

5º CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS



10º pdpetro

Realização



TÍTULO DO TRABALHO:

SIMULAÇÃO DA ABSORÇÃO DE BENZENO EM ÁGUA UTILIZANDO COMO SISTEMA COMPUTACIONAL A PLATAFORMA COMSOL

AUTORES:

H. M. GUERREIRO¹, E. Q. FONSECA JÚNIOR^{1,2}

INSTITUIÇÃO:

¹Universidade Federal do Amazonas

²Universidade do Estado do Amazonas; Uninassau Manaus

SIMULAÇÃO DA ABSORÇÃO DE BENZENO EM ÁGUA UTILIZANDO COMO SISTEMA COMPUTACIONAL A PLATAFORMA COMSOL

Abstract

The chemical component benzene, activated from petroleum, mineral and natural gas to coal, presents studies on the risk of its exposure throughout Brazil and various parts of the world. Its relevance to the chemical industry derives from its diffusion capacity in compounds, but its toxicity is a limiting factor in determining its employability. The use of computational simulation currently available due to adaptations to various process conditions, as well as displaying short-term data with high precision accuracy. Therefore, the determination of an absorption model of this component that represents the experimental data is important to evaluate its toxicity after its examination in the process, thus adding a use for such component. Then, the present work aimed to evaluate the phenomenology of mass transfer by simulating the absorption of benzene in water using the COMSOL Multiphysics software. Using the principles of Fick's Law in the control loop, simulate the diffusion of benzene in a water trickle at 3 different speeds 0.01; 0.1 and 1 m/s. The concentration of gas evaluated was $5 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^3$ at 20 °C in a fillet with a thickness of 0.002 m and a height of 1 m. The simulation showed that there was a variation of the concentration of the component in the 3 evaluated velocities and the velocity profile showed a good representation of the experimental data, implying the lower the fillet velocity, the greater the absorption of impaired substances. It was observed that the efficiency of benzene absorption by water as it approached the end of the height showed similar values of maximum concentration values at your total benzene absorption level, so such a system shows promise used to predict the absorption behavior of this component in the process steps in the suggested industry and lower than from this environment, besides suggesting as a basic tool for teaching this process in the transport phenomenon.

Introdução

Atualmente, inúmeras substâncias químicas denominadas xenobióticos são empregadas em muitas atividades industriais, sendo seu descarte um potencial de risco para o equilíbrio ecológico do meio ambiente. Devido as diferentes classes de substâncias presentes em sua composição, os solventes utilizados na grande maioria dos processos químicos industriais agregam uma exposição maior desses agentes à saúde humana oferecendo risco a saúde e contaminação do meio (TAMBELLINI e CÂMARA, 1998).

Entre as substâncias químicas que carecem atenção devido à toxicidade e ampla utilização industrial é o benzeno, um hidrocarboneto aromático amplamente utilizado como matéria-prima para diferentes produtos, como detergentes, gasolina e plásticos (COTTICA e GRIGNANI, 2013).

No Brasil, as principais produtoras de benzeno estão limitadas nos centros de produção petroquímica e refino de petróleo, sendo encarregado por aproximadamente 95% da produção nacional do mesmo. Seus efeitos tóxicos sobre o organismo determinaram que o benzeno tivesse sua concentração no ar em ambientes de trabalho, ou mesmo na atmosfera, regulada em inúmeros países, minimizando a exposição crônica (COSTA, 2009).

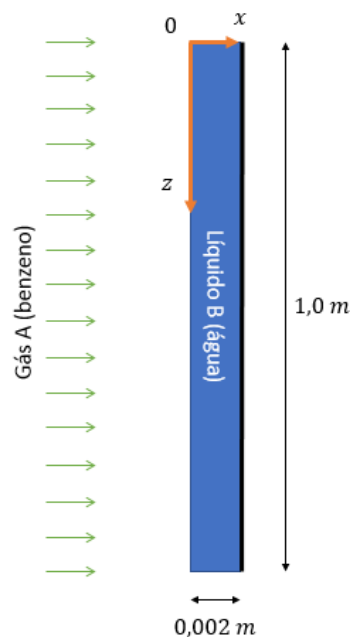
A simulação computacional atualmente é uma grande aliada para o aprendizado e desenvolvimento técnico-científico na engenharia. À medida que a mesma é implementada como auxílio para o controle de substâncias perigosas durante o processo industrial, essas substâncias voláteis são avaliadas quanto ao processo de absorção, por exemplo, que relaciona o fenômeno de transferência de massa devido a diferença de concentração da mesma, com outros agentes não tóxicos que podem ser aproveitados em diferentes etapas do processo, acarretando uma corrente de descarte mais limpa, além de torna-lo promissor devido a diminuição em seu valor energético (CHEMMANGATTUVALAPPIL et al., 2017)

Dessa maneira, o presente trabalho teve como objetivo avaliar a fenomenologia de transferência de massa através da simulação de absorção do benzeno em água por meio do software COMSOL MULTIPHYSICS®. Por meio dos princípios da Lei de Fick na malha de controle, realizou-se a simulação da difusão do benzeno em um filete de água em 3 diferentes velocidades 0,01; 0,1 e 1 m/s.

Metodologia

Para a análise das condições do estudo de caso do sistema, são necessários os princípios bem definidos para o alicerce do problema proposto, isto é, as hipóteses e os limites dados entre sistema e meio, determinando uma fronteira e analisando as entradas e saídas, sendo responsável pelas condições de contorno do problema. O modelo para o estudo avaliado foi modelado por Cremasco (2002) na semelhança da Figura 1.

Figura 1 – Esquema do estudo de caso



As condições físicas do problema foram determinadas por Vargas (2013), com algumas modificações tornando a simulação próximo a realidade na indústria. A Tabela 1 contempla as hipóteses, as condições de contorno e as especificações agrupadas ao sistema aplicado à simulação computacional em plataforma do software COMSOL MULTIPHYSICS®.

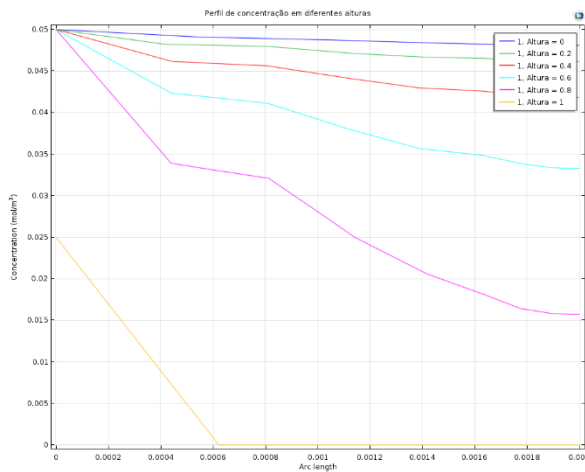
Tabela 1 – Hipóteses e especificações aplicados ao estudo de caso

Hipóteses	Condições de Contorno	Especificações à Simulação
Regime permanente		Espessura do filme de água
Sem reação		$\sigma = 0,002 \text{ m}$
A = Benzeno / B = Água	$x \rightarrow \infty, \quad N_A = 0, \quad \forall z$	Altura da parede = 1 m
$N_A = 0$		$D_{AB} = 1,02 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
Mistura binária (A e B)		$C_{A_0} = 5 \times 10^{-3} \text{ mols/m}^3$
$D_{AB} = \text{cte}$	$\forall x, \quad C_A = 0, \quad z = 0$	Temperatura da água
Bidimensional		$T_\infty = 293 \text{ K}$
Arraste de A na queda de B		Variação de velocidade da água
A não encontra resistência no seu fluxo	$x = 0, \quad C_A = C_{A_0}, \quad \forall z$	$U_o = 0,01 \text{ m/s}; 0,1 \text{ m/s e } 1 \text{ m/s}$
$X_a \ll X_b$		

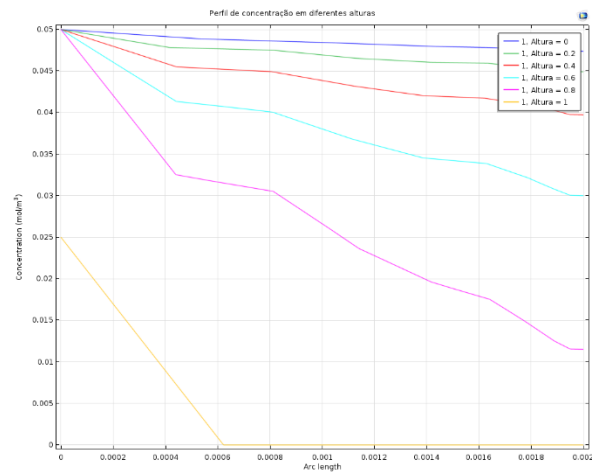
Resultados e Discussão

Em análise aos perfis de concentração, foi observado que a transferência de massa encontra maior resistência em meios onde o filme possui uma maior velocidade de acordo com a Figura 2. A transição entre os gráficos indica um aumento da resistência no meio devido ao aumento nas curvaturas das linhas, onde cada uma representa um ponto em relação à altura da parede. Assim, por exemplo, a linha roxa apresenta, à medida que a velocidade aumenta, uma inclinação mais negativa e próxima da concentração zero. Portanto, se a concentração, num ponto com diferentes velocidades, for pequena em altas velocidades é devido à dificuldade do soluto frente as forças de arraste do fluido em movimento.

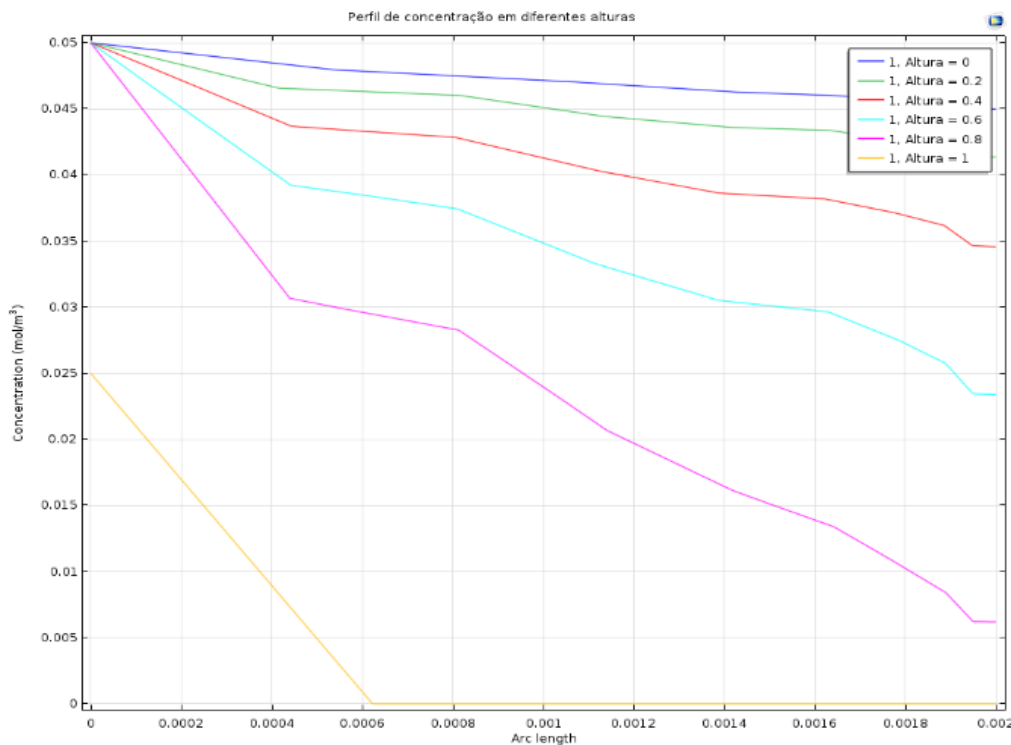
Figura 2 – Perfil de concentração em x em velocidade 0,01 m/s (a), 0,1 m/s (b) e 1 m/s (c)



(a)



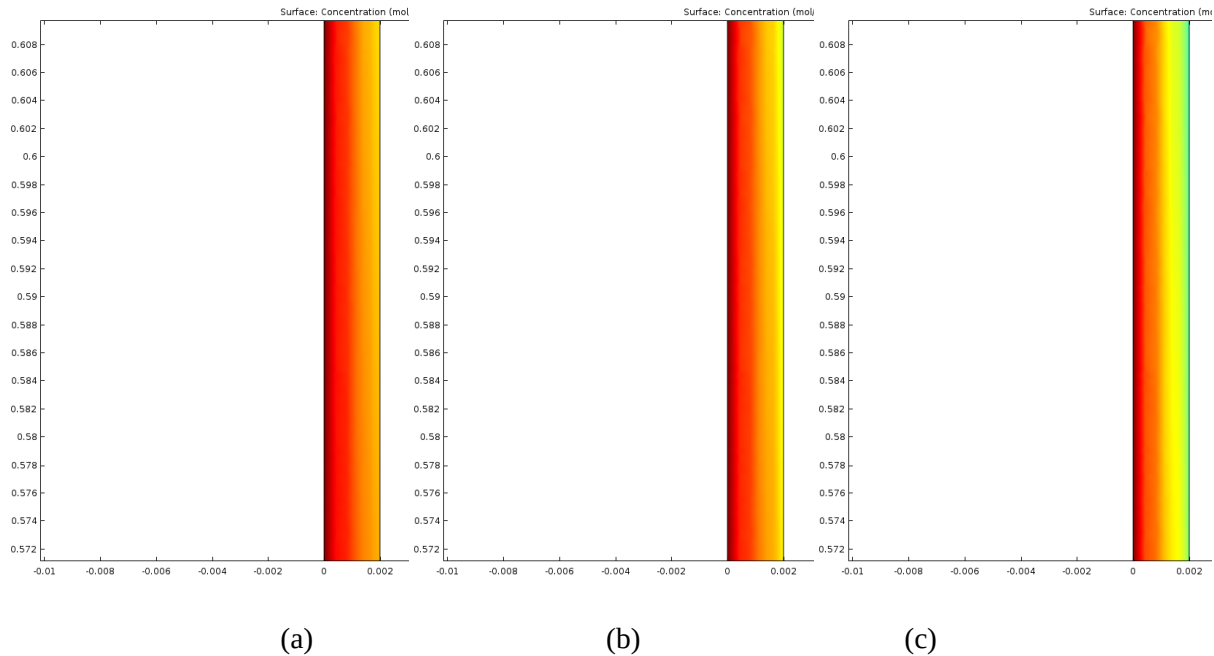
(b)



(c)

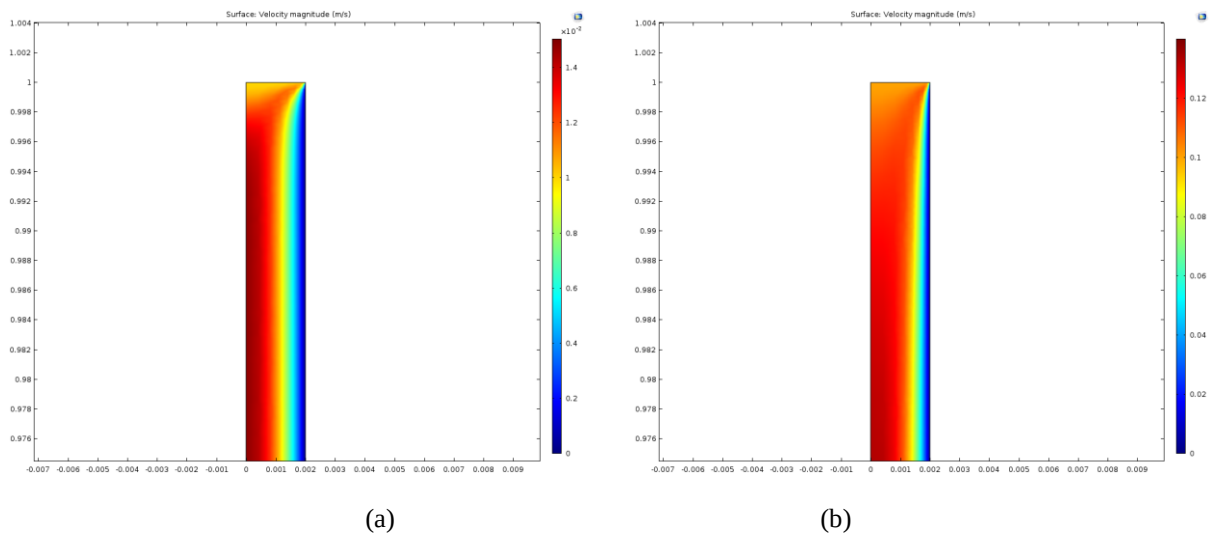
A simulação do sistema também comprova que para menores velocidades o filme tende a atingir a saturação num menor espaço, sendo contrário é verdade para velocidades maiores conforme se observa na Figura 3, justamente porque a necessidade do alto fluxo mássico remete a dificuldade que o sistema possui em atingir seu objetivo, que é a transferência de massa do componente benzeno (CREMASCO, 2002).

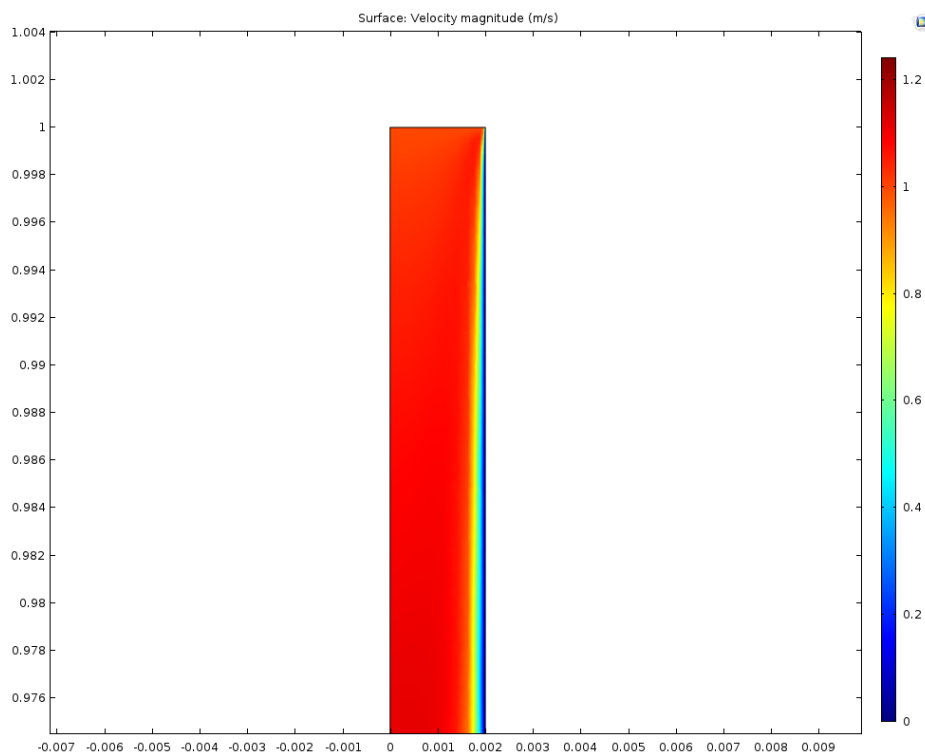
Figura 3 – Superfície de concentração analisada num mesmo espaço para velocidades diferentes 0,01 m/s (a) 0,1 m/s (b) e 1 m/s (c)



O aumento da velocidade inicial provoca um aumento global em toda velocidade desenvolvida pelo fluido na queda, desde sua superfície até a camada limite. A transição que ocorre da superfície entre 0,01 até 1 m/s é correspondente ao fato de que o líquido se aproxima do regime turbulento até atingir seu perfil desenvolvido e o atrito interno torna-se menos influente pela camada limite, perceptível numa queda de velocidade acentuada na faixa de 1 m/s até 0 m/s, o que se observa com menos impacto na superfície de 0,01 m/s. Com o atrito interno (viscosidade) sendo cada vez menos sentido, a camada limite atingi a velocidade máxima de forma mais acentuada, é o que descreve a Figura 4 (FOX, 2011).

Figura 4 – Superfícies de velocidade em velocidade 0,01 m/s (a) 0,1 m/s (b) e 1 m/s (c)





(c)

Conclusões

Diante do problema descrito e dos resultados observados, determinou-se que a água, como filme e fluido absorvente, favoreceu a absorção do benzeno presente no meio, com uma resistência característica, não tão alta, mas em consideração a altura de 1 m e espessura de 0,002 m os resultados são promissores para tal atividade.

Através da simulação na plataforma COMSOL pôde-se notar um aprofundamento das investigações quanto a transferência de massa e o comportamento fluidodinâmico no meio.

Este trabalho apresentou estudos e análises que poderão ser desenvolvidas intensamente para inúmeras situações, assim como o aprofundamento deste, a fim de analisar as possíveis melhorias na área da absorção visando a transferência de massa entre fases e as suas propriedades.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao suporte financeiro e estrutura da UFAM para a estudo desse trabalho.

Referências Bibliográficas

CHEMMANGATTUVALAPPIL, N.; CHON, C.; SUM, D. N. K.; ELYAS, R.; CHEN, C.; CHIEN, I. L. C.; LEE, H.; ELMS, R. **Chemical Engineering Process Simulation**. 1ª. ed. Elsevier, 2017.

COSTA, D. F. **Prevenção da exposição ao benzeno no Brasil**. Tese (Doutorado em Patologia), Faculdade de Medicina, Universidade de São Paulo, 2009.

COTTICA, D.; GRIGNANI, E. Evolution of technology and occupational exposures in petrochemical industry and in petroleum refining. **Giornale Italiano di Medicina del Lavoro ed Ergonomia**, v. 35, n. 4, p. 236-243, 2013.

CREMASCO, M. A. **Fundamentos de transferência de massa**. 2ª edição. Campinas, editora da UNICAMP, 2002.

FOX, R. W. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. Tradução e revisão técnica: Ricardo Nicolau Nassar Koury, Luiz Machado. Rio de Janeiro: LTC, 2011.

TAMBELLINI, A. T.; CÂMARA, V. M. A temática saúde e ambiente no processo de desenvolvimento do campo da saúde coletiva: aspectos históricos, conceituais e metodológicos. **Ciência & Saúde Coletiva**, v. 3, n.2, p. 47-59, 1998.

VARGAS, J. V. **Transferência de Massa - Aula 8**. TM035 - Transferência de Calor e Massa II. UFPR – Paraná, 2013.