



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
COPPE – PROGRAMA DE ENGENHARIA QUÍMICA

COQ862: MÉTODOS NUMÉRICOS PARA SISTEMAS DISTRIBUÍDOS

**Duas abordagens de solução de modelos distribuídos
do tipo duplo filme**

Carlos Henrique Ferreira Brasil de Souza

Professor: Argimiro Resende Secchi

Conteúdo

- Introdução
- Modelagem
- Métodos utilizados
- Resultados
- Conclusões

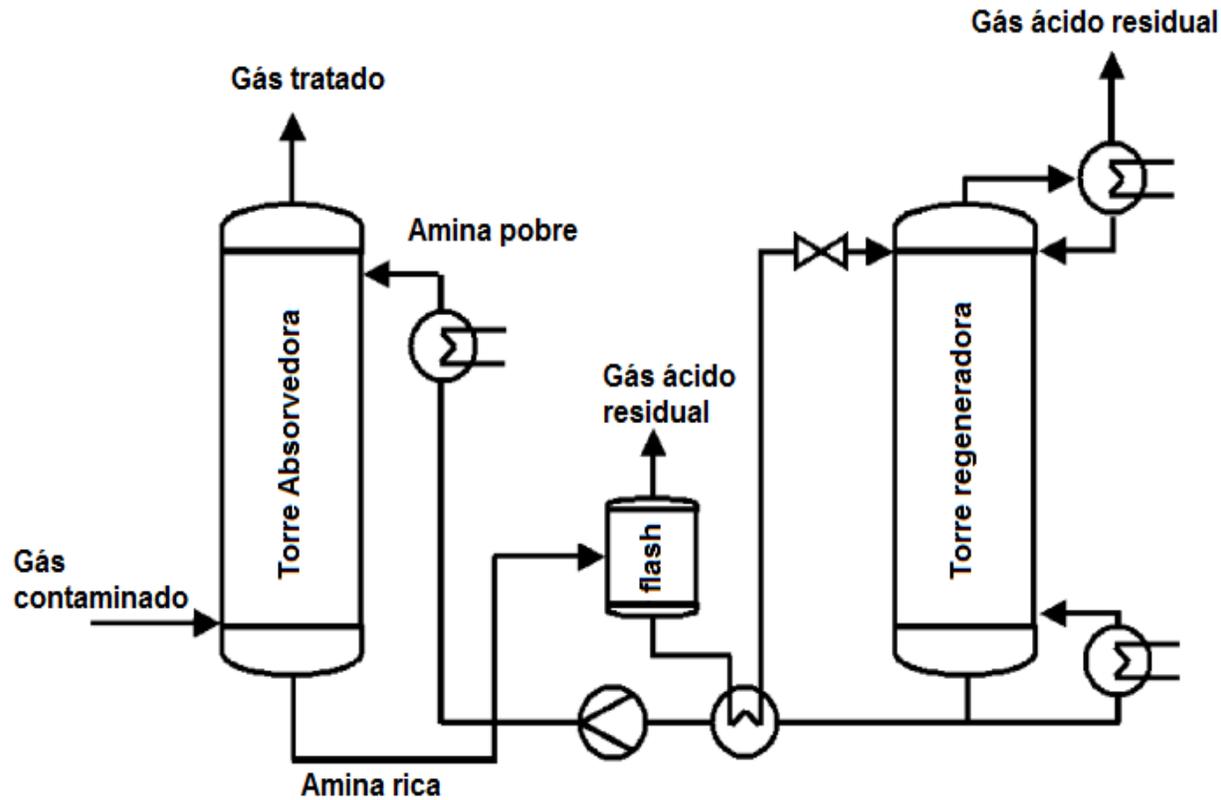
Por que remover o CO₂ do gás natural?

O CO₂ é um dos principais contaminantes do gás natural.

Problemas causados pela sua presença:

- Redução do poder calorífico
- Aceleração da corrosão em dutos
- Elevado ponto de congelamento

Como remover o CO₂ do gás natural?



Esquemático do tratamento do gás natural pelo processo de absorção reativa do CO₂

Absorção química utilizando alcanolaminas é o processo mais maduro e consolidado. Está sendo amplamente estudado também para remoção de CO₂ de gases de combustão

Alternativamente, o CO₂ pode ser removido via membranas, caminho que está em expansão em unidades *off-shore*

Como é feita a modelagem da absorção reativa do CO₂?

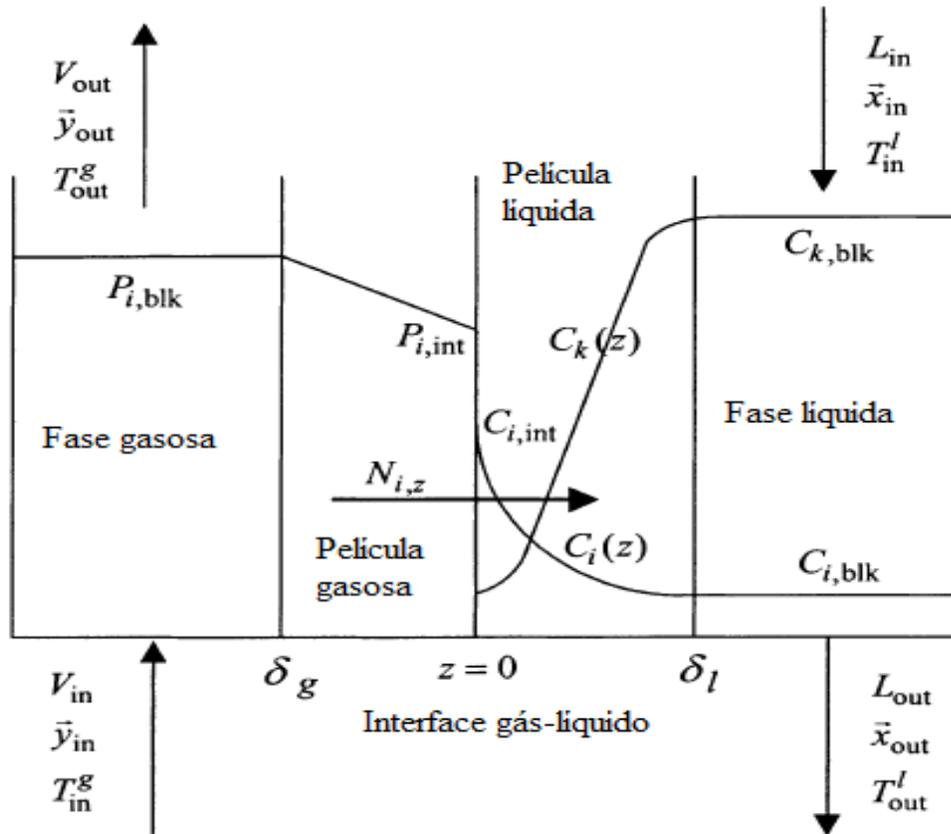


Diagrama esquemático do modelo de duplo-filme

Modelos tradicionais de equilíbrio químico.

Rate-Based Models

(modelos que levam em consideração transferência de calor massa entre as fases)

Objetivo

Resolver um sistema simplificado de duplo filme e comparar os diferentes métodos de discretização para posterior aplicação na modelagem da absorção reativa de CO₂

Conteúdo

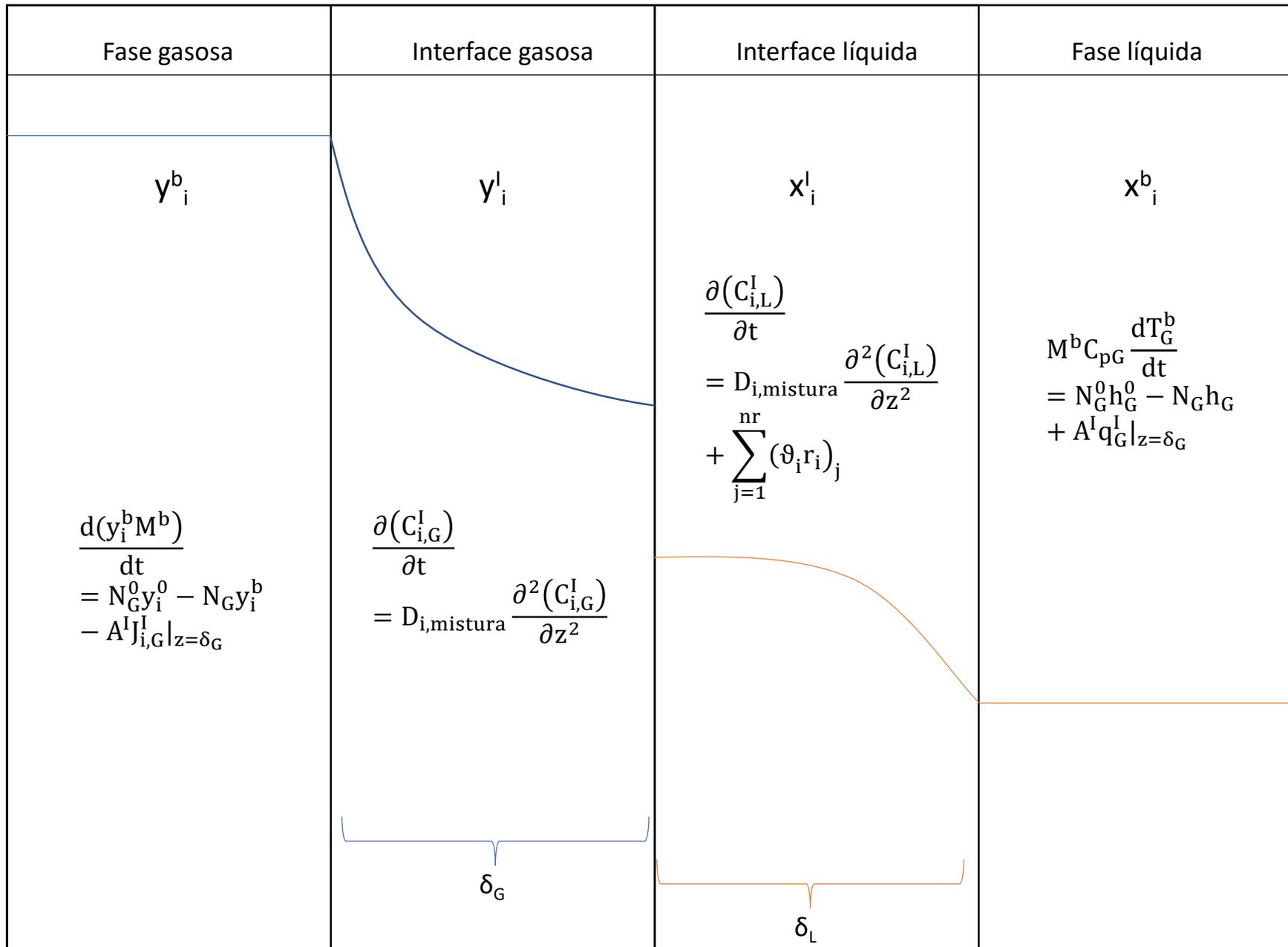
- Introdução

- Modelagem

- Métodos utilizados

- Resultados

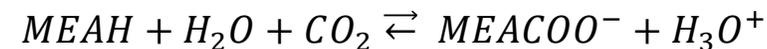
- Conclusões



Esquemático do modelo de duplo-filme para um estágio de absorção

Simplificações

- As fases líquida e gasosa são consideradas ideais;
- O transporte dos componentes pelo duplo filme ocorre por difusão simples, sem considerar os eletrólitos presentes na solução;
- As correntes possuem capacidade calorífica constante;
- Os coeficientes de difusão são considerados constantes;
- Fase líquida incompressível;
- As reações químicas só ocorrem em fase líquida;
- Somente uma reação química exotérmica ocorre:



- O sistema possui quatro componentes: CO₂, H₂O, MEA e CH₄;
- O equilíbrio líquido-vapor é descrito pela lei de Henry;

Principais equações

Balanço de massa, por componente, para a fase gás:

$$\frac{d(y_i^b M^b)}{dt} = N_G^0 y_i^0 - N_G y_i^b - A^I J_{i,G}^I |_{z=\delta_G}$$

Balanço de energia para a fase gás:

$$M^b C_{pG} \frac{dT_G^b}{dt} = N_G^0 h_G^0 - N_G h_G - A^I (q_G^I + J_{T,G}^I h_G^I) |_{z=\delta_G}$$

Balanço de massa, por componente, para a fase líquida:

$$\frac{d(C_i V_L)}{dt} = Q_L^0 C_i^0 - Q_L C_i^b - A^I J_{i,L}^I |_{z=\delta_L} + V_L \sum_{j=1}^{nr} (\vartheta_j r_j)$$

Balanço de energia para a fase líquida:

$$V_L C_t C_{pL} \frac{dT_L}{dt} = C_t^0 Q_L^0 h_L^0 - C_t^b Q_L h_L^b + A^I q_L^I |_{z=\delta_L} + V_L \sum_{j=1}^{nr} (-\Delta H) r_j$$

Principais equações

Balanço de massa, por componente, para a película gasosa:

$$\frac{\partial(C_{i,G}^I)}{\partial t} = D_{i,mistura} \frac{\partial(C_{i,G}^I)^2}{\partial z^2}$$

Com condições de contorno, na interface da película com a fase gás, as concentrações se igualam:

$$C_{i,G}^I(z = \delta_G) = C_{i,G}$$
$$J_{i,G}^I|_{z=\delta_G} = -D_{i,mistura} \frac{\partial C_{i,G}^I}{\partial z} |_{z=\delta_G}$$

E, na interface entre as películas líquida e gasosa, existe um equilíbrio termodinâmico:

$$C_{i,G}^I|_{z=0} = C_{i,G}^{I,EQ}, \text{ se } i \text{ é volátil}$$
$$J_{i,G}^I(z = 0) = 0, \text{ se } i \text{ não é volátil (iônico)}$$

Balanço de energia para a película gasosa:

$$\frac{MC_{p,G}}{V_G^I} \frac{\partial T_G^I}{\partial t} = k_G \frac{\partial^2(T_G^I)}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z} (J_G^I h_G^I)$$

Principais equações

Balanço de massa, por componente, para a película líquida:

$$\frac{\partial(C_{i,L}^I)}{\partial t} = D_{i,mistura} \frac{\partial(C_{i,L}^I)^2}{\partial z^2} + \sum_{j=1}^{nr} (\vartheta_i r_i)_j$$

Com condições de contorno análogas às do gás:

$$C_{i,L}^I(z = \delta_L) = C_{i,L}$$

$$C_{i,L}^I(z = 0) = C_{i,L}^{I,EQ}$$

Balanço de energia para a película líquida:

$$V_L^I C_{T,L}^I C_{p,L} \frac{\partial T_L^I}{\partial t} = k_L \frac{\partial^2(T_L^I)}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z} (J_L^I h_L^I) + V_L \sum_{j=1}^{nr} (-\Delta H)_j r_j$$

Dados da carga		
Gás natural		
Vazão total	1097,2	kmol/h
Temperatura	310,93	K
Pressão	60	bar
Composição		
Metano	92,871	% mol
CO₂	6,99029	% mol
H₂O	0,138659	% mol
Amina		
Vazão total	62,4	m ³ /h
	2885,5	kmol/h
Temperatura	316,073	K
Concentrações		
H₂O	42,206	kmol/m ³
MEA	4,036	kmol/m ³
Dados do estágio		
Volume	0,71168	m ³
Área inundada	70%	

Conteúdo

- Introdução
- Modelagem
- Métodos utilizados
- Resultados
- Conclusões

Volumes finitos

Balances de massa e energia por volume

Balanco de massa – fase
gás

$$\frac{dC_{i,G}^{I,k}}{dt} = \frac{J_{i,G}^{I,k} - J_{i,G}^{I,k+1}}{\Delta z}$$

Balanco de massa – fase
líquida

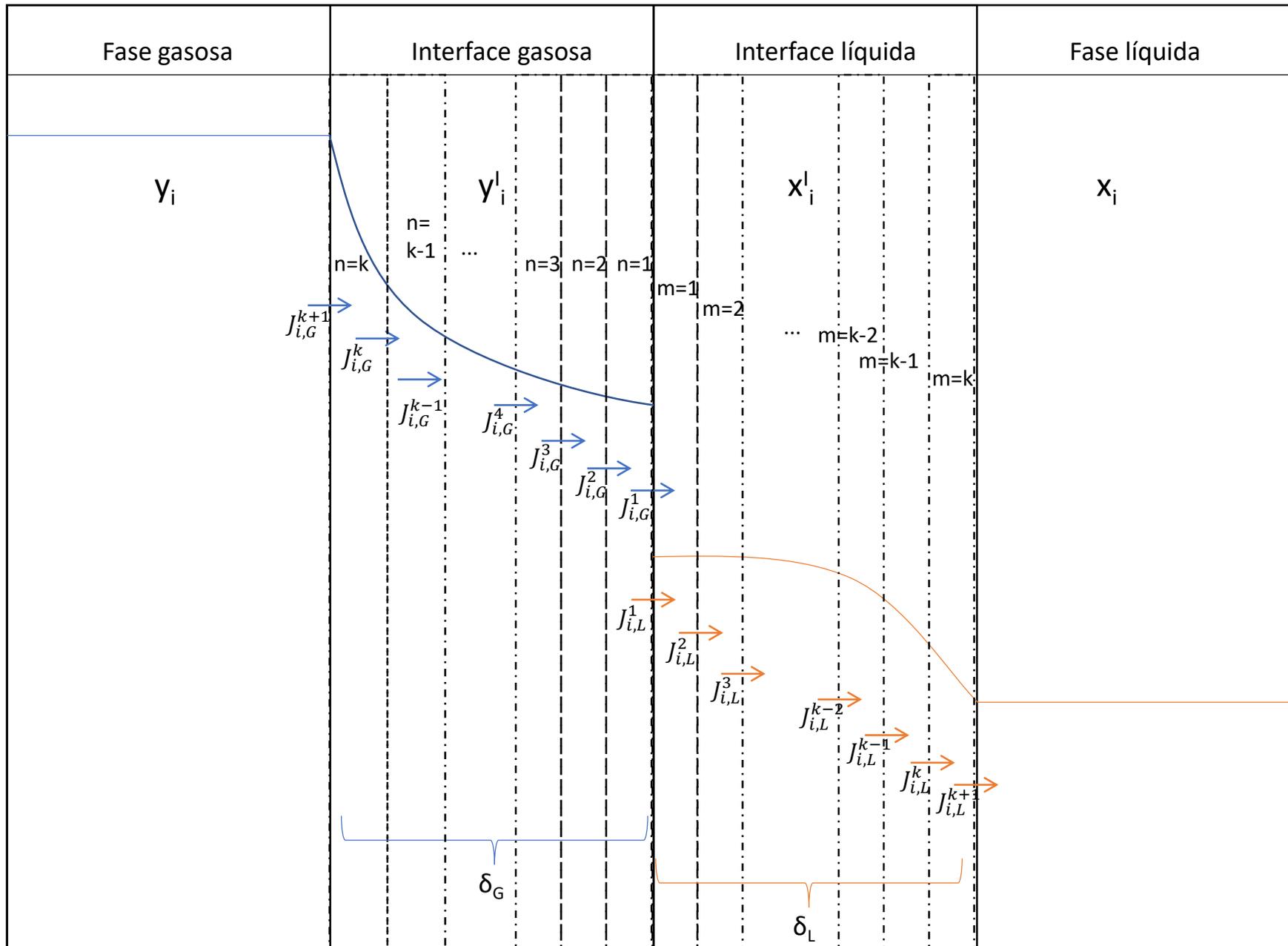
$$\frac{dC_{i,L}^{I,k}}{dt} = \frac{J_{i,L}^{I,k} - J_{i,L}^{I,k+1}}{\Delta z} + \sum_{j=1}^{nr} (\vartheta_i r_j)_j$$

Balanco de energia –
fase gás

$$C_{T,G}^{I,k} C_{pG} \frac{dT_G^{I,k}}{dt} = \frac{q_G^{I,k} - q_G^{I,k+1}}{\Delta z}$$

Balanco de energia –
fase líquida

$$C_{T,L}^{I,k} C_{p,L} \frac{dT_L^{I,k}}{dt} = \frac{q_G^{I,k} - q_G^{I,k+1}}{\Delta z} - \sum_{j=1}^{nr} (-\Delta H)_j r_j$$



Esquemático da discretização do estágio

Volumes finitos

Cálculo nos fluxos internos

Fluxo de massa

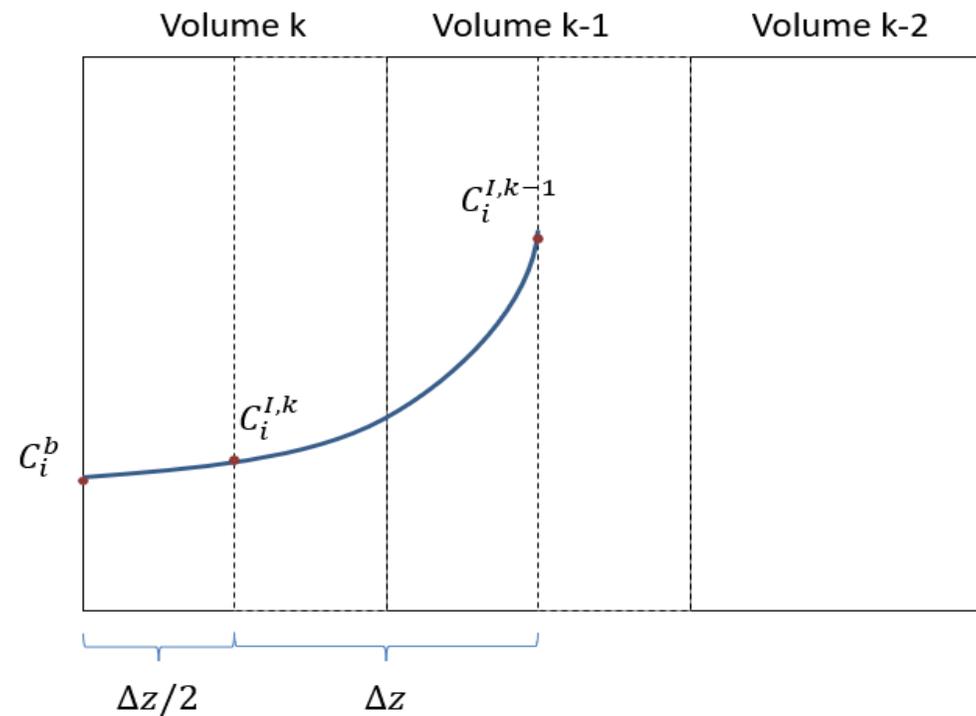
$$J_{i,G}^{I,k} = -D_{i,mistura} \frac{C_{i,G}^{I,k} - C_{i,G}^{I,k-1}}{\Delta z}$$
$$J_{i,L}^{I,k} = -D_{i,mistura} \frac{C_{i,L}^{I,k} - C_{i,L}^{I,k-1}}{\Delta z}$$

Fluxo de energia

$$q_G^{I,k} = -k_G \frac{T_G^{I,k} - T_G^{I,k-1}}{\Delta z} + \overline{h_G^{I,k}} J_{T,G}^{I,k}$$
$$q_L^{I,k} = -k_L \frac{T_L^{I,k} - T_L^{I,k-1}}{\Delta z} + \overline{h_L^{I,k}} J_{T,L}^{I,k}$$

Volumes finitos

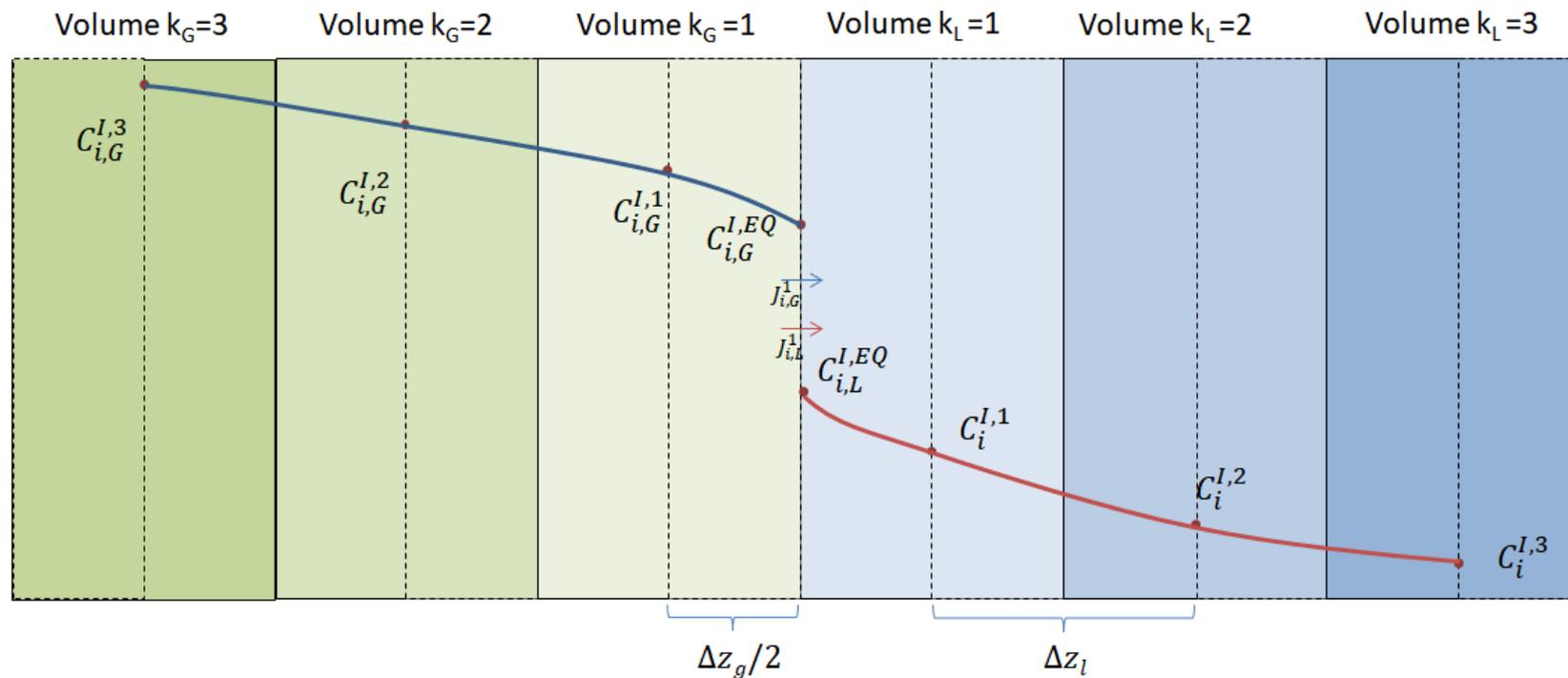
Condições de contorno – Interface película / fase contínua (*bulk*)



Interpolação de 2º grau e cálculo da derivada na fronteira para cálculo do fluxo em k+1

Volumes finitos

Condições de contorno – Interface gás/líquido



Interpolação de 2º grau e cálculo da concentração na interface

Volumes finitos

Ambiente de simulação: EMSO

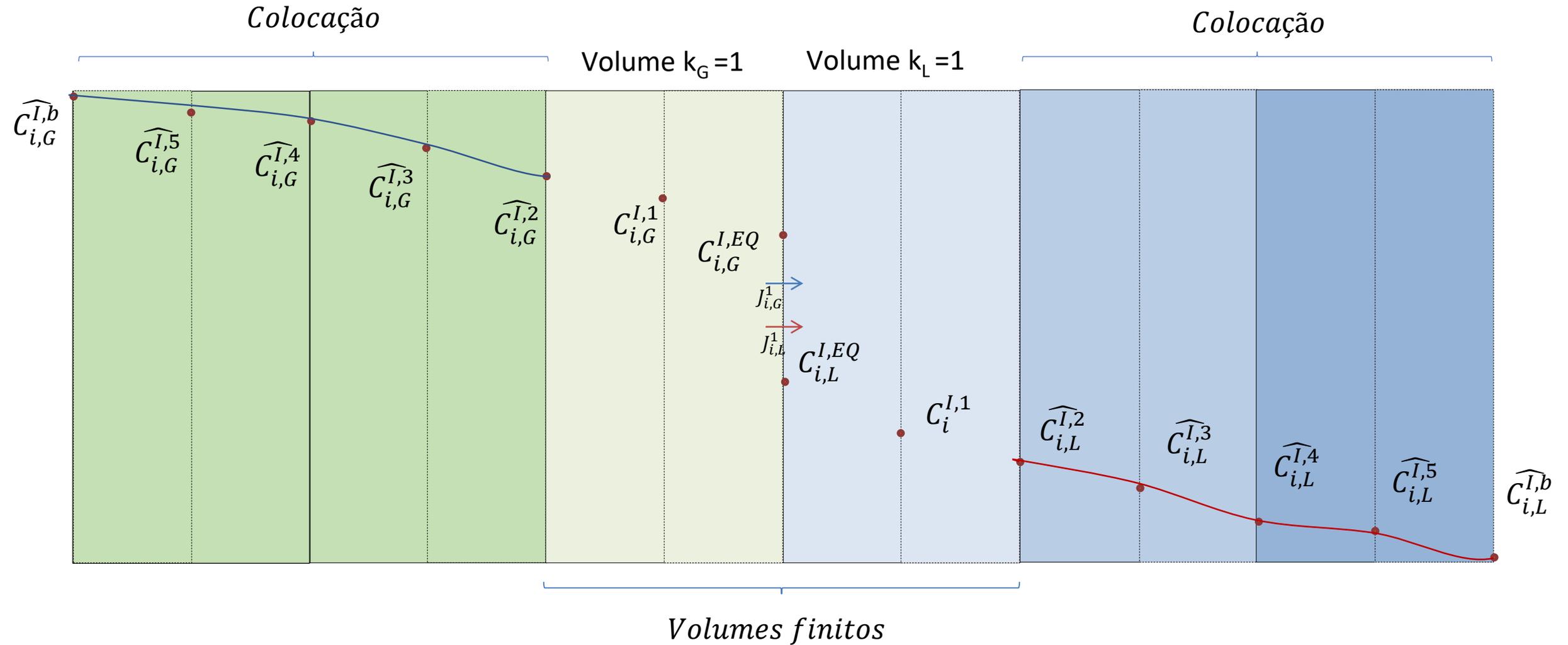
Para solução do sistema algébrico-diferencial:

- Dasslc
- Tolerância relativa: 10^{-8}

Para cálculo do estado estacionário

- Sundials
- Estimativa inicial: solução da integração do sistema dinâmico
- Tolerância relativa: 10^{-6}

Colocação polinomial modificada



Colocação polinomial modificada

Apenas a interface é modelada como um volume finito

Remove a região de alto gradiente, de difícil aproximação polinomial

Objetivo: cálculo direto do fluxo entre a interface baseado na integral das equações de conservação.

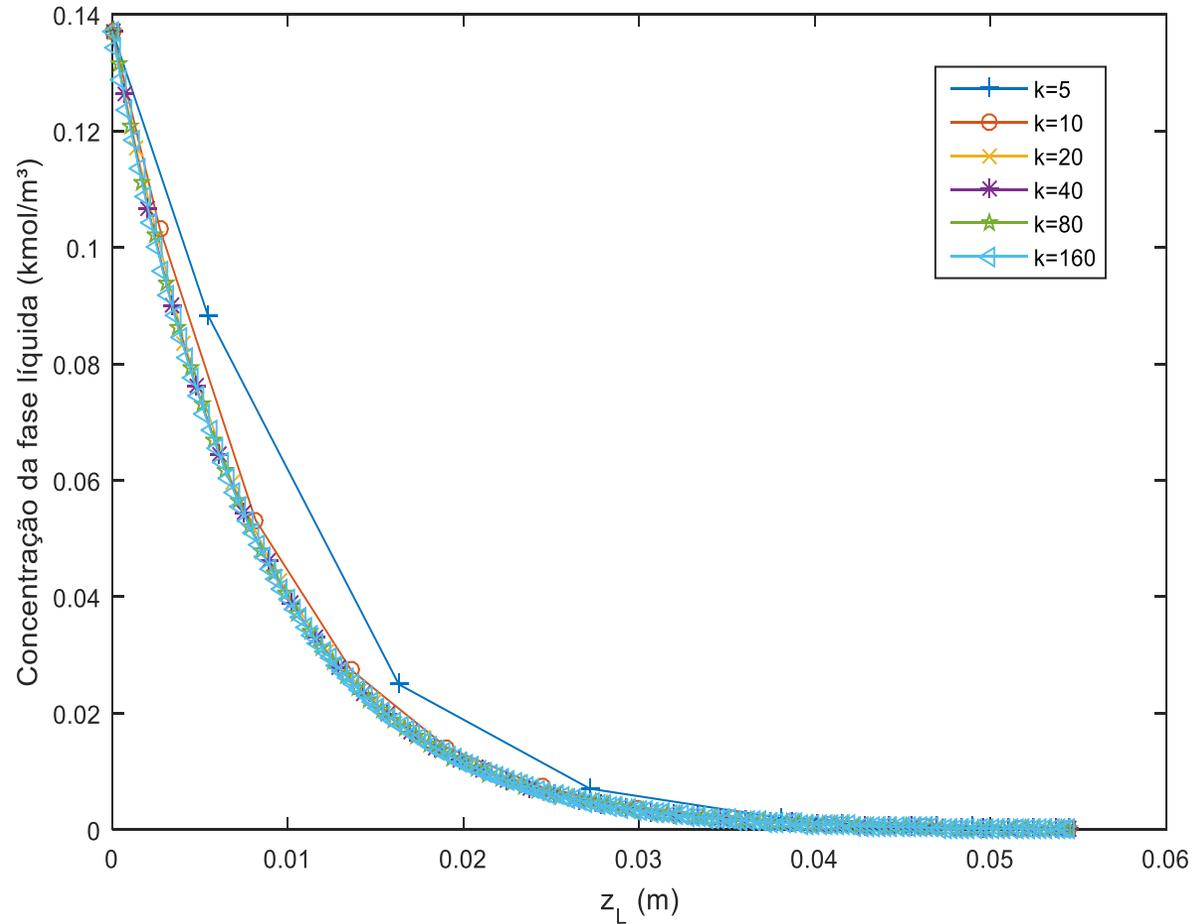
Redução do número de pontos fora da região da interface

Utilizado polinômio de Jacobi $\alpha=\beta=0$

Conteúdo

- Introdução
- Modelagem
- Métodos utilizados
- Resultados
- Conclusões

Ajuste da malha dos volumes finitos

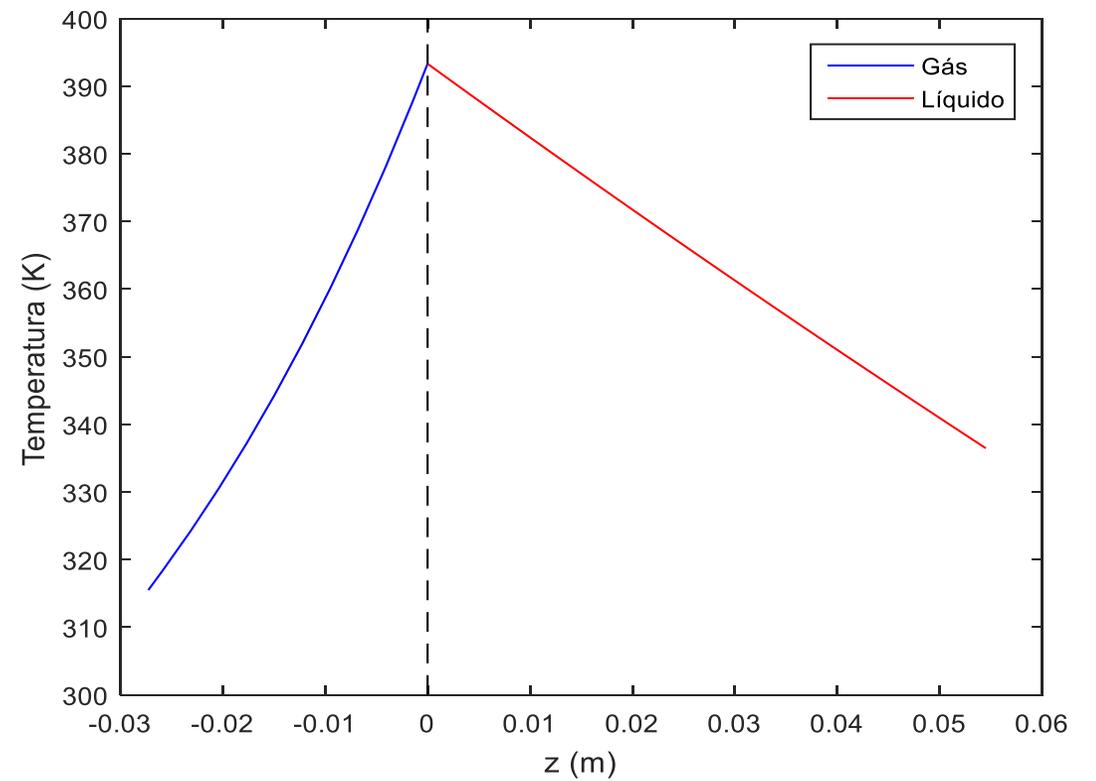
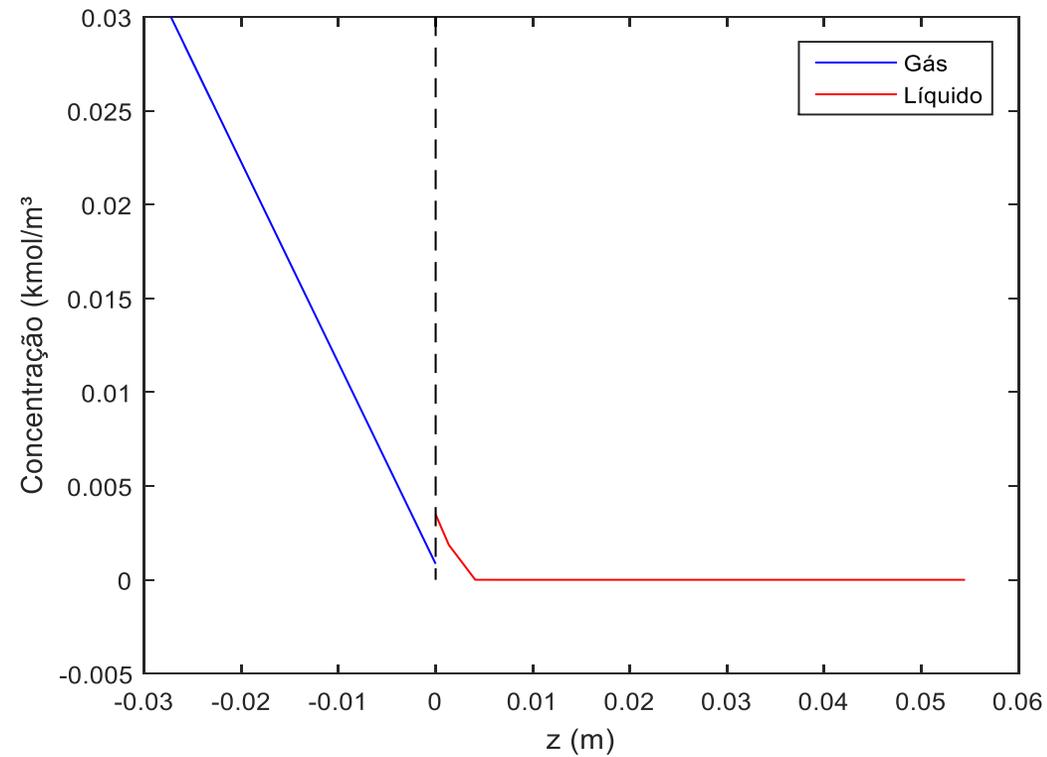


Aumento da malha do método dos volumes finitos na película líquida mostrando a convergência da solução

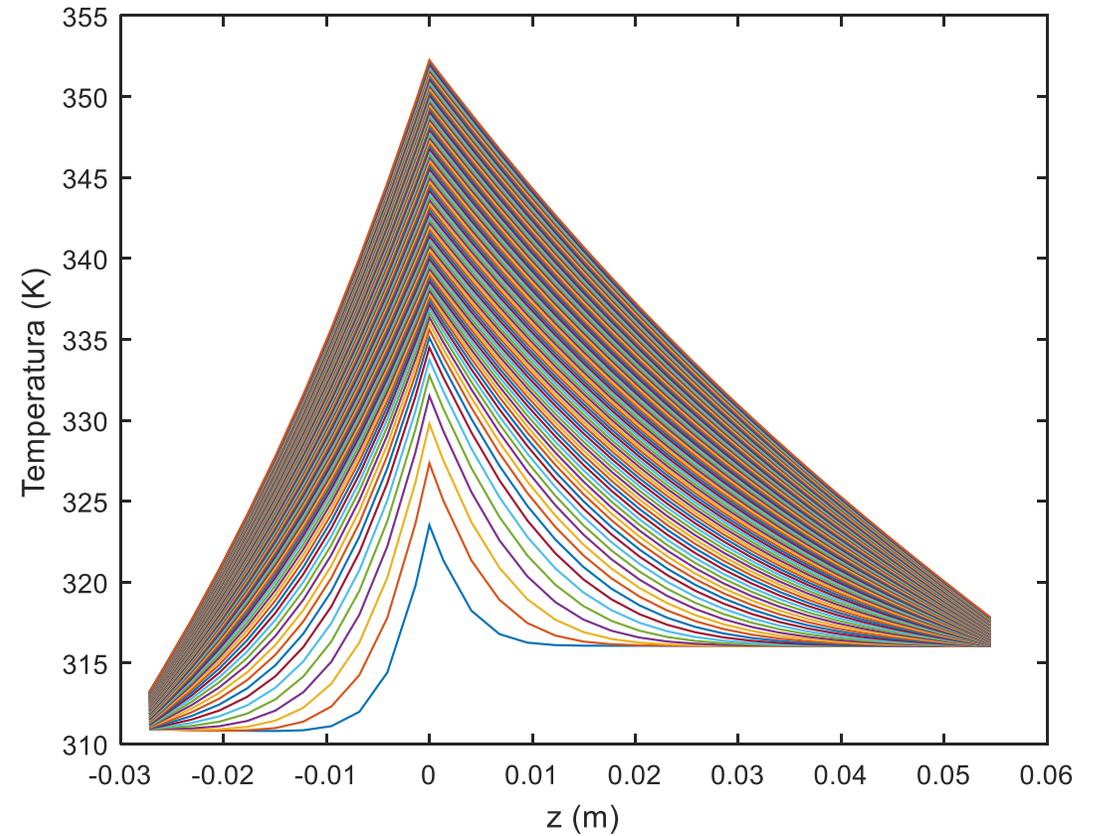
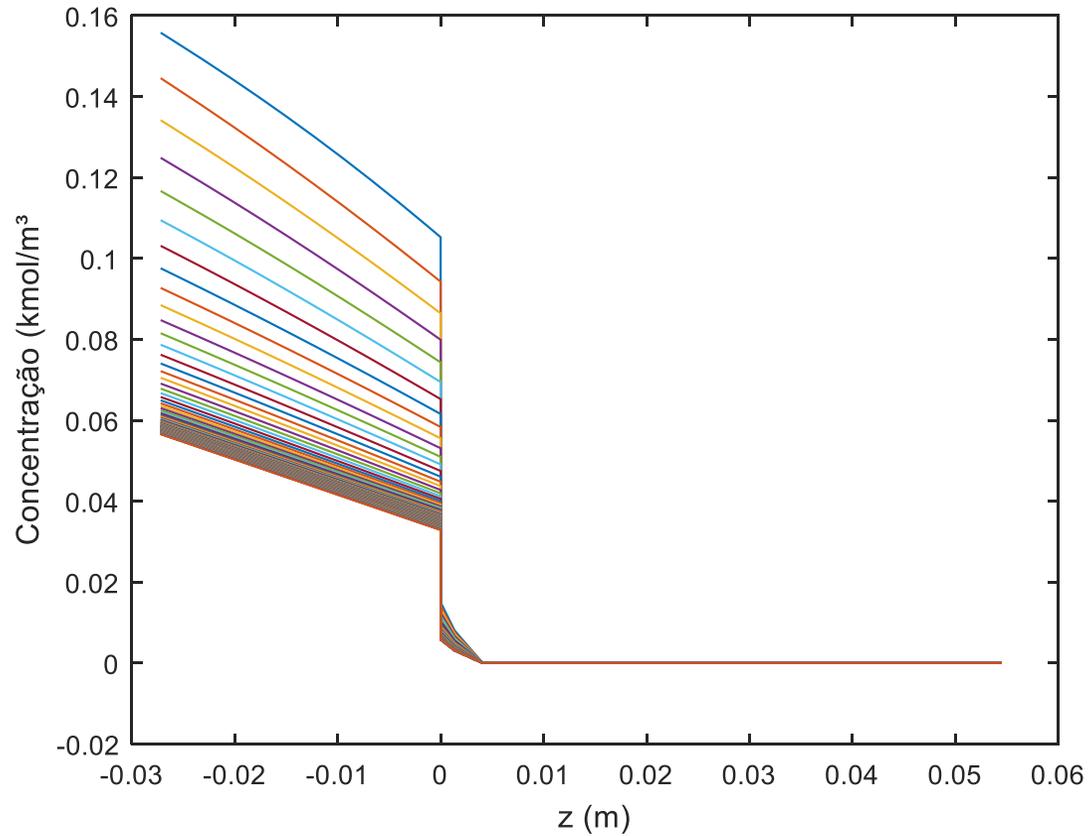
Interface líquida: 20 pontos

Interface gás: 10 pontos

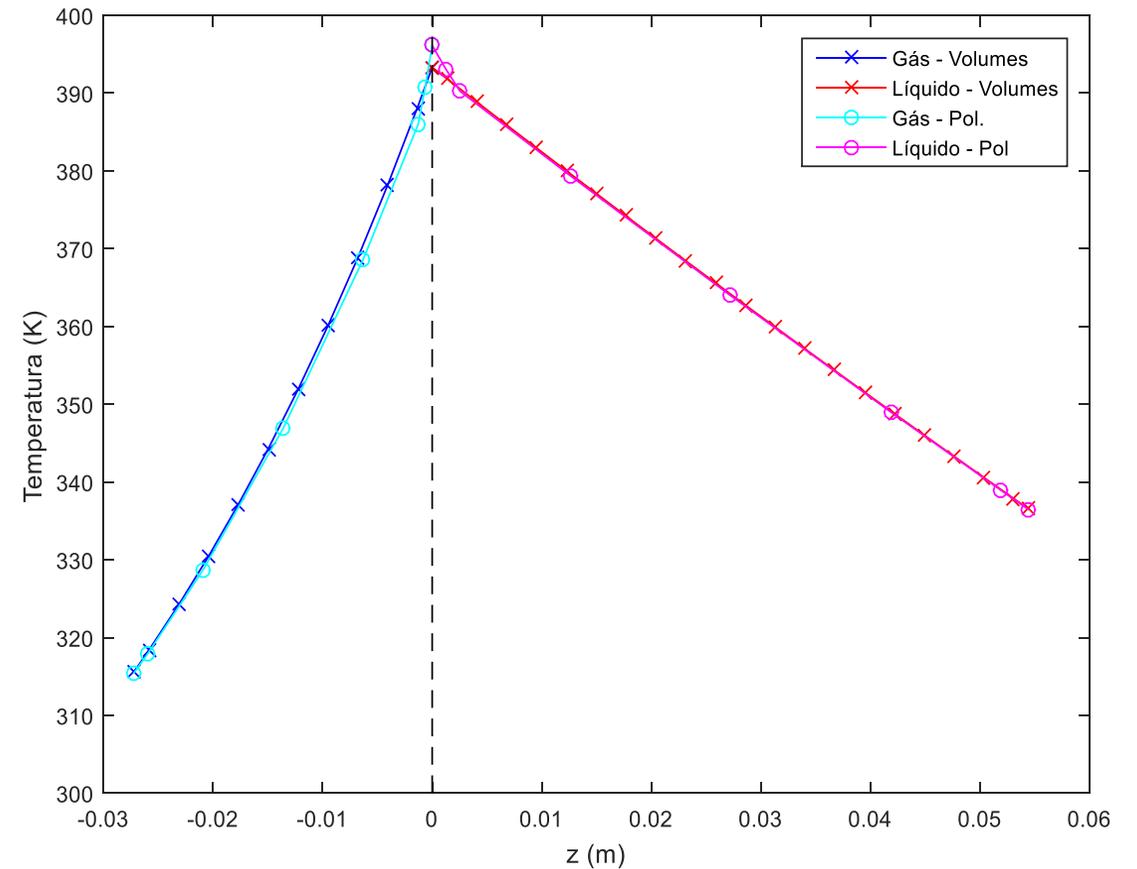
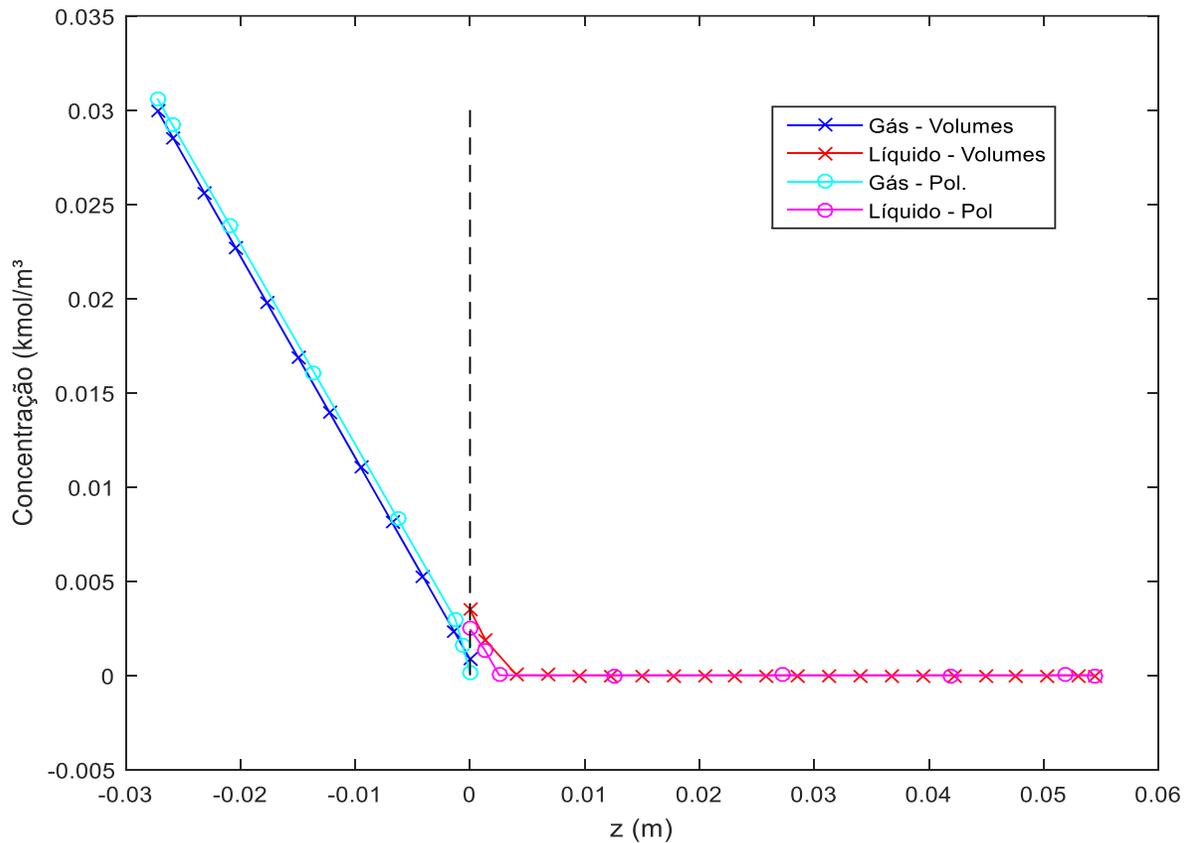
Perfis no estado estacionário – método dos volumes finitos



Perfis no transiente – método dos volumes finitos



Perfis no estado estacionário – comparação entre os métodos



Utilizado 5 pontos internos para colocação

Resultados principais

Resultado	Volumes finitos	Colocação polinomial
Teor de CO2 saída (%)	1,29	1,31
Temperatura do gás (K)	315,6	315,5
Vazão do gás (kmol/h)	1033,8	1034,1
Temperatura do líquido (K)	336,6	336,5
Número de variáveis	774	714
Tempo de solução - Estacionário	0,070 s	0,102 s
Tempo de solução - Dinâmico	0,909 s	2,382 s

Conteúdo

- Introdução
- Modelagem
- Métodos utilizados
- Resultados
- Conclusões

Conclusões

- Método dos volumes finitos é adequado para a resolução do problema de duplo filme
- A convergência do método é mais simples, devido à possibilidade de cálculo dos fluxos da interface de acordo com as equações de conservação
- Aproximação polinomial combinada com volumes finitos reduziu o número de variáveis, mas não aumentou a eficiência computacional
- Próximo passo: volumes finitos com malha exponencial

Obrigado!

carlos.hfbs@gmail.com