

ANÁLISE DO AQUECIMENTO DO PREENCHIMENTO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO DE LEITO FIXO EM SOFTWARE OPEN-SOURCE

Reinaldo Burcon Junior, Universidade Estadual de Maringá, E-mail: rburcon@gmail.com
Wagner André dos Santos Conceição, Universidade Estadual de Maringá, E-mail: wasconceicao@uem.br
Marcio Higa, Universidade Estadual de Maringá, E-mail: mhiga@uem.br
Júlio César Dainezi de Oliveira, Universidade Estadual de Maringá, E-mail: jcdoliveira@uem.br

Resumo: Este artigo apresenta o modelo matemático utilizado baseado no modelo de transferência de calor, discretizado pela metodologia dos elementos finitos e os resultados de uma simulação numérica do aquecimento de uma partícula do recheio de uma coluna utilizada na destilação de ácido clorídrico durante seu processo de recuperação, utilizando-se softwares livres para isto. Fica demonstrada a dificuldade de se atingir uma temperatura uniforme em todo o material do recheio e, portanto a dificuldade do aparelho atingir regime permanente de operação.

Palavras-chave: Destilação, leito fixo, transferência de calor, preenchimento, Open-source.

ANALYSIS OF HEATING OF THE FILLING OF DISTILLATION COLUMNS OF FIXED BED IN OPEN-SOURCE SOFTWARE

Abstract: This paper presents the mathematical model used in the model-based heat transfer discretized by finite element method and the results of a numerical simulation of a particle heating of the filling of a column used in the distillation of hydrochloric acid during the recovery process, using up for this free software. It demonstrates the difficulty of achieving a uniform temperature throughout the material of the filling and thus the difficulty of the unit achieve steady-state operation.

Keywords: Distillation, fixed bed, heat transfer, filling, Open-source.

1. INTRODUÇÃO

Colunas de leito fixo para o contato gás-liquido são extensamente usadas para absorção, separação e operações de destilação. Usualmente as colunas são preenchidas com partículas dispostas em uma orientação randômica, mas para um grande numero de aplicações, como por exemplo o desumidificador de óleo, o preenchimento é muito cuidadosamente posicionado na coluna. Ademais, a questão no projeto deste tipo de coluna é a seleção do material e geometria do preenchimento, assim o recheio provê o efeito de contato de fases sem uma excessiva queda de pressão. Muitos preenchimentos são comercialmente disponíveis e cada um possui uma vantagem específica com relação ao custo, a superfície avaliada, interface de regeneração, queda de pressão, peso e resistencia a corrosão. Desta maneira, acidos e muitos outros materiais corrosivos podem ser manuseados neste tipo de equipamento, pois o preencimento pode ser de cerâmica, carbono ou outro material resistente (MCCABE et al, 1991). Alguns tipos representativos de preenchimento são ilustrados por meio da Figura 1.

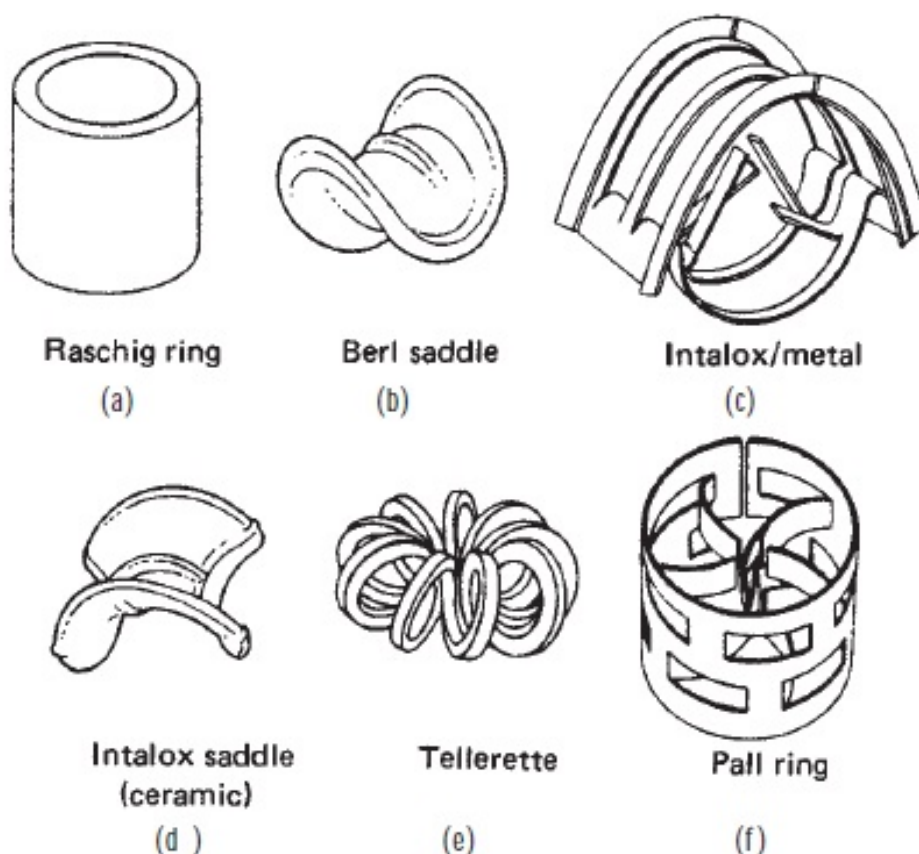


Figura 1. Tipos de preenchimento comuns em colunas de leito fixo (MCCABE et al, 1991).

O objetivo deste trabalho é estudar o aquecimento do preenchimento de uma coluna de leito fixo aplicada na regeneração de ácido clorídrico como parte de um equipamento e entender os motivos pelo qual o equipamento demora a entrar em regime permanente de operação, utilizando-se para isto softwares open-source para a resolução das equações diferenciais que governam este fenômeno através do método dos elementos finitos. Para tanto, tem-se o software ELMER, que é um pacote voltado à solução de equações diferenciais através do método dos elementos finitos permitindo a análise de sistemas multifísicos. Além do mais, este software permite a modificação dos solvers e procedimentos de resolução pelo usuário, tornando-se assim flexível a resolução de qualquer sistema de equações diferenciais (RÅBACK, 2013a).

2. MATERIAIS E MÉTODOS

A simulação é feita somente sobre uma única partícula do preenchimento, mantendo-se a pressão do meio constante e negligenciando-se as perdas de calor para o ambiente. Por motivo de simplificação do modelo, também foi omitida a transmissão de calor entre partículas. É ilustrada por meio da Figura 2 a geometria das partículas do preenchimento. O material utilizado para fabricar o recheio é o politetrafluoretileno (PTFE).

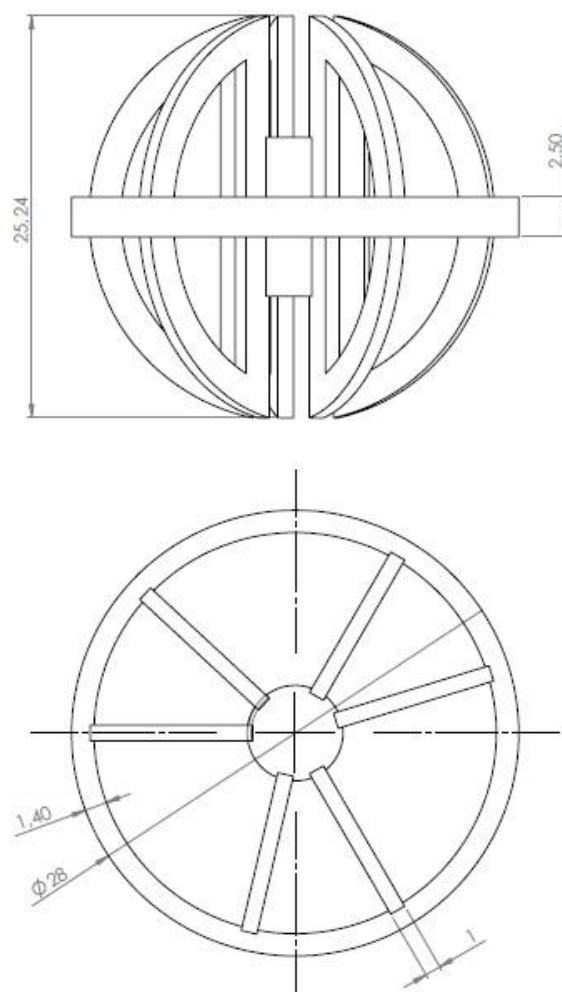


Figura 2. Geometria utilizada no preenchimento da coluna.

2.1 SUPOSIÇÕES DO MODELO

Para desenvolver-se um modelo consistente, as seguintes considerações são feitas:

- A transmissão de calor é considerada em regime transiente.
- As perdas para o ambiente são desconsideradas.
- O material do preenchimento é considerado isotrópico.
- A fonte de calor é considerada constante.
- O contato entre partículas é desconsiderado.
- As propriedades do meio são consideradas constantes.

2.2 EQUAÇÕES QUE REGEM O FENOMENO

Baseado nessas considerações, as seguintes equações governamentais podem ser definidas.

Equação da transferência de calor para meios incompressíveis:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) T \right) - \nabla \cdot (k \nabla T) = \tau : \varepsilon + \rho h \quad (1)$$

Onde ρ é a densidade, c_p é o calor específico a pressão constante, T é a temperatura, \vec{u} é a velocidade de convecção, k é a condutividade térmica, h é a fonte de calor e o termo $\tau : \varepsilon$ representa o aquecimento por fricção viscosa.

Para fluidos newtonianos o tensor torna-se:

$$\tau = 2\mu \varepsilon \quad (2)$$

2.3 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Para uma temperatura, pode ser aplicada a condição de contorno e ter ou temperatura ou fluxo de calor prescrito. A condição de contorno de Dirichlet (temperatura é prescrita) se apresenta como:

$$T = T_B \quad (3)$$

O valor T_B pode ser constante, função do tempo, posição ou outra variável.

Fluxo de calor dependente do coeficiente de transferência de calor α e da temperatura externa T_{ext} pode ser escrito como:

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} = \alpha (T - T_{ext}) \quad (4)$$

Ambas as variáveis α e T_{ext} podem ser constantes ou funções do tempo, posição ou outra variável. Se o coeficiente de transferência de calor α é igual à zero, o fluxo de calor pela fronteira é igual à zero. A condição de fronteira de Neumann pode ser usada em um eixo simétrico 2D ou problemas cilíndricos (RÅBACK, 2013b). Esta condição pode ser escrita como:

$$k \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad (5)$$

2.4 SOLUÇÃO NUMÉRICA

O modelo da partícula do preenchimento foi desenvolvido no software de pré-processamento SALOME (SALOME, 2012). Dispondo deste arquivo, utilizou-se o software GMSH (GMSH, 2012) para geração da malha, a qual foi criada utilizando se formato tetraédrico adaptativo, com tamanho máximo de malha de 4 mm e tamanho mínimo de 1 mm. Procurou-se manter o tamanho do elemento o menor possível sem que aumentasse em muito o tempo de processamento, garantindo-se assim uma boa convergência do sistema e a confiabilidade dos resultados. Ilustra-se por meio da Figura 3 a malha gerada. As propriedades físicas do material constituinte da esfera são listadas na Tabela 1.

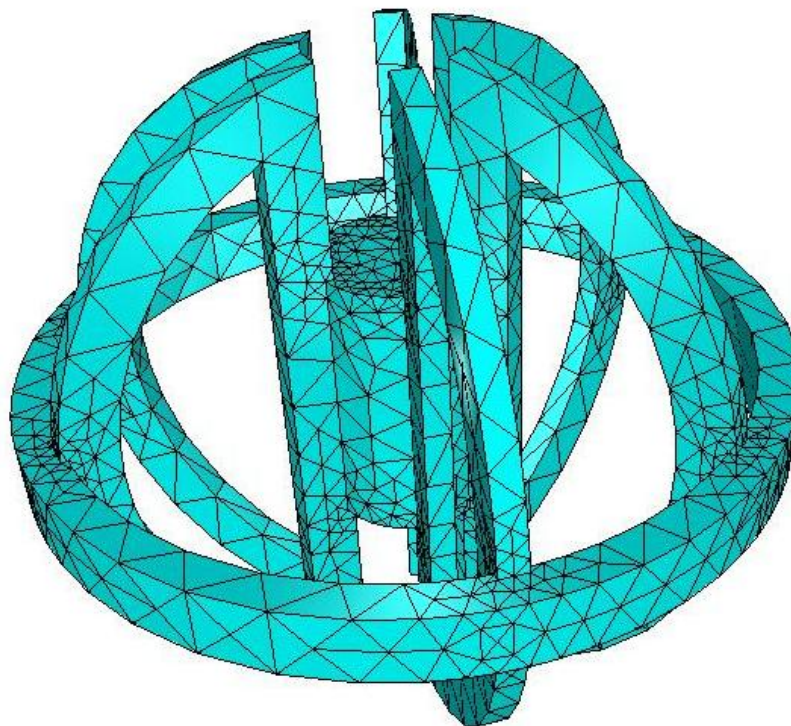


Figura 3. Malha tetraédrica gerada pelo software GMSH.

Tabela 1-Propriedades físicas do politetrafluoretilino (PTFE) (DUPONT, 2012).

ρ	c_p	K
2200	1000	0.25

Onde ρ é a densidade em $[\text{kg.m}^{-3}]$, c_p é o calor específico em $[\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}]$ e k é a condutividade térmica em $[\text{W.m}^{-2}.\text{k}^{-1}]$.

Esta simulação foi executada no software ELMER (ELMER, 2012), considerando-se o regime transiente no intervalo de tempo entre 0s até 10s, resolvendo-se a Equação 1 e desconsiderando o termo de aquecimento viscoso presente nesta. Utilizou-se a condição de contorno de Neumann, pois o recheio estará à temperatura ambiente no início da operação do equipamento e é estimado o fornecimento de calor ao meio onde se encontra a partícula, possibilitando-se assim uma aproximação da solução.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A simulação foi executada considerando-se uma única partícula, com o objetivo de entender o processo de aquecimento e o tempo para uma partícula atingir a temperatura de trabalho do equipamento de destilação. Desta maneira, pode-se entender o porquê da demora de mais de duas horas para o equipamento entrar em regime permanente de trabalho.

Foi considerado o tempo de aquecimento no intervalo de 0 a 10 segundos. A temperatura ideal de trabalho encontra-se aos 400 K. Ilustra-se por meio da Figura 4(a) o campo de temperaturas no início da simulação, considerando-se 5 segundos de simulação Figura 4(b) e ao final dos 10 s de simulação Figura 4(c).

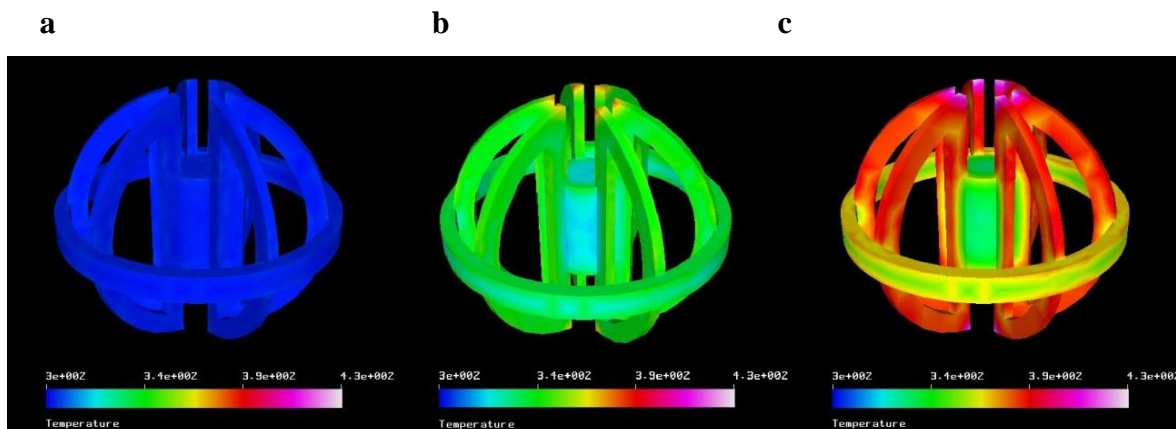


Figura 4. Faixa de temperaturas durante a simulação.

Como se pode observar a partícula não atingiu uma temperatura uniforme ao final do tempo de 10 segundos, o que ressalta a dificuldade prática do equipamento em entrar em regime permanente de trabalho. Ilustra-se na Figura 5 o gráfico onde é representada a faixa de temperatura máxima, mínima e média durante o processo.

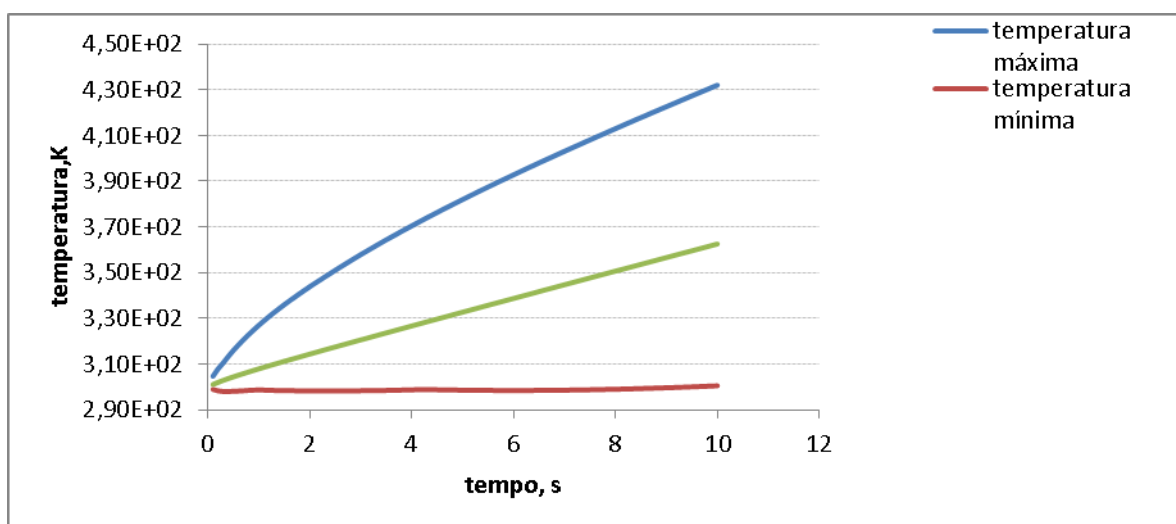


Figura 5. Faixa de temperaturas máximas, mínimas e médias durante a simulação

Pode-se observar que ao final da simulação, apesar das extremidades da partícula já ter atingido a temperatura ideal de trabalho do equipamento, o núcleo experimenta somente 2 K de aumento em sua temperatura.

4. CONCLUSÕES

Neste artigo foi demonstrado o uso de softwares livres na simulação de sistemas com aplicações práticas na indústria, desmistificando o uso somente acadêmico deste tipo de software. Foi demonstrado como se desenvolve o aquecimento de uma partícula que forma o conjunto do recheio de colunas de leito fixo utilizadas na destilação de ácido clorídrico, o que demonstrou a dificuldade deste equipamento em iniciar sua operação em regime permanente, pois ao mesmo tempo em que as extremidades da partícula já atingiram a temperatura ideal de operação, se núcleo praticamente não experimentou alteração significativa na temperatura.

REFERÊNCIAS

DUPONT. PTFE Handbook. Disponível em: <http://www.rjchase.com/ptfe_handbook.pdf>. Acesso em: 01 out. 2012.

ELMER. Disponível em: <<http://www.csc.fi/english/pages/elmer>>. Acesso em: 01 out. 2012.

GMSH: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities, 2012. Disponível em: <<http://geuz.org/gmsh/>>. Acesso em: 15 out. 2012.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOTT, P. **Operaciones Unitarias en Ingeniería Química**. 4. ed. Madrid: McGrawHill, 1991.

RÅBACK, P. et al. Elmer Models Manual, 2012a. Disponível em: <<http://www.nic.funet.fi/pub/sci/physics/elmer/doc/ElmerModelsManual.pdf>>. Acesso em: 01 jan. 2013.

RÅBACK, P.; MALINEN, M. Elmer Overview, 2012b. Disponível em: <<http://www.nic.funet.fi/pub/sci/physics/elmer/doc/ElmerOverview.pdf>>. Acesso em: 01 jan. 2013.

SALOME - The Open Source Integration Platform for Numerical Solutions. Disponível em: <<http://www.salome-platform.org/downloads/current-version>>. Acesso em: 15 out. 2012.