



DESENVOLVIMENTO DE MODELOS PARA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL INTEGRADO À SIMULAÇÃO DE PROCESSOS

SCHULTZ¹, E. S.; *PEZZINI¹, M. A.; SECCHI², A. R.

¹Aluno do DEQUI/UFRGS ²Professor do DEQUI/UFRGS
Departamento de Engenharia Química - Universidade Federal do Rio Grande do Sul
90040-040 – Porto Alegre – RS
e-mail: arge@enq.ufrgs.br

RESUMO - A simulação de processos e a simulação fluidodinâmica são importantes ferramentas para o desenvolvimento e otimização dos processos químicos; logo, neste trabalho desenvolveu-se uma interface de comunicação entre os simuladores PHOENICS[®] e EMSO[®], objetivando a utilização das informações de ambos para a simulação de processos químicos. Assim, foi realizada a simulação de um reator químico do tipo batelada, não-isotérmico, com transferência de calor através de uma camisa de troca térmica na área lateral do reator; calculando-se, pois, o perfil de velocidades e a variação da temperatura e concentração no reator com o decorrer da reação. Logo, a partir desta integração, obteve-se uma modelagem matemática robusta, que considera as interações entre o balanço de quantidade de movimento, a transferência de calor, a variação de composição do meio reacional e a estratégia de controle utilizada, sendo uma ferramenta de auxílio em decisões de projeto e operação de um reator químico.

Palavras Chaves: modelagem e simulação, integração, CFD.

INTRODUÇÃO

Os simuladores de processos aparecem hoje como uma ferramenta consolidada para o projeto de equipamentos e estudos de plantas industriais, sendo possível estudar operações de unidades individualmente, ou o processo inteiro, através da conexão das diversas unidades envolvidas (Bezzo, Macchietto, Pantelides, 2000). Porém, estes simuladores utilizam modelos para equipamentos em que se faz uso de simplificações para o modelo de escoamento, de forma a desconsiderar as variações espaciais das propriedades

envolvidas e a interferência destas no funcionamento e na eficiência da operação.

Com o avanço computacional, tornou-se possível processar algoritmos numéricos que resolvem as equações de balanço de quantidade de movimento tridimensional, simultaneamente com as equações dos balanços de massa e de energia, para diversas geometrias, tornando possível a obtenção dos perfis de velocidade, temperatura e concentração no interior dos equipamentos. Os softwares que realizam a solução numérica destes balanços são conhecidos como simuladores fluidodinâmicos e surgem como uma

poderosa ferramenta para dimensionamento de equipamentos.

Tendo em vista o conjunto de informações que estes softwares fornecem, pode-se considerar que formam um valioso instrumento de análise, proporcionando ao engenheiro dados, que até bem pouco tempo, não poderiam ser previstos; possibilitando que se façam correções em equipamentos e que se aperfeiçoe o processo industrial.

Visando a utilização customizada destas informações, o presente trabalho busca integrar esses dois tipos de simuladores, através de uma interface de comunicação que envie e receba informações de cada simulador. Assim utilizou-se o simulador de processos EMSO[®] e o software PHOENICS[®] de fluidodinâmica computacional para a simulação de um reator do tipo batelada para a reação de esterificação do metanol, utilizando uma camisa de troca térmica com controle de temperatura.

Por meio desta simulação, desenvolveu-se a interface de comunicação que gerencia a troca de informações entre os simuladores e torna a informação fornecida por cada simulador útil para o outro, buscando um aumento da fidelidade entre a simulação e o processo real.

ESCOPO E ARQUITETURA DA INTERFACE

A arquitetura da interface desenvolvida parte de duas considerações que se seguem.

1. Ambos simuladores, de processo e fluidodinâmico, simulam o mesmo volume de controle do reator, utilizando as mesmas dimensões e propriedades; porém com simplificações diferentes em cada um. Assim o modelo fluidodinâmico considera todas as variações espaciais do perfil de velocidades no interior do reator, mas desconsiderando variações espaciais de concentração e temperatura; por outro lado o simulador de processo desconsidera qualquer variação espacial, considerando,

apenas, a variação das principais variáveis envolvidas com o tempo.

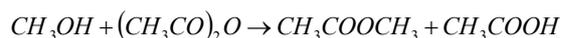
2. Os fenômenos descritos pelo modelo fluidodinâmico são considerados instantâneos quando comparados àqueles descritos pelo modelo do processo (balanços de massa e energia).

Devido à flexibilidade do simulador EMSO[®], desenvolvido na Universidade Federal do Rio Grande do Sul por Soares e Secchi (2003), todas as equações de projeto e modelagem do reator foram desenvolvidas neste software, o qual possui uma interface de acesso a *dynamic-link libraries* (DLL), onde foi implementada a interface de comunicação desenvolvida neste trabalho. Além disso, há um pacote termodinâmico (VRTherm[®]) integrado ao simulador que permite a avaliação das propriedades físico-químicas do sistema ao longo da simulação.

O software PHOENICS[®], utilizado em paralelo, possui uma interface gráfica amigável, tornando-se um instrumento de fácil utilização para simulações de pouca complexidade. Além disso, sua arquitetura interna de execução do programa é constituída de módulos, os quais são chamados via arquivos com extensão *bat*, o que permite que sejam executadas partes do software via comandos internos de outros programas. Outra característica é que o armazenamento de dados da simulação é realizado via arquivos de textos, com formatação pré-definida; logo, torna-se possível configurar e executar o pacote fluidodinâmico de forma automatizada via outro software, e que é aplicado para a integração dos simuladores.

APLICAÇÃO DA INTERFACE

Para o estudo da combinação dos softwares EMSO[®]/PHOENICS[®], foi realizada a modelagem e simulação de uma reação de esterificação do metanol utilizando anidrido acético, por meio da seguinte equação química:



que pode ser considerada uma reação elementar, fornecendo uma equação de taxa de reação de segunda ordem (Bohm, Hessel, Kryk, Prasser, Schmitt) como:

$$-r_{Metanol} = kr \cdot C_{Metanol} \cdot C_{AnidridoAcético} \quad (1)$$

A reação foi realizada em um reator do tipo batelada, com fração molar inicial de 50% em reagentes e 50% em solvente.

O reator utilizado foi modelado de forma a possuir um controle de temperatura externo, por meio de uma jaqueta de troca térmica, seguindo um programa de temperatura de acordo com a fração molar de metanol, de forma a diminuir o tempo da batelada e executar o resfriamento após ser atingida a conversão desejada.

Assim utilizou-se a seguinte estratégia de controle:

1. temperatura inicial da mistura reacional de 310K;
2. aquecimento inicial do reator até alcançar uma temperatura de 365K;
3. temperatura constante até ser atingida uma fração molar de metanol de 0,15;
4. aquecimento do reator até alcançar uma temperatura de 390K;
5. temperatura constante até ser atingida uma fração molar de metanol de 0,05 e
6. resfriamento do reator à temperatura de 310K.

Foi especificado como agitador para a mistura reacional do reator batelada, um propulsor de três pás do tipo A310 (Wu, Graham, Nguyen, Mehidi, 2006), conforme pode ser visto na Figura 1, onde o fluxo volumétrico produzido pode ser calculado em função da rotação de acordo com:

$$Q = K \cdot N \cdot D^3 \quad (2)$$

possibilitando a especificação da rotação através de condição de fluxo de quantidade de movimento na simulação fluidodinâmica.

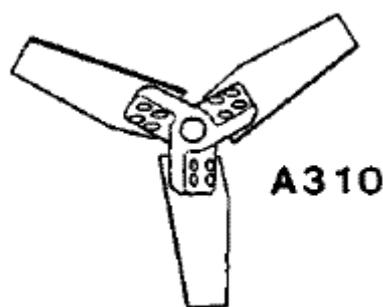


Figura 1- Impelidor A310.

Desenvolvendo as equações de balanço molar para o metanol e balanço de energia, obtêm-se:

$$\frac{dC_{CH_3OH}}{dt} = r_{CH_3OH} \quad (3)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-U \cdot A_t \cdot (T - T_w)}{\rho \cdot V \cdot Cp} + \frac{(-\Delta H_r) \cdot (-r_{CH_3OH})}{\rho \cdot Cp} \quad (4)$$

, que relacionam a variação da concentração e da temperatura com o tempo de reação.

Também foi desenvolvido o modelo tridimensional do reator, para o cálculo fluidodinâmico, como pode ser visto na Figura 2, onde se utilizou uma malha refinada devido à alta turbulência envolvida e foi considerada a simetria angular do sistema.

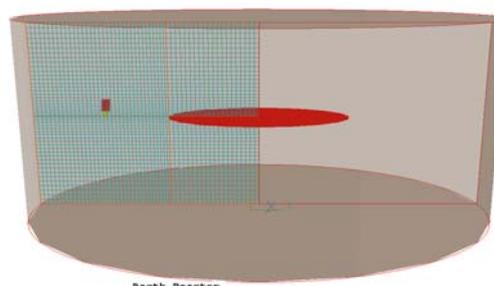


Figura 2: Modelo tridimensional do reator.

Os modelos obtidos foram resolvidos utilizando os dois simuladores,

sendo cada um responsável por parte das equações. A integração de ambos foi realizada por meio do coeficiente de transferência de calor, o qual foi obtido por meio da correlação:

$$Nu = 0.31 \cdot Re^{(2/3)} \cdot Pr^{(1/3)} \cdot \mu_r^{0.14} \cdot Gc \quad (5)$$

com base na velocidade do fluido e nas suas propriedades físicas.

Logo, a divisão das soluções foi arquitetada da seguinte forma:

1. EMSO
 - a. Balanço de energia
 - b. Balanço de massa
 - c. Modelo de controle
 - d. Estimativa das propriedades físicas do meio reacional
2. PHOENICS
 - a. Balanço de quantidade de movimento
3. INTERFACE
 - a. Cálculo do coeficiente de transferência de calor

A Figura 3 mostra de forma esquematizada o diagrama de blocos da integração dos simuladores, onde pode ser visto os parâmetros enviados e resolvidos por cada um e sua participação na simulação.

Também é possível ver por meio da Figura 4 o fluxograma do processo, assim como a instrumentação necessária para o controle da temperatura em função da fração molar de metanol e os equipamentos utilizados no processo de esterificação durante o estágio de reação química. Contudo a modelagem foi realizada com base no reator químico, desconsiderando os modelos para o trocador de calor e para o bombeamento, assim como quaisquer perdas energéticas devido ao sistema de refrigeração e aquecimento do reator. Logo, foi considerado um modelo de controle ideal através da temperatura do fluido na camisa, desconsiderando a resistência à condução de calor da parede do reator e a resistência à convecção externa da camisa.

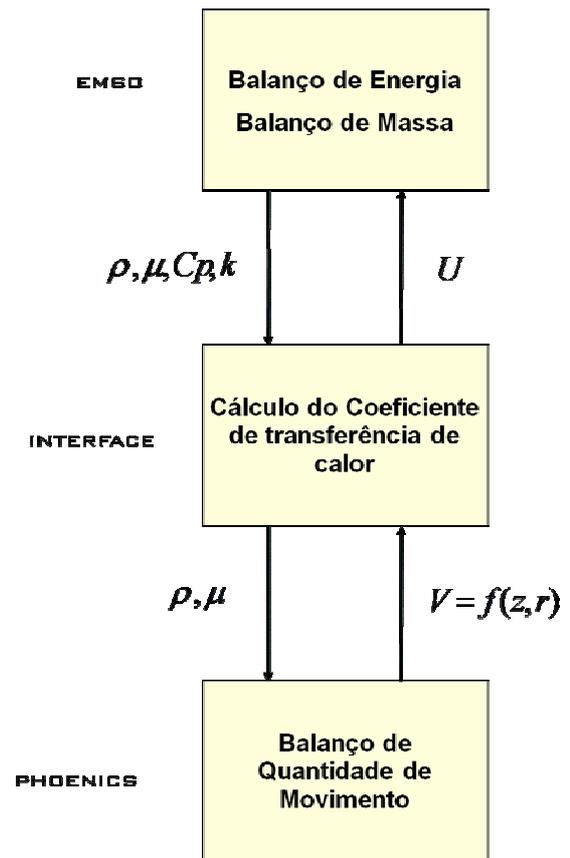


Figura 3: Diagrama de blocos da integração entre os simuladores via interface de comunicação.

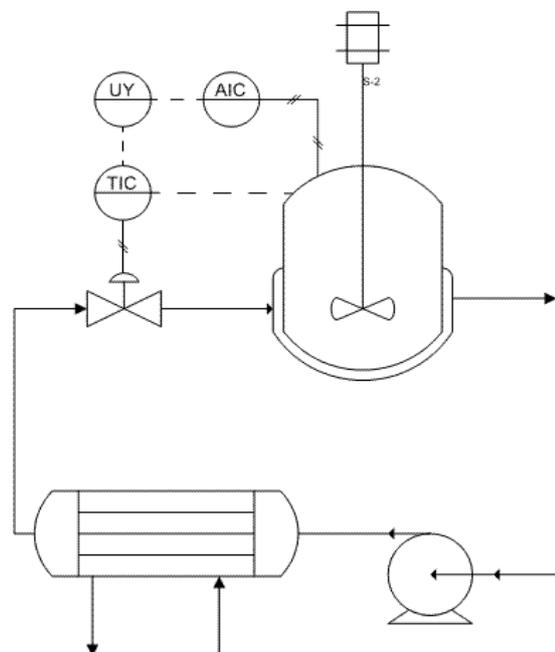


Figura 4: Fluxograma do processo.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Analisando a evolução da temperatura no interior do reator conforme a Figura 5, é possível verificar a eficiência do controle de temperatura devido aos patamares alcançados a cada mudança de *setpoint* do controlador.

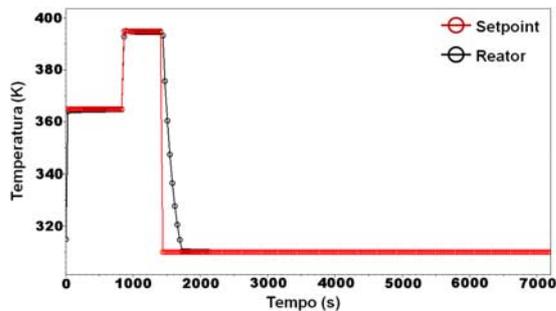


Figura 5: Variação da temperatura(K) e setpoint(K) no reator em função do tempo(s).

Outro resultado obtido foi a variação da concentração de metanol, expresso em na forma de fração molar, ao longo do tempo conforme a Figura 6. É possível verificar um aumento da taxa de reação no momento do aumento da temperatura, compensando a baixa concentração de reagente no reator devido ao processo estar sendo conduzido em batelada com consumo dos reagentes sem a reposição dos mesmos.

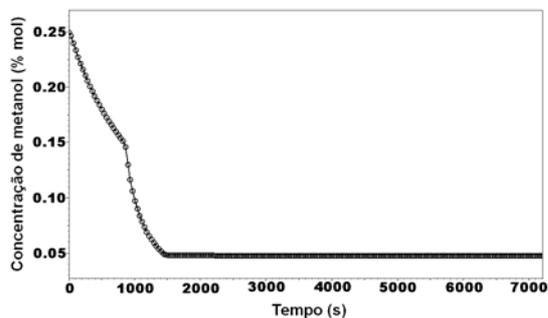


Figura 6: Variação da concentração de metanol (% mol) em função do tempo (s).

Analisando o perfil de velocidades no reator, de acordo com a Figura 7, pode-se observar que os resultados obtidos com a solução fluidodinâmica foram coerentes

com o perfil esperado para o propulsor utilizado, como os resultados de Ludwig (1999), apresentado na Figura 8 e Paul, Atiemo-Obeng, Kresta (2004).

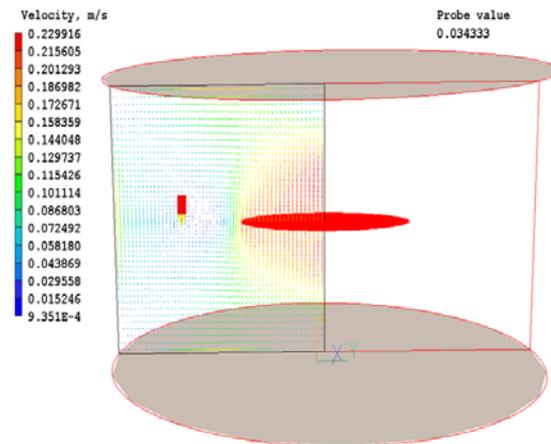


Figura 7: Perfil de velocidade no reator.

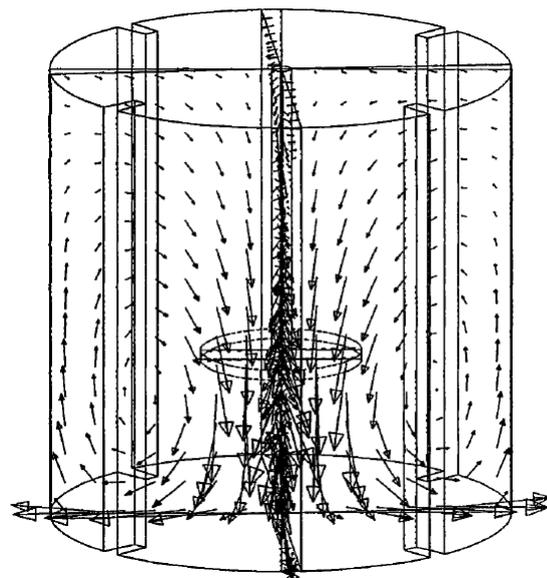


Figura 8: Perfil de velocidade para tanque agitado com propulsor A310

CONCLUSÕES

A utilização do simulador de processos e do simulador fluidodinâmico simultaneamente, mostrou-se como uma ferramenta eficaz para a modelagem e simulação de equipamentos, fornecendo informações adicionais sobre o funcionamento interno destes.

Assim, com o desenvolvimento desta interface de comunicação, disponibiliza-se a utilização do perfil de escoamento no projeto de reatores do tipo batelada, sendo possível ampliar a sua utilização para outros tipos de reatores e outros equipamentos, alcançando-se resultados mais precisos com a utilização do simulador de processos e CFD de forma simplificada.

NOMENCLATURA

ΔH_r = entalpia de reação, kJ/mol
 ρ = massa específica, kg/m³
 μ = viscosidade, poise
 μ_r = viscosidade em relação à água à 60° F, adimensional
 A_t = área de troca térmica, m²
 C_i = concentração molar, kmol/m³
 C_p = calor específico, kJ/kg.K
 D = diâmetro do propulsor, m
 G_c = fator de forma para o impelidor, adimensional
 k = condutividade térmica da mistura reacional, W/m.K
 K = constante de fluxo do propulsor, adimensional
 k_r = constante cinética da reação química, m³/h.kmol
 N = rotação do propulsor, Hz
 Nu = número de Nusselt, adimensional
 r = posição radial, m
 Re = número de Reynolds, adimensional
 r_i = taxa de reação para o componente i, kmol/m³.s
 Pr = número de Prandtl, adimensional
 t = tempo, s
 T = temperatura, K
 T_w = temperatura da parede, K

U = coeficiente de transferência de calor, kW/m².K

V = velocidade, m/s

z = posição axial, m

REFERÊNCIAS

- Soares, R. P., Secchi, A. R. (2003). EMSO: A New Environment for Modelling, Simulation and Optimisation, ESCAPE-13.
- Ludwig, E. E. (1999), *Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants*, (1).
- Paul, E. L., Atiemo-Obeng, V. A., Kresta, S.M. (2004), *Handbook of Industrial Mixing*. Wiley-Interscience, Hoboken, New Jersey, 1443p.
- Bezzo, F., Macchietto, S., Pantelides, C. C. (2000), "A general framework for the integration of computational fluid dynamics and process simulation". *Computers and Chemical Engineering*, 24, 653-658.
- Wu, J., Graham, L. J., Nguyen, B., Mehidi, M. N. N. (2006), "Energy efficiency study on axial flow impellers". *Chemical Engineering and Processing*, 45, 625-632.
- Bohm, S., Hessel, G., Kryk, H., Prasser, H., Schmitt, W., Auto-catalytic effect of acetic acid on the kinetics of the methanol/acetic anhydride esterification.
- PHOENICS 6.04 (2006), *Polis - Manual do software de fluidodinâmica computacional Phoenix*.
- EMSO 0.9.52 (2006), *Manual de EML (Emso Model Library)*.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CNPQ e a CHEMTECH.