

ESTUDO DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA DE UM PRATO PERFURADO INDUSTRIAL NA DESTILAÇÃO DO ETANOL ATRAVÉS DE CFD

G. C. OLIVEIRA¹, G. H. JUSTI¹, G. C. LOPES¹ e J. A. S. GONÇALVES¹

¹ Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Engenharia Química
E-mail para contato: gabrielhjusti@yahoo.com.br

RESUMO – A destilação é uma das mais importantes técnicas de separação de componentes empregada a nível industrial nos mais diversos processos. Estudos empíricos em colunas de destilação são raros, em parte devido às grandes dimensões destes aparelhos e o seu alto investimento. Neste estudo, foi proposta a simulação computacional de pratos perfurados de destilação usando ferramentas de CFD, tendo como principal objetivo conceber um modelo capaz de prever a hidrodinâmica do prato e a transferência do componente mais volátil entre o líquido e o vapor. Para isso, foram usados modelos 3D, transientes e multifásicos com abordagem Euler-Euler. Os principais resultados mostram a fração mássica e eficiência do estágio, os quais apresentaram concordância quando comparados com a literatura, obtendo-se uma eficiência de estágio de 65%. CFD demonstrou ser uma ferramenta valiosa para estudar o fluxo em internos de torres de destilação.

1. INTRODUÇÃO

A destilação é uma das mais antigas operações unitárias de separação física de uma mistura. Além de ser bastante empregada na produção de etanol, esta técnica também é muito utilizada na indústria de processos químicos, abrangendo cerca de 90 a 95% das separações (Wankat, 2007). A principal forma de avaliar a qualidade de um processo de destilação dá-se através da capacidade de extrair o componente mais volátil da fase rica. (Kister, 1992).

Com isso, muitos autores utilizaram as técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD) para verificar a transferência de massa em pratos perfurados de coluna de destilação. Neste contexto, pode-se citar os principais trabalhos como de Rahimiet *al.* (2006), Noriler *et al.* (2010) e Rahimi *et al.* (2012), os quais predisseram a eficiência de separação no estágio de destilação e os campos de fração mássica dos componentes distribuídos ao longo do prato perfurado.

2. MODELAGEM MATEMÁTICA

Neste estudo, um modelo de CFD multifásico e multicomponente foi utilizado para descrever a hidrodinâmica e a transferência das espécies químicas entre as fases para um sistema etanol-água a 1 atm utilizando uma abordagem Euleriano-Euleriano. As equações que descrevem o fenômeno são

apresentadas abaixo, onde os subscritos α e β representam as fases líquida e vapor:

2.1. Equação da Continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha}) + \nabla \cdot (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) = \mathbf{S}_{MS,\alpha} + \sum_{\beta=1}^{N_f} \Gamma_{\alpha\beta} \quad (1)$$

onde f , ρ e \mathbf{v} representam a fração volumétrica, massa específica e o vetor velocidade para a fase α , respectivamente. \mathbf{S}_{MS} representa o termo de fonte de massa, como não há reações ou outras formas de criação de massa para este escoamento, este termo é nulo. O termo Γ representa a taxa de transferência de massa entre as fases por unidade de volume.

2.2. Equação da Quantidade de Movimento

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) + \nabla \cdot [f_{\alpha} (\rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \otimes \mathbf{v}_{\alpha})] \\ = -f_{\alpha} \nabla p_{\alpha} + \nabla \cdot (f_{\alpha} \mathbf{T}_{\alpha}^{\text{eff}}) + \sum_{\beta=1}^{N_f} (\Gamma_{\alpha\beta}^+ \mathbf{v}_{\beta} - \Gamma_{\beta\alpha}^+ \mathbf{v}_{\alpha}) + \mathbf{S}_{M,\alpha} + \mathbf{M}_{\alpha} \end{aligned} \quad (2)$$

onde p representa a pressão, na qual todas as fases compartilham o mesmo campo de pressão, isto é, $p_{\alpha} = p_{\beta} = p$. \mathbf{T}^{eff} representa o tensor efetivo e $(\Gamma_{\alpha\beta}^+ \mathbf{v}_{\beta} - \Gamma_{\beta\alpha}^+ \mathbf{v}_{\alpha})$ representa a transferência de momento entre as fases devido à transferência de massa entre elas. O termo \mathbf{S}_M representa a fonte de *Momentum*, em virtude das forças externas do corpo e/ou fontes definidas e o termo \mathbf{M}_{α} descreve as forças interfaciais atuando nas fases devido à presença de outra fase.

2.3. Equação das Espécies Químicas

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_{\alpha} \rho_{\alpha} y_{A,\alpha}) + \nabla \cdot \{f_{\alpha} [\rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} y_{A,\alpha} - \rho_{\alpha} D_{A,\alpha} (\nabla y_{A,\alpha})]\} \\ = \mathbf{S}_{A,\alpha} + \sum_{\alpha \neq \beta}^{N_f} \mathbf{Y}_{A,\alpha\beta} + \sum_{\alpha \neq \beta}^{N_f} (\Gamma_{\alpha\beta}^+ y_{A,\beta} - \Gamma_{\beta\alpha}^+ y_{A,\alpha}) \end{aligned} \quad (3)$$

onde $y_{A,\alpha}$ e $D_{A,\alpha}$ representam a fração mássica e a difusividade do componente A na fase α , respectivamente. Os termos $\mathbf{Y}_{A,\alpha\beta}$ e $(\Gamma_{\alpha\beta}^+ y_{A,\beta} - \Gamma_{\beta\alpha}^+ y_{A,\alpha})$ representam a transferência das espécies químicas entre as fases, o primeiro devido à diferença de potencial químico e o segundo devido à quantidade líquida de massa total transferida de uma fase para a outra.

2.4. Equações de Restrição

As frações mássicas dos componentes e as frações volumétricas das fases podem ser relacionadas através de uma restrição de soma, na qual a somatória das frações deve ser igual 1.

2.5. Hipóteses do modelo

As seguintes hipóteses foram consideradas para a modelagem do prato perfurado: um sistema de duas fases; a fase gasosa é a fase dispersa; a mistura binária etanol-água foi utilizada; a taxa líquida de transferência de massa entre as fases é tão pequena que pode ser desprezada. Neste caso, o termo do lado direito da Equação 1 desaparece e os termos associados a ele nas Equações 2 e 3 são nulos; e para a fase dispersa não foi utilizado nenhum modelo de turbulência.

2.6. Equações de Fechamento

Transferência de quantidade de movimento na interface: Em escoamento líquido-vapor em pratos perfurados de destilação, a força de arraste destaca-se por possuir maior importância nos fenômenos de transferência de momento na interface. Portanto, para modelar o coeficiente de arraste, foi utilizado a correlação de Krishna *et al.* (1999), na qual torna-se o termo de transferência de quantidade de movimento na interface independente do diâmetro de bolha.

Transferência das espécies químicas na interface: O modelo de duas resistências foi utilizado para determinar o $Y_{A,\alpha\beta}$, conforme apresentado pela Equação 5.

$$Y_{A,\alpha\beta} = -Y_{A,\beta\alpha} = k_{\alpha\beta}^C A_{\alpha\beta} (K^C \rho_{A,\alpha} - \rho_{A,\beta}) \quad e \quad \frac{1}{k_{\alpha\beta}^C} = \frac{1}{k_{\alpha}^C} + \frac{K^C}{k_{\beta}^C} \quad (5)$$

onde K^C é a constante de equilíbrio termodinâmico e k_{α}^C e k_{β}^C representam os coeficientes de transferência de massa.

A teoria de penetração de Higbie (1953) foi utilizada para calcular os coeficientes de transferência de massa e a constante de equilíbrio termodinâmico pode ser obtida da literatura.

Modelo de turbulência: O modelo *Shear Stress Transport* (SST) foi utilizado para a fase contínua, pois trata-se de um modelo que engloba o modelo $k-\varepsilon$ padrão e o modelo $k-\omega$. Sua vantagem é a flexibilidade e o tratamento dado próximo às paredes, além de apresentar melhor convergência.

3. METODOLOGIA

3.1. Domínio Computacional e Malha Numérica

O domínio computacional desenvolvido foi um prato perfurado de coluna de

destilação utilizando o *software* DesignModeler (ANSYS 14.5), suas características geométricas foram baseadas no trabalho de Solari e Bell (1986). O prato perfurado possui um diâmetro de 1,213 [m] e espaçamento de 0,61 [m], vertedor com altura de 0,05 [m] e a entrada de líquido com altura de 0,038 [m]. O diâmetro dos orifícios é de 0,0127 [m] e foram distribuídos de forma triangular com 0,05 [m] de distância entre eles, totalizando 348 orifícios.

Na construção da malha foi utilizado o *software* Meshing (ANSYS 14.5) e foi realizado teste de sensibilidade da solução da malha, visando garantir independência dos resultados em relação ao seu refinamento. Trata-se de uma malha mista/híbrida, ou seja, com tetraédros (região dos orifícios) e hexaédros. O refino da malha deu-se na região de borbulhamento e foram realizados 4 tipos de refino, variando de 600.000 à 1.800.000 elementos. Para avaliar a sensibilidade da malha foi escolhido o parâmetro hidráulico altura de líquido claro. A partir de 1.200.000 elementos, a variação da altura de líquido claro é pequena, na ordem 0,05 mm, sugerindo que maior refinamento não se faz necessário. A Figura 1 ilustra o domínio computacional e a malha numérica utilizada.

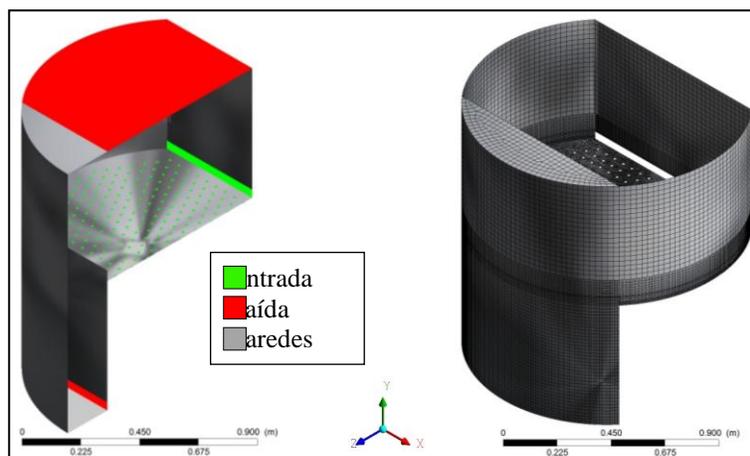


Figura 1 – Prato perfurado de destilação: condições de contorno (esq.) e malha (dir.).

Com base nesta análise, a malha com 1.200.000 elementos foi empregada para obter os resultados.

3.2. Condições de Inicialização e de Contorno

As condições de contorno e iniciais são fundamentais para o fechamento do modelo e permitir a resolução das equações numéricas envolvidas nas simulações. A Figura 1 ilustra as regiões de contorno do prato perfurado.

Inicialização do domínio: A condição inicial aplicada na simulação consistiu em velocidades nulas, ou seja, com o domínio vazio, permitindo a observação do fenômeno de enchimento do prato.

Entrada de vapor: Considerou-se que a vazão mássica de vapor que entra no prato pelos orifícios é a mesma em cada orifício. Sendo assim, a velocidade de vapor fluindo através dos

furos ($v_{y,V}^{in}$) para a região “*Entrada de Vapor*” foi calculada conforme a Equação 6:

$$v_{y,V}^{in} = \frac{U_s A_B}{N_H A_{H,i}} \quad (6)$$

onde U_s , A_B , N_H e $A_{H,i}$ representam a velocidade superficial do gás, área de borbulhamento, número total de orifícios e área de um orifício, respectivamente. Considerou-se que apenas vapor entra por esta região, pois a quantidade arrastada de líquido pelo vapor é desprezível. Adicionalmente, para o sistema binário etanol-água, especificou-se a fração mássica de etanol na entrada sendo igual a 0,812.

Entrada de líquido: Adotou-se um perfil de velocidade uniforme para o líquido ($v_{z,L}^{in}$) para a região “*Entrada de Líquido*” do prato, conforme a Equação 7:

$$v_{z,L}^{in} = \frac{Q_L}{A_L^{in}} \quad (7)$$

onde Q_L e A_L^{in} representam a vazão volumétrica de líquido e área de entrada de líquido no prato, respectivamente. Considerou-se que apenas líquido entra no domínio por esta região, pois a quantidade arrastada de vapor é desprezível. Adicionalmente para o binário etanol-água, especificou-se a fração mássica de etanol na entrada sendo igual a 0,785.

Saída de gás: Adotou-se uma condição de pressão e especificou-se uma pressão absoluta de 1 atm ($p_{relativa} = 0$ atm) para a região “*Saída de Vapor*” do prato.

Saída de líquido: Adotou-se também uma condição de pressão para a região “*Saída de Líquido*” do prato. A ideia foi adicionar uma resistência na saída de líquido que existe em função do prato consequente, o qual não consta no modelo proposto e foi projetada para representar a coluna de líquido que forma na região do *downcomer* do prato com uma altura aproximadamente de 20 cm.

Paredes: A condição de não deslizamento para a região “*Paredes*” para as duas fases.

A análise de CFD foi realizada no *software* CFX-Pre 14.5. A condição operacional utilizada para o líquido e vapor na simulação foi $Q_L = 6,94 \times 10^{-3} [m^3 s^{-1}]$ e $F_s = 1,015 [m s^{-1} (kg m^{-3})^{1/2}]$, respectivamente. O fator F_s é função da velocidade superficial do vapor e da massa específica do vapor, portanto é definida como $F_s = U_s \sqrt{\rho_v}$. A simulação foi realizada em um AMD Opteron^(TM) 2,26 GHz (25x2,26 GHz), em paralelo, para simular 40 segundos do escoamento do prato perfurado.

4. RESULTADOS

4.1. Campos e Perfis de Frações Mássicas

Visando conhecer a distribuição da concentração de etanol no líquido por todo o prato e ao longo do tempo simulado, a Figura 2 ilustra a distribuição de concentrações para instantes de tempo definidos.

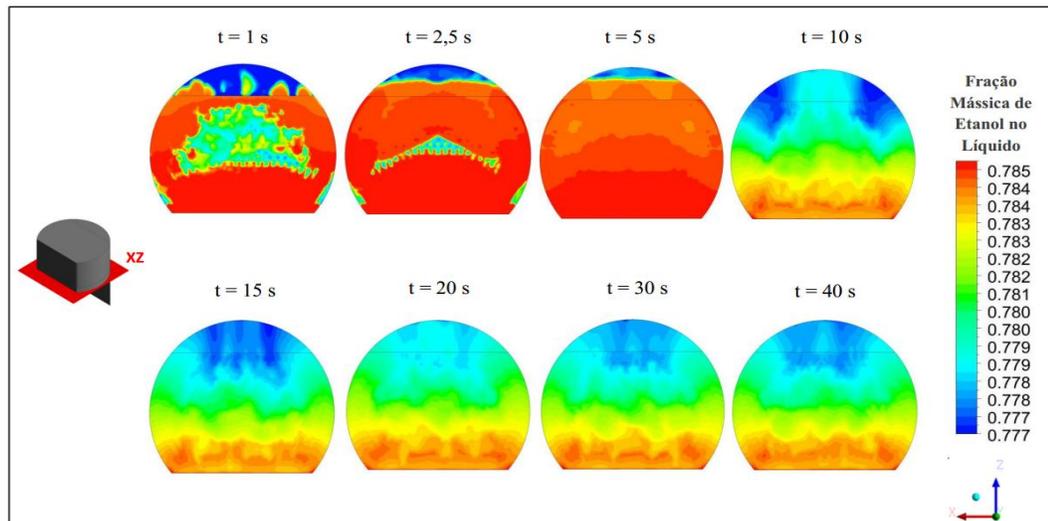


Figura 2 – Distribuição dos campos de fração mássica de etanol no líquido ao longo do tempo em um plano ZX ($y = 0,038$ m).

Nos primeiros instantes, o perfil ainda não está definido, pois o prato está no seu período puramente transiente. Decorridos cerca de 10 s, um visível perfil começa a ser moldado, evidenciando regiões com concentrações distintas. O líquido entra no prato com fração mássica alta (regiões em vermelho) e se “empobrece” em virtude da troca de espécies entre fases. Tem-se que a diminuição do componente na fase líquida dá-se de forma gradual ao longo do prato, uma vez que o processo de transferência é função do tempo de contato, área efetiva de contato e gradiente de concentração. Estima-se uma redução mais expressiva na região central do prato, enquanto as regiões periféricas demonstram uma troca levemente mais lenta. Acredita-se que as trocas na região periférica do prato sejam influenciadas pela existência dos efeitos de recirculação, estagnação, baixa mistura ou o próprio efeito de parede.

A Figura 3 apresenta a variação temporal da fração mássica média de etanol para as fases líquida e vapor, avaliadas nas saídas do domínio computacional. Observando-se o comportamento da fração mássica de etanol em ambas as fases, nota-se variações diferentes ao longo do tempo. A fase gasosa (entra no prato com 0,812) varia quase que linearmente crescente até atingir um patamar oscilatório depois de decorridos aproximadamente 10s. Após este tempo, a variável oscila em torno de um valor médio de 0,861 ilustrando o regime chamado de quase estacionário. Através de uma média representativa da fração mássica de etanol, estima-se o enriquecimento da fase gasosa em aproximadamente 6 %. Em relação à fase líquida, a variação da fração mássica de etanol é mais abrupta nos primeiros 6s de escoamento real, passando de 0,712 para 0,777. Este comportamento deve-se ao fato de o monitoramento ter sido iniciado com o prato vazio. De qualquer forma, após o estabelecimento do fluxo no prato, a fração de etanol no líquido permanece quase que inalterada em

aproximadamente 0,778. Ou seja, o líquido estabiliza-se com um valor pouco menor ao de entrada (redução de aproximadamente 1%), indicando a perda do componente mais volátil para a fase gasosa.

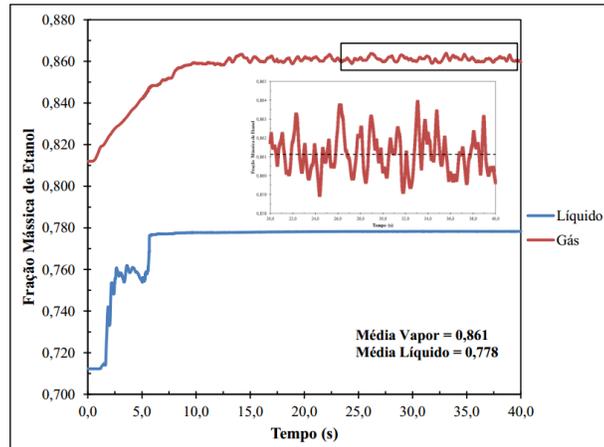


Figura 3–Variação da fração mássica de etanol para as fases líquida e vapor ao longo do tempo.

Como análise da eficiência de separação no estágio simulado, a Figura 4 apresenta o comportamento médio da Eficiência de Murphree ao longo do tempo.

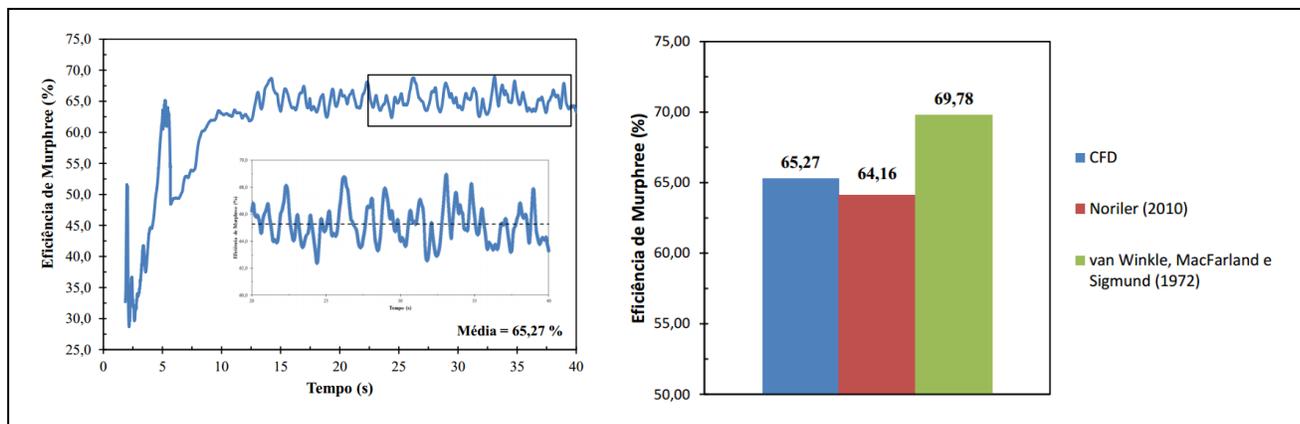


Figura 4 - Variação temporal da eficiência de Murphree no prato (esq.) e a comparação entre as eficiência simulada com a literatura e correlações empíricas.

Os dados aqui encontrados estão de acordo com aqueles citados por Noriler *et al.* (2010), que apresentou uma diferença de 1,7 % de desvio. Acredita-se que esta discrepância dos resultados obtidos numericamente dê-se por dois motivos: primeiro e principalmente pelo tamanho e características do prato avaliado e segundo pelas difusividades estipuladas. O menor diâmetro do prato avaliado por Noriler *et al.*(2010) e um vertedor mais alto, provavelmente permitem um tempo menor de contato entre as fases e aumenta as chances de recirculação. Somados a isso, as difusividades estipuladas diferiram-se nos valores, o que provavelmente acarretou taxas diferentes de

transferência de espécies químicas. Por outro lado, a correlação de van Winkle *et al.*(1972) fornece eficiências superiores ao modelo numérico aqui proposto, com 6,5 % de desvio.

Acredita-se que este desvio é aceitável, pois a correlação utilizada é sensível aos valores das propriedades da mistura líquida.

5. CONCLUSÕES

A metodologia proposta neste trabalho mostrou ser adequada para descrever a eficiência de separação de um escoamento líquido-vapor em um prato perfurado de coluna de destilação. Foi possível calcular a eficiência estágio baseado em modelos que consideram as variações espaciais e temporais ao longo do domínio computacional. Isso é importante em termos de projeto e otimização de pratos perfurados de destilação. Finalmente, as técnicas de CFD podem ser utilizadas para otimizar projetos de pratos e suas condições operacionais desses processos.

6. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a CNPq e a CAPES pelo suporte financeiro.

7. REFERÊNCIAS

HIGBIE, R. The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure. *Transactions AIChE*, v. 31, p. 365-389, 1935.

KISTER, H. Z. *Distillation design*. Boston: McGraw-Hill, 1992.

KRISHNA, R.; URSEANU, M. I.; VAN BATEN, J. M.; ELLENBERGER, J. Rise velocity of a swarm of large gas bubbles in liquids. *Chem. Eng. Science*, v. 54, p. 171-183, 1999.

NORILER, D; BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. W.; MEIER, H. F. Simultaneous momentum, mass, and energy transfer analysis of a distillation sieve tray using CFD techniques: prediction of efficiencies. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 49, p. 6599-6611, 2010.

RAHIMI, R.; RAHIMI, M. R.; SHAHRAKI, F.; ZIVDAR, M. Efficiencies of sieve tray distillation columns by CFD simulation. *Chem. Eng. Technol.*, 29, n. 3, p. 326-335, 2006.

RAHIMI, R.; SOTOODEH, M. M.; BAHRAMIFAR, E. The effect of tray geometry on the sieve tray efficiency. *Chemical Engineering Science*, v. 76, p. 90-98, 2012.

SOLARI, R. B.; BELL, R. L. Fluid flow patterns and velocity distribution on commercial scale sieve trays. *AIChE Journal*, v. 32, n. 4, p. 640-649, 1986.

VAN WINKLE, M.; MACFARLAND, S. A.; SIGMUND, P. M. Predict distillation efficiency. *Hydrocarbon Processing*, v. 51, n. 7, p. 111-114, 1972.

WANKAT, P. C. *Separation process engineering*. 2 ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2007.