Morelus;

K_B = parâmetro da equação de Bärnea;

K_F = parâmetro ajustável do modelo de Forchheimer;

K_{lee} = parâmetro do modelo de Lee *et al.* ;

K_p = constante de permeabilidade do meio poroso;

L = altura do leito poroso (m);

m = constante do modelo de Peng Robinson;

m_{PF} = interação entre o fluido e a matriz porosa;

M = massa molecular do gás (kg/mol);

M_{mc} = massa molar da mistura estimada pelas regras de mistura de Chung (g/mol);

M_H = massa molar do componente da mistura com maior peso molecular (Kg/mol);

M_L = massa molar do componente da mistura com menor peso molecular (Kg/mol);
 M_m = massa molar da mistura (Kg/mol);
 M_M = parâmetro do modelo de Mehta para correção do efeito da parede;
 n = parâmetro que influencia a porosidade do modelo de Sug e Lee;
 p = mudança na quantidade de movimento devido ao gradiente de pressão;
 P = pressão (Pa) ;
 P = pressão piezométrica (Pa);
 P_c = a pressão crítica (Pa);
 P_{cm} = pressão crítica da mistura (Pa);
 P_{vp} = pressão de vaporização (Pa);
 R = constante dos gases ideais (J/(mol.K));
 r_0/δ = razão entre o dimensão da partícula e o diâmetro do poro;
 Re = número de Reynolds;
 Re_M = número de Reynolds modificado pelo modelo de Morelus;
 Re_p = número de Reynolds particulado;
 $Re_{saída}$ = número de Reynolds calculado da saída do leito;
 S = superfície de controle (m²);
 S_{ch} = constante do modelo de Chung;
 T = temperatura (K);
 t = tempo (s);
 T^* = temperatura adimensional;
 T_c = temperatura crítica (K);
 T_{ci} = temperatura crítica do gás “i” puro (K);
 T_{cm} = temperatura crítica da mistura (K);
 T_r = temperatura relativa (T/T_c);
 u = velocidade do fluido (m/s);
 U = velocidade média na saída do leito (m/s);
 u_b = velocidade bulk do modelo de Di Felice (m/s);
 V = volume de controle (m³);
 V_{ci} = volume crítico do gás “i” puro (m³/mol) e para o modelo de Chung em cm³/mol;
 V_{mol} = volume molar dos gases (m³/mol);
 v_z = velocidade intersticial do fluido (m/s);

v_{zo} = velocidade intersticial inicial (m/s);

X_{lee} = parâmetro do modelo de Lee *et al.*;

Y = parâmetro do modelo de Lucas;

y_i = fração molar do gás;

Y_{lee} = parâmetro do modelo de Lee *et al.*;

y_{ch} = parâmetro modelo de Chung;

Z = fator de compressibilidade;

Z_1 = parâmetro do modelo de Lucas;

Z_2 = parâmetro do modelo de Lucas;

Z_{ci} = fator de compressibilidade do gás “i” puro;

W_{ch} = constante do modelo de Chung;

Sub Índices:

i = sub índice que indica o componente “i” utilizado para determinação da interação entre as moléculas por meio de regras de mistura;

j = sub índice que indica o componente “j” utilizado para determinação da interação entre as moléculas por meio de regras de mistura;

1 INTRODUÇÃO

A separação de componentes de soluções homogêneas gasosas – seja para a purificação de gases industriais ou até mesmo para controle da poluição atmosférica – é enfoque de pesquisas que buscam processos alternativos com menor relação custo/benefício. Um exemplo é o tratamento do gás natural para remoção do CO₂ e H₂S, causadores da corrosão de equipamentos e tóxicos em determinadas faixas de concentrações (FAIZ e AL-MARZOUQI, 2010; KROOSS *et al.*, 2002; XIAO *et al.*, 2008). Neste sentido, diversas pesquisas apontam para a grande potencialidade dos processos adsortivos para a remoção de componentes de correntes gasosas, como por exemplo, a pesquisa de Meisen e Shuai (2007), que estudaram a seletividade de adsorventes para remoções discretas de gases ácidos do gás natural e a de Agarwal *et al.* (2010), que demonstram a potencialidade de processos PSA (*pressure swing adsorption*) na remoção do CO₂ de correntes gasosas em um processo de fácil aplicação.

Um dos maiores custos envolvidos na operação de equipamentos que realizam a separação de gases por adsorção é proveniente da queda de pressão originada durante o escoamento do fluido no leito poroso (FOUMENY *et al.*, 1993), seja nas etapas de operação ou regeneração do material adsorvente. Portanto, para uma operação com menores custos, é necessário o conhecimento fluidodinâmico do leito perante diferentes partículas de contato, características do empacotamento, regimes de escoamento que podem proporcionar diferentes quedas de pressão (YANG, 2003).

Apesar do comportamento fluidodinâmico de colunas de adsorção ser um parâmetro decisivo na viabilidade do projeto, observam-se poucas pesquisas aprofundadas neste tema. A respeito disso, Shafeeyan *et al.* (2014) realizaram uma revisão sobre a modelagem de adsorção em colunas de leito fixo para remoção de CO₂ de misturas gasosas considerando pesquisas publicadas nas últimas três décadas, totalizando 34 trabalhos. Entre os resultados dos pesquisadores está que 19 das pesquisas desprezaram a influência da fluidodinâmica de colunas de leito fixo nos processos de adsorção, 10 consideram o modelo de Ergun (1952), 4 aplicaram as equações de quantidade de movimento para meios descontínuos e 1 considerou o modelo de Darcy (1856). Dos que fizeram o uso de equações empíricas e semi-empíricas, como Ergun, apenas 1 apresentou uma ótima concordância com resultados experimentais durante a simulação de curvas de ruptura.

Além das equações semi-empíricas de Ergun (1952) e Darcy (1856), a fluidodinâmica pode ser concebida por mais de 20 outros modelos empíricos ou semi-empíricos desenvolvidos nos últimos 80 anos, os quais, para determinadas situações, podem gerar melhores estimativas que os modelos tradicionais. Contudo, a aplicação de modelos simplifcatórios para representar a fluidodinâmica de um processo de escoamento em leito poroso deve ser cautelosa e a escolha do modelo correto deve ser pautada nas características do sistema que se deseja modelar e operar, tais como regime de escoamento, porosidade do leito, formato das partículas, dentre outros.

Com vista dos fatos apresentados, pretende-se com este trabalho 1) disponibilizar a equação de balanço de quantidade de movimento em seu formato geral, 2) simplificá-la a fim de gerar bases para a simulação de colunas de adsorção de leito fixo para a separação de componentes de correntes gasosas. Como objetivos específicos citam-se:

- Apresentar as simplificações da equação geral de balanço de quantidade de movimento para meios porosos por meio de pesquisas disponíveis na literatura;
- Verificar a aplicabilidade do modelo de Peng-Robinson utilizado para a predição da densidade de gases puros e misturas gasosas de interesse neste trabalho;
- Selecionar modelos preditivos para a viscosidade, que sejam capazes de fornecer baixos desvios em relação aos dados experimentais para moléculas gasosas polares e apolares;
- Determinar modelos de perda de carga preditivos, alternativos ao modelo de Ergun (1952) para escoamento em regime permanente de gases diversos;
- Validar os modelos de perda de carga pela comparação de dados experimentais disponíveis na literatura, capazes de fornecer melhores estimativas que o modelo de Ergun.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 PROCESSOS PARA A REMOÇÃO DE COMPONENTES DE CORRENTES DE GASOSAS

Processos industriais que utilizam a separação de gases são amplamente utilizados na indústria petroquímica, em usinas termelétricas, e por empresas fornecedoras de gases de alta pureza. Dentre os processos tradicionais para purificação cita-se a destilação criogênica, que demanda altos custos devido a grande necessidade energética (YU *et al.*, 2016). Há também os processos absorptivos que tem como inconveniente a baixa seletividade e difícil regeneração do absorvente (MEISEN e SHUAI, 2007; RUFFORD *et al.*, 2012). Um processo bastante promissor e alternativo é a utilização da adsorção, podendo gerar produtos com elevado grau de pureza uma vez que é possível a utilização de adsorventes seletivos à uma dada molécula. Por exemplo, em misturas que contém oxigênio e nitrogênio, podem ser utilizadas zeólitas LiX, que são seletivas ao nitrogênio (YANG E LIN, 2003).

Outro exemplo é o tratamento do gás natural, constituído por uma mistura de hidrocarbonetos gasosos (metano, etano, propano), podendo conter também dióxido de carbono, nitrogênio, sulfeto de hidrogênio, oxigênio, vapor d'água e traços de outros gases. Sua composição média é de 70 a 90% de metano e de 0 a 20% de outros gases, sendo 5% de dióxido de carbono e 2% de sulfeto de hidrogênio em média (MARZOUK *et al.*, 2012). Segundo Rufford *et al.* (2012), esses gases ácidos na presença de água podem sofrer reações químicas e produzir ácidos que causam corrosão de dutos e outros equipamentos. Outro inconveniente é a alta toxicidade do sulfeto de hidrogênio em determinadas faixas de concentrações (MUREDDU *et al.*, 2012), além de que a sua queima libera SOx na atmosfera, gás causador de chuva ácida.

Recentemente, estudos apontam que os custos inerentes no processo de captura de gases ácidos, como do CO₂, usando processos de adsorção podem ser menores do que os custos de processos convencionais, como da absorção utilizando solventes líquidos (HO *et al.*, 2008; RADOSZ *et al.*, 2008). Várias pesquisas que destacam a tecnologia de adsorção na captura do CO₂ por processos adsorptivos estão sendo

desenvolvidas mundialmente, demonstrando os atrativos desta técnica no tratamento de corrente gasosas que contenham este contaminante (GRANDE *et al.*,2008).

2.2 ADSORÇÃO

O fenômeno de adsorção é abordado pela ciência há quase dois séculos, apesar de registros de aplicações desde antes da era cristã. Sua utilização em aplicações industriais ainda é novidade, sendo empregado em leitos fixos e fluidizados, por meio do estudo do contato íntimo entre a partícula sólida adsorvente e uma corrente líquida ou gasosa (MCCABE *et al.*, 1985).

De acordo com Gomide (1987) esta é uma operação de transferência de massa do tipo sólido-fluido na qual se explora a habilidade de certos sólidos em concentrar na sua superfície determinadas substâncias existentes em soluções líquidas ou gasosas, o que permite separá-las dos demais componentes desta solução. Diz-se então que o sólido é seletivo, o que torna possível fracionar a solução. A quantidade adsorvida geralmente varia entre 5 e 30% da massa do sólido adsorvente, podendo chegar excepcionalmente a 50%. Uma vez que os componentes adsorvidos concentram-se sobre a superfície externa do sólido, quanto maior for esta superfície por unidade de peso de sólido, mais favorável será a adsorção. Por esta razão, os adsorventes são geralmente sólidos porosos.

O componente que se encontra diluído na fase fluida é denominado de adsorvato e o sólido que promove esta separação de adsorvente. A força motriz para a ocorrência deste fenômeno é a diferença de potencial químico entre o seio da fase fluida e a superfície do material sólido. No mecanismo de transferência de massa, o adsorvato difunde-se do seio do fluido até a interface fluido-sólido. Após atingir a superfície, o soluto difunde-se através dos microporos do adsorvente e então é adsorvido pelos sítios ativos (RUTHVEN, 1984).

2.2.1 ADSORVENTES

Os adsorventes são em sua maioria materiais bastante porosos, sendo que a adsorção ocorre nas paredes dos poros ou em locais específicos dentro das partículas, chamados de sítios de adsorção. Devido à grande quantidade de poros, a área superficial interna destes materiais supera em muitas vezes sua área superficial externa. Muitos tipos de sólidos porosos são utilizados como adsorventes, por conferirem estas características desejadas, tais como carvões ativados, zeólitas, argilas, entre outros (RUTHVEN, 1984).

2.2.1.1 Zeólitas

Estruturalmente as zeólitas são materiais com estrutura de redes cristalinas que contém moléculas de água em sua estrutura e formam uma sequência de blocos idênticos de aluminossilicatos constituídos por tetraedros do tipo TO_4 . Apresentam em sua morfologia canais internos ou poros cujo tamanho da abertura varia entre 4 a 12 Å que permitem a ocorrência do fenômeno da adsorção em seus poros, quando este é menor que o tamanho dos poros (MELO, 2007).

A zeólita LiLSX (*lithium ion-exchanged low silica X zeolite*) tem uma razão de Si/Al próxima de 1,0. Esta zeólita artificial apresenta uma alta capacidade e seletividade para o nitrogênio em processos de recuperação de oxigênio (CHANG-HAA LEE, 2003).

2.3 COLUNAS DE ADSORÇÃO

Grande parte dos processos industriais de adsorção é operada em colunas de leito fixo ou colunas empacotadas, sendo bastante empregada a tecnologia PSA (pressure swing adsorption) (RUTHVEN, 1984). Neste processo, duas ou mais colunas operam paralelamente. Se realizado com duas colunas, enquanto uma processa a separação, a outra regenera o adsorvente pela redução da pressão, promovendo o

transporte das partículas adsorvidas da superfície do adsorvente para o seio do fluido, recuperando o adsorvente (MCCABE *et al.*, 1985; RUTHVEN, 1984).

Várias pesquisas foram desenvolvidas com o intuito de promover separações discretas de correntes gasosas utilizando a tecnologia de colunas de adsorção, demonstrando a potencialidade da técnica. García *et al.* (2013) demonstraram em suas pesquisas uma máxima remoção de CO₂ de uma corrente de CO₂ e H₂ em uma temperatura de 60°C e em uma pressão de 5 bar utilizando carvão ativado em colunas de leito fixo. Ainda, determinaram que a técnica mais eficiente para regeneração do carvão foi por meio da modulação da pressão.

Belmabkhout *et al.* (2009) pesquisaram a remoção de uma mistura multi-componente composta de CO₂ e H₂S presentes em uma corrente de gás natural utilizando o adsorvente mesoporoso TRI-PE-MCM-41. Os autores observaram que este material apresentou elevadas capacidades de adsorção de CO₂ e H₂S e seletividade em relação ao metano, sendo o adsorvente totalmente regenerado a uma temperatura de 75°C.

Assim, verifica-se que a técnica de colunas de adsorção é promissora na remoção discreta de componentes de correntes gasosas e que se projetada e operada de forma adequada pode gerar melhores resultados quando comparados a outras tecnologias de remoção. Os custos, conforme relatado por Foumeny *et al.* (1993), podem ser minimizados ao se escolher características do leito que proporcionem menores perdas de carga para uma dada aplicação. Para isso, é fundamental o conhecimento fluidodinâmico do leito perante as aplicações que são desejadas (YANG, 2003).

2.4 FLUIDODINÂMICA DE COLUNAS DE ADSORÇÃO EM LEITO FIXO

O conhecimento do escoamento do fluido no interior dos interstícios da matriz porosa é essencial para o entendimento dos fenômenos de transferência de massa e de energia (GUNJAL *et al.*, 2005), que são necessários para o projeto destes equipamentos.

O projeto de um processo de adsorção apropriado é baseado no desenvolvimento de modelos que possam descrever a dinâmica de uma coluna de adsorção com um determinado adsorvente (DANTAS *et al.*, 2011; DELGADO *et al.*, 2006). A

modelagem empírica baseada em extensivas pesquisas experimentais demanda tempo e altos custos (SIAPOOSH *et al.*, 2009). Um modelo preditivo pode ser em princípio uma alternativa para estimar os parâmetros pertinentes sem a necessidade de grande demanda experimental. A simulação matemática de uma coluna fornece um melhor entendimento do comportamento do processo durante os ciclos de adsorção/dessorção e é uma ferramenta para otimização do mesmo (SHAFEEYAN *et al.*, 2014).

Neste sentido, Cen e Yang (1985) se propuseram a modelar a purificação de contaminantes de uma corrente de gás contendo H_2 , CO , CH_4 , H_2S e CO_2 utilizando carvão ativado em um processo PSA. Os autores desenvolveram o balanço de massa e de quantidade de movimento desprezando a dispersão de massa axial e assumindo o equilíbrio térmico entre a fase fluída e as partículas sólidas. As equações diferenciais obtidas foram resolvidas por meio do método de diferenças finitas. O modelo forneceu um comportamento teórico da coluna de adsorção, mas sua validação ficou prejudicada pela pequena quantidade de dados experimentais.

De maneira análoga, Mohamadinejad *et al.* (2003) estudaram a adsorção do dióxido de carbono de uma corrente gasosa contendo CO_2 , N_2 e H_2O em uma coluna de leito fixo utilizando a zeólita 5A. Diferentemente de Cen e Yang (1985) os autores consideram a dispersão de temperatura, concentração e velocidade na direção radial do leito. O sistema de equações diferenciais parciais foi resolvido pelos métodos de discretização de primeira e segunda ordem no tempo e no espaço, sendo a convergência dos dados matemáticos fornecidas pelo método de Newman. Como resultado os autores conseguiram prever os dados experimentais.

Ao contrário de Cen e Yang e Mohamadinejad *et al.*, Shen *et al.* (2010) desconsideraram a variação fluidodinâmica durante a modelagem de uma coluna de adsorção em leito fixo para a adsorção de CO_2 em carvão ativado, que foi resolvido por meio do software *gPROMS*. Com sua simulação, os autores conseguiram boas estimativas de dados experimentais na faixa de temperatura estudada. Entretanto, Kikkinides e Yang (1992) relatam que a desconsideração da fluidodinâmica em colunas de adsorção podem gerar desvios em relação aos dados experimentais. Enfatizam ainda que o efeito da queda de pressão na dinâmica do processo de adsorção leva a uma ruptura precoce tanto das curvas de concentração quanto das ondas térmicas ao longo do leito quando comparado ao caso em que se despreza a queda de pressão.

Verifica-se, deste modo, uma não uniformidade nas pesquisas disponíveis na literatura sobre o escoamento em colunas de adsorção em leito fixo. Em algumas pesquisas, o comportamento fluidodinâmico é representado pela interação entre as fases fluidas e particuladas (Mohamadinejad *et al.*, 2003). Em outras, são utilizados modelos preditivos semi-empíricos ou empíricos, como nas pesquisas de Sereno e Rodrigues (1993), que utilizam o modelo preditivo de Ergun (1952). Há ainda àqueles que desconsideram o comportamento fluidodinâmico na representação destes processos, como nas pesquisas de Shen *et al.* (2010). Na primeira abordagem, a influência fluidodinâmica é obtida ao se considerar uma partícula imersa num fluido. Este modelo é conhecido como modelo discreto de partícula (BARNEA E MEDINICK, 1978). Na segunda, as perdas de carga podem ser associadas a fluxos em tubos estreitos, formadores dos canais entre as partículas adsorventes ou por ajustes empíricos a dados experimentais. Este modelo é conhecido como modelo de regime permanente (BARNEA E MEDINICK, 1978; SERENO E RODRIGUES, 1993). Ambos os casos podem requerer a solução das equações de Navier-Stokes, tornando-se mais complexo do que a escolha por modelos preditivos para o fator de atrito aplicados a sistemas específicos.

Assim, como relatado, considerando apenas o comportamento fluidodinâmico de uma coluna de leito fixo, observa-se que grande parte das pesquisas tem seguido uma das duas linhas, conforme demonstrado na Figura 1 a seguir, ou seja, pelo uso do modelo discreto de partícula ou aplicação de equações empíricas ou semi-empíricas que serão tratados nos próximos tópicos.

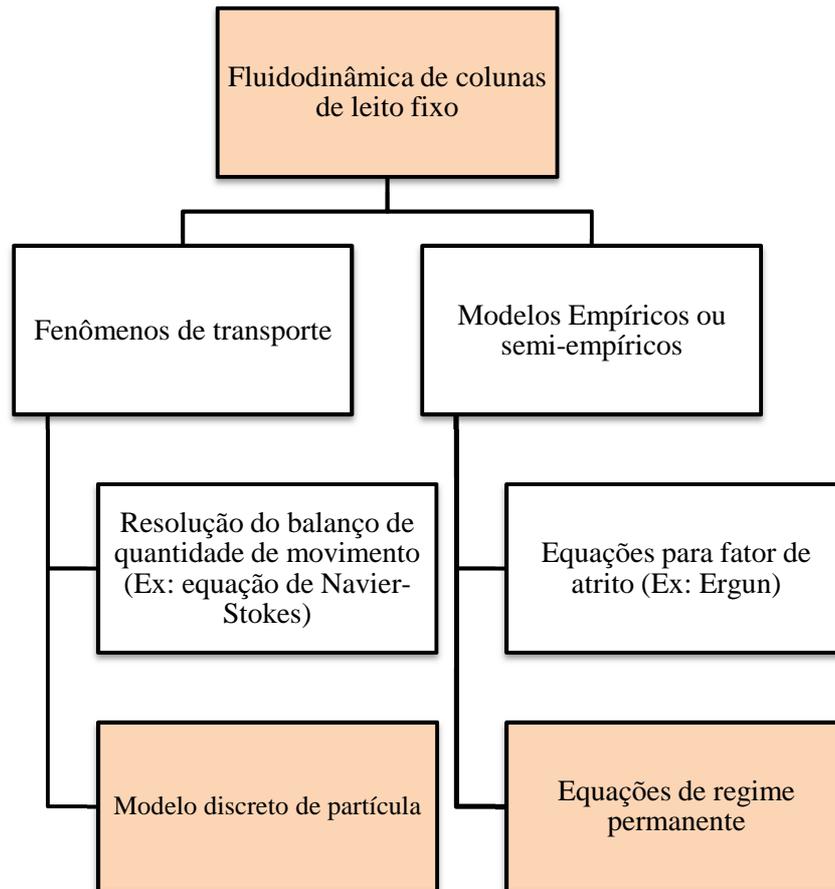


Figura 1 - Esquema geral para previsão do comportamento fluidodinâmico de colunas de leito fixo.

2.4.1 MODELO DISCRETO DE PARTÍCULA

Para descrever a variação de quantidade de movimento em leitos porosos utiliza-se o teorema de transporte de Reynolds, que reúne a lei da conservação do movimento, a segunda lei de Newton e as leis da termodinâmica, descritas em seu formato geral pela Equação 1 (CREMASCO, 2012):

$$\frac{D}{Dt} \iiint \rho u dV = \iiint \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} dV + \iint (\rho u u) \cdot n dS \quad 1)$$

De acordo com Cremasco (2012), o primeiro termo desta equação representa a variação da quantidade de movimento de acordo com a concepção de Lagrange, indicando a variação desta propriedade com o tempo, tomando-se como base um referencial que acompanha as partículas do fluido, enquanto que o termo após a igualdade apresenta a variação da quantidade de movimento com relação a coordenadas espaciais fixas (concepção de Euler). Nesta equação, ρ representa a densidade do fluido, u a velocidade do fluido, V o volume de controle, t o tempo e S a superfície de controle em que são aplicadas as forças externas.

O desenvolvimento da Equação 1 para escoamentos em meios porosos que envolvem o contato fluido-partícula, o balanço de massa e o movimento do fluido, junto a uma equação de estado, resultando na equação de Navier-Stokes, desenvolvida originalmente por Navier com base em argumentos moleculares e por Stokes a partir do conceito de contínuo, demonstrado pela Equação 2.

$$\rho\varepsilon\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u.\nabla u\right) = -\nabla p + \nabla\tau + m_{PF} + \rho b_g \quad 2)$$

Em que ε é a porosidade do meio, p é a pressão, τ as tensões cisalhantes, m_{PF} as interações entre a matriz porosa e o fluido; e b_g as forças de campo gravitacional.

Na Equação 2, o termo a esquerda representa a variação da quantidade de movimento no tempo e espaço, e os termos à direita, representam as forças que atuam no elemento de controle e promovem variações na quantidade de movimento do sistema. O primeiro e segundo termo após a igualdade representam forças de superfície que atuam sobre as fronteiras do elemento de controle. O terceiro termo representa a força exercida pelo fluido sobre a matriz porosa e o último termo as forças gravitacionais (CREMASCO, 2012).

Luberti *et al.* (2015) apresentam em sua pesquisa um desenvolvimento da Equação 2 considerando o escoamento do fluido no sentido axial e desconsiderando a variação das propriedades na direção radial, apresentado conforme mostrado na Equação 3:

$$\varepsilon \frac{\partial(\rho_g u_z)}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial(\rho_g u_z \cdot u_z)}{\partial z} + \varepsilon \frac{\partial P}{\partial z} - \Gamma u_z + \varepsilon f_{PD} = 0 \quad 3)$$

Neste caso ρ_g representa a densidade da fase gasosa, u_z representa a velocidade intersticial do fluido na direção do escoamento, P a pressão piezométrica, Γ o termo de acúmulo devido ao fenômeno de adsorção, e f_{PD} o fator de atrito do meio poroso.

O termo de acúmulo é definido pelos autores conforme Equação 4:

$$-\Gamma = (1 - \varepsilon) \frac{\partial(\rho_a)}{\partial t} \quad (4)$$

Sendo ρ_a é a densidade da fase adsorvida na superfície do adsorvente.

Jakobsen *et al.* (2002) relatam em suas pesquisas que a variação da pressão em termos da altura do leito (primeiro termo após a igualdade da Equação 2 pode ser mensurada utilizando-se uma equação de estado e o fator de atrito do meio poroso pode ser estimado por meio de equações disponíveis na literatura, sendo sugerido o uso da equação de Froment e Bischoff (1990).

São poucos os trabalhos que se dedicam a resolução do balanço de quantidade de movimento para obtenção dos perfis de pressão e velocidade em função do comprimento do leito e do tempo. Isso é resultado da complexidade das equações diferenciais obtidas, conforme demonstrado na revisão de dados da literatura realizados por Shafeeyan *et al.* (2014). Mesmo com a adoção de técnicas numéricas, ainda assim a resolução é dificultada em virtude da não convergência dos dados ou a tempos computacionais demasiados. Este fato dificulta os processos de simulação e demanda uma escolha por modelos simplificados, que viabilizem a convergência dos dados com menores tempos computacionais.

Para reduzir a demanda computacional diversos autores propõem simplificações na equação de quantidade de movimento. Kikkinides e Yang (1992) modelaram a purificação de oxigênio em colunas de adsorção isotérmicas utilizando-se a zeólita 13X-PSO₂, comparando os resultados com dados experimentais em temperaturas próximas a

25°C e pressões de 25 psig. Os autores reportaram que para aplicações práticas de processos de adsorção, o primeiro, segundo e quarto termos da Equação 3 possuem uma ordem de grandeza de 4 a 5 vezes menor do que os outros termos, podendo ser desprezados. Para estimativa do fator de atrito do meio poroso os autores utilizaram o modelo preditivo de Ergun (1952), resultando em um modelo simplificado, conforme a Equação 5.

$$\varepsilon \frac{\partial P}{\partial z} + \varepsilon f_{PD(ERGUN)} = 0 \quad 5)$$

Ainda, os autores provam por meio de dados experimentais que a Equação (5) é capaz de fornecer boas estimativas, como demonstrado na Figura 2.

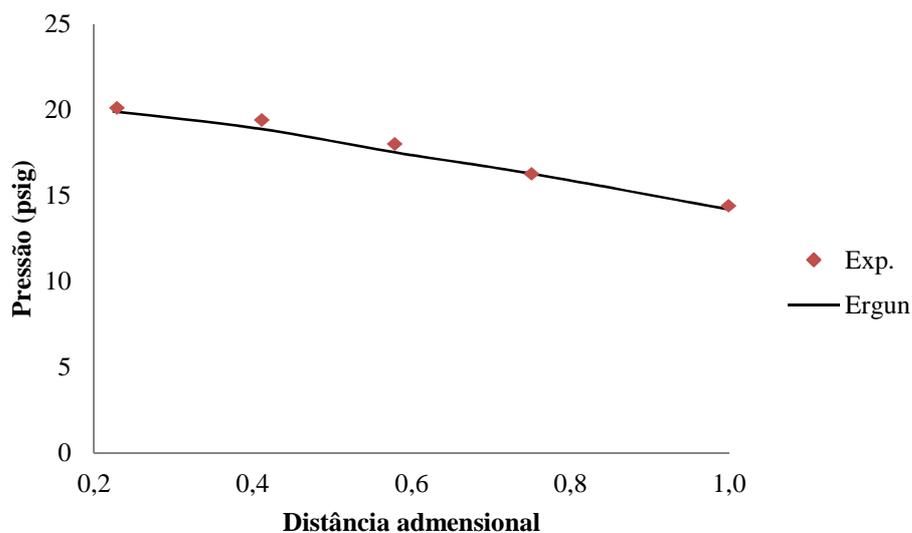


Figura 2 - Queda de pressão para o fluxo de 2% de oxigênio em hélio em coluna de leito fixo de zeólita 13X, com comprimento de 44,5cm e velocidade intersticial de 81,14 cm/s.

Fonte: (Kikkinides e Yang, 1992)

Sob esta mesma perspectiva, Sereno e Rodrigues (1993) vão além e investigam se a modelagem das etapas de pressurização e purga de ciclos de adsorção poderiam ser realizadas empregando-se somente as equações de regime permanente. Os autores testaram o efeito de três diferentes casos, como equações de balanço de quantidade de movimento que empregam equações de regime permanente (Equação 3) e um balanço

de massa, constituindo o modelo geral, em seguida, uma simplificação é aplicada neste modelo, e são desprezados os efeitos cinéticos, deixando o modelo conforme a Equação 5, resolvida de forma concomitante ao balanço de massa e por último, apenas o uso de equações de regime permanente. Como resultados, verificaram que a utilização de uma equação de regime permanente, como o modelo de Ergun pode ser utilizada de forma segura para representar o balanço de quantidade de movimento, apresentando uma boa concordância com dados experimentais.

Nessa mesma linha de simplificações do balanço de quantidade de movimento, Tood e Webley (2005) modelaram o processo dinâmico de adsorção em coluna de leito fixo para purificação do O_2 utilizando zeólitas LiLSX. Em sua pesquisa, consideraram que as perdas de quantidade de movimento devido ao fator de atrito com o meio poroso prevalecem sobre os outros termos da Equação 3, podendo aqueles com pequenas magnitudes serem desprezados. Os autores comprovam tal simplificação ao utilizar este modelo simplificado, tal qual como a Equação 5, para modelar o escoamento de Hélio no meio poroso, calculando o desvio relativo entre dados experimentais de queda de pressão e medidas estimadas pela Equação 5, conforme demonstra a Figura 3.

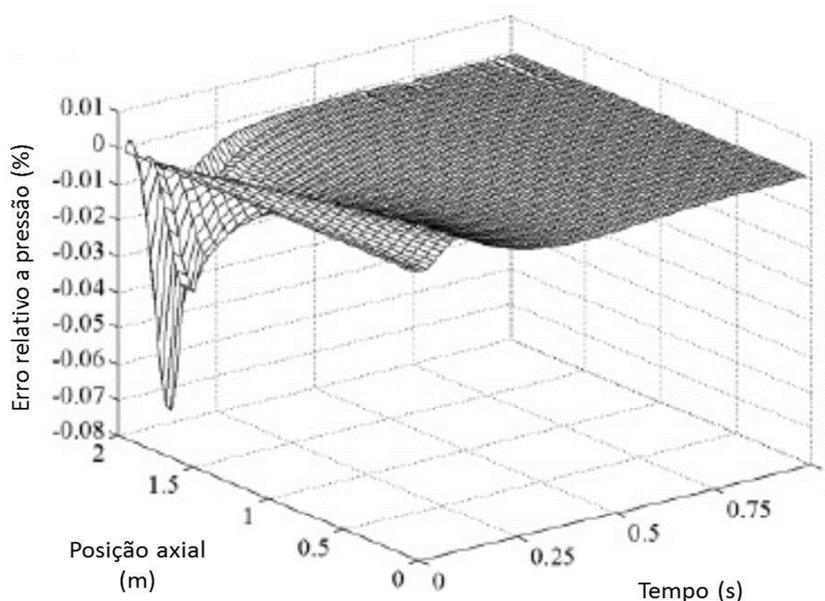


Figura 3 - Erro relativo entre a pressão experimental e pressão estimada pelo modelo simplificado de balanço de quantidade de movimento em função do tempo e do comprimento do leito.

Fonte: (Tood e Webley, 2005)

Na Figura 3, os desvios em relação aos dados experimentais são menores do que 0,1% e ocorrem no tempo inicial e na saída do leito. Ainda, em suas pesquisas os autores modelaram a curva de ruptura durante o escoamento de correntes gasosas de oxigênio em nitrogênio utilizando a equação de quantidade de movimento em sua forma simplificada. Encontraram novamente pequenos desvios em relação aos dados experimentais, demonstrando a potencialidade de modelos simplificados de balanço de quantidade de movimento em representar a dinâmica de colunas de leito fixo.

Seguindo esta tendência, Rao e Farooq (2014) pesquisaram a curva de ruptura de oxigênio em colunas de leito fixo contendo zeólitas 5A com partículas na faixa de tamanho de 63 a 75 μ m. Por trabalharem com partículas finamente divididas, a queda de pressão proporcionada durante o escoamento da corrente gasosa foi grande. Os autores empregaram em seu trabalho um balanço de quantidade de movimento simplificado, em sua forma integrada. O fator de atrito do meio poroso neste caso foi estimado por meio do modelo de Darcy, com suas constantes ajustadas, representado pela Equação 6.

$$\frac{\Delta P}{\Delta L} = \frac{\eta}{k_p} v_z \quad 6)$$

Em que L representa a altura do leito, η representa a viscosidade dinâmica, k_p a permeabilidade do meio poroso, v_z a velocidade intersticial unidimensional na direção z .

O valor da permeabilidade do meio é dado de acordo com a Equação 7.

$$k_p = \frac{d_p^2}{k_1} \left(\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \right)^2 \quad 7)$$

Em que d_p é o tamanho médio de partícula e k_1 a constante de Darcy, cujo valor original é 150.

Para adequar a equação com o uso do modelo de Darcy para partículas finamente divididas os autores precisaram fazer um ajuste da constante original de Darcy. O ajuste foi realizado por dois métodos. No primeiro, a constante original de

Darcy foi ajustada pela minimização do erro entre os dados experimentais de queda de pressão e os dados simulados como função da velocidade intersticial na entrada da coluna. No segundo, foi empregado a equação do balanço de massa total, simplificado pela lei dos gases ideais e equação de Darcy para queda de pressão, resolvida com o software *COMSOL Multphysics* para fornecer a variação da velocidade na coluna. Os autores realizaram a minimização dos erros entre dados experimentais e dados simulados para determinar o valor das constantes de Darcy que fornecem os melhores ajustes. Os resultados são demonstrados na Figura 4.

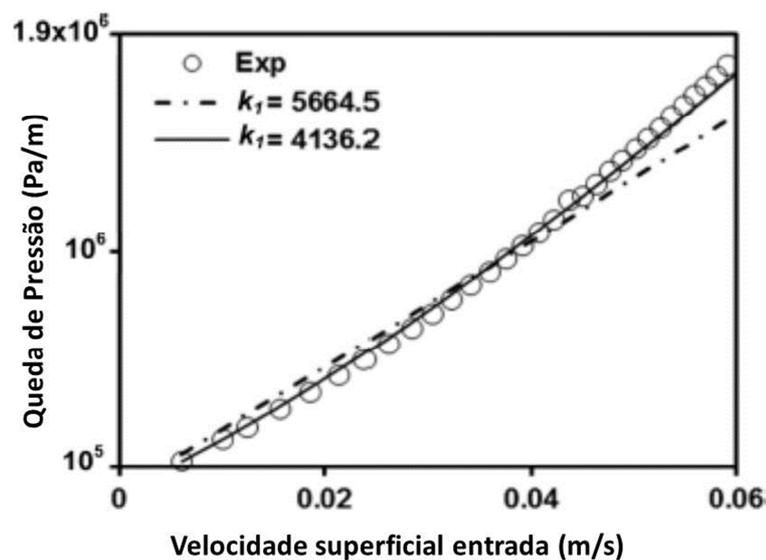


Figura 4 - Queda de pressão como função da velocidade intersticial.

Fonte: (Farooq e Rao, 2014)

O valor da constante de Darcy, originalmente 150, passou a ser 5.664,5, com o ajuste do primeiro método e 4.136,2 com o ajuste do segundo método. Portanto, o emprego de uma equação de regime permanente, como o modelo de Darcy (método 1), com constantes ajustadas estimou de forma adequada a fluidodinâmica do processo.

De maneira análoga às outras pesquisas que utilizaram simplificações em seus modelos, ao se analisar a Equação 6 percebe-se que tem o mesmo formato da Equação 5, sendo que esta apresenta a equação na forma integral e utiliza-se do fator de atrito de Darcy, dado pelo lado direito da Equação 6, e aquela é dada na forma diferencial e o fator de atrito é estimado pelo modelo de Ergun. Portanto, embora não seja mencionado

pelos autores, entende-se que de forma implícita a Equação 5 é originada por meio de uma simplificação da Equação 3.

Ainda, nessa mesma linha de raciocínio, Luberti *et al.* (2015) avaliaram a influência da fluidodinâmica de colunas de adsorção em leito fixo sob os perfis de temperatura. Eles relataram que diversos outros autores desprezam a influência da fluidodinâmica ao considerarem velocidade constante ao longo do leito. Desenvolveram também um extensivo equacionamento, que engloba os balanços de massa, energia e quantidade de movimento, sendo que o modelo que contempla os três fenômenos é chamado de “modelo rigoroso”. Consideram duas situações distintas para simplificar o modelo complexo. Na primeira são desconsiderados os termos que descrevem as mudanças de velocidade, chamado de modelo 1. Na segunda, consideram a variação da temperatura com o tempo devido a influência da capacidade calorífica do gás, ainda desprezando os efeitos cinéticos, chamado de modelo 2. Ainda, no “modelo rigoroso”, fazem uma simplificação e consideram que o fator de atrito do meio poroso tem influência decisiva nos perfis de velocidade, resultando na Equação 8, que é a equação de balanço de energia substituída na equação de balanço de quantidade de movimento.

$$\rho_g C_{p,g} \frac{dT}{dz} = \frac{dP}{dz} - f_{PD(ERGUN)} \quad 8)$$

Em que $C_{p,g}$ é a capacidade calorífica do gás e T a temperatura.

Ao compararem os resultados obtidos pelo modelo rigoroso com as duas simplificações verifica-se pouca influência destas nos perfis de temperatura, divergências menores que 0,002K, conforme demonstra a Figura 5.

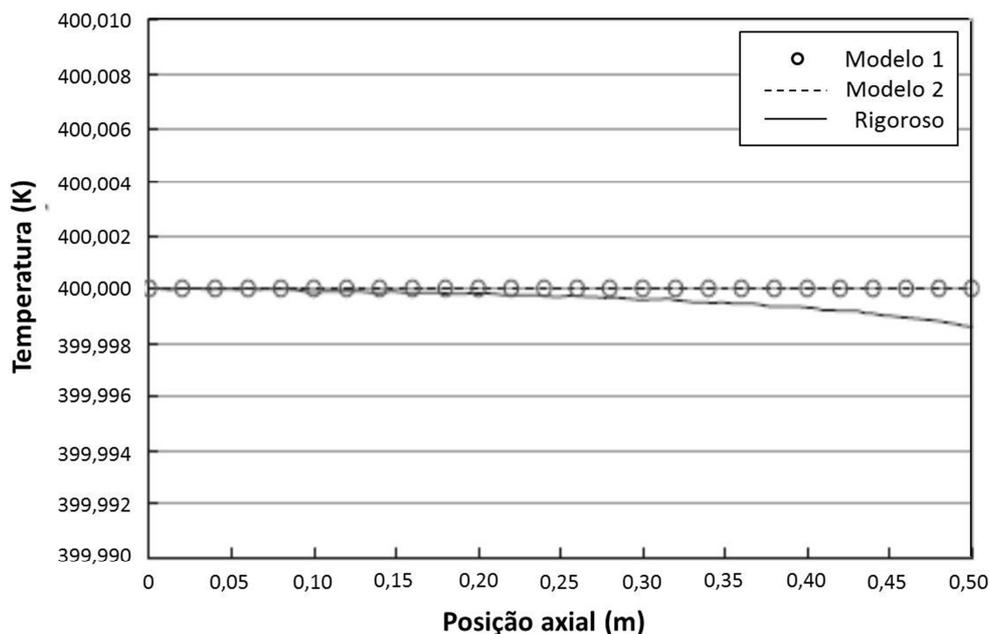


Figura 5 - Comparação dos perfis de temperatura sob três modelos diferentes durante o fluxo de gás em altas pressões.

Fonte: (Luberti, 2015)

Em suma, verifica-se que no desenvolvimento da Equação 8, os autores desconsideraram o primeiro, segundo e quarto termo da Equação 3, levando em consideração que a influência destes é mínima comparada ao atrito do meio poroso, estimada pelos autores pelo uso do modelo de Ergun.

Como observado, de forma geral, em pesquisas de adsorção em leito fixo, os pesquisadores que não desprezam a fluidodinâmica do sistema e que utilizam o balanço de quantidade de movimento em sua forma simplificada, desprezando os termos de variação na quantidade de movimento devido a mecanismos convectivos e de acúmulo da Equação 3 tem encontrado boas estimativas de dados experimentais. Verifica-se ainda que tal simplificação torna o perfil de pressão como função apenas do atrito oferecido pelo escoamento no meio poroso, sendo amplamente utilizadas equações de regime permanente tradicionais, como os modelos de Darcy (1856) e Ergun (1952) conforme denota a Equação 5. Além do uso da equação de Ergun e Darcy, existem mais de 20 outros modelos, preditivos, empíricos ou semi-empíricos, desenvolvidos nos últimos 80 anos, e que em determinadas faixas de aplicação podem fornecer melhores estimativas do fator de atrito quando comparado aos modelos tradicionais, que é o assunto a ser tratado no próximo tópico.

2.4.2 EQUAÇÕES DE REGIME PERMANENTE

A necessidade de se reduzir a demanda computacional ao se executar a simulação da fluidodinâmica do escoamento em leito fixo e a alta complexidade em definir a geometria do leito fizeram surgir modelos preditivos, conhecidos também por modelos de regime permanente, capazes de descrever de forma satisfatória o comportamento fluidodinâmico de leitos recheados (Yang, 2003).

Enquanto o modelo discreto de partículas baseia-se na suposição de que o leito é composto por um conjunto de partículas discretas, os modelos de regime permanente foram concebidos de diferentes formas. Pode-se ressaltar a analogia ao escoamento no do leito como sendo um fluxo por meio de uma série de tubos capilares retos de mesma área transversal, como por exemplo, o modelo de Tallmadge (1970) e Molerus (1980), e também por meio de ajustes a dados experimentais, como no modelo de Rose e Risk (1949). Conceitualmente, o modelo discreto de partícula representa melhor a realidade física do fluxo em meio poroso, contudo, devido sua complexidade, historicamente, os modelos de regime permanente, por sua simplicidade de aplicação, são mais utilizados (YANG, 2003).

A origem dos modelos de regime permanente se deu através de pesquisas, realizadas por Henry Darcy, em 1856, que determinou empiricamente através do fluxo de água em um leito contendo areia, em certas circunstâncias, que a velocidade era proporcional à queda de pressão através do sistema no sentido do fluxo, conforme Equação 6. Em 1901, Forchheimer realizou diversas investigações experimentais e demonstrou que se a velocidade do fluido é aumentada, a partir de certo ponto a proporcionalidade sugerida por Darcy deixava de ser representativa, e sugeriu, também de forma empírica, que o fluxo nestas condições é descrito por uma relação de ordem mais elevada, conforme a Equação 9 (FORCHHEIMER, 1901):

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{\eta u}{k_p} + \rho k_F u^2 = \alpha_{NV} u + \beta_{NV} u^2 \quad 9)$$

Em que k_F um parâmetro ajustável da equação de Forchheimer. Os valores de α_{NV} e β_{NV} podem ser obtidos pela solução das equações parciais diferenciais de Navier-Stokes sob condições de contorno especificadas. De acordo com Dzmitry e Tallarek (2006), a geometria complexa do leito e a não linearidade desta equação diferencial torna a solução analítica de difícil obtenção, justificando os esforços de pesquisadores subsequentes para obter um relacionamento empírico entre $\Delta P/L$ e u em meios porosos.

Desde então, o modelo empírico mais consagrado e utilizado na literatura é a relação proposta por Ergun (1952), que estudou o fenômeno de escoamento de um gás escoando através de partículas sólidas relacionando com a velocidade do fluido, com as propriedades do fluido e do meio particulado. Generalizando a equação de Forchheimer, Ergun obteve a seguinte equação, representada pela Equação 10:

$$\frac{\Delta P}{L} = A \frac{(1 - \varepsilon)^2 \eta v_z}{\varepsilon^3 d_p^2} + B \frac{(1 - \varepsilon) \rho v_z^2}{\varepsilon^3 d_p} \quad 10)$$

Após a análise de uma grande quantidade de dados experimentais, Ergun concluiu que a melhor representação para os parâmetros adimensionais de ajuste são $A=150$ e $B=1,75$ (ERGUN, 1952).

Apesar de ser uma equação consagrada e bastante utilizada na literatura, diversas pesquisas demonstram que sob certas condições o seu uso pode levar a uma não representatividade dos dados experimentais ao qual foi submetida. Nemeč e Levec (2005) estudaram a queda de pressão em leito de partículas esféricas e não esféricas e relatam em seus resultados terem encontrado forte evidência de que a equação de Ergun prevê valores acima do medido para a queda de pressão em número de Reynolds acima de 300, sendo que a diferença se torna bastante significativa dentro do regime turbulento ($Re > 900$). Morelus (1980) relata que a incerteza nos parâmetros A e B da equação de Ergun é maior que nos parâmetros da equação de Forchheimer, já que os últimos refletem a incerteza na medida da queda de pressão e velocidade somente, e os da equação de Ergun, além da incerteza na queda de pressão e velocidade, também oferecem incertezas quanto ao tamanho de partícula e porosidade. Hicks (1970) afirma que a equação de Ergun pode não apresentar resultados satisfatórios para número de Reynolds acima de 500 e para partículas não esféricas. Farooq e Rao (2014) testaram o modelo de Darcy em um sistema constituído de partículas de zeólita 5A com diâmetro

médio de 69 μm para a concentração de O_2 em leito fixo e concluíram que a equação original subestima os valores experimentais em duas ordens de grandeza.

Valores universais das constantes Ergun tem sido um assunto de debate considerável desde 1952. De acordo com Jiang *et al.* (2001), os valores dessas constantes não são apenas dependentes da geometria da partícula, mas também podem variar de acordo com as características de empacotamento do leito. Assim seus valores podem ser determinados para grupos de geometria semelhante (NEMEC e LEVEC, 2005). Desta forma, ao longo dos anos desenvolveram-se diversas pesquisas que procuram modificar a equação de Ergun a fim de obter uma melhor representatividade de resultados experimentais sob certas condições e geometrias especificadas. As mudanças levam em conta uma série de fatores, embasados em resultados experimentais ou teóricos, tais como, a variação da forma da partícula, a porosidade do leito, a influência da resistência ao escoamento oferecido pela parede e também a influência das velocidades elevada sob a queda de pressão.

No tópico seguinte são disponibilizados alguns desses principais modelos em regime permanente, englobando modelos que modificaram a equação de Ergun, outros que em sua fundamentação utilizaram as bases teóricas das equações de Navier-Stokes com sua solução sob condições de contorno especificadas e ajustes a dados experimentais, e outros puramente empíricos que se ajustaram aos dados experimentais para sistemas específicos. Os modelos foram separados em duas categorias, de acordo com a influência ou não da parede na fluidodinâmica de colunas de adsorção.

2.4.2.1 Equações de regime permanente sem o efeito da parede

Na tabela 1 são apresentados algumas das principais equações desenvolvidas nos últimos 80 anos, em ordem cronológica, que são equações alternativas ou que corrigem o modelo de Ergun, bem como suas restrições e faixas de aplicação.

Entre as restrições aplicadas (tabelas 1) há o tipo de escoamento, que pode ser laminar, de transição e turbulento. Para meios porosos é definido por meio do número de Reynolds modificado, conforme Equação 11.

$$Re_p = \frac{\rho u d_p}{(1 - \varepsilon)\mu} \quad 11)$$

Não existe um consenso na literatura quanto aos limites do número de Reynolds para classificação do tipo de escoamento. Brea e Edwards (1976) consideram que o escoamento é laminar para $Re_p < 10$. Uma transição gradual ocorre entre os números de Reynolds $10 < Re_p < 10^3$, depois do qual o fluxo é inteiramente turbulento.

Outro parâmetro restritivo empregado em grande parte dos modelos é a porosidade do leito. Esta propriedade estima a fração de vazios existente no leito e pode ser estimada por meio do conhecimento da relação D/d_p da coluna, o tamanho e formato da partícula (esfericidade). Para uma relação $2 \leq D/d_p \leq 19$, ela pode ser estimada de acordo com a Equação 12 (RIBEIRO *et al.*, 2010):

$$\varepsilon = 0,373 + 0,917 \exp\left(-0,824 \frac{D}{d_p}\right) \quad 12)$$

Como mencionado, existe ainda o parâmetro que leva em conta o formato da partícula, chamado de esfericidade (ϕ). Para uma partícula esférica a esfericidade é igual a 1. Para as outras formas, a esfericidade é sempre menor que 1 (LING, 2003): Uma das metodologias empregadas para determinar a esfericidade é a medição da queda de pressão em leitos porosos e regressão dos dados experimentais por uso de equações empíricas, como a equação de Ergun. Além disso, para formas geométricas comumente empregadas, dados de esfericidade são encontrados tabelados (LING, 2003):

Tabela 1 - Correlações teóricas para prever a queda de pressão de sistemas particulados que desconsideram o efeito da parede, faixas de aplicação e considerações.

Ano	Autor	Equação	Regime (Reynolds)	Porosidade (ϵ)	Partícula	Considerações
1949	Rose e Risk	$\frac{\Delta P d_p}{\rho L v_z^2} = \frac{1000}{Re} + \frac{125}{\sqrt{Re}} + 14$ $Re = \frac{\rho u d_p}{\mu}$	Todo intervalo	$0,30 \leq \epsilon \leq 0,90$	Esféricas ou não esféricas	Os autores correlacionaram uma grande quantidade de dados experimentais, e propuseram seu modelo, capaz de prever valores de queda de pressão de em uma ampla faixa de porosidade e em todo regime de escoamento.
1963	Wentz Jr. e Thodos	$\frac{\Delta P d_p \phi}{\rho v_z^2 L} = \frac{0,351}{Re_p^{0,06} - 1,20}$ $\frac{\Delta P d_p \phi}{\rho v_z^2 L} = \frac{0,396}{Re_p^{0,06} - 1,20}$	$2550 \leq Re_p \leq 64900$	$0,354 \leq \epsilon \leq 0,882$	Partículas esféricas com diâmetros diversos	Os autores testaram a influência do arranjo geométrico e fração de vazios sob a queda de pressão. Sugerem uma relação simples capaz de prever a queda de pressão e concluem que os efeitos estudados não possuem influência sob os valores da queda de pressão. O primeiro modelo desconsidera a influência da entrada e saída do leito (leitos com grande comprimento).
1970	Hicks	$\frac{\Delta P d_p^2}{L \eta v_z} \frac{\epsilon^3}{(1 - \epsilon)^2} = 6,8 \left(\frac{Re}{1 - \epsilon} \right)^{0,8}$	$300 \leq \frac{Re}{(1 - \epsilon)} \leq 60000$	-	Esféricas	Concluem em seus testes que na região de dissipação viscosa (laminar), o modelo proposto por eles apresenta melhores resultados que a correlação de Ergun.
1970	Tallmadge	$\frac{\Delta P d_p \epsilon^3}{v_z^2 \rho L (1 - \epsilon)} = \frac{150}{Re_p} + \frac{4,2}{Re_p^{1/6}}$	$10^{-1} \leq Re_p \leq 10^5$	$0,35 \leq \epsilon \leq 0,88$	Esféricas	Propuseram seu modelo com base na analogia de escoamento em tubos. Sua proposição é feita com base na análise de dados experimentais disponíveis na literatura.
1978	Barnea e Mednick	$\frac{\Delta P d_p}{2 L \rho v_z^2} = (1 + 0,884 K_B) \left(\frac{158}{Re} + \frac{18,8}{Re^{1/2}} + 0,56 \right)$ $K_B = 2,6$	Laminar, transição e turbulento.	Partículas rearranjadas aleatoriamente	Partículas esféricas com estreita distribuição de tamanhos	Baseado em um modelo multipartículas de formato esférico com correção para os efeitos de interação entre partículas. As estimativas possuem bom ajuste para regime laminar e transição e valores subestimados em regime turbulento. O valor de K_B é um parâmetro do modelo e deve ser ajustado a partir de dados experimentais, sendo sugerido um valor para partículas esféricas.

1979	MacDonald <i>et al.</i>	$\frac{\Delta P}{L} = A_M \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^{3,6}} \frac{\eta v_z}{(d_p)^2} + B_M \frac{(1 - \varepsilon) \rho v_z^2}{\varepsilon^{3,6} d_p}$ $A_M = 180, \quad B_M = 1,8$	-	$0,36 \leq \varepsilon \leq 0,92$	Esferas ásperas	O parâmetro B_M é uma função da aspereza da partícula e seu valor encontra-se entre 1,8 e 4,0. O parâmetro A_M , para partículas não esféricas, é função do formato da partícula ou porosidade do leito. Em regime laminar, A_M é independente da porosidade, relacionando-se com o diâmetro equivalente da partícula. Para escoamentos com Reynolds mais elevado, o parâmetro A_M torna-se função da porosidade do leito. O desvio estimado pelos autores é de 50%.
		$\frac{\Delta P}{L} = A_M \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^{3,6}} \frac{\eta v_z}{(d_p)^2} + B_M \frac{(1 - \varepsilon) \rho v_z^2}{\varepsilon^{3,6} d_p}$ $A_M = 180, \quad B_M = 4,0$	-	$0,36 \leq \varepsilon \leq 0,92$	Esferas lisas	
		$\frac{\Delta P}{L} = A_M \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^{3,6}} \frac{\eta v_z}{(d_p)^2} + B_M \frac{(1 - \varepsilon) \rho v_z^2}{\varepsilon^{3,6} d_p}$ $A_M = 3,27 + 118,2d_{eq}$ $B_M = 1,8 \text{ a } 4,0$	Baixo a moderado Reynolds	$0,36 \leq \varepsilon \leq 0,92$	Não esféricas	
		$\frac{\Delta P}{L} = A_M \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^{3,6}} \frac{\eta v_z}{(d_p)^2} + B_M \frac{(1 - \varepsilon) \rho v_z^2}{\varepsilon^{3,6} d_p}$ $A_M = 214,25 - 151,72\varepsilon$ $B_M = 1,8 \text{ a } 4,0$	Reynolds elevado	$0,36 \leq \varepsilon \leq 0,92$	Não esféricas	

1980	Morelus	$Eu = \frac{24}{Re_M} \left\{ 1 + K_{1M} \left[\frac{r_0}{\delta} + \frac{1}{2} \left(\frac{r_0}{\delta} \right)^2 \right] \right\}$ $+ \frac{4}{\sqrt{Re_M}} + 0,4$ $+ K_{2M} \frac{r_0}{\delta}$ $K_{1M} = 0,777$ $K_{2M} = 0,511$ $\xi = 0,95$ $Re_M = \frac{v_z \rho d_p}{\varepsilon \eta}$ $\frac{r_0}{\delta} = \frac{1}{\frac{\xi}{\sqrt[3]{1-\varepsilon}} - 1}$ $Eu = \frac{4 \Delta P d_p}{3 L \rho v_z^2 (1-\varepsilon)} \varepsilon^2$	$Re_M \leq 200$	$0,35 \leq \varepsilon \leq 0,64$	Esféricas*	Os autores sugeriram seu modelo semi-empírico com base na definição de célula unitária, ou seja, o estudo do fluxo sobre uma partícula isolada. Combina o número de Reynolds (modificado pelos autores, Re_M), Euler (Eu) e um parâmetro adimensional r_0/δ , que trata da dimensão da partícula pela dimensão dos poros. ξ é um parâmetro do leito, função do empacotamento, K_{1M} e K_{2M} são parâmetros de otimização, todos ajustados a partir de dados experimentais, sendo sugeridos valores para tipos específicos de partículas. *Seu modelo também é capaz de descrever o comportamento de leitos fluidizados e de partículas não esféricas, desde que alterados os parâmetros ajustáveis.
1983	Foscolo, Gibilaro e Waldram	$\frac{\Delta P}{L} = 17,3 \frac{\eta v_z}{(d_p \phi)^2} (1-\varepsilon) \varepsilon^{-4,8}$ $\frac{\Delta P}{L} = 0,336 \frac{\rho v_z^2}{d_p \phi} (1-\varepsilon) \varepsilon^{-4,8}$ $\frac{\Delta P}{L} = 17,3 \frac{\eta v_z}{(d_p \phi)^2} (1-\varepsilon) \varepsilon^{-4,8} + 0,336 \frac{\rho v_z^2}{d_p \phi} (1-\varepsilon) \varepsilon^{-4,8}$	Laminar: $Re < 0,2$	~ 0,4	Esféricas	Os valores de 17,3 e 0,336 foram ajustados a partir de dados experimentais, de um leito fixo com porosidade próxima a 0,4. Para a região de transição, assim como Ergun, os autores somaram contribuições das dissipações de energia cinética e viscosas. Em seus testes, obtiveram boas aproximações no regime laminar e turbulento, e valores superestimados na região de transição.
			Turbulento: $Re > 500$	~ 0,4	Esféricas	
			Transição: $0,2 < Re < 500$	~ 0,4	Esféricas	

1985	Gibilaro, Di Felice e Waldram	$\frac{\Delta P}{L} = \left(\frac{17,3}{Re} + 0,336 \right) \frac{\rho v_z^2}{d_p \phi} (1 - \varepsilon) \varepsilon^{-4,8}$	Laminar ou turbulento	$0,40 \leq \varepsilon \leq 1,0$	Esféricas	A proposta representou bem os dados experimentais de leitos contendo esferas com elevadas porosidades. Ainda, apresentou menores desvios na região de fluxo turbulento quando comparado ao modelo de Ergun.
1989	Morelus e Schweinzer	$Eu = \frac{24}{Re_M} \left\{ 1 + K_{1M} \left[\frac{r_0}{\delta} + \frac{1}{2} \left(\frac{r_0}{\delta} \right)^2 \right] \right\} + \frac{4}{\sqrt{Re_M}} \left[1 + K_{2M} \left(\frac{r_0}{\delta} \right)^{1,5} \right] + 0,4 + \frac{K_{3M} \left(\frac{r_0}{\delta} \right)}{Re_M^\varphi}$ $K_{1M} = 0,692, K_{2M} = 0,120, K_{3M} = 0,891, \varphi = 0,1$	$Re_M \leq 10000$	$\sim 0,35$	Esféricas	Os autores complementaram seu trabalho anterior, verificando que para $Re_M \geq 10^4$ o número de Euler (Eu) não é constante, possuindo uma dependência com o número de Reynolds. A pressão testada por esta nova correlação foi até 25 bar. Os valores de K_{1M} , K_{2M} , K_{3M} e φ são ajustados experimentalmente, sendo sugeridos valores para determinados tipos de partículas.
		$Eu = \frac{24}{Re \Phi_D^2} \left\{ 1 + K_1 \left[\frac{r_0}{\delta} + \frac{1}{2} \left(\frac{r_0}{\delta} \right)^2 \right] \right\} + \frac{4}{\sqrt{Re} \Phi_D^{1,5}} \left[1 + K_2 \left(\frac{r_0}{\delta} \right)^{1,5} \right] + \frac{[0,4 + K_3 \left(\frac{r_0}{\delta} \right)]}{\Phi_D}$ $K_{1M} = 0,685, K_{2M} = 0,289, K_{3M} = 0,514$	$Re_M \leq 10000$	$0,395 \leq \varepsilon \leq 0,415$	Areia Quartz - $\Phi_D = 0,74$ Partículas de aço - $\Phi_D = 0,80$ Partículas porosas - $\Phi_D = 0,80$	Neste formato os autores incorporaram o fator de forma, Φ_D para prever o comportamento de leitos diferentes de partículas das esféricas. Estes valores foram obtidos experimentalmente.
1994	Sug Lee e Ogawa	$\Delta P = \frac{12,5(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^3} (29,32 Re^{-1} + 1,56 Re^{-n} + 0,1) \frac{\rho v_z^2}{2 d_p}$ $n = 0,352 + 0,1\varepsilon + 0,275\varepsilon^2$	-	-	-	Os autores propõe uma equação alternativa a equação de Ergun, como função da porosidade e número de Reynolds para melhorar as estimativas de queda de pressão em regimes com número de Reynolds elevados. No caso n é um parâmetro que introduz a influência da

						porosidade no modelo proposto.
2008	Çarpinlioglu e Ozahi	$\frac{\Delta P}{\frac{1}{2} \rho U^2}$ $= 139,57 [Re_p (d_p/L) \varepsilon^7]^{-0,4733}$ $Re_{saída} = 3097,1 [Re_p (d_p/L)]^{0,1726}$	$675 \leq Re_p \leq 7772$	$0,36 \leq \varepsilon$ $\leq 0,56$	$0,55 \leq \phi$ $\leq 1,00$	Os autores sugerem que o erro de seu modelo empírico para estimativa de quedas de pressão é menor que 20%. A velocidade a ser utilizada é a velocidade média na saída do leito (U), calculada a partir da expressão do número de Reynolds na saída ($Re_{saída}$), sugerida pelos autores. A razão altura da coluna pelo diâmetro do leito utilizada foi de $0,24 \leq L/D \leq 1,46$, em que D é o diâmetro da coluna.

2.4.2.2 Equações de regime permanente com o efeito da parede

Eisfeld e Schnitzlein (2001) fizeram uma análise detalhada de mais de 2.300 dados experimentais e concluem que a inclusão dos efeitos da parede no fluxo do fluido conduz a um aumento da perda de carga em escoamento sob regime laminar, devido a maior aderência do fluido na parede. A não uniformidade dos perfis de velocidade na direção radial é explicado pelos autores devido ao aumento da porosidade local próximo das paredes, efeito que sofre a influência do número de Reynolds. Yang (2003) afirma que para uma relação D/d_p maior que 50 o efeito da parede é insignificante e pode ser desprezado a fim de simplificar o modelo. Já Di Felici e Gibilaro. (2004) são menos restritos e consideram que a influência da parede é mínima, defendendo que, para a maioria dos casos de interesse prático, a região da parede representa uma fração suficientemente pequena em relação ao todo, tornando sua influência insignificante. Afirmam ainda que o desvio torna-se significativo para uma relação D/d_p menor que 5. Nield (1983) apud Eisfeld (2001) consideram que uma redução progressiva na relação D/d_p em um regime de escoamento laminar proporcionam maior resistência viscosa, e uma queda de pressão maior ao se desconsiderar o efeito da parede. Já para elevados números de Reynolds, uma redução progressiva na relação D/d_p conduz a uma menor diferença entre a pressão estimada e a pressão real ao se desconsiderar o efeito da parede, pois os efeitos viscosos sob a parede passam a possuir menor intensidade.

A tabela 2 apresenta alguns dos principais modelos existentes na literatura que consideram o efeito da parede sobre a fluidodinâmica do processo de escoamento em uma coluna empacotada. Também são apresentadas faixas de aplicação e outras considerações importantes a cerca dos modelos.

Tabela 2 - Correlações teóricas para prever a queda de pressão de sistemas particulados que consideram o efeito da parede, faixas de aplicação e considerações.

Ano	Autor	Equação	Regime	Porosidade	Partícula	Relação D/d _p	Considerações
1969	Mehta	$\Delta P = \left(\frac{150 \eta (1 - \varepsilon)}{d_p \phi \rho v_z} M_M + 1,75 \right) \frac{L \rho v_z^2 (1 - \varepsilon) M_M}{d_p \phi \varepsilon^3}$ $M_M = \frac{4 d_p}{6 D (1 - \varepsilon)} + 1$				$D/d_p < 50$	Em que M_M é o parâmetro que corrige o efeito da parede na fluidodinâmica de colunas empacotadas.
1993	Foumeny <i>et al.</i>	$A_F = 130, \quad B_F = \frac{D/d_p}{0,335 D/d_p + 2,28}$ $\frac{\Delta P d_p^2 \varepsilon^3}{L \eta v_z (1 - \varepsilon)^2} = B_F Re_p + A_F$	$5 \leq Re_p \leq 25$	-	Esféricas	$3 \leq D/d_p < 25$	Utilizaram como base a equação de Ergun, sugerindo um novo valor para a constante A_F , ajustada experimentalmente e uma relação para B_F que insere a influência da parede. Relatam ainda que esta relação pode ser diferente para valores fora do intervalo de referência por eles sugeridos. Sugerem o uso da porosidade média.
2001	Eisfeld e Schnitzlein	$\frac{\Delta P d_p^2 \varepsilon^3}{L \eta v_z (1 - \varepsilon)^2} = \frac{155 A_E^2 (1 - \varepsilon)^2}{Re \varepsilon^3} + \frac{A_E (1 - \varepsilon)}{B_E \varepsilon^3}$ $A_E = 1 + \frac{2}{3 \frac{D}{d_p} (1 - \varepsilon)}$ $B_E = \left(1,42 \left(\frac{d_p}{D} \right)^2 + 0,83 \right)^2$	$0,01 < Re < 17635$	$0,330 \leq \varepsilon \leq 0,882$	Esféricas e Cilindros	$D/d_p < 250$	Os autores testaram diversas condições experimentais para vários modelos que consideram o efeito da parede. Apontam o modelo de Reichelt como melhor estimativa para dados experimentais. Estabelecem os parâmetros A_E e B_E para correção dos efeitos da parede.
2003	Freund <i>et al.</i>	$\frac{\Delta P d_p}{L \rho v_z^2} = \frac{A_R (1 - \varepsilon)^2}{Re \varepsilon^3} + B_R \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon^3}$	$0,01 \leq Re_p \leq 17635$	$0,330 \leq \varepsilon \leq 0,882$	Esféricas	$1,624 \leq D/d_p < 25$	Os autores utilizaram-se da modelagem fluidodinâmica computacional (CFD) com base

		$A_R = 163,35 A_w^2, \quad B_R = 1,2B_w$ $A_w = B_w = 1 + \frac{1}{2(D/d_p)(1 - \varepsilon)}$ $\varepsilon_R = 0,375 + 0,340 \frac{d_p}{D}$					<p>nas equações de Navier-Stokes para simulação do empacotamento do leito e determinação dos perfis de velocidade e pressão. Sugerem um erro menor que 13% nas condições sugeridas. Os parâmetros A_R e B_R inserem a influência da parede. Os parâmetros A_w e B_w inserem a influência do tipo de partícula e também da parede sob a fluidodinâmica do leito.. No caso de partículas esféricas, A_w e B_w possuem o mesmo valor, podendo possuir diferentes valores para partículas com formatos variados. Sugerem ainda uma correlação alternativa para o cálculo da porosidade (ε_R) para os casos em que se consideram os efeitos da parede.</p>
2004	Di Felici e Gibilaro	$u_b = \frac{v_z}{2,06 - 1,06 \left(\frac{D/d_p - 1}{D/d_p} \right)^2}$	Laminar e turbulento	~0,40 (valor estimado na região bulk – distante da parede)	Esféricas	$D/d_p < 5$	<p>O autor define uma velocidade bulk (u_b), função da velocidade média mensurada que deve ser aplicada no modelo de Ergun. De acordo com os autores, há um aumento da influência da parede na estimativa de queda de pressão em regimes viscosos e uma redução da influência da parede em regimes turbulentos.</p>
2005	Nemec e Levec	$\frac{\Delta P/L}{\rho g} = A_N \frac{Re_p}{Ga_p^*} + B_N \frac{Re_p^2}{Ga_p^*}$	$10 < Re_p < 500$	$0,37 \leq \varepsilon \leq 0,52$	Cilíndricas $\frac{h_p}{d_p} < 0,5$ h_p – altura	$D/d_p < 10$	<p>Concluem que a equação de Ergun fornece boas estimativas para diversas faixas de porosidade e partículas</p>

		$Ga_p^* = \left(\frac{\rho}{\eta}\right)^2 g \left(\frac{d_p \varepsilon}{1 - \varepsilon}\right)^3$ $A_N = 150/\phi^{3/2} \quad B_N = 1,75/\phi^{4/3}$ $A_N = 150/\phi^{6/5} \quad B_N = 1,75/\phi^2$			partícula		esféricas, mas fornece valores superestimados quando as partículas não são esféricas. Com a correção proposta passam a considerar diferentes formatos de partículas ao incluir os parâmetros de correção para tipo de escoamento e para forma da partícula, A_N e B_N . Em seu modelo empregam os números adimensionais de Reynolds particulado (Re_p) e Galio (Ga_p^*). Utilizam ainda a força da gravidade, g . Sugerem um desvio médio de 10% de dados experimentais.
			$10 < Re_p < 500$	$0,37 \leq \varepsilon \leq 0,52$	Polilobes	$D/d_p < 10$	
2007	Montillet, Akkari e Comiti	$\left(\frac{ \Delta P }{L}\right) \left(\frac{d_p}{\rho v_{zo}^2}\right)$ $= 0,061 \left(\frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon^3}\right) \left(\frac{D}{d_p}\right)^{0,2} \left(\frac{1000}{Re} + \frac{60}{\sqrt{Re}} + 12\right)$	$10 \leq Re \leq 2500$	$0,36 \leq \varepsilon \leq 0,39$	Esféricas	$3,8 \leq D/d_p < 40$	Os autores fizeram uma correção ao modelo de Rose e Risk (1970) aplicados a leitos densos, considerando o efeito da variação da porosidade devido a parede. Afirmam que para uma relação D/d_p maior que 50 a influência do aspecto geométrico pode ser negligenciada e o termo $D/d_p^{0,2}$ se torna 2,2.
2008	Ozahi, Gundogdu e Carpinlioglu	$\left(\frac{\Delta P^*}{2}\right) \left(\frac{d_p}{L}\right) \left(\frac{\varepsilon^3}{1 - \varepsilon}\right) \phi^2 = \frac{160}{Re_p} + 1,61 \phi$ $\Delta P^* = \frac{\Delta P}{1/2 \rho v_z^2}$ $\left(\frac{\Delta P^*}{2}\right) \left(\frac{d_p}{L}\right) \left(\frac{\varepsilon^3}{1 - \varepsilon}\right) \phi^2 = \frac{276}{Re_p} + 1,76 \phi^2$	$708,2 \leq Re_p \leq 7772,73$	$0,55 \leq \phi \leq 1,00$	Partículas sem formato padrão	$5,72 \leq D/d_p < 17,1$ $0,04 \leq d_p/L < 0,72$	Concluem que a equação de Ergun fornece estimativas para partículas esféricas ou não com um erro máximo de 20% na faixa estudada. Enfatizam que este erro pode ser reduzido para 4% ao se utilizar o modelo modificado por eles nas condições consideradas.
			$15000 \leq Re \leq 33000$	$0,36 \leq \varepsilon \leq 0,56$	Partículas sem formato padrão	$5,72 \leq D/d_p < 17,1$ $0,04 \leq d_p/L < 0,72$	

		$\Delta P^* = \frac{\Delta P}{1/2 \rho v_z^2}$						Incluem modificações nos valores originais das constantes de Ergun, reduzindo o erro para 3%.
--	--	--	--	--	--	--	--	---

Conforme mostrado nas tabelas 1 e 2, todos os modelos em regime permanente presentes correlacionam importantes propriedades do fluido, tais como a densidade (ρ) e a viscosidade (η). Desta forma, para uma melhor estimativa do comportamento fluidodinâmico de leitos fixos, é importante que os valores atribuídos a estas propriedades representem valores próximos de valores reais. Assim, o tópico seguinte se propõe em apresentar alguns modelos preditivos disponíveis na literatura capazes de estimar valores para estas propriedades.

2.4.3 ESTIMATIVA DAS PROPRIEDADES DO FLUIDO

2.4.3.1 Densidade

Para diversas operações com sistemas gasosos em altas pressões, a influência do comportamento não ideal dos gases em equações de balanço de massa, energia e de quantidade de movimento tornam-se importantes. As propriedades termodinâmicas de sistemas que contenham gases reais podem ser estimadas através de equações de estado, tais como a equação de Peng-Robinson (PENG e ROBINSON, 1976; BOUTON e STEIN, 1988; FATEEN, KHALIL e ELNABAWY, 2013).

A equação de Peng-Robinson é facilmente empregada para o cálculo da densidade, conforme indicado por Sandler (2006). Trata-se de uma relação matemática que correlaciona grandezas termodinâmicas para descrever propriedades de certos compostos. É função do volume molar dos gases (V_{mol}), da pressão (P), da temperatura (T), fator acêntrico (ω), fator de compressibilidade (Z) e as propriedades críticas do fluido.

2.4.3.1.1 Densidade de gases puros

As expressões para o cálculo da densidade de gases puros em condições diversas utilizando o modelo de Peng e Robinson é realizada combinando-se as Equações 13 a

$$P = \frac{V_{mol}T}{(V_{mol} - b)} - \frac{a\alpha}{(V_{mol}(V_{mol} + b) + b(V_{mol} - b))} \quad (13)$$

Em que a e b são parâmetros da equação de Peng e Robinson, calculados como função das propriedades críticas da molécula de interesse, de acordo com as Equações 14 e 15.

$$a = 0,45723553 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad (14)$$

$$b = 0,077796074 \frac{RT_c}{P_c} \quad (15)$$

Ainda, na Equação 13, o parâmetro α denota a dependência dos parâmetros críticos com a temperatura, sendo estimados pelas Equações 16 e 17.

$$\alpha = \left(1 + m \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right)^2 \quad (16)$$

$$m = 0,37464 + 1,54226\omega - 0,2699\omega^2 \quad (17)$$

Um modo simplificado para encontrar suas raízes (volumes) consiste em reescrevê-la numa forma polinomial em termos do fator de compressibilidade Z , como demonstra a Equação 18.

$$Z^3 - (1 - B^*)Z^2 + Z(A^* - 2B^* - 3B^{*2}) - (A^*B^* - B^{*2} - B^{*3}) = 0 \quad (18)$$

Em que:

$$Z = \frac{PV}{RT} \quad (19)$$

$$A^* = \frac{a \alpha P}{(RT)^2} \quad (20)$$

$$B^* = \frac{bP}{RT} \quad (21)$$

Sendo Z o fator de compressibilidade, A^* e B^* parâmetros do modelo de Peng e Robinson definidas pelas Equações 19 e 21.

Após resolver a Equação 18 e selecionar a raiz fisicamente possível o volume do gás real é calculado pela Equação 19. A partir do volume do gás real, obtido na temperatura e pressão desejadas, a densidade do gás real é encontrada pelo uso da Equação 22.

$$\rho = \frac{M}{V} \quad (22)$$

Em que M representa a massa molecular do gás.

Contudo, na prática, ocorre também o trabalho com misturas gasosas. Desta forma, torna-se necessário o conhecimento de modelos capazes de descrever tais propriedades para misturas. Geralmente se utilizam regras de misturas, tratadas no tópico seguinte.

2.4.3.1.2 Densidade de misturas gasosas

Uma das formas amplamente empregadas para prever o valor das propriedades de misturas gasosas reais é a aplicação das regras de mistura tais como as de van der Waals (Sandler, 2004).

O emprego destas regras em conjunto com o modelo de Peng e Robinson é simples, bastando-se fazer a correção dos parâmetros $a\alpha$ e b , dadas de acordo com as Equações 23 e 24.

$$a\alpha = \sum_i \sum_j z_i z_j \sqrt{(a_i \alpha_i)(a_j \alpha_j)} (1 - k_{ij}) \quad (23)$$

$$b = \sum_i Z_i b_i \quad (24)$$

Os índices i e j denotam os gases presentes nas misturas. k_{ij} é um parâmetro de ajuste que considera a interação binária i - j . Se $k_{ij} = 0$ as propriedades são preditas pela equação de estado.

Sendo conhecidas as densidades de gases puros e misturas em condições diversas pode-se calcular a viscosidade (η) conforme disposto na próxima sessão.

2.4.3.2 Viscosidade

A viscosidade é uma propriedade fundamental no estudo do comportamento do transporte e armazenamento de fluidos, com aplicações em balanços de energia, quantidade de movimento e no projeto de equipamentos industriais (Gomide, 1993).

A determinação experimental da viscosidade pode demandar custo experimental se forem considerados diversos arranjos possíveis que são empregados nos processos industriais. Ling (2010) relata que é desejado resultados experimentais de viscosidade pela confiabilidade dos valores encontrados, mas destaca como desvantagens os elevados tempo e custo requerido para as análises, e em alguns casos, a indisponibilidade de equipamentos apropriados para determinar valores em condições adversas. Nessa mesma linha, Galliero *et al.* (2007) relata outra dificuldade em se obter viscosidades experimentais causada pela manipulação de compostos tóxicos. O autor revela que para sistemas contendo sulfeto de hidrogênio (H_2S), experimentos utilizados para a determinação das propriedades termofísicas são escassos por causa da alta

toxicidade do H₂S. Destaca ainda que o quadro se agrava em situações de altas pressões, limitando ainda mais a disponibilidade de dados experimentais.

Entretanto, a viscosidade pode ser estimada por meio de modelos preditivos. Chung *et al.* (1988) citam uma limitação na estimativa de viscosidades devido à alta complexidade que envolve os tratamentos teóricos das propriedades de transporte. Os autores relatam ainda sobre a existência de correlações para prescrever a viscosidade de moléculas simples em baixas pressões com certo grau de confiança. Porém, em casos mais complexos, como gases densos o desenvolvimento teórico é mais escasso. Assael, Dalaouti e Vesovic (2001) complementam o que foi exposto por Chung *et al.* (1988) ao ressaltar que alguns modelos que se propõem ao cálculo de viscosidade de gases em diversas condições não revelam os detalhamento das considerações realizadas em suas pesquisas, dificultando o julgamento das incertezas obtidas e a reprodutibilidade dos dados.

Surge então na literatura pesquisas que trazem correlações empíricas para a predição da viscosidade, tanto de compostos puros, quanto para misturas, limitadas a determinados compostos e outras variáveis que interferem no seu comportamento e estimativa.

2.4.3.2.1 Variáveis que interferem na viscosidade

De acordo com Poling e Prausnitz, (2000) as variáveis geradoras da resistência ao escoamento são o tamanho e a geometria das moléculas, entre outras, que são difíceis de ser mensuradas. Ainda de acordo com o autor, em escala macroscópica, a viscosidade pode ser tomada como função do estado termodinâmico do fluido. Bird (2004) afirma que para sistemas gasosos, a elevação da temperatura e da pressão, em geral, aumenta a viscosidade do sistema, por favorecer a perda de quantidade de movimento entre as moléculas constituintes para gases em baixas densidades.

Para o caso de misturas gasosas, Poling e Prausnitz, (2000) enfatizam que além da temperatura e pressão, outras variáveis influenciam nos valores da viscosidade, tais como composição e polaridade dos compostos. O aumento da polaridade do sistema, em geral, tende a aumentar os valores da viscosidade.

Considerando estes fatores, alguns modelos podem ser utilizados para prever a viscosidade de sistemas gasosos, que serão os assuntos tratados nos próximos tópicos.

2.4.3.2.2 Modelos preditivos da viscosidade de compostos gasosos

As técnicas mais utilizadas para estimar a viscosidade de gases em condições de operações diversas são baseadas na teoria de Chapman-Enskog ou na lei de estados correspondentes. Chapman e Enskog propuseram modelos baseados na teoria cinética de gases monoatômicos a baixas densidades. Incluíram também a influência das forças atrativas e repulsivas existentes entre as moléculas. Os resultados foram expressões para a viscosidade em termos da energia potencial intermolecular, correlacionando propriedades, tais como σ um diâmetro característico entre as moléculas, também conhecido por diâmetro de colisão e ε_{atr} , energia máxima de atração entre duas moléculas. Ainda na relação proposta pelos autores aparece a grandeza adimensional Ω_v , denominada integral de colisão para a viscosidade, que leva em conta os detalhes da trajetória que as moléculas descrevem em uma colisão binária (POLING e PRAUSNITZ, 2000).

A dificuldade de se estabelecer valores para do diâmetro de colisão (σ) e a energia máxima de atração entre duas moléculas (ε_{atr}) tem levado muitos pesquisadores a especificar regras, baseados em dados experimentais, a fim de estimar estes parâmetros como função de propriedades macroscópicas, como as propriedades críticas dos compostos, fator de compressibilidade, fator acêntrico, entre outros (POLING e PRAUSNITZ, 2000). A seguir, são apresentados alguns dos principais modelos capazes de prever a viscosidade de substâncias puras e misturas gasosas, polares e apolares, em condições diversas.

2.4.3.2.2.a Correlação de Lee et al. (1966)

O modelo de Lee *et al.* (1966) é um aprimoramento da equação semi-empírica proposta por Starling e Ellington, em 1964, desenvolvida para prever a viscosidade de

compostos puros. A equação também foi adaptada para prever a viscosidade de misturas e compostos puros simultaneamente.

O modelo de Lee *et al.* (1966) é dado pela Equação 25:

$$\eta_{lee} = K_{lee} e^{(X_{lee} \rho^{Y_{lee}})} \quad (25)$$

Sendo:

$$K_{lee} = \frac{(7,77 + 0,0063M)T^{1,5}}{122,4 + 12,9M + T} \quad (26)$$

$$X_{lee} = 2,57 + \frac{1914,5}{T} + 0,0095M \quad (27)$$

$$Y_{lee} = 1,11 + 0,04X_{lee} \quad (28)$$

Em que η é a viscosidade da fase gasosa, K , X e Y parâmetros do modelo de Lee *et al.*, M a massa molecular (g/mol) e T a temperatura (K).

A faixa de trabalho de trabalho é para temperaturas de 310 a 444 K e pressão de 6,9 a 551,6 bar. Em sua investigação, os autores compararam os resultados obtidos para metano, etano, propano e n-butano puros, e para quatro misturas de diferentes composições contendo nitrogênio, dióxido de carbono, hélio, metano, etano, propano, n-butano, i-butano, pentanos, hexanos, heptanos (LEE *et al.*, 1966). Os autores relataram desvios menores que 1,89 % dos dados experimentais. A massa molecular, M , expressa em g/mol, pode ser utilizada tanto para compostos puros quanto para misturas, considerando regras de mistura, como dado pelo modelo de Lucas (1980).

2.4.3.2.2.b Correlação de Lucas (1980)

Lucas (1980) apud Poling e Prausnitz (2000) utilizou-se da teoria de estados correspondentes para propor o seu modelo capaz de descrever a viscosidade de gases

puros e misturas, compostos polares e apolares com um desvio relativo dos dados experimentais não superiores a 5%. É bastante eficaz na estimativa de propriedades de compostos com baixas massas moleculares.

i. Correlação de Lucas para gases puros a baixas densidades

Em sua pesquisa, os dados de entrada para estimar a viscosidade de gases puros em baixas densidades são: temperatura crítica, pressão crítica, fator acêntrico, massa molar, momento dipolar. As seguintes correlações foram utilizadas por Lucas:

$$T_r = T/T_c \quad (29)$$

$$\mu_r = 52,46 \frac{\mu^2 P_c}{T_c^2} \quad (30)$$

$$F_p^0 = 1 \quad 0 \leq \mu_r < 0,022 \quad (31)$$

$$F_p^0 = 1 + 30,55(0,292 - Z_c)^{1,72} \quad 0,022 \leq \mu_r < 0,075 \quad (32)$$

$$F_p^0 = 1 + 30,55(0,292 - Z_c)^{1,72} |0,96 + 0,1(T_r - 0,7)| \quad 0,075 \leq \mu_r \quad (33)$$

$$F_Q^0 = 1,22 Q^{0,15} \{1 + 0,00385[(T_r - 12)^2]^{1/M} \text{sen}(T_r - 12)\} \quad (34)$$

$$\xi = 0,176 \left(\frac{T_c}{M^3 P_c^4} \right)^{1/6} \quad (35)$$

$$\eta_{lu}^o = \frac{[0,807T_r^{0,618} - 0,357e^{(-0,449T_r)} + 0,340e^{(-4,058T_r)} + 0,018]F_P^0 F_Q^0}{\xi} \quad (36)$$

Sendo que o termo ξ é um parâmetro do modelo de Lucas $(\mu P)^{-1}$, η_{lu}^o a viscosidade para gases puros em baixas densidades (μP) , e os parâmetros F_P^0 e F_Q^0 são fatores de correção para quantificar os efeitos quânticos e da polaridade sobre a viscosidade. O fator F_Q^0 é somente utilizado para gases como He e H₂, cujos valores são 1,38 e 0,76 respectivamente.

ii. Correlação de Lucas para gases puros a altas densidades

Para gases puros em altas densidades Lucas (1980) recomenda o seguinte equacionamento para obtenção da viscosidade:

$$Z_1 = \eta_{lu}^o \xi = [0,807T_r^{0,618} - 0,357e^{-0,449T_r} + 0,340e^{-4,058T_r} + 0,018]F_P^0 F_Q^0 \quad (37)$$

$$Z_2 = 0,6 + 0,76P_r^{\alpha_L} + (6,99P_r^{\beta_L} - 0,6)(1 - T_r) \quad T_r \leq 1,0 \text{ e } P_r < \left(\frac{P_{vp}}{P_c}\right) \quad (38)$$

$$\alpha_L = 3,262 + 14,98 P_r^{5,508} \quad (39)$$

$$\beta_L = 1,390 + 5,746 P_r \quad (40)$$

$$Z_2 = \eta_{lu}^o \xi \left[1 + \frac{a P_r^{e_L}}{b_L P_r^{f_L} + (1 + c_L P_r^{d_L})^{-1}} \right] \quad 1 < T_r < 40 \text{ e } 0 < P_r \leq 100 \quad (41)$$

$$a_L = \frac{0,001245}{T_r} e^{5,1726T_r^{-0,3286}} \quad (42)$$

$$b_L = a_L(1,6553T_r - 1,2723) \quad (43)$$

$$c_L = \frac{0,4489}{T_r} e^{3,0578T_r^{-37,7332}} \quad (44)$$

$$d_L = \frac{1,7368}{T_r} e^{2,2310T_r^{-7,6351}} \quad (45)$$

$$e_L = 0,9425e^{-0,1853T_r^{0,4489}} \quad (46)$$

$$Y = \frac{Z_2}{Z_1} \quad (47)$$

$$F_p = \frac{1 + (F_p^0 - 1)Y^{-3}}{F_p^0} \quad (48)$$

$$F_Q = \frac{1 + (F_Q^0 - 1)[Y^{-1} - (0,007)(\ln Y)^4]}{F_Q^0} \quad (49)$$

$$\eta_{lu} = \frac{Z_2 F_p F_Q}{\xi} \quad (50)$$

Neste modelo, utilizam-se os valores F_p^0 , F_Q^0 , η_{lu}^0 e ξ conforme demonstrado para gases em baixas densidades. Em baixas pressões Y tende a unidade, F_p e F_Q tendem para unidade, e a viscosidade se torna aproximadamente a mesma que a calculada em baixas pressões.

iii. Correlação de Lucas para misturas gasosas a baixas densidades

Para misturas gasosas, o modelo de Lucas (1980) para puros é combinado com regras de misturas, conforme mostrado nas Equações 51 a 57:

$$T_{cm} = \sum_i y_i T_{ci} \quad (51)$$

$$P_{cm} = RT_{cm} \frac{\sum_i y_i Z_{ci}}{\sum_i y_i V_{ci}} \quad (52)$$

$$M_m = \sum_i y_i M_i \quad (53)$$

$$F_{Pm}^0 = \sum_i y_i F_{Pi}^0 \quad (54)$$

$$F_{Qm}^0 = \left(\sum_i y_i F_{Qi}^0 \right) A_L \quad (55)$$

$$A_L = 1 - 0,01 \left(\frac{M_H}{M_L} \right)^{0,87} \quad \frac{M_H}{M_L} > 9 \text{ e } 0,05 < y_H < 0,7 \quad (56)$$

$$A_L = 1 \quad \text{demais casos} \quad (57)$$

Sendo que H corresponde ao componente de maior peso molecular na mistura e L o de menor peso molecular. m indica mistura.

iiii. Correlação de Lucas para misturas gasosas com altas densidades

Para determinação da viscosidade de misturas gasosas em altas densidades o autor propõe a utilização das Equações (37) a (50). Para aplicação as misturas, deve se aplicar as regras de mistura propostas pelo autor para obter T_{cm} , P_{cm} , M_m como funções da composição, utilizando as Equações (51) a (53). A correção para os efeitos de polaridades é feita utilizando as Equações (48) e (49), sendo que os fatores F_P^0 e F_Q^0 são obtidos pelas Equações (54) e (55). O parâmetro Y nas Equações (48) e (49) deve ser baseado em T_{cm} , P_{cm} . Os fatores F_P^0 e F_Q^0 para componentes puros são definidos pelas Equações (31) à (34).

2.4.3.2.2.c Correlação de Chung et al. (1988)

Neste modelo a teoria de Chapman-Enskog, capaz de descrever a viscosidade de moléculas gasosas simples, como o metano e o argônio, foi utilizada como base para o desenvolvimento de um modelo com parâmetros empíricos que leva em conta a estrutura de moléculas poliatômicas. Este modelo é aplicado para compostos puros apolares e polares e suas misturas. Foi testado para pressões até 3447 bar e temperaturas na faixa de 70 a 973 K. Comparado com os dados experimentais para compostos puros e misturas, este modelo apresentou desvios relativos menores que 4 %, se mostrando menos eficaz para compostos altamente polares.

O procedimento para o cálculo da viscosidade é simples, requerendo como dados de entrada somente as propriedades críticas e fator acêntrico dos gases para fluidos apolares e o momento dipolar e um parâmetro de associação para compostos polares e associação de compostos.

No caso de misturas, a fundamentação teórica é bastante similar dos compostos puros em baixas e altas densidades. É incluso neste caso regras de mistura para os parâmetros. O modelo tem se mostrado bastante eficaz no cálculo das propriedades de mistura, exceto para misturas altamente polares.

As equações também são indicadas para compostos que não são hidrocarbonetos, compostos polares e contendo hidrogênio em sua estrutura.

i. Correlação de Chung et al. para gases puros a baixas densidades

As correlações propostas pelos autores para gases polares e apolares em baixas densidades são:

$$\frac{\varepsilon_{atr}}{K} = \frac{T_c}{1,2593} \quad (58)$$

$$\sigma = 0,809 V_c^{1/3} \quad (59)$$

$$T^* = 1,2593 T_r \quad (60)$$

$$\Omega_v = \frac{A_{ch}}{T^{*B_{ch}}} + \frac{C_{ch}}{e^{D_{ch} \cdot T^*}} + \frac{E_{ch}}{e^{F_{ch} \cdot T^*}} + G_{ch} \cdot T^{*(B_{ch})} \cdot \text{sen}(S_{ch} \cdot T^{*(W_{ch})} - H_{ch}) \quad (61)$$

$$F_c = 1 - 0,2756\omega + 0,059035\mu_r^4 + \kappa \quad (62)$$

$$\mu_r = 0,1313 \cdot \frac{\mu}{(V_c \cdot T_c)^{1/2}} \quad (63)$$

$$\kappa = 0,0682 + 4,704 \left[\frac{\text{número de grupos } OH^-}{M} \right] \quad (64)$$

$$\eta_{ch}^o = 40,785 \frac{F_c (MT)^{1/2}}{V_c^{2/3} \Omega_v} \quad (65)$$

Em que η_{ch}^o é a viscosidade para gases puros em baixas densidades (μP), V_c o volume crítico e no caso específico do modelo de Chung deve ser usado com as unidades de cm^3/mol , κ o fator de correção para substâncias altamente polares como álcoois, K a constante de Boltzman, μ o momento dipolar (debyes), Ω_v a integral de colisão entre as moléculas que depende da energia potencial intermolecular; e as constantes do modelo com os valores $A_{ch}= 1,16145$, $B_{ch}=0,14874$, $C_{ch}= 0,52487$,

$D_{ch}=0,77320$, $E_{ch}=2,16178$, $F_{ch}=2,43787$, $G_{ch}=-6,435.10^{-4}$, $H_{ch}=7,27371$; $S_{ch}=18,0323$ e $W_{ch}=-0,76830$; T^* = temperatura adimensional; T_r = temperatura relativa; μ_r = momento dipolar adimensional; V_c = volume crítico (cm³/mol).

Para moléculas poliatômicas polares e apolares, Chung *et al.* (1988) inseriram o fator F_c , dado pela Equação (62), que leva em conta a estrutura molecular e os efeitos polares. Ainda, os autores utilizaram em suas pesquisas a integral de colisão (Ω_v) dado pela Equação (61) conforme sugerido pelos pesquisadores Neufeld *et al.* (1972) apud Chung *et al.* (1988), cuja validade é $0,3 \leq T^* \leq 100$.

ii. Correlação de Chung et al. para gases puros a altas densidades

Para compostos com alta densidade, a viscosidade é relatada empiricamente como função da densidade, sendo aplicado um fator empírico para correção dos dados em altas pressões. As correlações são mostradas a seguir:

$$\eta_{ch} = \eta^* \frac{36,344(M T_c)^{1/2}}{V_c^{2/3}} \quad (66)$$

$$\eta^* = \frac{(T^*)^{1/2}}{\Omega_v} \{F_c[(G_2)^{-1} + E_6 y_{ch}]\} + \eta^{**} \quad (67)$$

$$y_{ch} = \frac{\rho V_c}{6} \quad (68)$$

$$G_1 = \frac{1 - 0,5 y_{ch}}{(1 - y_{ch})^3} \quad (69)$$

$$G_2 = \frac{E_1 \left\{ \left[\frac{1 - e^{-E_4 y_{ch}}}{y} \right] + E_2 G_1 e^{E_5 y_{ch}} + E_3 G_1 \right\}}{E_1 E_4 + E_2 + E_3} \quad (70)$$

$$\eta^{**} = (E_7)(y_{ch}^2)(G_2)e^{[E_8+E_9(T^*)^{-1}+E_{10}(T^*)^{-2}]} \quad (71)$$

A tabelas 3 apresenta as possíveis combinações para estimativa do parâmetro E_i .

Tabela 3 - Coeficientes para calcular $E_i = a_i + b_i\omega + c_i\mu_r^4 + d_i\kappa$

i	a_i	b_i	c_i	d_i
1	6,324	50,412	-51,680	1189,0
2	$1,210 \cdot 10^{-3}$	$-1,154 \cdot 10^{-3}$	$-6,257 \cdot 10^{-3}$	0,03728
3	5,283	254,209	-168,48	3898,0
4	6,623	38,096	-8,464	31,42
5	19,745	7,630	-14,354	31,53
6	-1,900	-12,537	4,985	-18,15
7	24,275	3,450	-11,291	69,35
8	0,7972	1,117	0,01235	-4,117
9	-0,2382	0,06770	-0,8163	4,025
10	0,06863	0,3479	0,5926	-0,727

Fonte: (Chung *et al.*, 1988) Os termos a^0 e a^1 estão relacionados a fluidos apolares, e a^2 e a^3 para fluidos polares e associação de compostos.

iii. *Correlação de Chung et al. para misturas gasosas a baixas densidades*

Para misturas gasosas em baixas densidades as seguintes equações são utilizadas para prever a viscosidade:

$$\eta_m = \frac{26,69 F_{cm} (M_{mc} T)^{1/2}}{\sigma_m^2 \Omega_v} \quad (72)$$

$$F_{cm} = 1 - 0,275 \omega_m + 0,059035 \mu_{rm}^4 + \kappa_m \quad (73)$$

$$\mu_{rm} = \frac{131,3 \mu_m}{(V_{cm} T_{cm})^{1/2}} \quad (74)$$

$$T_{cm} = 1,2593 (\varepsilon/k)_m \quad (75)$$

As regras de misturas sugeridas pelos autores são:

$$\sigma_m^3 = \sum_i \sum_j y_i y_j \sigma_{ij}^3 \quad (76)$$

$$T_m^* = T / (\varepsilon/k)_m \quad (77)$$

$$(\varepsilon/k)_m = \frac{\sum_i \sum_j y_i y_j (\varepsilon_{ij}/k) \sigma_{ij}^3}{\sigma_m^3} \quad (78)$$

$$M_{mc} = \left[\frac{\sum_i \sum_j y_i y_j (\varepsilon_{ij}/k) \sigma_{ij}^2 M_{ij}^{1/2}}{(\varepsilon/k)_m \sigma_m^2} \right]^2 \quad (79)$$

$$\omega_m = \frac{\sum_i \sum_j y_i y_j \omega_{ij} \sigma_{ij}^3}{\sigma_m^3} \quad (80)$$

$$\mu_m^4 = \sigma_m^3 \sum_i \sum_j \left(\frac{y_i y_j \mu_i^2 \mu_j^2}{\sigma_{ij}^3} \right) \quad (81)$$

$$\kappa_m = \sum_i \sum_j y_i y_j \kappa_{ij} \quad (82)$$

$$\sigma_{ii} = \sigma_i = 0,809V_{ci}^{1/3} \quad (83)$$

$$\sigma_{ij} = \xi_{ij}(\sigma_i \sigma_j)^{1/2} \quad (84)$$

$$\varepsilon_{ii}/k = \varepsilon_i/k = T_{ci}/1,2593 \quad (85)$$

$$\frac{\varepsilon_{ij}}{k} = \zeta_{ij} \left(\frac{\varepsilon_i}{k} \frac{\varepsilon_j}{k} \right)^{1/2} \quad (86)$$

$$\omega_{ii} = \omega_i \quad (87)$$

$$\omega_{ij} = (\omega_i + \omega_j)/2 \quad (88)$$

$$\kappa_{ii} = \kappa_i \quad (89)$$

$$\kappa_{ij} = (\kappa_i \kappa_j)^{1/2} \quad (90)$$

$$M_{ij} = \frac{2M_i M_j}{M_i + M_j} \quad (91)$$

Em que ξ_{ij} e ζ_{ij} são parâmetros de interação binária, normalmente igual à unidade.

iiii. Correlação de Chung et al. para misturas gasosas a altas densidades

Neste caso, as equações (66) a (71) devem ser usadas. Os parâmetros T_c , V_c , ω , M , μ e κ devem ser substituídos por valores da mistura gasosa, conforme relatado nas regras de mistura, dado pelas equações (76) a (91).

Desta forma, foi possível vislumbrar modelos capazes de prever a densidade e a viscosidade de compostos gasosos em condições diversas de temperatura, pressão e composição. Delineado estas propriedades, apresentou-se diversos modelos capazes de estimar a perda de carga em leitos fixos em condições operacionais diversas. Assim, com as informações prestadas é possível escolher as equações que melhor preveem as propriedades das correntes gasosas e os modelos que fornecem as melhores estimativas da perda de carga.

3 METODOLOGIA

Todas as simulações foram realizadas utilizando-se o programa Maple (versão 18) e Excel (versão 2010).

Para testar os modelos preditivos de queda de pressão dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento gasoso em coluna de leito fixo é necessário além do conhecimento das propriedades do leito e condições operacionais, da estimativa da densidade e da viscosidade da corrente gasosa.

3.1 ESTIMATIVA DA DENSIDADE

Testou-se a capacidade de predição da densidade do modelo de Peng-Robinson (1976) para diferentes tipos de gases em condições operacionais diversas, conforme disposto na tabela 4. A qualidade da predição foi avaliada por meio a comparação a dados experimentais disponíveis na literatura.

Tabela 4 - Condições operacionais estudadas na predição da densidade.

Gás	Condições operacionais	Fonte
CH ₄	$T = 310,00 \text{ K}$ $1 \leq P \leq 75 \text{ bar}$	Mollerup (1985)
CO ₂	$T = 313,15 \text{ K}$ $10 \leq P \leq 60 \text{ bar}$	Gokmenoglu <i>et al.</i> (1996)
H ₂ S	$T = 310,93 \text{ K}$ $1,0 \leq P \leq 55,16 \text{ bar}$	Reamer <i>et al.</i> (1950)
N ₂	$T = 295 \text{ K}$ $1 \leq P \leq 60 \text{ bar}$	Span <i>et al.</i> (2000)
O ₂	$T = 295 \text{ K}$ $1 \leq P \leq 60 \text{ bar}$	Stewart <i>et al.</i> (1991)
Mistura ¹	$T = 300,0 \text{ K}$ $1,20 \text{ bar} \leq P \leq 58,29 \text{ bar}$	Esper <i>et al.</i> (1989)
Mistura ²	$T = 298 \text{ K}$ $P = 1 \text{ bar}$	Gururaja et al (1967)

Mistura¹: CO₂ (47,6% molar) + CH₄. Mistura²: N₂ + O₂ (0 – 100% molar)

Após validação do modelo de Peng-Robinson para estimativa de propriedades de gases polares e apolares, estimou-se a densidade de cinco sistemas gasosos, conforme a tabela 6 a seguir, que descreve os sistemas que serão testados os diversos modelos de perda de carga.

3.2 ESTIMATIVA DA VISCOSIDADE

De posse dos dados de densidade, é possível a estimativa da viscosidade. Neste trabalho testou-se a capacidade de predição da viscosidade por meio dos modelos de Lucas (1980) e Chung *et al.* (1988) de gases puros e estes mais o modelo de Lee *et al.* (1966), para misturas gasosas em condições operacionais diversas, conforme disposto na tabela 5.

Tabela 5- Condições operacionais estudadas na predição da viscosidade.

Gás	Condições operacionais	Fonte
CH ₄	$T = 293,15$ e $373,15$ K $1 \text{ bar} \leq P \leq 288 \text{ bar}$	Evers <i>et al.</i> (2002)
CO ₂	$T = 298,15$ e $323,15$ K $1,01 \text{ bar} \leq P \leq 76,51 \text{ bar}$	Iwasaki e Takahashi (1981)
H ₂ S	$T = 373,15$ e $423,15$ K $10,0 \text{ bar} \leq P \leq 1004,4 \text{ bar}$	Giri <i>et al.</i> (2011 apud Quiñor Cisneros <i>et al.</i> , 2012)
N ₂	$T = 298,15$ K $1 \text{ bar} \leq P \leq 70 \text{ bar}$	Kestin e Leidenfrost (1959)
O ₂	$T = 298,15$ K $1 \text{ bar} \leq P \leq 52 \text{ bar}$	Kestin e Leidenfrost (1959)
Mistura ¹	$T = 294,0$, $322,9$ e $353,4$ K $3,0 \text{ bar} \leq P \leq 140,4 \text{ bar}$	Assael <i>et al.</i> (2001)
Mistura ²	$T = 298$ K $P = 1 \text{ bar}$	Gururaja <i>et al.</i> (1967)

Mistura¹: CH₄ (84,84% molar), C₂H₈ (8,4%), C₃H₁₂ (0,5%), N₂(5,6%), CO₂(0,66%). Mistura²: N₂ + O₂ (0 – 100%).

A qualidade da predição foi avaliada por meio do cálculo do desvio relativo médio, conforme demonstra a Equação 92:

$$\delta\bar{\eta} = \frac{1}{n} \sum_n \frac{|\eta_{calc} - \eta_{exp}|}{\eta_{exp}} \quad (92)$$

Em que: $\delta\bar{\eta}$ é o desvio relativo médio da viscosidade estimada, η_{calc} é a viscosidade calculada em uma determinada condição T e P, η_{exp} é a viscosidade experimental nessa mesma condição, e n é o número de dados experimentais.

Ainda, os valores encontrados para $\delta\bar{\eta}$ foram comparados com os desvios relativos sugeridos pelos autores dos modelos.

Após a determinação do modelo que melhor estima a viscosidade de gases polares e apolares em condições diversas, estimou-se a viscosidade de cinco sistemas gasosos, conforme condições descritas na tabela 6 a seguir.

3.3 TESTE DAS EQUAÇÕES DE REGIME PERMANENTE

De posse da densidade e viscosidade para os sistemas descritos na tabela 6 abaixo, das características do leito, conforme disposto na tabela 7, testou-se os modelos preditivos de perda de carga (tabelas 1 e 2) geradas durante o fluxo das correntes gasosas dispostas na tabela 6. Comparou-se também os resultados simulados com o modelo de Ergun.

Para estas estimativas, foi-se considerado regime de escoamento permanente, temperatura constante dos gases, sistema sem acúmulo de massa e sem variação das propriedades na direção radial do leito.

Tabela 6 - Condições operacionais estudadas na predição da perda de carga.

Gás	Temperatura (K)	Pressão (KPa)	Sistema	Fonte
100% O ₂	295,0	195	Gás puro	Tood e Webley (2005)
90% O ₂ 10% N ₂	295,0	195	Mistura	Tood e Webley (2005)
22% O ₂ 78% N ₂	295,0	195	Mistura	Tood e Webley (2005)
10% O ₂ 90% N ₂	295,0	195	Mistura	Tood e Webley (2005)
99,99% He	292,6	186	Inerte	Tood e Webley (2005)

A tabela 7 apresenta as características dos sistemas que foram simulados, tais como altura (L), diâmetro (D), tipo de partícula, tamanho da partícula (d_p), porosidade (ϵ) e esfericidade (ϕ).

Tabela 7 - Características dos sistemas simulados.

Gás	L (m)	D (m)	Partícula	d_p (m)	ϵ	ϕ
Tood e Webley (2005)	1,8	0,05	Adsorvente LiLSX	$1,7 \cdot 10^{-3}$	0,35	1

A qualidade da predição foi avaliada por meio do cálculo do desvio relativo (Equação 93) e desvio relativo médio (Equação 94), cujos resultados encontram-se nos anexos.

$$\delta P = \frac{|\Delta P_{calc} - \Delta P_{exp}|}{\Delta P_{exp}} \quad (93)$$

$$\delta \bar{P} = \frac{1}{n} \sum_n \frac{|\Delta P_{calc} - \Delta P_{exp}|}{\Delta P_{exp}} \quad (94)$$

Em que: δP é o desvio relativo entre a queda de pressão calculada e experimental, $\delta \bar{P}$ é o desvio relativo médio da queda de pressão estimada, ΔP_{calc} é a queda de pressão

calculada com o uso das equações preditivas, ΔP_{exp} é a queda de pressão experimental nessa mesma condição, e n é o número de dados experimentais.

O processo de análise seguiu a seguinte sequência:

- Determinação dos modelos com melhores capacidades preditivas de queda de pressão para escoamento de gases puros;
- Determinação dos modelos com melhores capacidades preditivas de queda de pressão para o escoamento de misturas gasosas;
- Comparação dos modelos com melhores capacidades preditivas com o modelo de Ergun;
- Enquadramento do sistema quanto à aplicabilidade dos modelos, conforme restrições e indicações dispostas nas tabelas 1 e 2 para o tipo de escoamento, porosidade do leito e forma das partículas;
- Influência do efeito da parede na estimativa de dados experimentais de queda de pressão - relação do diâmetro do leito pelo diâmetro de partícula (D/d_p) - conforme modelos dispostos na tabela 2.

3.4 VARIAÇÃO DA QUEDA DE PRESSÃO COM A VELOCIDADE

A fim de comparar os modelos com melhores capacidades preditivas mostrou-se graficamente em uma mesma figura os dados de queda de pressão experimental e simulados como função da velocidade superficial. Com base nas curvas foi possível determinar os modelos que subestimam ou superestimam estes valores.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 DENSIDADE DE GASES PUROS E MISTURAS

A densidade estimada pelo modelo de Peng-Robinson para os gases puros metano, dióxido de carbono, sulfeto de hidrogênio, nitrogênio e oxigênio, bem como seus valores experimentais, são mostradas nas Figura 6 - Figura 10, respectivamente.

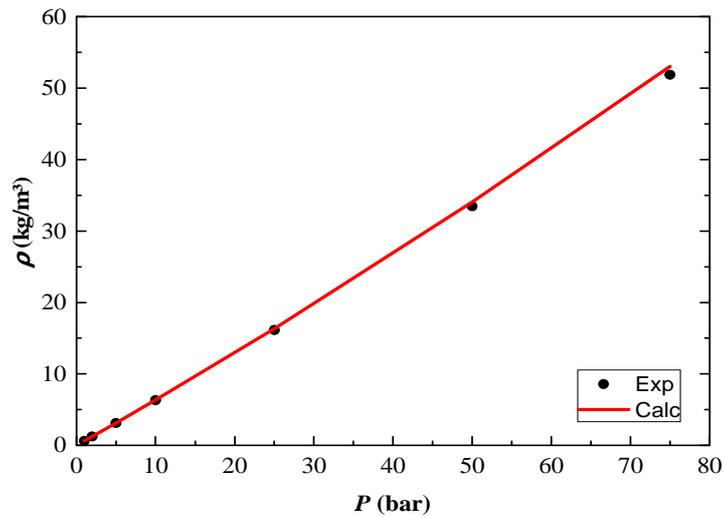


Figura 6 - Densidade a 310 K e pressão de 1 a 75 bar estimada pela equação de Peng-Robinson para o metano. Dados experimentais reportados por Mollerup (1985).

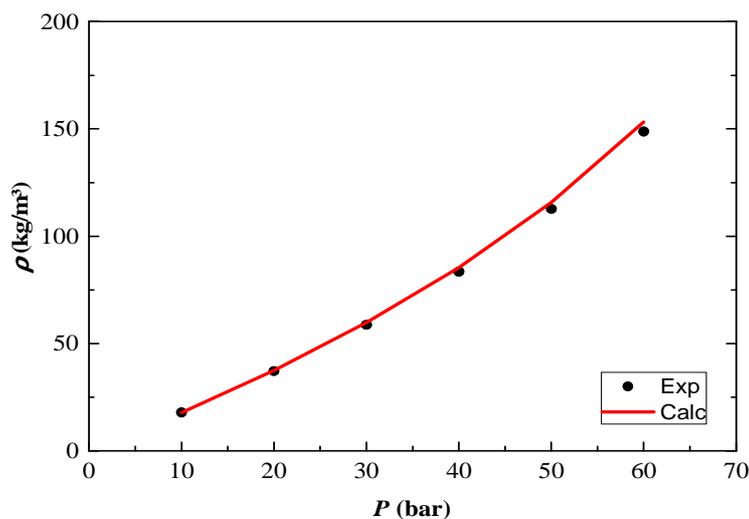


Figura 7 - Densidade a 313,15 K e pressão de 10 a 60 bar estimada pela equação de Peng-Robinson para o dióxido de carbono. Dados experimentais reportados por Gokmenoglu *et al.* (1996).

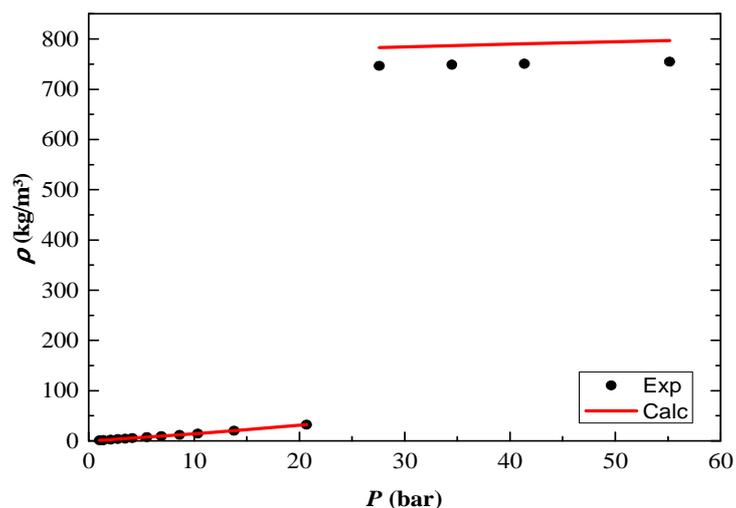


Figura 8 - Densidade a 310,93 K e pressão de 1,00 a 55,16 bar estimada pela equação de Peng-Robinson para o sulfeto de hidrogênio. Dados experimentais reportados por Reamer *et al.* (1950).

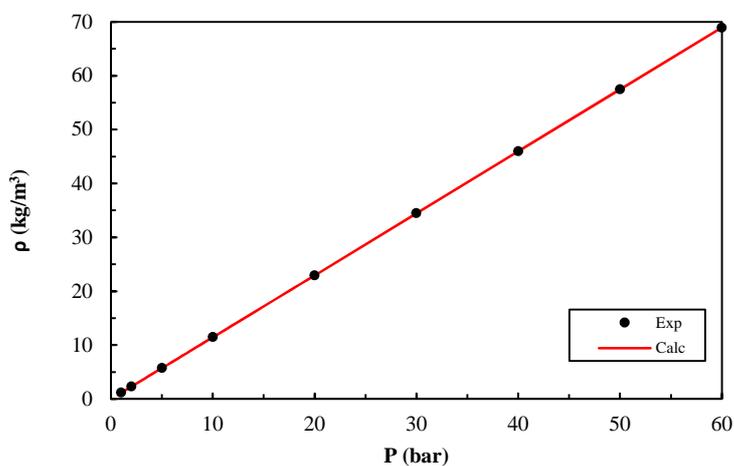


Figura 9 - Densidade a 295 K e pressão de 1 a 60 bar estimada pela equação de Peng-Robinson para o nitrogênio. Dados experimentais reportados por Span *et al.* (2000).

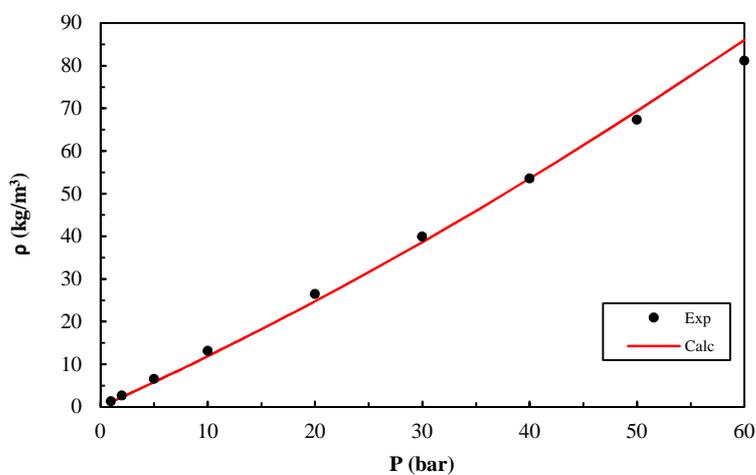


Figura 10 - Densidade a 295 K e pressão de 1 a 60 bar estimada pela equação de Peng-Robinson para o oxigênio. Dados experimentais reportados por Stewart *et al.* (1991).

Para os gases puros (Figura 6 a Figura 10), com exceção do H₂S (Figura 8), os resultados demonstram que a equação de estado de Peng-Robinson representa bem o comportamento da densidade nas condições testadas. Em relação ao H₂S, verifica-se que esta equação representa bem o comportamento da densidade até pressões de 25 bar. Acima deste valor, observa-se um súbito aumento nos valores desta propriedade. Este aumento é devido à mudança da fase vapor para a líquida. Sendo assim, percebe-se que esta equação fornece boas estimativas para a densidade do sulfeto de hidrogênio gasoso, mas superestima esta propriedade para este composto no estado líquido.

A densidade estimada pelo modelo de Peng-Robinson para as misturas gasosas compostas de metano (47,6% molar) com dióxido de carbono e oxigênio com nitrogênio (0 – 100%), bem como seus valores experimentais, são mostradas nas Figura 11 a Figura 12, respectivamente.

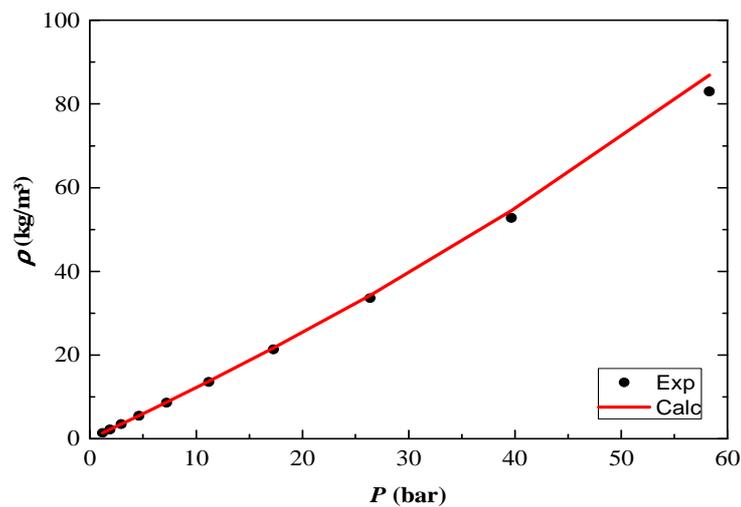


Figura 11 - Densidade para a mistura contendo dióxido de carbono (47,6% molar) e metano a 300 K e pressão de 1,20 a 58,29 bar estimada por Peng-Robinson. Dados experimentais reportados por Esper *et al.* (1989).

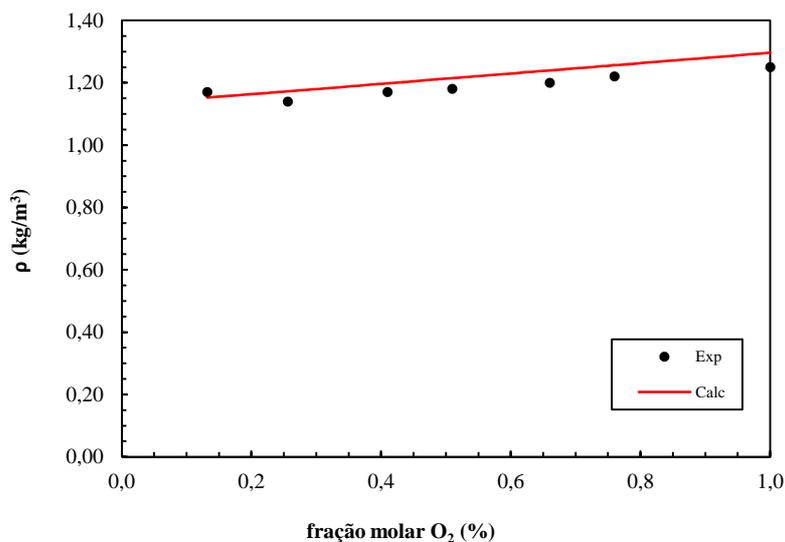


Figura 12 - Densidade a 298 K e pressão de 1 bar estimada por Peng-Robinson para a mistura de nitrogênio com oxigênio. Dados experimentais reportados por Gururaja *et al.* (1967).

Os resultados demonstrados nas Figura 11 - Figura 12 indicam que o modelo de Peng-Robinson representa bem o comportamento da densidade das misturas estudadas.

Os valores estimados das densidades para todos os compostos, em todas as faixas de temperaturas e pressão e composição estão anexas nas tabelas 14 a 19.

A estimativa da densidade para os sistemas em que serão testadas as equações de regime permanente, conforme item 3.3 da metodologia, baseado em dados de Tood e Webley *et al.* (2005), está mostrada na tabela 8, para que possam ser utilizados nos modelos preditivos de queda de pressão.

Tabela 8 - Estimativa da densidade pelo modelo de Peng-Robinson em condições similares as condições experimentais de Tood e Webley (2005).

Sistema	Gás	Temperatura (K)	Pressão (KPa)	Densidade estimada (Kg/m³)
1	100% O ₂	295,0	195	2,549
2	90% O ₂ 10% N ₂	295,0	195	2,517
3	22% O ₂ 78% N ₂	295,0	195	2,479
4	10% O ₂ 90% N ₂	295,0	195	2,261
5	99,99% He	292,6	186	0,306

4.2 ESTIMATIVAS DA VISCOSIDADE

Os resultados obtidos para a viscosidade do metano, dióxido de carbono, sulfeto de hidrogênios, nitrogênio e oxigênio puros (tabela 5), estão mostrados nas Figura 13 a Figura 17, juntamente com os dados experimentais obtidos na literatura.

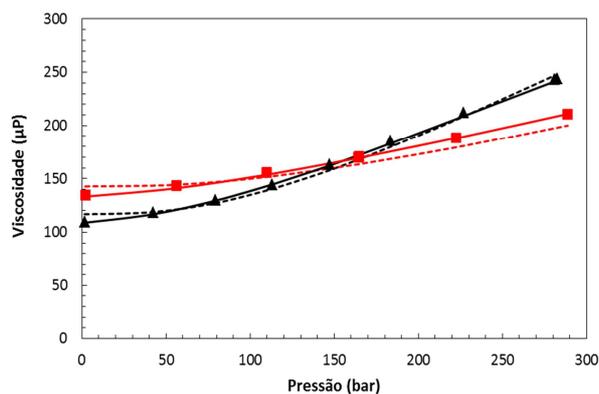


Figura 13 - Viscosidade do CH₄ puro: (▲) experimental a 293,15 K; (■) experimental a 373,15 K. Viscosidades calculadas: (----)Chung *et al.*; (—) Lucas. Dados experimentais reportados por Evers *et al.* (2002).

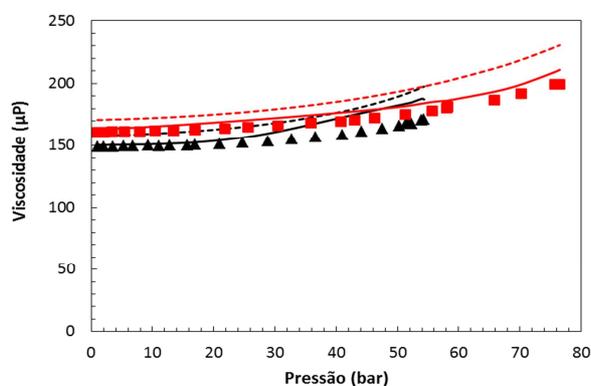


Figura 14 - Viscosidade do CO₂ puro: (▲) experimental a 298,15 K; (■) experimental a 323,15 K. Viscosidades calculadas: (----)Chung *et al.*; (—) Lucas. Dados experimentais reportados por Iwasaki e Takahashi (1981).

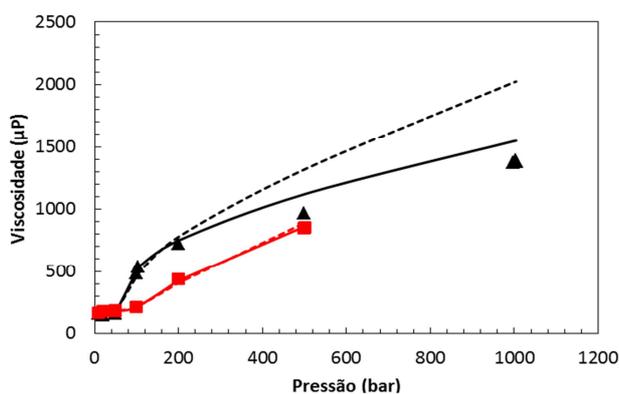


Figura 15 - Viscosidade do H₂S puro: (▲) experimental a 373,15 K; (■) experimental a 423,15 K. Viscosidades calculadas: (----)Chung *et al.*; (—) Lucas. Dados experimentais reportados por Giri *et al.* (2011 apud Quiñones-Cisneros *et al.*, 2012).

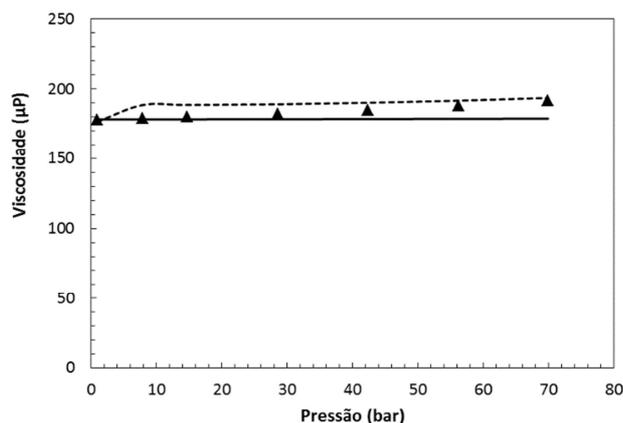


Figura 16 - Viscosidade do N₂ puro: (▲) experimental a 298,15 K. Viscosidades calculadas: (----)Chung *et al.*; (—) Lucas. Dados experimentais reportados por Kestin e Leidenfrost. (1959).

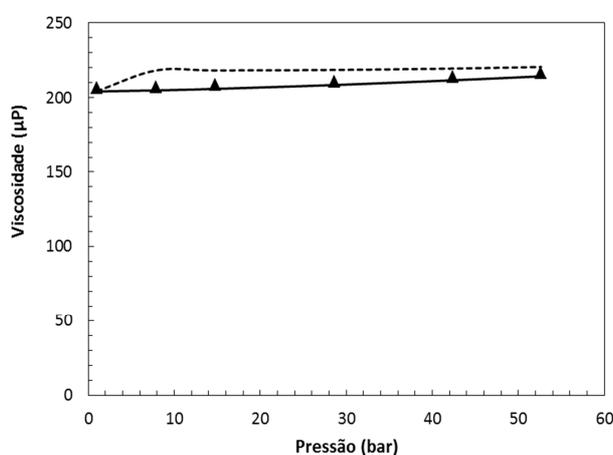


Figura 17 - Viscosidade do O₂ puro: (▲) experimental a 298,15 K. Viscosidades calculadas: (----)Chung *et al.*; (—) Lucas. Dados experimentais reportados por Kestin e Leidenfrost. (1959).

Os resultados mostrados na Figura 13 indicam que tanto o modelo de Chung quanto o de Lucas representam bem o comportamento da viscosidade do CH₄. Os desvios relativos médios para cada modelo foram de 3,5 e 0,7%, para Chung e Lucas, respectivamente, conforme demonstra a tabela 9. Os resultados apresentados para o CH₄ foram preditos com baixo desvio relativo médio pelos modelos de Chung e Lucas, pois estes modelos são adequados para gases apolares e com pequena massa molecular.

Para o CO₂ (Figura 14), os resultados indicam que o modelo de Chung superestima os valores experimentais para as duas temperaturas estudadas. Neste sistema, o modelo de Lucas representa o comportamento a 298,15K até pressões próximas a 20 bar. No entanto, acima desta pressão, a viscosidade calculada pelo modelo de Lucas desvia dos dados experimentais, e isto aumenta com o aumento da pressão. Para a

temperatura de 323,15 K, Lucas também superestima os valores de viscosidade experimentais, mas apresenta comportamento mais próximo que o mostrado por Chung. Os desvios relativos médios para cada modelo foi de 9,7 e 4,1%, para Chung e Lucas, respectivamente (tabela 9).

As viscosidades calculadas e experimentais, determinadas para o H₂S, estão mostradas na Figura 15. Conforme estimado para o H₂S, o aumento de temperatura apresentou melhores previsões para a viscosidade. Na temperatura mais baixa testada (373,15 K), novamente Lucas apresentou melhores resultados que Chung. Verifica-se também que o aumento da pressão, para valores maiores que 200 bar, acarretou em um aumento no desvio entre valores experimentais e preditos pelos modelos estudados. Os desvios relativos médios calculados foram de 13,0 e 4,7%, para Chung *et al.* e Lucas, respectivamente conforme mostrado na tabela 9. Para gases polares (H₂S), o modelo de Lucas apresentou melhores resultados, pois contempla as características de gases polares em seu modelo, enquanto que o modelo de Chung, como constatado pelos autores, é menos eficaz para compostos altamente polares.

Para o N₂ (Figura 16) os resultados indicam que o modelo de Lucas fornece boas estimativas até pressões de 30 bar. Acima deste valor, este modelo subestima os valores experimentais. Para o modelo de Chung observa-se o contrário: para pressões até 40 bar ele superestima os dados experimentais e acima desta pressão este modelo gera boas estimativas. O desvio relativo médio para cada modelo foi de 3,0 e 2,6%, para Chung e Lucas, respectivamente (tabela 9). Os resultados apresentados para o N₂ foram preditos com baixo desvio relativo médio pelos modelos de Chung e Lucas, pois estes modelos são adequados para gases apolares e com pequeno peso molecular.

Para o O₂ (Figura 17) os resultados indicam que o modelo de Lucas fornece boas estimativas para os dados experimentais. O modelo de Chung tem a tendência de superestimar os dados experimentais, sendo que o desvio se torna menor para pressões menores que 30 bar. O desvio relativo médio para cada modelo foi de 3,2 e 1,1%, para Chung e Lucas, respectivamente (tabela 9). Os resultados apresentados para o O₂ foram preditos com baixo desvio relativo médio pelos modelos de Chung e Lucas, pois estes modelos são adequados para gases apolares e com pequeno peso molecular.

De forma geral, para os gases puros, observou-se que ao se considerar a polaridade e acidez das moléculas estudadas, os desvios de ambos os modelos

aumentaram com a presença destas características, *i.e.*, $H_2S > CO_2 > CH_4 \approx O_2 \approx N_2$. Isto pode ser explicado considerando-se que: a) o metano, oxigênio e nitrogênio são moléculas apolares, e no caso do metano, sem elétrons livres nos átomos de hidrogênio e carbono; b) o gás carbônico é apolar, mas apresenta momento quadrupolo devido a elétrons livres nos átomos de oxigênio, e que o tornam uma molécula com caráter ácido; c) o sulfeto de hidrogênio é uma molécula polar e ácida, possuindo momento dipolar e elétrons livres no átomo de enxofre.

Os resultados obtidos para a mistura gasosa composta de constituintes do gás natural e a mistura entre oxigênio e nitrogênio, conforme tabela 5 estão mostrados nas Figura 18 - **Figura 19**, juntamente com os dados experimentais obtidos na literatura.

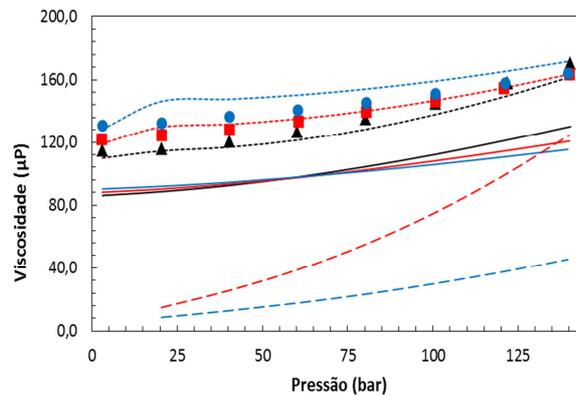


Figura 18 - Viscosidade para mistura modelo de gás natural: (\blacktriangle) experimental a 294,0 K; (\blacksquare) experimental a 322,9 K; (\bullet) experimental a 353,4 K. Viscosidades calculadas: (\cdots)Chung *et al.*; (\dashv) Lucas; ($- - -$) Lee *et al.*. Dados experimentais reportados por Assael *et al.* (2001).

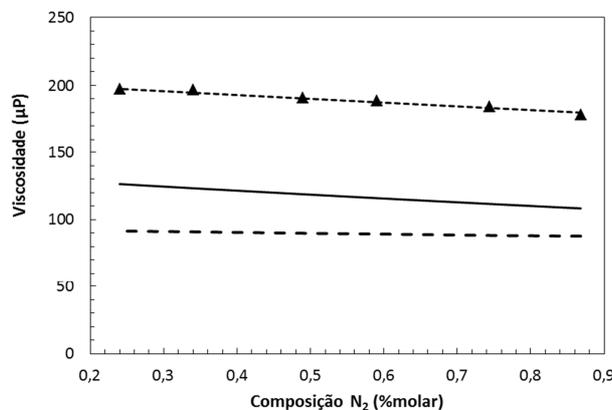


Figura 19 - Viscosidade para mistura composta por N_2 e O_2 com composição variada: (\blacktriangle) experimental a 298 K. Viscosidades calculadas: (\cdots)Chung *et al.*; (\dashv) Lucas; ($- - -$) Lee *et al.*. Dados experimentais reportados por Gururaja *et al.* (1967).

O perfil da viscosidade da mistura modelo de gás natural foi melhor predito por Chung e subestimado pelo modelo de Lucas (Figura 18). Neste caso foi estudado também o modelo de Lee *et al.*, indicado para aplicações de gás natural e com aplicabilidade de 20,4 a 140,4 bar e 322,9 e 353,4 K para este sistema específico. Para as temperaturas de 294,0 K e 322,9 K, o modelo de Chung representa bem os dados experimentais, mas para 353,4 K, este modelo superestima a viscosidade da mistura na faixa de pressão estudada. Chung. apresentou desvio relativo médio – entre as duas temperaturas - igual a 3,8% nestes resultados. O modelo de Lucas subestimou a viscosidade da mistura para as três temperaturas testadas. Para pressões próximas de 60 bar, os cálculos indicaram uma mudança do comportamento, em que a viscosidade para pressões maiores que 60 bar diminui com o aumento da temperatura, enquanto para pressões menores que 60 bar ocorre o contrário. Lee apresentou os maiores desvios dos dados experimentais dentre os modelos utilizados. Um desvio médio de 70,8% foi apresentado pelo modelo. Os resultados indicam um aumento da viscosidade com o aumento da pressão, que é melhor evidenciado para a temperatura de 322,9 K.

Para a mistura constituída por O₂ e N₂ com composições variadas (Figura 19), os resultados indicam que o modelo de Chung fornece boas estimativas para os dados experimentais. Os modelos de Lucas e Lee subestimam os dados experimentais. O desvio relativo médio para cada modelo foi de 0,7, 37,4 e 52,6%, para Chung, Lucas e Lee respectivamente (tabela 9).

Em geral, para as misturas gasosas - representativa do gás natural (composta em sua maior parte por alcanos apolares) e nitrogênio com oxigênio (também compostos apolares) o modelo de Chung, por ser mais adequado que o de Lucas para misturas, uma vez que utiliza regras de misturas com base na termodinâmica clássica (regras de mistura de van der Waals) representa melhor os resultados experimentais. Verificou-se para esta mistura que a partir da pressão de 75 bar a viscosidade é pouco influenciada pelo temperatura.

A tabela 9 apresenta os valores dos desvios relativos médios entre as faixas de temperatura e pressão testadas.

Tabela 9 - Desvios relativos médios para viscosidade obtidos para cada modelo estudado.

Gás	Chung <i>et al.</i>	Lucas	Lee <i>et al.</i>
CH ₄	3,5%	0,7%	-
CO ₂	9,7%	4,1%	-
H ₂ S	13,0%	4,7%	-
N ₂	3,0%	2,6%	-
O ₂	3,2%	1,1%	-
Gás natural	3,8%	26,7%	70,8%
N ₂ + O ₂	0,7%	37,4%	52,6%

Os artigos dos modelos originais sugerem valores para os desvios relativos menores que 4, 5 e 2% para os modelos de Chung, Lucas e Lee. Ao se considerar o desvio relativo médio, o modelo de Chung gerou dados acima dos valores estipulados pelos autores para compostos puros com caráter ácido e polar (CO₂ e H₂S, respectivamente). Os modelos de Lucas e Lee apresentaram desvios acima do previsto para as misturas gasosas.

Os valores estimados das viscosidades para todos os compostos, em todas as faixas de temperaturas e pressão, bem como os desvios relativos estão nas tabelas 21 a 31 dos anexos.

Por meio dos testes efetuados para prever propriedades de sistemas, como no caso de colunas de adsorção, em que ocorrem sequencialmente etapas de adsorção, ativação, purga, com diferentes composições, recomenda-se o uso do modelo de Chung, que fornece boas estimativas de viscosidade para misturas.

Após a validação da capacidade de predição da viscosidade pelos modelos acima citados, estimou-se por meio do modelo de Chung a viscosidade para os sistemas em que serão testados as equações de regime permanente. Os valores calculados são mostrados na tabela 10, nas mesmas condições operacionais de Tood e Webley (2005).

Tabela 10 - Estimativa da viscosidade dos gases pelo modelo de Chung *et al.* nas mesmas condições operacionais que os dados experimentais de Tood e Webley (2005).

Sistema	Gás	Temperatura (K)	Pressão (KPa)	Viscosidade (μP)
1	100% O ₂	295,0	195	269,95
2	90% O ₂ 10% N ₂	295,0	195	271,88
3	22% O ₂ 78% N ₂	295,0	195	274,09
4	10% O ₂ 90% N ₂	295,0	195	284,50
5	99,99% He	292,6	186	302,58

De posse da densidade e da viscosidade das correntes gasosas, e das características do leito poroso, é possível iniciar a terceira etapa deste trabalho referente aos testes dos modelos de regime permanente.

4.3 TESTE DAS EQUAÇÕES DE REGIME PERMANENTE

Com base nas estimativas da densidade (tabela 8), viscosidade (tabela 10) e das propriedades do leito (tabela 7) aplicou-se as equações de regime permanente para a predição da perda de carga, conforme disposto nas tabelas 1 e 2. A simulação dos 5 sistemas contemplam o fluxo gasoso em regime permanente por um leito poroso de zeólita LiLSX de gases puros e misturas gasosas compostas por N₂ e O₂ com composições variadas, bem como o fluxo do gás inerte Hélio. As condições simuladas foram as mesmas que as experimentais efetuadas por Tood e Webley (2005).

A seguir, na tabela 11 são apresentados todos os modelos testados, bem como os a média dos valores dos desvios relativos médios que permite selecionar os modelos com menores desvios.

Tabela 11 - Desvios relativos médios para todos os modelos testados.

Modelos que desconsideram o efeito da parede							
Modelo	100% O ₂ [1]*	90% O ₂ , 10% N ₂ [2]*	22% O ₂ , 78% N ₂ [3]*	10% O ₂ , 90% N ₂ [4]*	Média escoamento misturas	99,99% He [5]*	$\delta \bar{P}$
Rose e Risk	2,50%	4,30%	6,96%	4,16%	5,14%	3,06%	4,20%
Ergun	7,90%	14,53%	5,58%	5,19%	8,43%	12,97%	9,23%
Sug, Lee, Ogawa	8,11%	16,14%	5,34%	11,79%	11,09%	42,14%	16,70%
Mac Donald aspera	19,12%	26,77%	13,94%	16,73%	19,15%	31,55%	21,62%
Mac Donald lisa	90,71%	105,18%	85,80%	80,71%	90,56%	60,98%	84,67%
Mac Donald aspera <Re	13,15%	20,21%	8,45%	9,99%	12,88%	20,29%	14,42%
Mac Donald aspera >Re	89,15%	98,62%	80,02%	73,96%	84,20%	49,72%	78,29%
Foscolo Transição	32,51%	40,51%	26,58%	27,65%	31,58%	34,90%	32,43%
Foscolo Laminar	44,29%	38,73%	46,05%	37,00%	40,59%	5,18%	34,25%
Foscolo Turbulento	23,20%	20,76%	27,37%	35,35%	27,83%	70,26%	35,39%
Gibilaro	32,51%	40,51%	26,58%	27,66%	31,58%	34,90%	32,43%
Talmadge	13,47%	20,67%	8,43%	12,05%	13,72%	22,90%	15,50%
Çarpinlioglu	85,87%	85,13%	86,57%	86,32%	86,00%	88,39%	86,45%
Hicks	9,72%	11,77%	13,83%	18,41%	14,67%	51,37%	21,02%
Barnea e Medinick	24,89%	19,47%	28,03%	22,65%	23,38%	5,10%	20,03%
Morelus	8,35%	15,55%	4,24%	7,24%	9,01%	24,58%	11,99%
Morelus et al.	13,64%	20,99%	8,65%	12,60%	14,08%	25,91%	16,36%
Wentz e Thodos	93,58%	92,98%	93,78%	93,29%	93,35%	69,02%	88,53%
Modelos que consideram o efeito da parede							
Mehta	13,37%	20,43%	8,64%	10,13%	13,07%	20,12%	14,54%
Foumeny	24,86%	31,62%	19,01%	16,99%	22,54%	10,05%	20,51%
Esfield	4,20%	11,08%	3,92%	3,05%	6,02%	19,13%	8,27%
Montillet	37,34%	46,35%	31,37%	36,41%	38,04%	45,52%	39,40%

Freund	3,05%	3,73%	7,09%	2,66%	4,49%	19,14%	7,14%
Di Felice	77,94%	76,18%	78,78%	76,93%	77,30%	68,11%	75,59%
Nemec Polilobe	7,90%	14,55%	5,58%	5,19%	8,44%	12,97%	9,24%
Nemec Cilindro	7,90%	14,55%	5,58%	5,19%	8,44%	12,97%	9,24%
Ozahi	6,23%	13,05%	4,27%	4,12%	7,14%	17,07%	8,94%

*Sistemas testados.

Em que $\delta\bar{P}$ é o valor médio entre os cinco testes realizados.

Nas tabelas 32 a 36 dos anexos encontram-se todos os cálculos realizados para a predição da perda de carga dos sistemas estudados.

4.3.1 QUEDA DE PRESSÃO EM FLUXOS DE GASES PUROS E MISTURAS

As Figura 20 - **Figura 24** demonstram os desvios relativos médios entre a queda de pressão teórica e experimental para os sistemas 1-5 da tabela 11. Representam os desvios relativos médios para a queda de pressão durante o fluxo de diversas correntes gasosas pelo meio poroso. Identificam ainda modelos que consideram o efeito da parede na queda de pressão, que será discutido no tópico seguinte.

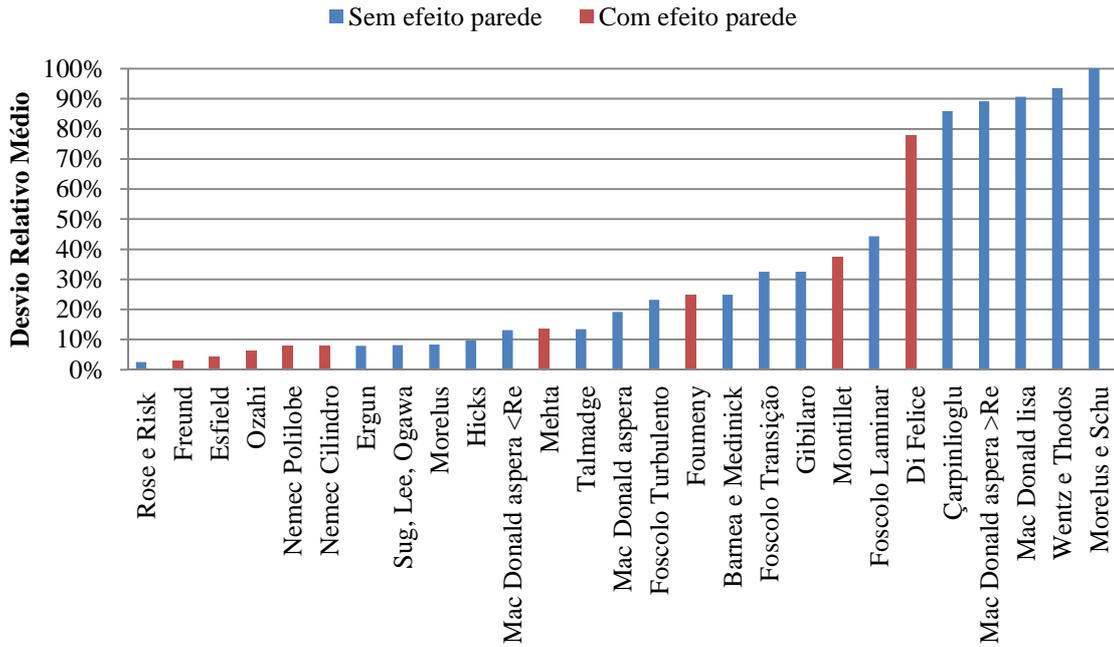


Figura 20 - Desvio relativo médio entre dados estimado pelos modelos e dados experimentais de Tood e Webley (2005) para escoamento de uma corrente gasosa contendo 100% de O₂.

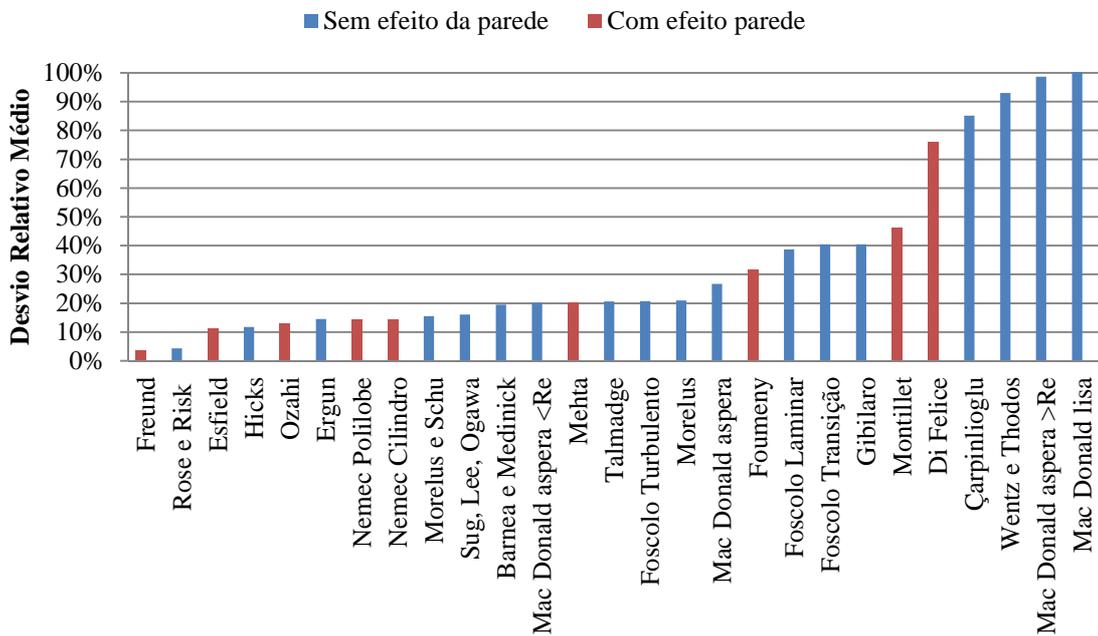


Figura 21 - Desvio relativo médio entre dados estimado pelos modelos e dados experimentais de Tood e Webley (2005) para escoamento de uma corrente gasosa contendo 90% de O₂ e 10% de N₂.

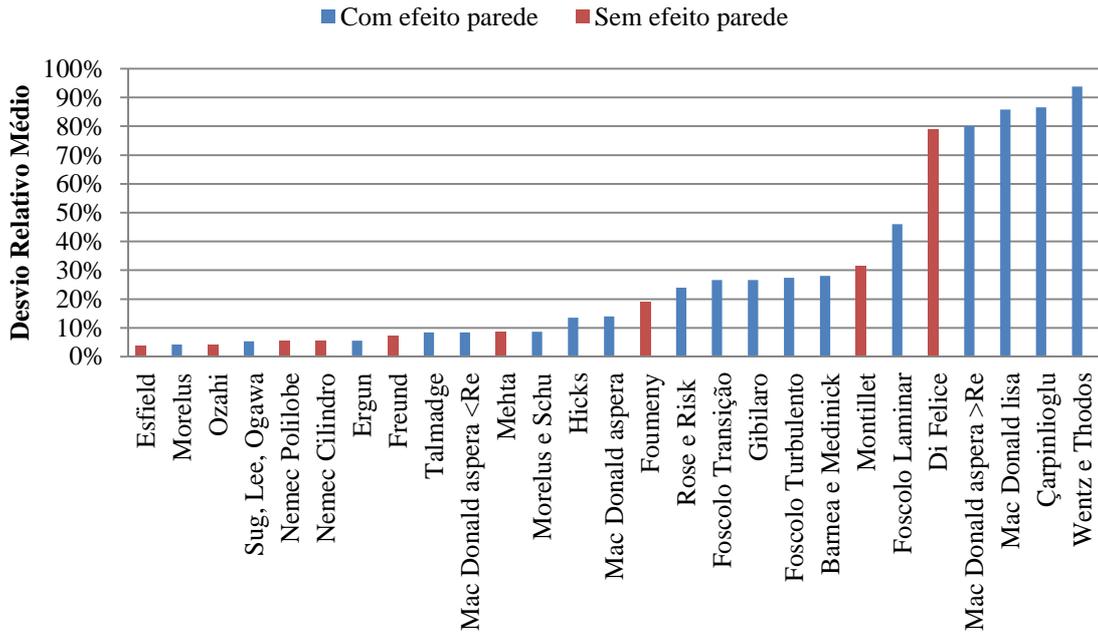


Figura 22 - Desvio relativo médio entre dados estimado pelos modelos e dados experimentais de Tood e Webley (2005) para escoamento de uma corrente gasosa contendo 22% de O₂ e 78% de N₂.

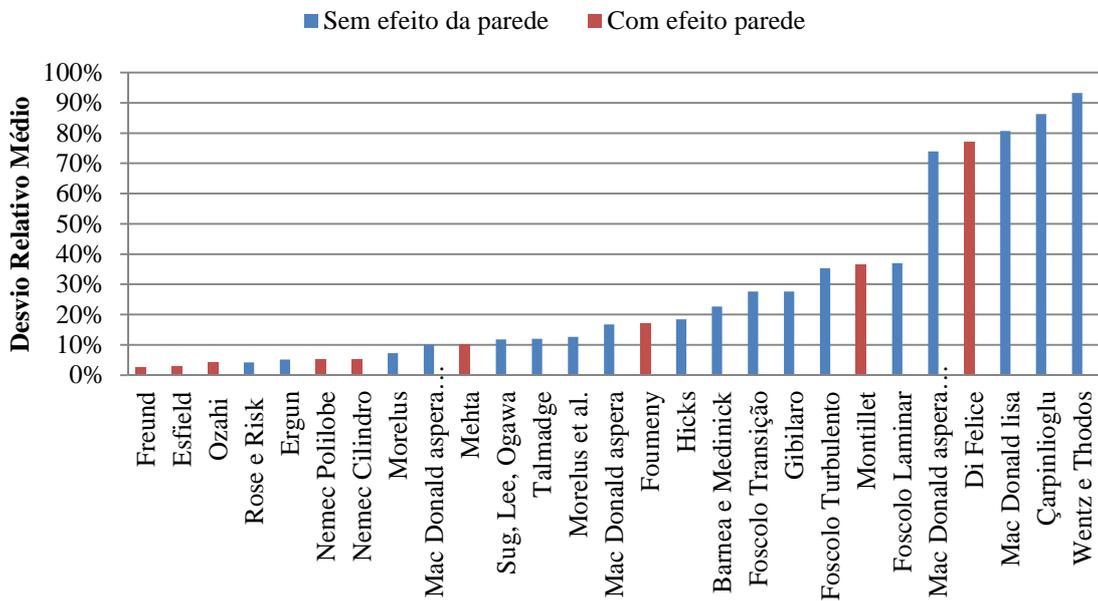


Figura 23 - Desvio relativo médio entre dados estimado pelos modelos e dados experimentais de Tood e Webley (2005) para escoamento de uma corrente gasosa contendo 10% de O₂ e 90% de N₂.

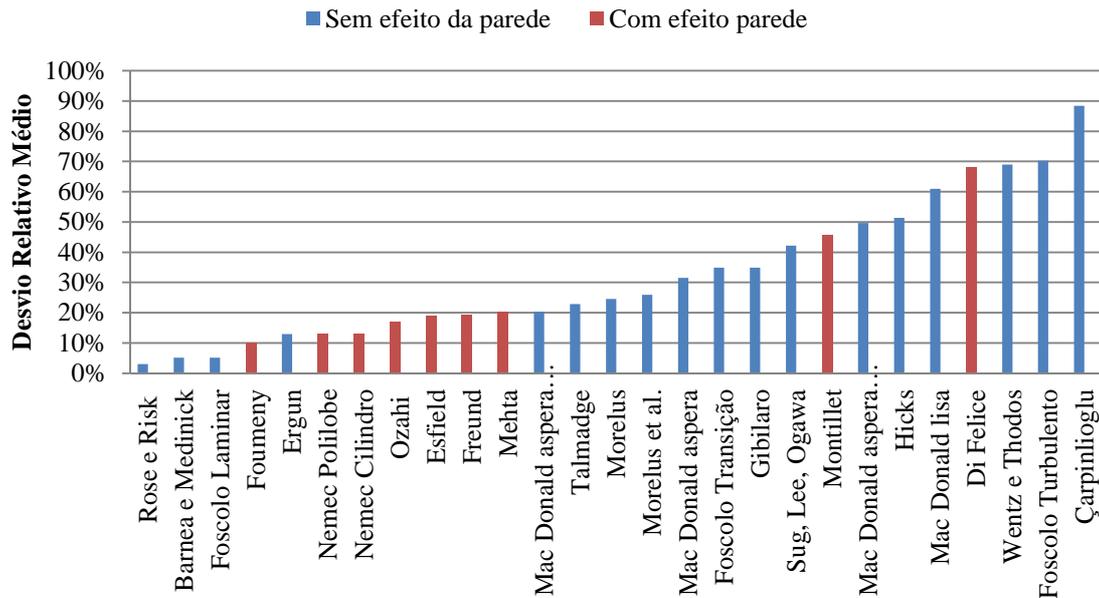


Figura 24 - Desvio relativo médio entre dados estimado pelos modelos e dados experimentais de Tood e Webley (2005) para escoamento de uma corrente gasosa contendo 99,99% He.

Conforme a Figura 20, o modelo de Rose e Risk apresentou as melhores estimativas em relação aos dados experimentais, seguido de Freund, Esfield e Ozahi, com desvios relativos médios de 2,50%, 3,05%, 4,20% e 6,23% respectivamente. Estes modelos apresentaram melhores estimativas que o modelo de Ergun, com desvio relativo médio de 7,90%.

Já de acordo com a Figura 21, o modelo de Freund gerou as melhores estimativas de dados experimentais, seguido de Rose e Risk, Esfield e Hicks, com desvios relativos médios de 3,73%, 4,30%, 11,08% e 11,77% respectivamente. Estes modelos apresentaram melhores estimativas que o modelo de Ergun, com desvio relativo médio de 14,53%.

Na Figura 22, o modelo de Esfield gerou as melhores estimativas de dados experimentais, seguido de Morelus, Ozahi e Sug, Lee e Ogawa, com desvios relativos médios de 3,92%, 4,24%, 4,27% e 5,34% respectivamente. Estes modelos apresentaram melhores estimativas que o modelo de Ergun, com desvio relativo médio de 5,58%.

Conforme a Figura 23, o modelo de Freund gerou as melhores estimativas de dados experimentais, seguido de Esfield, Ozahi e Rose e Risk, com desvios relativos médios de 2,66%, 3,05%, 4,12% e 4,16% respectivamente. Estes modelos apresentaram melhores estimativas que o modelo de Ergun, com desvio relativo médio de 5,19%.

Na Figura 24, o modelo de Rose e Risk gerou as melhores estimativas de dados experimentais, seguido de Barnea e Medinick, Foscolo (laminar) e Foumeny, com desvios relativos médios de 3,06%, 5,10%, 5,18% e 10,05% respectivamente. Estes modelos apresentaram melhores estimativas que o modelo de Ergun, com desvio relativo médio de 12,97%.

A tabela 12 apresenta os modelos estudados e os desvios relativos médios menores que 20% para os sistemas testados.

Tabela 12 - Modelos com desvios relativos médios menores que 20%.

Sistema	Desvio Relativo Médio (%)						Desvio Global
	100% O ₂	90% O ₂ , 10% N ₂	22% O ₂ , 78% N ₂	10% O ₂ , 90% N ₂	Média (misturas gasosas)	99,99% He	
Rose e Risk	2,50%	4,30%	6,96%	4,16%	5,14%	3,06%	4,20%
Freund	3,05%	3,73%	7,09%	2,66%	4,49%	19,14%	7,14%
Esfield	4,20%	11,08%	3,92%	3,05%	6,02%	19,13%	8,27%
Ergun	7,90%	14,53%	5,58%	5,19%	8,43%	12,97%	9,23%
Nemec Polilobe	7,90%	14,55%	5,58%	5,19%	8,44%	12,97%	9,24%
Nemec Cilindro	7,90%	14,55%	5,58%	5,19%	8,44%	12,97%	9,24%
Morelus	8,35%	15,55%	4,24%	7,24%	9,01%	24,58%	11,99%
Ozahi	6,23%	13,05%	4,27%	4,12%	7,14%	17,07%	8,94%
Mac Donald asp. <Re	13,15%	20,21%	8,45%	9,99%	12,88%	20,29%	14,42%
Mehta	13,37%	20,43%	8,64%	10,13%	13,07%	20,12%	14,54%
Talmadge	13,47%	20,67%	8,43%	12,05%	13,72%	22,90%	15,50%
Morelus et al.	13,64%	20,99%	8,65%	12,60%	14,08%	25,91%	16,36%

Com base na tabela 12, verifica-se que de forma geral, ao se considerar todos os sistemas, os modelos que melhor predizem os dados experimentais são os de Rose e Risk, Freund, Esfield e Ozahi, com desvios relativos médios entre todos os sistemas de 4,20%,

7,14%, 8,27% e 8,94% respectivamente. Estes modelos apresentaram menores desvios quando comparados ao modelo de Ergun, cujo desvio médio foi de 9,23%. Ao se considerar a média dos desvios em sistemas com escoamento de misturas gasosas, os modelos com menores desvios relativos médios continuam a ser os mesmos, porém, nesse caso, o modelo de Freund gerou um menor desvio, de 4,49%, seguido pelos modelos de Rose e Risk (5,14%), Esfield (6,02%), sendo menores que o modelo de Ergun (8,43%). Para o escoamento do oxigênio puro, o modelo de Rose e Risk obteve a melhor capacidade preditiva, com um desvio relativo médio de 2,50%, seguido pelos modelos de Freund (3,05%), Esfield (4,20%) e Ergun (7,90%). Para o escoamento do gás inerte hélio, o modelo de Rose e Risk obteve a melhor capacidade preditiva, com um desvio relativo médio de 3,06%, seguido pelos modelos de Nemeç (12,97%) e Ergun (12,97%).

Diferentemente do modelo de Ergun, cuja estimativa da queda de pressão é dada pela proporcionalidade da velocidade de escoamento, contemplando o regime laminar, transição e turbulento, corrigidos por constantes A e B, fixas, o modelo de Rose e Risk, também ajustado a partir de dados experimentais, é função do tipo regime de escoamento (Reynolds), e possui uma natureza empírica.

A tabela 13 apresenta uma comparação entre os sistemas com escoamento de nitrogênio e oxigênio e suas misturas e o gás inerte.

Tabela 131 - Modelos com melhores capacidades preditivas para escoamento de gases puros, misturas gasosas e inerte.

Sistema	Modelo	Desvio Relativo Médio (%)
Escoamento gás puro (O₂)	Freund	3,05
	Rose e Risk	2,50
	Esfield	4,20
	Ergun	7,90
Escoamento de mistura gasosa (O₂ + N₂)	Freund	4,49
	Rose e Risk	5,14
	Esfield	6,02
	Ergun	8,43
Inerte	Freund	19,14
	Rose e Risk	3,06
	Esfield	19,13
	Ergun	12,97

Os resultados obtidos com Rose e Risk fazem deste modelo uma melhor alternativa para estimativa da perda de carga para os sistemas estudados (escoamento de gases puros e misturas gasosas). Ele pode ser empregado no balanço de quantidade de movimento em seu formato simplificado, conforme Equação 5, substituindo o modelo de Ergun. Na pesquisa de Tood e Webley (2005), os balanços de massa foram resolvidos acoplados a equação de Ergun, representativa do balanço de quantidade de movimento para obtenção dos perfis de pressão em regime transiente, considerando-se a ocorrência do fenômeno da adsorção. Recomenda-se, portanto a utilização do modelo de Rose e

Risk, podendo-se obter melhores estimativas dos dados experimentais nas condições e restrições relatadas na tabela 1.

4.3.2 RESTRIÇÕES DOS MODELOS

Uma outra análise proposta foi a avaliação dos modelos quanto à sua aplicabilidade, conforme restrições e indicações dispostas nas tabelas 1 e 2, sendo elas o tipo de escoamento (representado pelo número de Re), porosidade (ε) e tamanho e forma das partículas.

Em relação ao tipo de escoamento, o número de Reynolds testado variou entre 36 a 104 e o Reynolds modificado (Re_p) entre 16 e 160. Com base nisto, os modelos de Wentz Jr. e Thodos, Hicks, Çarpinlioglu, Ozahi e Foumeny ficaram fora da faixa de aplicabilidade, apresentando desvios relativos médios entre todos os sistemas maiores que 88%, 21%, 86%, 9% e 21% respectivamente, conforme consta na tabela 11. O modelo de Ozahi, mesmo não estando dentro da faixa de aplicabilidade, ainda assim gerou boas estimativas de dados experimentais.

A porosidade média do meio é 0,35. Em relação a este parâmetro o modelo de Gibilaro (1985) ficou fora da faixa de aplicação, 0,40 a 1,0 e apresentou um desvio relativo médio de 32,43% entre todos os sistemas.

Em relação aos parâmetros tamanho e forma das partículas todos os modelos se enquadraram na faixa de aplicação sugerida pelos autores.

4.3.3 INFLUÊNCIA DA PAREDE

Outra análise proposta foi verificar se os modelos dispostos na tabela 2 geram melhores estimativas para os sistemas simulados. A relação D/d_p do leito simulado é de 29,4. Este valor encontra-se fora dos limites especificados pelos modelos de Freund, Di Felice, Nemeç e Ozahi. Destes, o modelo de Di Felice apresentou o maior desvio relativo médio entre todos os sistemas testados (75,59%). Os modelos de Freund, Nemeç e Ozahi,

mesmo estando fora da faixa de aplicabilidade, ainda assim forneceram boas estimativas, cuja média dos desvios entre os sistemas foi de 7,14, 9,24 e 8,94% respectivamente.

De forma geral, ao testar todos os modelos dispostos na tabela 2, que consideram importante o efeito da parede, verifica-se que um maior número de modelos forneceram boas estimativas quando comparados ao número de modelos que desconsideram este efeito, como pode ser verificado na tabela 11. Contudo, a diferença entre os valores simulados não foi significativa, e modelos que desconsideram o efeito da parede provaram ser capazes de gerar boas estimativas de dados de queda de pressão.

O modelo de Rose e Risk apresentou melhores resultados por se tratar de um modelo que desconsidera os efeitos da parede, tratando-se do caso estudado. Além disso, outra vantagem é trata-se de uma equação de mais fácil aplicação do que os modelos que consideram o efeito da parede.

4.3.4 VARIAÇÃO DA QUEDA DE PRESSÃO COM A VELOCIDADE

Para verificar o comportamento das curvas simuladas pelos modelos que apresentaram os menores desvios relativos médios (Rose e Risk, Freund e Esfield) entre todos os sistemas, ou seja, escoamento de gás puro (O_2), misturas gasosas (O_2 e N_2) e gás inerte (He), demonstrou-se a queda de pressão *versus* a velocidade superficial da corrente gasosa, conforme demonstram as Figuras Figura 25 a Figura 29. Para efeito de comparação, foi incluído também o modelo de Ergun.

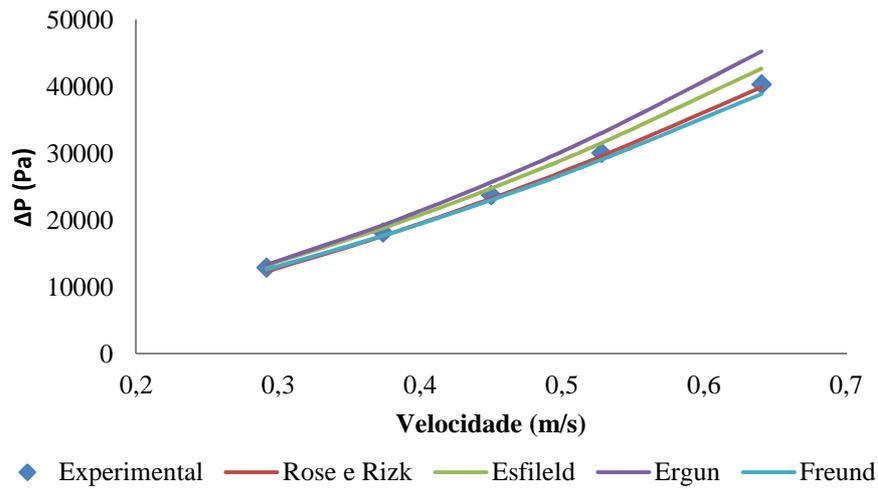


Figura 25 - Dados experimentais de Tood e Webley (2005) e simulação com os modelos de melhor ajuste para o sistema contendo 100% de O₂.

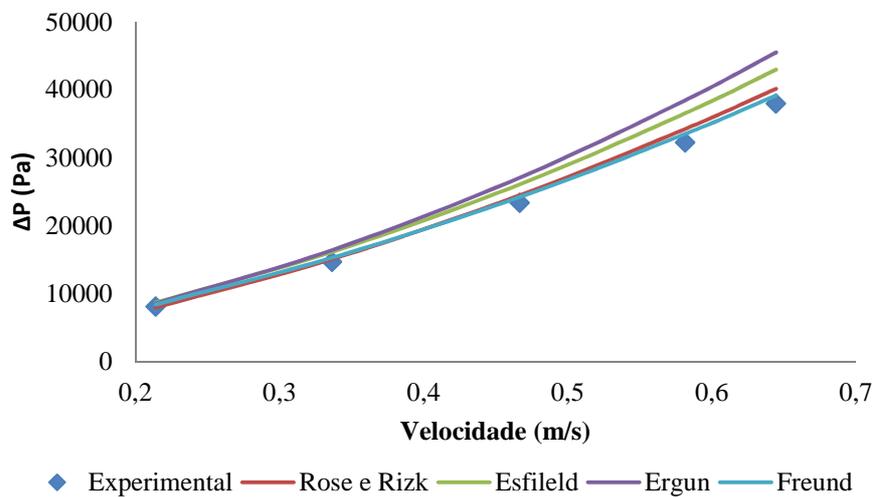


Figura 26 - Dados experimentais de Tood e Webley (2005) e simulação com os modelos de melhor ajuste para o sistema contendo 90% O₂ e 10% de N₂.

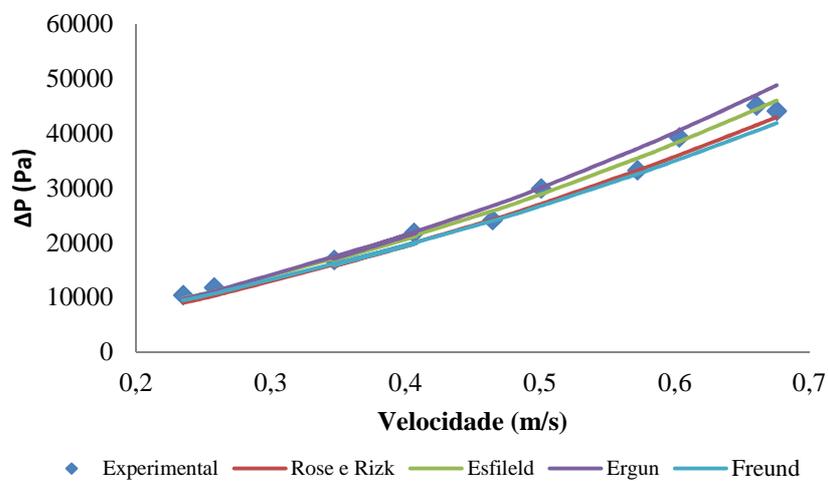


Figura 27 - Dados experimentais de Tood e Webley (2005) e simulação com os modelos de melhor ajuste para o sistema contendo 22% O₂ e 78% de N₂.

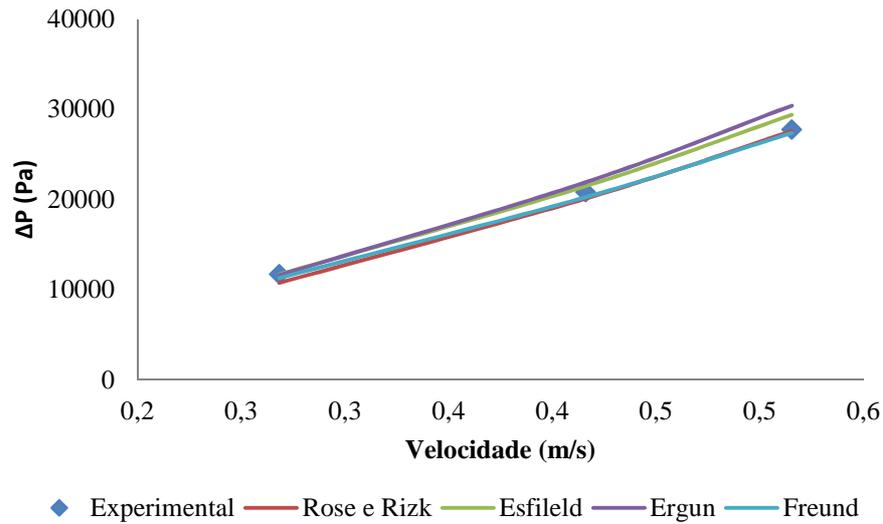


Figura 28 - Dados experimentais de Tood e Webley (2005) e simulação com os modelos de melhor ajuste para o sistema contendo 10% O₂ e 90% de N₂.

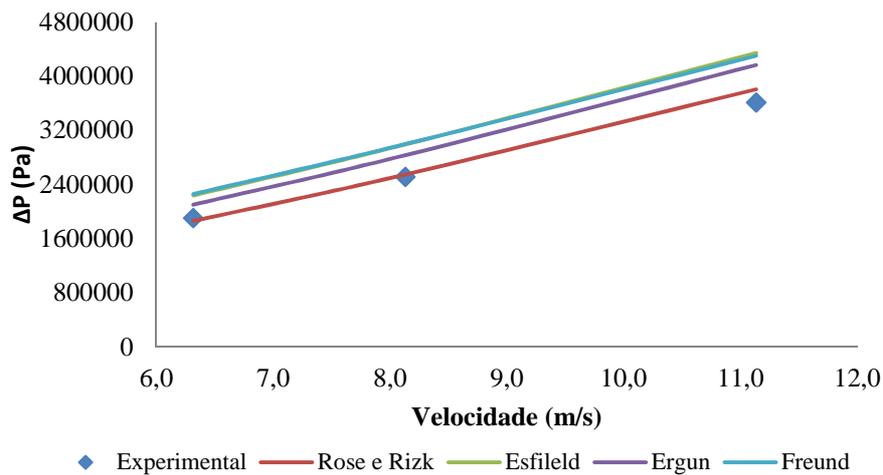


Figura 29 - Dados experimentais de Tood e Webley (2005) e simulação com os modelos de melhor ajuste para o sistema contendo 100% He.

De acordo com a Figura 25, o escoamento de oxigênio puro é melhor representado pelo modelo de Rose e Risk, enquanto que o modelo de Freund subestima os valores experimentais a partir da velocidade de 0,53 m/s, enquanto os outros modelos superestimam os valores.

Já na Figura 26, no escoamento da mistura gasosa composta de O₂ (90%) e N₂ o modelo de Esfield e Rose e Risk fornecem boas estimativas dos dados experimentais,

apresentando uma leve superestimava de valores para velocidades maiores que 0,47m/s, enquanto que os outros modelos superestimam os valores experimentais.

Na Figura 27, para o escoamento da mistura gasosa composta de O₂ (22%) e N₂ os modelos de Esfield e Rose e Risk, em geral, fornecem boas estimativas dos dados experimentais para este sistema. O modelo de Freund subestima os dados enquanto que o modelo de Ergun superestima os valores.

E na Figura 28, que representa a perda de carga durante o escoamento da mistura gasosa composta de O₂ (10%) e N₂ o modelo de Rose e Risk fornece boas estimativas dos dados experimentais para este sistema. Os demais modelos superestimam os valores experimentais.

Por fim, na Figura 29, há o escoamento do gás inerte He, e neste caso os modelos de Rose e Risk e Esfield fornecem boas estimativas dos dados experimentais. Os demais modelos superestimam os valores experimentais.

Em todos os casos analisados acima, o modelo de Rose e Risk se destacou em relação aos demais modelos por apresentar uma boa capacidade preditiva, enquanto os outros sistemas, mesmo possuindo baixos desvios, tem a tendência de superestimar ou subestimar os valores experimentais.

5.0 CONCLUSÃO

A equação de estado de Peng-Robinson e as regras de mistura de van der Waals foram utilizadas para estimar a densidade dos gases puros metano, dióxido de carbono, sulfeto de hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e também para uma mistura gasosa composta de metano com dióxido de carbono e nitrogênio com oxigênio. Demonstrou-se, potencialidade na predição desta propriedade em diversas temperaturas e em uma ampla faixa de pressão, para compostos puros polares a apolares e também misturas gasosas, apresentando pequenos desvios em relação a medidas experimentais disponíveis na literatura.

Em relação à viscosidade, a aplicabilidade dos modelos estudados neste trabalho indica que para gases puros apolares e misturas destes, o modelo de Chung, pode ser utilizado para a predição da mesma. Para gases puros polares, a aplicação do modelo de Lucas resultou neste caso em melhores predições que Chung, pois contempla tais moléculas em seu modelo, enquanto modelo de Chung, como constatado pelos autores e pelos resultados da pesquisa, é menos eficaz para compostos polares. Misturas de gases polares merecem uma maior investigação em trabalhos futuros. Os resultados com o modelo Lee *et al.* indicam que sua aplicação não é recomendada para misturas gasosas similares à testada neste trabalho. Para simulação de processos cíclicos, com escoamento de gases puros e misturas, como ocorre na operação de colunas de adsorção, recomenda-se o uso do modelo de Chung para predição da viscosidade, que proporciona boas estimativas da viscosidade de misturas gasosas e de gases puros.

Em relação as equações de regime permanente utilizadas para a previsão da queda de pressão no leito recheado com zeólita LiLSX, a utilização do modelo de Rose e Risk pode ser promissora para a estimativa de dados experimentais durante o escoamento dos gases puros oxigênio e nitrogênio e suas misturas e também para o escoamento de hélio, com um desvio médio de 4,20%. Portanto, indica-se o uso deste modelo para simulações de condições operacionais para sistemas semelhantes aos estudados, bem como no estudo teórico da otimização de processos, uma vez que apresentou menores desvios que o modelo de Ergun, que é amplamente utilizado, e que no caso estudado, apresentou desvio de 9,23%.

Em relação às faixas de aplicação testadas para as equações de regime permanente, a característica mais influente foi o efeito da parede. Verificou-se que, de forma geral, um maior número de modelos que consideram a influência da parede geraram melhores estimativas se comparado ao número de modelos que não consideram este efeito. Contudo, em virtude de sua maior complexidade e da pequena diferença entre os desvios gerados por modelos mais simples, sugere-se o uso destes, como por exemplo, o modelo de Rose e Risk, que apresentou menores desvios relativos médios para o caso estudado.

Por fim, ao se comparar as curvas experimentais de queda de pressão com as curvas simuladas pelos modelos que geraram menores desvios, Rose e Risk (4,20%), Freund (7,14%), Esfield (8,27%), verificou-se que o modelo de Rose e Risk, de forma geral, apresentou boas estimativas dos dados experimentais, enquanto os outros modelos subestimam ou superestimam estes valores.

6.0 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Assael, M. J.; Dalaouti, N. K.; Vesovic, V. Viscosity of natural-gas mixtures: measurements and prediction. **International Journal of Thermophysics**. 22 (2001), 61-71.

Barnea, E.; Mednick, R. L. A Generalized approach to the Fluid Dynamics of Particulate Systems Part III: General Correlation for the Pressure Drop Through Fixed Beds of Spherical Particles. **The Chemical Engineering Journal**. 15 (1978), 215 – 227.

Belmabkhout, Y.; Weireld, G. D.; Sayari, A. Amine-bearing mesoporous silica for CO₂ and H₂S removal from natural gas and biogas. **Langmuir**. 25 (2009), 13275-13278.

Bird, R. B.; Stewart, W. E.; Lightfoot, E. N. **Fenômenos de Transporte**. 2º Edição. LTC. Rio de Janeiro. RJ, 2004.

Bouton, J. R.; STEIN, F. P. Effect of pressure on the constant-pressure heat capacity of a methane-carbon dioxide mixture. **J. Chem. Eng. Data**, 33 (1988), 196 – 198.

Brea, F. M.; Edwards, M. F. ; Wilkinson, W. L. The flow of non-newtonian slurries through fixed and fluidised beds. **Chemical Engineering Science**. 31 (1976), 325 – 336.

Çarpinlioglu, M. O.; Özahi, E. A simplified correlation for fixed bed pressure drop. **Powder Technology**. 187 (2008), 94-101.

Cen, P.; Yang, R.T. Separation of a five-component gasmixture by pressure swing adsorption. **Sep. Sci. Technol**. 20 (1985),725–747.

Chang-Ha, Lee. **Adsorption Science and Technology**. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. USA, Danvers, 2003.

Chung, T.; Ajlan, M.; Lee, L. L.; Starling, K. Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties. **Ind. Eng. Chem. Res**. 27 (1988), 671-679.

Cremasco, M. A. **Operações unitárias em sistemas particulados e fluidodinâmicos**. 1º Edição. Blücher. São Paulo. SP, 2012.

Dantas, T.L.P.; Luna, F.M.T.; Silva Jr. I.J.; de Azevedo, D.C.S.; Grande, C.A.; Rodrigues, A.E.; Moreira, R.F.P.M. Carbondioxide-nitrogen separation through adsorption on activated carbon in a fixed bed. **Chem. Eng. J.** 169 (2011), 11–19.

Darcy, L., **Les Fontaines publiques de la ville de Dijon**, Victor Delmont, Paris, 1856

Delgado, J. A.; Uguina, M. A.; Sotelo, J. L.; Ruíz, B.; Gómez, J. M. Fixed Bed adsorption of carbon dioxide/methane mixtures on silicalite pellets. **Adsorption**. 12 (2006), 5-18.

Di Felice, R. Gibilaro, L. G. Wall effects for the pressure drop in fixed beds. **Chemical Engineering Science**. 59 (2004), 3037 – 3040.

Dzmitry, H.; Tallarek, U. Transition from creeping via viscous-inertial to turbulent flow in fixed beds. **Journal of Chromatography**. 1126 (2006), 70-85.

Eisfeld, B.; Schnitzlein, K. The influence of confining walls on the pressure drop in packed beds. **Chemical Engineering Science**. 56 (2001), 4321-4329.

Ergun, S., **Chem. Eng. Prog.**, 48 (1952), 89-94.

Esper, G. J.; Bailey, D. M.; Holste, J. C.; Hall, K. R. Volumetric behavior of near-equimolar mixtures for CO₂+CH₄ and CO₂+N₂. **Fluid Phase Equilib.** 49 (1989), 35 – 47.

Evers, C.; Lösch, H. W.; Wagner, W. An absolute viscosimeter-densimeter and measurements of the viscosity of Nitrogen, Methane, Helium, Neon, Argon, and Krypton over wide range of density and temperature. **International Journal of Thermophysics**. 23 (2002), 1411-1439.

Faiz, R.; Al-Marzouqi, M. Insights on natural gas purification: Simultaneous absorption of CO₂ and H₂S using membrane contactors. **Separation and Purification Technology**. 76 (2010), 351-361.

Fateen, S.-E. K.; Khalil, M. M.; Elnabawy, A. O. Semi-empirical correlation for binary interaction parameters of the Peng–Robinson equation of state with the van der Waals mixing rules for the prediction of high-pressure vapor–liquid equilibrium. **J. Adv. Res.** 4 (2013), 137 – 145.

Forchheimer, P., Wasserbewegung durch Boden. **Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieuer**. 45 (1901).

Foscolo, P. U.; Gibilaro, L. G.; Waldram, S. P. A unified model for particulate expansion of fluidised beds and flow in fixed porous media. **Chemical Engineering Science**. 8 (1983), 1251-1260.

Foumeny, E. A.; Benyahia, F.; Castro, J. A. A.; Moallemi, H. A., Roshani, S. Correlations of pressure drop in packed beds taking into account the effect of confining wall. **Int. J. Heat Mass Transfer**. 36 (1993), 536-540.

Freund, H.; Zeiser, T.; Huber, F.; Klemm, E.; Brenner, G.; Durst, F.; Emig, G. Numerical simulations of single phase reacting flows in randomly packed fixed-bed reactors and experimental validation. **Chemical Engineering Science**. 58 (2003), 903-910.

Galliero, G.; Nieto-Draghi, C.; Boned, C.; Avalos, J. B.; Mackie, A. D.; Baylaucq, A.; Montel, F. Molecular dynamics simulation of acid gas mixtures: A comparison between several approximations. **Ind. Eng. Chem. Res.** 46 (2007), 5238-5244.

García, S.; Gil, M.V.; Pis, J. J.; Rubiera, F.; Pevida, C. Cyclic operation of a fixed-bed pressure and temperature swing process for CO₂ capture: Experimental and statistical analysis. **International Journal of Greenhouse Gas Control**. 12 (2013), 35-43.

Gibilaro, L. G.; Di Felice, R.; Waldram, S. P. Generalized friction factor and drag coefficient correlations for fluid-particle interactions. **Chemical Engineering Science**. 40 (1985), 1817-1823.

Gokmenoglu, Z.; Xiong, Y.; Kiran, E. Volumetric Properties of Carbon Dioxide + Sulfur Hexafluoride at High Pressures. **J. Chem. Eng. Data**. 41 (1996), 354 – 360.

Gomide, R.; **Operações Unitárias – Operações de Transferência de Massa**. Vol. 4. Dag Gráfica e Editorial LTDA. ,São Paulo, 1987.

Gomide, R. **Operações Unitárias: Separações Mecânicas**. Dag Gráfica e Editorial LTDA. São Paulo, 1993.

Grande, C.A.; Rodrigues, A.E. Electric swing adsorption for CO₂ removal from flue gases. **Int. J. Greenh. Gas Con.** 2 (2008), 194–202.

Gunjal, P. R.; Ranade, V. V.; Chaudhari, R. V. Computational study of a single-phase flow in packed beds of spheres. **AIChE Journal**. 51 (2005), 365-378.

Gururaja, G. J.; Tirunarayanan, M. A.; Ramachandran, A. Dynamic viscosity of gas mixture. **Journal of Chemical Engineering Data**. 12 (1967), 562 – 567.

Hicks, R. E. Pressure drop in packed beds of spheres. **Ind. Eng. Chem. Fundamen.** 9 (1970), 500-502.

Ho, M.T.; Allinson, G.W.; Wiley, D.E. Reducing the cost of CO₂ capture from flue gases using pressure swing adsorption. **Ind. Eng. Chem. Res.** 47 (2008), 4883–4890.

Iwasaki, H.; Takahashi, M. Viscosity of carbon dioxide and ethane. **The Journal of Chemical Physics**. 74 (1981).

Jakobsen, H. A.; Håvard, L.; Handeland, V. A numerical study of interaction between viscous flow, transport and kinetics in fixed bed reactors. **Computers and Chemical Engineering**. 26 (2002), 333-357.

Jiang, M.; Eic, M. Miachon, S.; Dalmon, J. Kocirik, M. Diffusion of n-butane, isobutane and ethane in MFI-zeolite membrane investigated by gas permeation and ZLC measurements. **Separation and Purification Technology**. 25 (2001), 287-295.

Kestin, J.; Leidenfrost, W. An absolute determination of the viscosity of eleven gases over a range of pressures. **Physica**. 25 (1959), 1033 – 1062.

Kidnay, A. J.; Parrish, R. P. **Fundamentals of natural gas processing**. Boca Raton: CRC Press, 418 p., 2006.

Kikkinides, E. S.; Yang, R. T. Effects of bed pressure drop on isothermal and adiabatic adsorber dynamics. **Chemical Engineering Science**. 48 (1992), 1545-1555.

Krooss, B.M.; Van Bergen, F; Gensterblum, Y; Siemons, N; Pagnier, H.J.M.; David, P. High-pressure methane and carbon dioxide adsorption on dry and moisture-equilibrated Pennsylvanian coals. **International Journal of Coal Geology**. 51 (2002), 69-92.

Lee, A. L.; Gonzales, M. H.; Aime, J. M. Eakin, B. E. The viscosity of natural gases. **Journal of Petroleum Technology**. 18 (1966) 997-1000.

Ling, K. **Gas viscosity at high pressure and high temperature**; D.Sc. Thesis (in English), Texas A&M University, University of Texas, Texas, 2010.

Luberti, M.; Kim, Y.; Lee, C.; Ferrari, M. Ahn, H. New Momentum and Energy Balance Equations considering Kinetic energy effect for mathematical modelling of a fixed Bed Adsorption Column. **Adsorption**. 21 (2015), 353-363.

Macdonald, I. F.; El-Sayed, M. S.; Mow, K.; Dullien, A. F. Flow through porous media – the Ergun Equation Revisited. **Ind. Eng. Chem Fundam**. 18 (1979), 199-208.

Marzouk, S. A. M.; Al-Marzouki, M. H.; Teramoto, M.; Abdullatif, N. Simultaneous removal of CO₂ and H₂S from pressurized CO₂-H₂S-CH₄ gas mixture using hollow fiber membrane contactors. **Separation and Purification Technology**. 86 (2012), 88-97.

McCabe, W. L.; Smith, J. C.; Harriot, P.; **Unit Operations of Chemical Engineering**. 4ª Edição, McGraw-Hill Book Company, 1985.

Mehta, D.; Hawley, M. C. Wall effect in packed columns. **Industrial and Engineering Chemistry Design and Development**. 8 (1969), 280 – 282.

Meisen, A.; Shuai, X. Research and development in CO₂ capture. **Energy Convers**. 38 (2007), 37-42.

Melo, C. **Remoção de cor de efluente de tinturaria em leito poroso**; D.Ms. Tese (em português), Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, 2007.

Mohamadinejad, H.; Knox, J.C.; Smith, J.E. Experimental and numerical investigation of two-dimensional CO₂ adsorption/desorption in packed sorption beds under non-ideal flows. **Sep. Sci. Technol**. 38 (2003), 3875–3904.

Mollerup, J. Measurement of the volumetric properties of methane and ethene at 310 K at pressures to 70 MPa and of propene from 270 to 345 K at pressures to 3 MPa by the Burnett method. **J. Chem. Thermodyn.** 17 (1985), 489 – 499.

Montillet, A.; Akkari, E.; Comiti, J. About correlating equation for predicting pressure drops through packed beds of spheres in a large range of Reynolds numbers. **Chemical Engineering and Processing**. 46 (2007), 329 – 333.

Morelus, O. A coherent representation of pressure drop in fixed beds and of bed expansion for particulate fluidized beds. **Chemical Engineering Science**. 35 (1980), 1331-1340.

Morelus, O.; Schweinzer, J. Resistance os particle beds at Reynolds number up to $Re \sim 10^4$. **Chemical Engineering Science**. 44 (1989), 1071-1079.

Mureddu, M.; Ferino, I.; Rombi, E.; Cutrufello, M. G.; Deiana, P.; Ardu, A.; Musinu, A.; Piccaluga, G.; Cannas, C. ZnO/SBA-15 composites for mid-temperature removal of H₂S: Synthesis, performance and regeneration studies. **Fuel**. 102 (2012), 691-700.

Nemec, D.; Levec, J. Flow through packed bed reactors: single-phase flow. **Chemical Engineering Science**. 60 (2005), 6947-6957.

Ozahi, E.; Gundogdu, M. Y.; Çarpinlioglu, E. M. A modification on Ergun's correlations for use in cylindrical packed beds with non-spherical particles. **Advanced Powder Technology**. 19 (2008), 369-381.

Peng, D.; Robinson, D. B. A new two-constant equation of state. **Ind. Eng. Chem. Fundam**. 15 (1976), 59 – 64.

Poling, B. E.; Prausnitz, J. M.; O'Connell, J. P. **The properties of gases and liquids**. McGRAW-HILL, New York, 2000.

Quiñones-Cisneros, S. E.; Schmidt, K. A. G.; Giri, B. R.; Blais, P.; Marriot, R. A. Reference correlation for the viscosity surface of Hydrogen Sulfide. **J. Chem. Eng. Data**. 57 (2012), 3014-3018.

Radosz, M.; Hu, X.; Krutkramelis, K.; Shen, Y. Flue-gascarbon capture on carbonaceous sorbents: toward a low-cost multifunctional carbon filter for “Green” energy producers. **Ind. Eng. Chem. Res**. 47 (2008), 3783–3794.

Rao, V. R.; Farooq, S. Experimental study of a pulsed-pressure-swing-adsorption process with very small 5A zeolite particles for Oxygen enrichment. **Ind. Eng. Chem. Res**. 53 (2014), 13157-13170.

Reamer, H. H.; Sage, B. H.; Lacey, W. N. Volumetric behavior of hydrogen sulfide. **Ind. Eng. Chem**. 42 (1950), 140 – 143.

Ribeiro, A. M.; Neto, P.; Pinho, C. Mean porosity and pressure drop measurements in packed beds of monosized spheres: side wall effects. **I. RE.CH.E**. 2 (2010), 40-46.

Rose, R. E.; Risk, A. M. A. Further researches in fluid flow through beds of granular material. **Proc. Inst. Mech. Eng**. 160 (1949), 493-503.

Rufford, T. E.; Smart, S.; Watson, G. C. Y.; Graham, B. F.; Boxall, J.; Costa, J.C.D.; May, E.F. The removal of CO₂ and N₂ from natural gas: A review of conventional and emerging process Technologies. **Journal of Petroleum Science and Engineering**. 95 (2012), 123-154.

Ruthven, D. M.; **Principles of adsorption and adsorption processes**. John Wiley & Sons, Inc., Canada, 1984.

Sandler, S. I. **Chemical, Biochemical, and Engineering Thermodynamics**. New York: Wiley, 2006.

Sereno, C.; Rodrigues, A. Can steady-state momentum equations be used in modelling pressurization of adsorption beds? **Gas Separation e Purification**. 7 (1993), 167 – 174.

Shafeeyan M. S.; Daud, W. M. A. W.; Shamiri, A. A review of mathematical modeling of fixed-bed columns for carbon dioxide adsorption. **Chemical Engineering Research and Design**. 92 (2014), 961-988.

Shen, C.; Grande, C.A.; Li, P.; Yu, J.; Rodrigues, A.E. Adsorption equilibria and kinetics of CO₂ and N₂ on activated carbon beds. **Chem. Eng. J.** 160 (2010), 398–407.

Siapoosh, M. Mathematical Modeling of Single and Multi-Component. Adsorption Fixed Beds to Rigorously Predict the Mass Transfer Zone and Breakthrough curves. **Iranian Journal of Chemistry & Chemical Engineering**. 28 (2009), 25- 44.

Span, R.; Lemmon, E. W.; Jacobsen, R. T.; Wagner, W.; Yokozeki, A. A reference equation of state for the thermodynamic properties of Nitrogen for Temperatures from 63.151 to 1000K and pressures to 2200 MPa. **J. Phys. Chem. Ref. Data**. 29 (2000), 1361 – 1433.

Stewart, R. B.; Jacobsen, R. T. Thermodynamic properties of Oxygen fro the tripe point to 300 K with pressures to 80 MPa. **J. Phys. Chem. Ref. Data**. 20 (1991), 917 - 1021.

Sug Lee, J.; Ogawa, K. Pressure drop through packed bed. **Journal of Chemical Engineering of Japan**. 27 (1994), 691-693.

Tallmadge, J. A. Packed bed pressure drop-Na extension to higher Reynolds Number. **AIChE J.** 16 (1970), 1092-1093.

Tood, R. S.; Webley, P. A. Pressure drop in a packed bed under nonadsorbing and adsorbing conditions. **Ind. Eng. Chem. Res.** 44 (2005), 7234-7241.

Wentz Jr, C. A.; Thodos, G. Pressure drops in the flow of gases through packed and distended beds of spherical particles. **AIChE J.** 9 (1963), 81-84.

Xiao, Y.; Wang, S.; Wu, D.; Yuan, Q. Experimental and simulation study of hydrogen sulfide adsorption on impregnated activated carbon under anaerobic conditions. **Journal of Hazardous Materials.** 153 (2008), 1193-1200.

Yang, Wen-Ching. **Handbook of fluidization and fluid-particle systems.** New York: Marcel Dekker Inc., 2003.

Yang, Z. H.; Lin, Y. S. High-temperature oxygen sorption in a fixed bed packed with perovskite-type ceramic sorbents. **Ind. Chem. Res.** 42 (2003), 4376 – 4381.

Yu, K. W. Q.; Zuo, Q. Q. Z.; Wu, T. Evaluation of Cu-based oxygen carrier for chemical looping air separation in a fixed-bed reactor. **Chemical Engineering Journal.** 287 (2016), 292-301.

ANEXOS

A estimativa da densidade para o metano, dióxido de carbono, sulfeto de hidrogênio, nitrogênio, oxigênio e para uma mistura de metano com CO₂ e misturas entre oxigênio e nitrogênio, conforme as condições experimentais relatadas na tabela 4, são demonstradas abaixo nas tabelas 14 a 19.

Tabela 14. Dados experimentais de densidade de Mollerup (1985) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 310 K e pressões diversas para o metano.

CH₄ T = 310 K		
P (bar)	ρ (kg/m³)	ρ Peng-Robinson (kg/m³)
1	0,6233144	0,623
2	1,2483932	1,249
5	3,134216	3,142
10	6,316552	6,345
25	16,15228	16,311
50	33,45944	34,065
75	51,87336	53,046

Tabela 15. Dados experimentais de densidade de Gokmenoglu *et al.* (1996) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 313,15 K e pressões diversas para o dióxido de carbono.

CO₂ T = 313.15 K		
P (bar)	ρ (kg/m³)	ρ Peng-Robinson (kg/m³)
10	17,90	17,75
20	37,10	37,49
30	58,70	59,74
40	83,50	85,35

50	112,70	115,68
60	148,80	153,22

Tabela 16. Dados experimentais de densidade de Span *et al.* (1996) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 295 K e pressões diversas para o nitrogênio.

N₂ T = 295 K		
P (bar)	ρ (kg/m³)	ρ Peng-Robinson (kg/m³)
1	1,142695	1,142459
2	2,285893	2,28547
5	5,718235	5,717636
10	11,44782	11,44735
20	22,93163	22,93464
30	34,44388	34,44528
40	45,94058	45,96159
50	57,43167	57,47229
60	68,88915	68,95779

Tabela 17. Dados experimentais de densidade de Stewart *et al.* (1991) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 295 K e pressões diversas para o oxigênio.

O₂ T = 295 K		
P (bar)	ρ (kg/m³)	ρ Peng-Robinson (kg/m³)
1	1,305551	1,146773
2	2,612702	2,302783
5	6,545035	5,826938
10	13,13327	11,89164
20	26,43581	24,76345
30	39,8993	38,65569

40	53,51479	53,55882
50	67,26788	69,4004
60	81,14896	86,01234

Tabela 18. Dados experimentais de densidade de Gururaja *et al.* (1967) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 298 K e pressão de 1 bar para uma mistura composta de oxigênio e nitrogênio.

O₂ + N₂ T=298 K, P=1 bar				
x O₂	x N₂	M (kg/mol)	ρ (kg/m³)	ρ Peng- Robinson (kg/m³)
0,13	0,87	28,53947	1,17	1,152495
0,26	0,74	29,03366	1,14	1,172522
0,41	0,59	29,64741	1,17	1,198185
0,51	0,49	30,04595	1,18	1,214719
0,66	0,34	30,64376	1,2	1,23962
0,76	0,24	31,0423	1,22	1,256282

Tabela 19. Dados experimentais de densidade de Esper *et al.* (1989) e estimados pelos modelos de Peng-Robinson na temperatura de 300 K e pressões diversas para uma mistura composta de metano e dióxido de carbono.

CO₂(47,6%) + CH₄ T=300 K		
	ρ (kg/m³)	ρ Peng- Robinson (kg/m³)
1,2021	P (bar)	1,42
1,8854	76,00	2,23
2,9541	119,44	3,51
4,6202	187,70	5,51
7,2072	294,97	8,66
11,1935	463,56	13,61

17,2698	728,50	21,39
26,3692	1144,80	33,61
39,6524	1799,10	52,81
58,2928	2827,20	83,00

A estimativa da viscosidade para o metano, dióxido de carbono, sulfeto de hidrogênio, nitrogênio, oxigênio e para uma mistura representativa do gás natural e misturas entre oxigênio e nitrogênio, conforme as condições experimentais relatadas na Tabela , são demonstradas abaixo nas tabelas 20 a 31. São demonstrados também os desvios relativos em cada ponto que a viscosidade foi estimada.

Tabela 20. Dados experimentais de viscosidade de Ever *et al.*(2002) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 293,15 K e pressões diversas para o metano.

CH ₄ 293,15 K					
P (bar)	η (μ P) Evers <i>et al.</i>	η (μ P) Lucas	η (μ P) Chung	$\delta\eta$ Lucas	$\delta\eta$ Chung
1,51	109,79	108,9	116,8	0,8%	6,4%
1,63	109,77	108,9	116,8	0,8%	6,4%
42,19	118,07	116,8	118,9	1,1%	0,7%
79,12	129,66	129,4	127,2	0,2%	1,9%
112,98	144,28	144,4	140,2	0,1%	2,8%
113,1	144,42	144,5	140,3	0,0%	2,9%
147,02	162,93	162,1	157,7	0,5%	3,2%
183,51	185,35	182,9	179,7	1,3%	3,0%
226,76	212,11	208,8	208,5	1,6%	1,7%
281,08	243,04	241,6	247,1	0,6%	1,7%
282,46	243,82	242,41	248,15	0,6%	1,8%

Tabela 21 - Dados experimentais de viscosidade de Ever *et al.*(2002) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 373,15 K e pressões diversas para o metano.

CH ₄ 373,15 K					
P (bar)	η (μ P) Evers <i>et al.</i>	η (μ P) Lucas	η (μ P) Chung	$\delta\eta$ Lucas	$\delta\eta$ Chung
1,89	134,79	133,2	142,7	1,1%	5,9%
1,95	134,82	133,2	142,7	1,2%	5,9%
55,97	143,46	141,0	144,3	1,7%	0,6%
109,85	155,31	153,6	151,6	1,1%	2,4%
164,40	170,03	169,3	163,4	0,4%	3,9%
164,79	170,47	169,4	163,5	0,6%	4,1%
222,29	188,54	188,0	179,2	0,3%	5,0%
288,50	210,67	210,9	200,0	0,1%	5,1%
288,81	210,79	211,0	200,1	0,1%	5,1%

Tabela 22 - Dados experimentais de viscosidade de Iwasaki e Takahashi (1981) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 298,15 K e pressões diversas para o dióxido de carbono.

CO ₂ T= 298,15 K					
P(bar)	η (μ P) Iwasaki e Takahashi	η (μ P) Lucas	η (μ P) Chung	$\delta\eta$ Lucas	$\delta\eta$ Chung
1,013	148,93	150,5	158,2035	1,1%	6,2%
2,100	149,14	150,6	158,334	1,0%	6,2%
3,500	149,06	150,7	158,5253	1,1%	6,3%
5,310	149,35	150,8	158,8122	1,0%	6,3%
6,850	149,45	150,9	159,0928	1,0%	6,5%
9,297	149,89	151,1	159,6105	0,8%	6,5%
11,024	149,76	151,3	160,0311	1,0%	6,9%
12,857	150,29	151,6	160,5301	0,9%	6,8%

15,679	150,36	152,3	161,4093	1,3%	7,3%
16,951	150,74	152,7	161,8519	1,3%	7,4%
20,944	151,51	154,4	163,4422	1,9%	7,9%
24,781	152,3	156,7	165,2837	2,9%	8,5%
28,849	153,46	159,97	167,6159	4,2%	9,2%
32,713	155,25	163,78	170,2464	5,5%	9,7%
36,695	156,86	168,16	173,6904	7,2%	10,7%
40,963	158,99	172,99	177,56	8,8%	11,7%
44,171	161,37	176,49	181,2059	9,4%	12,3%
47,531	163,86	179,97	185,6666	9,8%	13,3%
50,263	166,45	182,75	189,9008	9,8%	14,1%
51,39	167,81	183,93	191,8413	9,6%	14,3%
51,835	168,08	184,41	192,6432	9,7%	14,6%
52,296	168,02	184,92	193,4967	10,1%	15,2%
53,974	171,01	187,87	196,8192	9,9%	15,1%
54,363	171,24	187,35	197,6427	9,4%	15,4%

Tabela 232 - Dados experimentais de viscosidade de Iwasaki e Takahashi (1981) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 323,15 K e pressões diversas para o dióxido de carbono.

CO ₂ T= 323,15 K					
P(bar)	η (μ P) Iwasaki e Takahashi	η (μ P) Lucas	η (μ P) Chung	$\delta\eta$ Lucas	$\delta\eta$ Chung
1,013	161,08	163,5	170,9641	1,5%	6,1%
2,070	161,24	163,7	171,0871	1,5%	6,1%
3,470	161,48	163,9	171,2691	1,5%	6,1%
5,470	161,33	164,4	171,5674	1,9%	6,3%
7,920	161,63	165,0	171,996	2,1%	6,4%

10,423	162,02	165,7	172,5078	2,3%	6,5%
13,474	162,27	166,6	173,2367	2,7%	6,8%
16,900	162,81	167,7	174,199	3,0%	7,0%
21,826	163,71	169,4	175,8651	3,5%	7,4%
25,621	164,86	170,7	177,3913	3,6%	7,6%
30,453	166,28	172,6	179,665	3,8%	8,0%
35,947	168,21	174,8	182,7408	3,9%	8,6%
40,759	169,89	176,8	185,9094	4,1%	9,4%
43,084	170,86	177,8	187,6141	4,1%	9,8%
46,230	172,44	179,3	190,1158	4,0%	10,3%
51,298	175,38	182,0	194,6604	3,8%	11,0%
55,650	178,11	185,3	199,1296	4,0%	11,8%
58,071	180,46	186,3	201,8693	3,3%	11,9%
58,237	181,58	186,5	202,0643	2,7%	11,3%
65,829	186,82	193,5	212,0734	3,6%	13,5%
70,288	191,95	199,4	219,1048	3,9%	14,1%
75,719	199,34	209,3	229,1109	5,0%	14,9%
76,514	199,35	211,0	230,7298	5,9%	15,7%
81,298	208,91	223,5	241,4504	7,0%	15,6%

Tabela 24 - Dados experimentais de viscosidade de Giri *et al.* (2011 apud Quiñones-Cisneros *et al.*, 2012) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 373,15 K e pressões diversas para o sulfeto de hidrogênio.

H₂S T = 373,15 K					
P(bar)	η (μP) (Giri et al)	η (μP) Lucas	η (μP) Chung	δη Lucas	δη Chung
10,0	159	152	160	4,4%	0,5%
20,0	145	155	161	6,7%	10,9%
50,0	159	165	170	3,6%	6,8%

50,0	162	165	170	1,7%	4,9%
100,0	483	503	460	4,1%	4,7%
102,9	537	531	478	1,1%	11,0%
199,9	722	749	779	3,8%	7,8%
500,0	970	1120	1318	15,4%	35,9%
996,1	1369	1543	2015	12,7%	47,2%
1002,5	1390	1548	2024	11,4%	45,6%
1004,4	1380	1549	2026	12,2%	46,8%

Tabela 25 - Dados experimentais de viscosidade de Giri *et al.* (2011 apud Quiñones-Cisneros *et al.*, 2012) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 423,15 K e pressões diversas para o sulfeto de hidrogênio.

H₂S T = 423,15 K					
P(bar)	η (μP) (Giri et al)	η (μP) Lucas	η (μP) Chung	δη Lucas	δη Chung
10,0	165	171	180	3,4%	9,0%
20,0	179	173	181	3,5%	1,0%
50,0	181	181	187	0,2%	3,1%
50,1	188	181	187	3,5%	0,7%
100,0	212	212	215	0,2%	1,2%
199,9	435	426	406	2,1%	6,7%
200,0	439	426	406	2,9%	7,4%
500,0	849	861	891	1,4%	4,9%
500,1	858	861	891	0,3%	3,8%

Tabela 26 - Dados experimentais de viscosidade de Kestin e Leidenfrost. (1959) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 298,15 K e pressões diversas para nitrogênio.

N₂ T= 298,15 K					
P(bar)	η (μP) Kestin e Leidenfrost (1959)(μP)	η (μP) Lucas	η (μP) Chung	δη Lucas	δη Chung
1,0041	177,96	178,23	176,58	0,2%	0,8%
7,9034	178,83	178,27	188,59	0,3%	5,5%
14,7935	179,89	178,31	188,63	0,9%	4,9%
28,5838	182,16	178,42	189,15	2,1%	3,8%
42,4146	184,79	178,55	190,19	3,4%	2,9%
56,2354	188,01	178,69	191,72	5,0%	2,0%
69,9545	191,64	178,84	193,65	6,7%	1,0%

Tabela 273 - Dados experimentais de viscosidade de Kestin e Leidenfrost. (1959) e estimados pelos modelos de Lucas e Chung na temperatura de 298,15 K e pressões diversas para oxigênio.

O₂ T= 298,15 K					
P(bar)	Kestin e Leidenfrost (1959)(μP)	η (μP) Lucas	η (μP) Chung	δη Lucas	δη Chung
1,0112	206,39	204,29	204,57	1,0%	0,9%
7,9034	207,2	205,01	218,37	1,1%	5,4%
14,8036	208,39	206,02	218,34	1,1%	4,8%
28,5939	210,97	208,60	218,69	1,1%	3,7%
42,3842	214,02	211,75	219,61	1,1%	2,6%
52,6485	216,64	214,40	220,65	1,0%	1,9%

Tabela 284 - Dados experimentais de viscosidade de Assael *et al.* (2001) e estimados pelos modelos de Lucas, Chung e Lee na temperatura de 294,0 K e pressões diversas para a mistura representante do gás natural.

Mistura (Gás Natural) T=294,0 K							
P (Bar)	η (μ P) Assael et al	η (μ P) Lucas	η (μ P) Chung	η (μ P) Lee	$\delta\eta$ Lucas	$\delta\eta$ Chung	$\delta\eta$ Lee
3,10	114,4	86,2	110,0	13,9	24,7%	3,8%	87,9%
20,60	115,8	88,6	114,5	47,9	23,5%	1,1%	58,6%
40,30	120,5	92,5	116,9	94,4	23,2%	3,0%	21,7%
60,20	126,5	97,8	121,4	156,1	22,7%	4,0%	23,4%
80,40	134,7	104,5	128,4	236,7	22,4%	4,7%	75,7%
100,80	144,7	112,3	137,9	338,7	22,4%	4,7%	134,1%
121,90	157,7	121,5	149,8	464,8	23,0%	5,0%	194,7%
140,40	170,2	130,2	161,8	589,3	23,5%	4,9%	246,2%

Tabela 29 - Dados experimentais de viscosidade de Assael *et al.* (2001) e estimados pelos modelos de Lucas, Chung e Lee na temperatura de 322,9 K e pressões diversas para a mistura representante do gás natural.

Mistura (Gás Natural) T=322,9 K							
P (Bar)	η (μ P) Assael et al	η (μ P) Lucas	η (μ P) Chung	η (μ P) Lee	$\delta\eta$ Lucas	$\delta\eta$ Chung	$\delta\eta$ Lee
3,00	122,1	88,2	119,2	6,3	27,8%	2,4%	94,8%
20,40	124,5	90,2	129,8	14,9	27,6%	4,3%	88,0%
40,40	128,2	93,4	131,6	25,7	27,1%	2,7%	80,0%
60,60	133,4	97,5	135,1	39,0	26,9%	1,3%	70,8%
80,50	139,3	102,5	140,1	55,3	26,4%	0,6%	60,3%
100,70	146,1	108,2	146,8	75,3	25,9%	0,5%	48,5%
120,80	154,8	114,4	154,8	98,9	26,1%	0,0%	36,1%
140,10	163,6	120,8	163,5	124,7	26,2%	0,1%	23,8%

Tabela 30 - Dados experimentais de viscosidade de Assael *et al.* (2001) e estimados pelos modelos de Lucas, Chung e Lee na temperatura de 353,4 K e pressões diversas para a mistura representante do gás natural.

Mistura (Gás Natural) T=353,4 K							
P (Bar)	η (μP) Assael et al	η (μP) Lucas	η (μP) Chung	η (μP) Lee	$\delta\eta$ Lucas	$\delta\eta$ Chung	$\delta\eta$ Lee
3,10	130,9	90,3	128,5	5,0	31,0%	1,8%	96,2%
20,40	132,5	91,9	146,2	8,7	30,6%	10,4%	93,5%
40,40	136,6	94,5	147,6	12,9	30,8%	8,1%	90,6%
60,50	140,6	97,8	150,2	17,8	30,4%	6,8%	87,3%
80,60	145,4	101,6	154,1	23,4	30,1%	6,0%	83,9%
100,70	151,1	105,9	159,1	30,1	29,9%	5,3%	80,1%
121,20	157,7	110,8	165,3	37,7	29,7%	4,8%	76,1%
139,60	163,7	115,4	171,6	45,5	29,5%	4,8%	72,2%

Tabela 31 - Dados experimentais de viscosidade de Gururaja *et al.* (1967) e estimados pelos modelos de Lucas, Chung e Lee na temperatura de 298 K e pressão de 1 bar para a mistura constituída de nitrogênio e oxigênio.

N ₂ + O ₂ , T= 298 K e 1 bar									
X (O ₂)	X (N ₂)	P (bar)	Gururaja et al. (1967) (μP)	η (μP) Lucas	η (μP) Chung	η (μP) Lee	$\delta\eta$ Lucas	$\delta\eta$ Chung	$\delta\eta$ Lee
0,000	1,000	1	177,96	178,16	176,51	86,94	0,1%	0,8%	51,1%
0,132	0,868	1	178,50	108,28	179,98	87,70	39,3%	0,8%	50,9%
0,256	0,744	1	184,50	111,62	183,36	88,44	39,5%	0,6%	52,1%
0,410	0,590	1	188,55	115,91	187,61	89,37	38,5%	0,5%	52,6%
0,510	0,490	1	191,00	118,80	190,39	90,00	37,8%	0,3%	52,9%
0,660	0,340	1	196,50	123,27	194,61	90,97	37,3%	1,0%	53,7%
0,760	0,240	1	197,50	126,36	197,45	91,63	32,1%	0,7%	53,6%
1,000	0,000	1	208,00	204,21	218,48	93,28	37,4%	0,7%	55,2%

A estimativa da queda de pressão bem como os dados experimentais de Tood e Webley (2005), conforme as condições dispostas no item 3.3 e 3.4 são demonstradas abaixo nas tabelas 32 a 36.

Tabela 325 - Dados experimentais de queda de pressão de Tood e Webley (2005) e estimados pelos modelos dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento de oxigênio puro no leito poroso.

Velocidade (m/s)	0,292	0,374	0,450	0,528	0,640
Re	46,85	60,02	72,25	84,73	102,79
Re_p	72,08	92,33	111,15	130,36	158,14
ΔP (exp) (Pa)	12934,22	18193,46	23775,18	30088,19	40372,13
Rose e Risk	12326,49	17657	23263	29618	39909
Ergun	13355,27	19302	25692	33073	45280
Sug, Lee, Ogawa	14658,1	20150	25711	31824	41406
Mac Donald aspera	14981	21447	28344	36267	49302
Mac Donald lisa	22650	30031	46579	61352	86217
Mac Donald aspera <Re	14069	20279	26938	34619	47302
Mac Donald aspera >Re	21738	32863	45173	59703	84217
Foscolo Transição	16268	23628	31564	40756	55995
Foscolo Laminar	8518	10911	13134	15404	18687
Foscolo Turbulento	7751	12718	18430	25351	37308
Gibilaro	16269	23628	31564	40756	55995
Talmadge	14431	20593	27063	34387	46221
Çarpinlioglu	1752	2556	3393	4328	5813
Hicks	10076	15734	21970	29273	41446
Barnea e Medinick	10131	13986	17885	22163	28850
Morelus	13817	19625	25772	32793	44275
Morelus et al.	14522	20652	27085	34366	46142

Wentz e Thodos	871,47	1183	1515	1894	2506
Mehta	14083	20311	26992	34700	47434
Foumeny	14738	21919	29788	39010	54470
Esfield	13245	18842	24782	31580	42720
Montillet	17610	24981	32714	41471	55648
Freund	12612	17699	23034	29085	38913
Di Felice	3035	4124	5229	6449	8378
Nemec Polilobe	13355	19302	25692	33073	45280
Nemec Cilindro	13355	19302	25692	33073	45280
Ozahi	13351	19121	25277	32352	43992

*Estimativas dos modelos em Pascal.

Tabela 33 - Dados experimentais de queda de pressão de Tood e Webley (2005) e estimados pelos modelos dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento de oxigênio (90%) e nitrogênio em um leito poroso.

Velocidade (m/s)	0,214	0,337	0,467	0,582	0,645
Re	33,69	52,96	73,46	91,53	101,44
Re_p	51,84	81,47	113,02	140,81	156,07
ΔP (exp) (Pa)	8120,124	14702,21	23355,04	32238,16	37994,79
Rose e Risk	7966	15106	24503	34247	40160
Ergun	8590	16428	27090	38473	45512
Sug, Lee, Ogawa	9972	17607	27003	36289	41768
Mac Donald aspera	9764	18342	29867	42068	49579
Mac Donald lisa	13838	28406	49235	72133	86510
Mac Donald aspera <Re	9091	17283	28398	40239	47551
Mac Donald aspera >Re	13165	27348	47767	70304	84483
Foscolo Transição	10410	20060	33293	47478	56269

Foscolo Laminar	6292	9889	13719	17092	18944
Foscolo Turbulento	4118	10172	19574	30385	37325
Gibilaro	10410	20061	33293	47478	56269
Talmadge	9387	17651	28500	39722	46521
Çarpinlioglu	1088	2169	3575	5001	5852
Hicks	5718	12903	23256	34548	41574
Barnea e Medinick	6840	12197	18787	25280	29102
Morelus	9093	16853	27142	37935	44544
Morelus et al.	9494	17731	28518	39678	46443
Wentz e Thodos	637	1037	1592	2173	2525
Mehta	9093	17305	28457	40341	47682
Foumeny	9134	18390	31467	45745	54678
Esfield	8701	16166	26103	36559	42974
Montillet	11556	21473	34441	47865	56013
Freund	8426	15292	24239	33522	39173
Di Felice	2106	3623	5489	7347	8451
Nemec Polilobe	8600	16429	27090	38473	45512
Nemec Cilindro	8600	16429	27090	38473	45512
Ozahi	8698	16350	26637	37531	44238

*Estimativas dos modelos em Pascal.

Tabela 346 - Dados experimentais de queda de pressão de Tood e Webley (2005) e estimados pelos modelos dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento de oxigênio (22%) e nitrogênio em um leito poroso.

Velocidade (m/s)	0,235	0,258	0,406	0,347	0,465	0,501	0,572	0,603	0,661	0,676
Re	36,13	39,65	62,46	53,37	71,44	76,99	87,99	92,74	101,58	103,89
Re_p	55,58	60,99	96,09	82,11	109,9	118,44	135,37	142,68	156,28	159,83
ΔP (exp) (Pa)	10410,15	11828,68	21829,78	16819,99	24159,52	29936,54	33275,5	39295,53	45147,31	44128,93
Rose e Risk	9055	10312	19853	15769	24248	27140	33267	36069	41536	43015
Ergun	9775	11139	21746	17154	26761	30099	37256	40565	47076	48851
Sug, Lee, Ogawa	11216	12592	22504	18355	26854	29663	35502	38130	43188	44543
Mac Donald aspera	11071	12573	24125	19145	29536	33125	40796	44333	51280	53170
Mac Donald lisa	15905	18394	38574	29698	48437	55077	69473	76191	89499	93144
Mac Donald aspera <Re	10326	11755	22837	18045	28062	31537	38981	42420	49184	51027
Mac Donald aspera >Re	15159	17576	37285	28596	46963	53489	67659	74278	87404	91001
Foscolo Transição	11848	13525	26641	20950	32870	37023	45942	50070	58204	60422
Foscolo Laminar	6963	7641	12038	10287	13768	14838	16959	17875	19578	20022
Foscolo Turbulento	4885	5884	14603	10664	19102	22185	28983	32196	38626	40399

Gibilaro	11848	13525	26641	20950	32870	37023	45942	50071	58204	60422
Talmadge	10654	12110	23141	18423	28213	31548	38605	41829	48113	49812
Çarpinlioglu	1249	1439	2880	2266	3536	3964	4861	5267	6052	6263
Hicks	6689	7908	17922	13505	22823	26113	33214	36511	43012	44786
Barnea e Medinick	7707	8672	15628	12716	18678	20646	24729	26564	30092	31036
Morelus	10290	11655	22046	17588	26867	30053	36839	39959	46071	47731
Morelus et al.	10763	12216	23197	18504	28239	31555	38571	41779	48032	49724
Wentz e Thodos	701	769	1321	1081	1582	1754	2119	2286	2611	2699
Mehta	10330	11762	22874	18069	28118	31605	39076	42529	49320	51170
Foumeny	10465	12055	24807	19219	30989	35140	44117	48297	56564	58826
Esfield	9850	11161	21173	16872	25832	28915	35489	38514	44447	46060
Montillet	13090	14841	28050	22408	34111	38097	46537	50398	57930	59968
Freund	9505	10721	19844	15952	24026	26778	32614	35288	40513	41929
Di Felice	2358	2632	4599	3776	5463	6023	7191	7718	8739	9013
Nemec Polilobe	9775	11139	21746	17154	26761	30099	37256	40565	47076	48850
Nemec Cilindro	9775	11139	21746	17154	26761	30099	37256	40565	47076	48850

Ozahi	9863	11202	21510	17067	26340	29544	36394	39552	45756	47444
--------------	------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

*Estimativas dos modelos em Pascal.

Tabela 35 - Dados experimentais de queda de pressão de Tood e Webley (2005) e estimados pelos modelos dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento de oxigênio (10%) e nitrogênio em um leito poroso.

Velocidade (m/s)	0,268	0,416	0,516
Re	36,25	56,22	69,66
Re_p	55,77	86,5	107,18
ΔP (exp) (Pa)	11714,01	20812,89	27777,94
Rose e Risk	10745	20087	27579
Ergun	11600	21896	30391
Sug, Lee, Ogawa	13303	23179	30677
Mac Donald aspera	13136	24390	33574
Mac Donald lisa	18884	38216	54803
Mac Donald aspera <Re	12253	23021	31877
Mac Donald aspera >Re	18001	36846	53106
Foscolo Transição	14060	26769	37311
Foscolo Laminar	8251	12796	15856
Foscolo Turbulento	5809	13973	21454
Gibilaro	14061	26769	37311
Talmadge	12642	23450	32100
Çarpinlioglu	1482	2897	4019
Hicks	7950	17514	25762
Barnea e Medinick	9142	16073	21331
Morelus	12208	22367	30567
Morelus et al.	12771	23537	32138
Wentz e Thodos	830	1362	1805
Mehta	12258	23053	31938
Foumeny	12424	24680	35095

Esfield	11686	21464	29383
Montillet	15531	28488	38827
Freund	11276	20236	27368
Di Felice	2797	4757	6245
Nemec Polilobe	11600	21896	30391
Nemec Cilindro	11600	21896	30391
Ozahi	11703	21743	29940

*Estimativas dos modelos em Pascal.

Tabela 36 - Dados experimentais de queda de pressão de Tood e Webley (2005) e estimados pelos modelos dispostos nas tabelas 1 e 2 para escoamento de hélio puro no leito poroso.

Velocidade (m/s)	6,317	8,133	11,134
Re	36,25	56,22	69,66
Re_p	16,71	21,52	29,46
ΔP (exp) (Pa)	1902291	2511277	3607762
Rose e Risk	1861970	2549359	3808288
Ergun	2102754	2834307	4167272
Sug, Lee, Ogawa	2684854	3578698	5151170
Mac Donald aspera	2464487	3303668	4818009
Mac Donald lisa	2895820	4018674	6157940
Mac Donald aspera <Re	2243334	3018933	4428223
Mac Donald aspera >Re	2674668	3733939	5768153
Foscolo Transição	2501989	3382680	4995673
Foscolo Laminar	2066069	2660070	3644149
Foscolo Turbulento	435920,3	722609,7	1354179
Gibilaro	2501990	3382680	4995672
Talmadge	2274636	3084021	4557024

Çarpinlioglu	196763,5	289399,1	467713,1
Hicks	759081	1196228	2105379
Barnea e Medinick	1775194	2387634	3474001
Morelus	2342626	3130843	4543465
Morelus et al.	2338605	3161155	4650479
Wentz e Thodos	285243,9	3457159	563075,5
Mehta	2238589	3014912	4424529
Foumeny	2000303	2751326	4164332
Esfield	2240691	2993489	4343537
Montillet	2875363	3203654	5694413
Freund	2259228	2998130	4303408
Di Felice	613999,4	804186,6	1131785
Nemec Polilobe	2102754	2834307	4167272
Nemec Cilindro	2102754	2834307	4167272
Ozahi	2192615	2939843	4288765

*Estimativas dos modelos em Pascal.