

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



TÍTULO DO TRABALHO:

Modelo fluidodinâmico de um prato perfurado de uma unidade de destilação

AUTORES:

Joel G. Teleken, Leandro O. Werle, Marinho B. Quadri, e Ricardo A. F. Machado

INSTITUIÇÃO:

Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

Este Trabalho foi preparado para apresentação no 5º Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás- 5º PDPETRO, realizado pela a Associação Brasileira de P&D em Petróleo e Gás-ABPG, no período de 15 a 22 de outubro de 2009, em Fortaleza-CE. Esse Trabalho foi selecionado pelo Comitê Científico do evento para apresentação, seguindo as informações contidas no documento submetido pelo(s) autor(es). O conteúdo do Trabalho, como apresentado, não foi revisado pela ABPG. Os organizadores não irão traduzir ou corrigir os textos recebidos. O material conforme, apresentado, não necessariamente reflete as opiniões da Associação Brasileira de P&D em Petróleo e Gás. O(s) autor(es) tem conhecimento e aprovação de que este Trabalho seja publicado nos Anais do 5ºPDPETRO.

Modelo fluidodinâmico de um prato perfurado de uma unidade de destilação

Abstract

Many studies involving distillation columns are based on macroscopic models of conservation of mass and energy. The present work deals with complex hydrodynamics of sieve trays in pilot plant distillation columns based on control distributed system with action on heating at intermediaries points, through electrical resistance heat arranged on the surface of sieve tray (MARANGONI and MACHADO, 2007; WERLE, 2007), using fluid dynamics computational. The lack of more knowledge about the transfer phenomena and hydrodynamic that occur within the columns distillation are a significant barrier to improve the performance and design. In this context, the objective of this work was evaluate the influence of the electrical resistance heat arranged on the surfaces of the sieve trays have taken on hydrodynamics. It was implemented one three-dimensional mathematical homogeneous model, biphasic in the commercial code of fluid dynamics computational (CFD), CFX 11 (AEA Technology) for numerical experimentation study. In results can be observed the influence of electrical resistance heat of surfaces sieve trays on patterns flow, but this does not harm to hydrodynamics as a whole, therefore helped to mixture and homogenize the region with active bubbles, by this way the use of electrical resistance heat could be applied to a control distributed system approach.

Introdução

A indústria de petróleo é uma das maiores responsáveis do avanço tecnológico no mundo. Isto se deve ao alto grau de competitividade existente em torno do petróleo, gerando uma busca incessante por novas tecnologias que possibilitem melhor eficiência em seus processos. O processo mais largamente utilizado neste setor é a destilação. Inserido neste contexto socioeconômico globalizado e competitivo, está o desenvolvimento de projetos e processos químicos cada vez mais aperfeiçoados, incorporando modelos matemáticos que possibilitam maior aproximação do seu comportamento real, por isso um maior entendimento, em nível microscópico, dos mecanismos de transferência de calor, massa e momento que ocorrem em processos de destilação é muito relevante, principalmente quanto a sofisticação dos equipamentos e processos.

O presente estudo procura vincular o desenvolvimento e controle de processos de destilação à fluidodinâmica computacional, não deixando de abordar os estudos tradicionais de transferência de massa e quantidade de movimento em colunas de destilação. A aplicação de tal ferramenta na modelagem do escoamento em colunas de destilação pode melhorar sua descrição a qual, à luz engenharia de processos de separação, é tratada empregando-se uma combinação de modelos altamente idealizados (NORILER *et al*, 2007).

Existem alguns trabalhos na literatura que tratam a modelagem fluidodinâmica de colunas de destilação, dentre eles vale ressaltar os estudos realizados por Noriler *et al* (2007), Van Baten e Krishna *et al* (1999), Liu *et al* (2000), Soares *et al* (2001) e Krishna e van Baten (2003) os quais estudaram na sua grande maioria o comportamento dos vetores velocidade e distribuição da energia cinética na superfície dos pratos de colunas de destilação afim de avaliar qual o comportamento do escoamento multifásico, turbulento nesta região e assim poderem identificar quais as regiões de menor e maior mistura e as possíveis causas destes problemas.

Diferentemente da abordagem dos trabalhos disponíveis na literatura, neste considerou-se a geometria real da unidade piloto de destilação, utilizando-se dois estágios da coluna para reproduzir de maneira mais efetiva e realística o escoamento multifásico. O presente artigo objetiva verificar qual a influência que a resistência elétrica, disposta na superfície do prato tem sobre o escoamento, baseado num modelo de conservação da quantidade de movimento sob condições de turbulência. O modelo foi resolvido utilizando-se o método de volumes finitos com variáveis localizadas em um sistema generalizado de coordenadas.

Metodologia

Esta seção será dividida em duas subseções distintas: na primeira, descreve-se brevemente o modelo matemático utilizado nas simulações; na segunda, apresenta-se a geometria utilizada nas simulações com as condições de contorno adotadas.

Modelo Matemático - O modelo matemático considera os fluxos de gás e líquido num enfoque Euleriano-Euleriano. As equações de conservação utilizadas para solução deste problema foram a Equação da Continuidade (Equação 1) e a Equação de Momento (Equação 3). Para resolvê-las foi necessário adicionar e utilizar a equação de fluxo de momento (Equação 4). Além disso, assumiu-se o modelo k-ε padrão como modelo de turbulência para o escoamento multifásico.

Equação da continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_k \rho_k) + \nabla \times (f_k \rho_k v_k) = 0 \quad (1)$$

Onde f_k , ρ_k e v_k representam a fração volumétrica, a densidade macroscópica (g cm^{-3}) e o vetor velocidade (m s^{-1}) para a fase k, respectivamente. As frações volumétricas de gás e de líquido são relacionadas através da restrição descrita pela Equação 2:

$$f_g + f_l = 1 \quad (2)(1)$$

Onde f_g e f_l representam respectivamente a fração volumétrica da fase gasosa e da fase líquida.

Equação de Momento

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_k \rho_k v_k) + \nabla \times (f_k \rho_k v_k v_k) = -f_k \nabla P_k + \nabla \times [f_k \mu_k (\nabla v_k + \nabla v_k^T)] + M_{g,l} + f_k \rho_k g \quad (3)(1)$$

Onde μ_k e g representam a viscosidade molecular ($\text{m}^{-1} \text{kg s}^{-1}$) para fase k e o vetor gravidade (m s^{-2}), respectivamente. P_k é o campo de pressão (Pa), tendo o mesmo valor para fase líquida e gasosa. $M_{g,l}$ representa a transferência de momento entre as fases.

Para resolver as Equações 1 - 3, é necessária uma equação adicional que relaciona a transferência de momento na interface, $M_{g,l}$ e os fluxos adicionais de momento, conforme:

$$M_{g,l} = \frac{3}{4} \frac{f_g \rho_l}{d_g} C_D |v_g - v_l| (v_g - v_l) \quad (4)$$

Onde d_g é o diâmetro da bolha (mm) e C_D é o coeficiente de arrasto.

Modelo de Turbulência

Segundo Nikou e Ehsani (2008), o modelo $k - \varepsilon$ padrão é baseado no conceito de viscosidade turbulenta, composto de duas equações, uma para k que é a turbulência da energia cinética definida como a variação da velocidade devido a flutuações e com dimensão (L^2T^2), e outra para ε a dissipação dos turbilhões e tem a dimensão de k pelo tempo (L^2T^3). O modelo $k - \varepsilon$ é baseado na viscosidade efetiva de turbilhões (μ_{eff}), que pode ser calculada pela Equação 5,

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (5)$$

Onde μ_t é a viscosidade turbulenta. O modelo $k-\varepsilon$ assume que a viscosidade turbulenta é ligada a energia cinética e de dissipação turbulenta pela Equação 6,

$$\mu_t = C_\mu \rho_k \left(\frac{k^2}{\varepsilon_k} \right) \quad (6)$$

Os valores de k e ε vem diretamente das equações diferenciais de transporte para a energia cinética turbulenta (Equação 7) e a taxa de dissipação turbulenta (Equação 8). Sendo assim, para o sistema multifásico tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \rho_\alpha k_\alpha) + \nabla \cdot \left(r_\alpha \left(\rho_\alpha U_\alpha k_\alpha - \left(\mu + \frac{\mu_{t\alpha}}{\sigma_k} \right) \nabla k_\alpha \right) \right) = r_\alpha (P_\alpha - \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + T_{\alpha\beta}^{(k)} \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + \nabla \cdot \left(r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha \varepsilon_\alpha - \left(\mu + \frac{\mu_{t\alpha}}{\sigma_k} \right) \nabla \varepsilon_\alpha \right) = r_\alpha \frac{\varepsilon_\alpha}{k_\alpha} (C_{\varepsilon 1} P_\alpha - C_{\varepsilon 2} \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + T_{\alpha\beta}^{(\varepsilon)} \quad (8)$$

Onde os termos adicionais $T_{\alpha\beta}^{(k)}$ e $T_{\alpha\beta}^{(\varepsilon)}$ representam os coeficientes de transferência entre as fases α e β , respectivamente. E $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, C_μ , σ_k e $\sigma_{\varepsilon 1}$ são constantes do modelo.

Na Figura 1 estão ilustrados dois pratos perfurados de uma coluna de destilação, os quais foram estudados nas simulações de CFD realizadas.

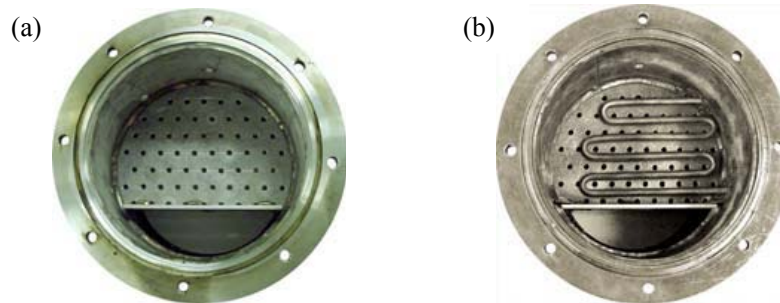


Figura 1. Vista superior dos módulos com detalhamento do prato (a) sem a resistência elétrica, (b) com a presença da resistência elétrica.

Condições Iniciais e Condições de Contorno utilizadas nas Simulações – Devido às características elípticas das equações diferenciais parciais do modelo, as condições de contorno para todas as fronteiras do domínio físico são necessárias. Nas condições de entrada de líquido e gás, as velocidades foram consideradas constantes e normais à fronteira. A pressão de 101,32 kPa foi adotada nas duas condições de pressão constante, considerando o escoamento completamente desenvolvido, e assumindo-se condição de não deslizamento nas paredes e na superfície das resistências elétricas. Nas Figuras 2a e 2b representam-se os dois domínios físicos utilizados nas simulações, com os pratos de destilação e demais detalhes em escala.

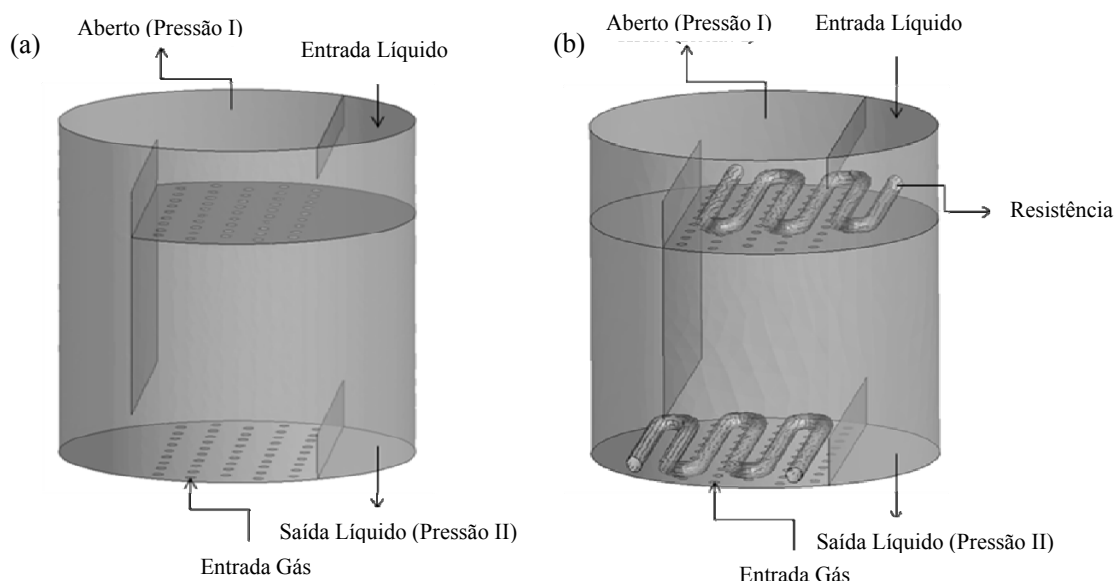


Figura 2. Domínio Físico 3-D Multifásico, (a) sem a presença da resistência elétrica, (b) com a presença da resistência elétrica.

A Tabela 1 apresenta os parâmetros geométricos utilizados para construção dos domínios utilizados nos estudos de CFD, além do tamanho das malhas construídas para cada um dos domínios.

Tabela 1. Parâmetros geométricos e numéricos dos domínios físicos estudados

Parâmetros		
Geométricos	Altura do Estágio [cm]	15
	Diâmetro da coluna [cm]	21
	Diâmetro do furo [mm]	6
	Número de Furos	47
	Altura da represa [cm]	3
Malha Numérica	$N_{\text{Elementos}}$ (sem resistência)	415 164
	$N_{\text{Elementos}}$ (com resistência)	1 129 497

Os fluidos escolhidos para realização destas simulações foram ar e água. A injeção de ar foi feita pelos furos do prato inferior como sendo uma condição de contorno, para avaliar qual sua influência no escoamento do líquido sobre o prato.

Resultados e Discussões

Nesta seção são apresentados os resultados das simulações realizadas, utilizando-se os dois domínios físicos estudados e analisados, ou seja, com e sem a presença das resistências elétricas sobre a superfície dos pratos.

Nas Figuras 3a e 3b, apresentam-se o perfil de distribuição da fração volumétrica de água num plano XY e em três alturas diferentes (1,5, 9, 16,5 cm) num plano XZ respectivamente, tanto com a presença das resistências elétricas sobre as superfícies dos pratos como sem a presença destas. Na Figura 3c é demonstrado o comportamento dos vetores velocidades a uma altura de 1,5 cm da superfície do prato inferior.

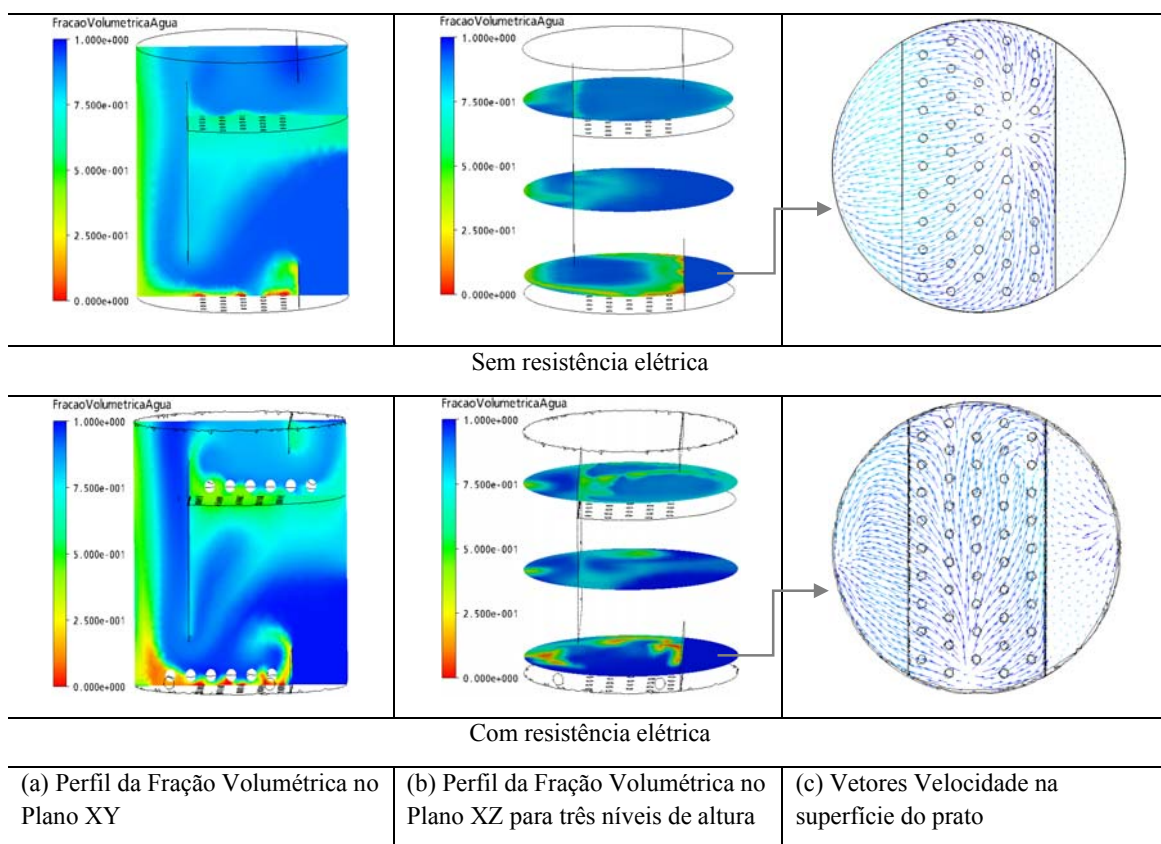


Figura 3 - Resultados das Simulações para Escoamento Multifásico.

Pode-se observar nas Figuras 3a e 3b que a camada de líquido retida (*hold-up*), representada pela cor azul mais escura (fração volumétrica de líquido igual a 1) sofre uma pequena elevação, ocorrendo uma mistura das duas fases e formação de espuma, em virtude da alta vazão do gás. A elevação de líquido ocorre de modo mais acentuado na região próxima a parede de saída do prato inferior, devido à entrada ar pelos furos ser uma condição de contorno com uma velocidade constante e normal a fronteira, o que força o aparecimento de alguns caminhos preferências como este e fazendo uma parte deste gás subindo pelo tubo de queda de líquido.

Esse comportamento para um prato de destilação apresenta alguns problemas operacionais e de eficiência, porém vale ressaltar que o estudo está se detendo na hidrodinâmica do prato, justamente para estudar estes fenômenos. Observa-se na Figura 2b que a 1,5 cm da superfície no prato inferior não existe uma mistura homogênea das fases tanto para o prato com resistência elétrica como para o prato sem a presença desta, pois existem pontos com concentrações de água (ou gás) diferentes, como

pode ser notado pelo aparecimento de regiões com maior concentração de água (azul forte) e regiões quase isentas de água (cores de verde tendendo ao vermelho), tanto com a presença da resistência elétrica como na ausência dela, o que também é um aspecto indesejável para o processo de destilação. Nesta situação não ocorre a transferência de massa de forma maximizada na região de borbulhamento, além de existirem gradientes de concentração nesta região. Comparando-se os resultados obtidos com e sem a presença da resistência elétrica sobre a superfície dos pratos, não se observa prejuízo para a distribuição da fração volumétrica de líquido, ou seja, a hidrodinâmica do escoamento sobre o prato não é afetada de maneira nociva pela presença das mesmas. Verifica-se pela análise da Figura 3b, que a presença das resistências elétricas até mesmo favorecem a mistura, pois se constata uma distribuição mais homogênea da fração volumétrica de líquido sobre o prato. Do ponto de vista do processo de separação, este fato é benéfico, pois minimiza os possíveis gradientes de concentração e temperatura nesta região.

Com relação aos vetores velocidade mostrados na Figura 3c, observam-se algumas diferenças quanto a sua distribuição, resultado esperado pela presença das resistências serem um obstáculo ao fluxo normal de líquido e gás, porém em ambos os casos apresentam regiões de recirculação próximas às paredes. Vale ressaltar que estas regiões de recirculação devem ser minimizadas para maximização do processo de transferência de massa. Observa-se que a distribuição dos vetores velocidade, sobre o prato que contém a resistência elétrica apresenta maior desordem se comparada com aquela sem a resistência elétrica, o que é benéfico do ponto de vista de transferência de massa. Pode-se afirmar portanto, que a presença das resistências elétricas é potencialmente desejável como fator a contribuir para um aumento da eficiência dos pratos de destilação e do processo como um todo.

Com o propósito de analisar a distribuição de líquido sobre a superfície dos pratos de destilação, graficou-se a distribuição da fração volumétrica de água na região central dos pratos a 1,5 cm acima da superfície dos mesmos, ao longo do seu raio (região ativa de borbulhamento -0,5 a 0,5 no eixo X), conforme m na Figura 4.

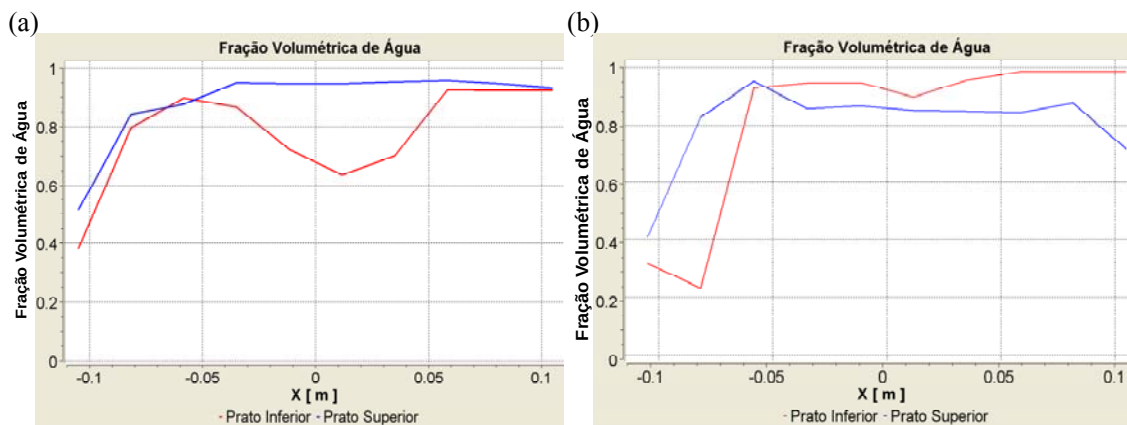


Figura 4 - Comparação entre a distribuição da fração volumétrica de líquido na superfície dos pratos (a) sem a resistência elétrica e (b) com a presença da resistência elétrica.

Observando-se e comparando as Figuras 4a e 4b, percebe-se que a presença das resistências elétricas sobre a superfície dos pratos favoreceu a mistura das fases na região ativa de borbulhamento, pois a distribuição da fração volumétrica de líquido se mostrou mais uniforme se comparada com aquela na superfície do prato sem a presença das resistências elétricas (Figura 4a). Ou seja, demonstra-se uma vez mais que a presença das resistências elétricas contribui positivamente para uma distribuição mais uniforme da fase líquida sobre os pratos.

Conclusões

Conclui-se dos resultados obtidos com este trabalho que a presença das resistências sobre a superfície dos pratos influencia nos padrões de escoamento de líquido sobre o mesmo, porém essa influência não traz prejuízos à hidrodinâmica, mas, bem ao contrário, favorece a homogeneização das fases, legitimando a presente abordagem de controle distribuído. De forma que, com este trabalho conclui-se que a utilização das resistências elétricas sobre a superfície dos pratos, utilizadas no sistema de controle com aquecimento distribuído, não prejudicam a hidrodinâmica da unidade. Além disso, melhora a homogeneização da mistura das fases na região ativa de borbulhamento, o que é muito importante para maximização do processo de transferência de massa. A partir destes resultados, em etapa posterior será realizado um estudo com mistura de etanol e água a fim de analisar a eficiência do processo de separação em ambos domínios, além de avaliar o efeito que a resistência elétrica acionada possui no processo de transferência de massa nesta unidade.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro da Agência Nacional do Petróleo, Gás e Biocombustíveis – ANP – e da Financiadora de Estudos e Projetos – FINEP – por meio do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor Petróleo e Gás – PRH-34-ANP/MCT e do CNPq – Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico.

Referências Bibliográficas

- KRISHNA, R., VAN BATEN, J. M., ELLENBERGER, J., HIGLER, A. P., TAYLOR, R. CFD Simulations of sieve tray hydrodynamics, *Trans IChemE*, v. 77, p. 639-646, 1999.
- KRISHNA, R., VAN BATEN, J. M. Modelling sieve tray hydraulics using computational fluid dynamics, *Trans IChemE*, v. 81, p. 27-38, 2003.
- LIU, C. J. X., YUAN, G., YU, K. T., ZHU, X. J. A fluid-dynamic model for flow pattern on a distillation tray, *Chemical Engineering Science*, v. 55, p. 2287-2294, 2000.
- MARANGONI, C., MACHADO, R. A. F. Distillation tower with distributed control strategy: Feed temperature loads. *Chemical Engineering and Technology*, v.30, pp.1292-1297, 2007.
- NIKOU, M. R. K., EHSANI, M. R. Turbulence models application on CFD simulation of hydrodynamics, heat and mass transfer in a structured packing, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 35, p. 1211-1219, 2008.
- NORILER, D., MEIER, H. F., BARROS, A. A. C., WOLF MACIEL, M. R. Thermal fluid dynamics analysis of gas-liquid flow on a distillation sieve tray, *Chem. Eng. J.*, doi:10.1016/j.cej.2007.03.023, 2007.
- SOARES, C., NORILER, D., BARROS, A. A. C., MEIER, H. F., WOLF MACIEL, M. R. Numerical Simulation of Liquid Flow On a Distillation Tray, In: *Iberian Latin-American Congress On Computational Methods In Engineering and Brazilian Congress on Computational Mechanics*, 22 e 2, 2001, Campinas – São Paulo – Brasil. *Anais do 22nd Iberian Latin-American Congress On Computational Methods In Engineering and 2nd Brazilian Congress on Computational Mechanics*. São Paulo (CD-Rom), 2001.
- WERLE, L. O. Minimização dos Transientes através do Aquecimento Distribuído em uma Coluna de Destilação. Dissertação. (Mestrado em Engenharia Química). Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC. Florianópolis, 2007.