Universidade Estadual de Maringá

CENTRO DE TECNOLOGIA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

REINALDO BURCON JUNIOR

ANÁLISE DE UM REGENERADOR DE ÁCIDO CLORÍDRICO SOB A ÓPTICA DA TERMOFLUIDODINÂMICA E TERMOECONOMIA

Maringá
2014

REINALDO BURCON JUNIOR

ANÁLISE DE UM REGENERADOR DE ÁCIDO CLORÍDRICO SOB A ÓPTICA DA TERMOFLUIDODINÂMICA E TERMOECONOMIA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, do Departamento de Engenharia Mecânica, Centro de Tecnologia da Universidade Estadual de Maringá, como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Engenharia Mecânica.
Área de concentração: Ciências Térmicas

Orientador: Prof. Dr. Wagner André dos Santos Conceição
Coorientador: Dr. Márcio Higa

Maringá
2014

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(Biblioteca Central - UEM, Maringá, PR, Brasil)

Burcon Junior, Reinaldo
B948a Análise de um regenerador de ácido clorídrico sob a óptica da termofluidodinâmica e termoeconomia / Reinaldo Burcon Junior. -- Maringá, 2014.
68 f. : il. color., figs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Wagner André dos Santos Conceição.
Coorientador: Prof. Dr. Márcio Higa.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Tecnologia, Departamento de Engenharia Mecânica, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2014.

1. Transferência de calor e massa. 2. Termodinâmica - Termoeconomia. 3. Regenerador. 4. Coluna de leito fixo. 5. Ácido clorídrico. 6. Galvanização por imersão a quente. I. Conceição, Wagner André dos Santos, orient. II. Higa, Márcio, coorient. III. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Tecnologia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDD 22.ed. 660.2842

SOI-002062

Pós-Graduação em Engenharia Mecânica | UEM

Universidade Estadual de Maringá
Centro de Tecnologia

Este é o exemplar definitivo da Dissertação apresentada por **Reinaldo Burcon Junior**, perante a Comissão Julgadora do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica em 31 de julho de 2014.

COMISSÃO JULGADORA

Prof. Dr. Wagner André dos Santos Conceição
Presidente – PEM/UEM

Prof. Dr. Júlio César Dainezi de Oliveira
Membro DEM/UEM

Profa. Dra. Luiza Helena Costa Dutra Sousa
Membro PEM/UEM

Prof. Dr. Evandro Bona
Membro – UTFPR

Dedico este trabalho

A Deus e a todas as pessoas que tornaram possível meu prosseguimento neste estudo.

AGRADECIMENTOS

A todos que colaboraram no desenvolvimento deste trabalho.

"É preciso que não tenham medo de dizer alguma coisa que possa ser considerada como erro. Porque tudo que é novo, aparece aos olhos antigos como coisa errada. É sempre nesta violação do que é considerado certo, que nasce o novo e há a criação. E este espírito deve ser redescoberto pela juventude brasileira" (Mário Schenberg).

RESUMO

Sob a perspectiva da termodinâmica e das leis de transferência de calor e massa, este trabalho apresenta a análise do funcionamento de um regenerador de ácido clorídrico, instalado em uma empresa do ramo de ferragens elétricas. Investigam-se as eficiências térmicas e mássicas, com o objetivo de melhorar o desempenho do sistema e viabilizar economicamente a operação. Inicialmente fez-se uma análise termoeconômica do sistema, atribuindo-se valor exergético e monetário as correntes de entrada e saída de cada dispositivo objetivando-se eliminar desperdícios e consequentemente reduzir o custo de operação. Em seguida utilizando-se de princípios de transferência de calor e massa, realizou-se a análise da coluna de destilação, com o objetivo de se entender o mecanismo de aquecimento e transferência mássica dos vapores. Esta análise tem por finalidade entender e sugerir modificações ao sistema com o intuito de se eliminar o tempo morto no início de operação e o arraste de ácido junto com a água recuperada. Fez-se também uma estimativa das perdas de calor pelo não isolamento do permutador de calor, procurando-se justificar ou não a possibilidade de isolá-lo termicamente. Por fim, conseguiu-se atingir a viabilidade termoeconômica deste sistema fazendo-se a troca parcial de combustível da caldeira. O calor desperdiçado pelo não isolamento do trocador de calor foi verificado como sendo insignificante, o recheio da coluna cumpre seu objetivo de frear qualquer fluxo provocado pela bomba de circulação e com relação ao arraste de ácido, não foi encontrada uma solução viável para este problema.

Palavras-chave: Transferência de calor e massa, Termodinâmica, Regenerador, Ácido clorídrico, Galvanização por imersão a quente.

ABSTRACT

Under the perspective of thermodynamics and the laws of heat and mass transfer, this paper presents the analysis of the operation of a hydrochloric acid regenerator installed in an industry of the electrical hardware segment. We investigate the thermal and mass efficiencies, with the goal to improve system performance and economically viable operation. Initially was made a thermoeconomic system analysis, assigning the exergetic and monetary value to input currents and output of each equipment aiming to eliminate waste and thus reduce the cost of operation. Then, was used the principles of heat and mass transfer, the analysis was made of the distillation column, with the goal to understand the mechanism of heat and mass transfer of steam. This analysis is aimed at understanding and suggest modifications to the system in order to eliminate the dead time at the beginning of operation and drag acid with the water recovered. And was made an estimate of heat losses by not isolating the heat exchanger, seeking to justify or not the possibility to isolate it thermally. Finally, we managed to reach the thermoeconomic feasibility of this system by the partial replacement of boiler fuel. The heat wasted by not insulating the heat exchanger was found to be insignificant, the filling of the column complies its goal of stopping any flow induced by the circulator and with respect to drag acid a feasible solution has not been found to this problem.

Key-words: Heat and mass transfer, Thermodynamics, Regenerator, Hydrochloric acid, Hot dip galvanizing.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Diagrama do Sistema de Recuperação de Ácido. 3
Figura 2 – Sistema de potência genérico. 9
Figura 3 - Sistema de destilação FLASH. 10
Figura 4 – Coluna de leito fixo. 12
Figura 5 – Tipos representativos de recheio para coluna de leito fixo. 13
Figura 6 – Evaporação do líquido A numa mistura binária de gás A+B. 15
Figura 7 – Diagrama funcional do sistema. 24
Figura 8 – Representação dos fluxos de entrada e saída da caldeira. 25
Figura 9 – Regenerador e trocador de calor. 27
Figura 10 – Diagrama de custos do trocador de calor e coluna de destilação. 28
Figura 11 – Partícula do recheio da coluna de destilação. 30
Figura 12 – Condições de fronteira. 31
Figura 13 – Pré-processador *Discretizer*. 32
Figura 14 – Pré-processador gedit. 32
Figura 15 – Tela inicial do pós-processador *paraFoam*. 33
Figura 16 – Pontos de injeção de água, recuperação de água e extração de ácido. 35
Figura 17 – Modelo simplificado da coluna de destilação considerando o recheio. 36
Figura 18 – Malha gerada considerando as esferas do recheio. 37
Figura 19 – Malha utilizada sem considerar as esferas do recheio. 39
Figura 20 – Malha sem considerar esferas e considerando barreiras. 40
Figura 21 – Malha utilizada na discretização das partículas. 41
Figura 22 – Trocador de calor. 43
Figura 23 – Custo do vapor em função do tempo de retorno para a situação inicial. 47
Figura 24 – Perda de velocidade do fluxo para a primeira consideração [m/s]. 48
Figura 25 – Fluxo considerado perpendicular ao primeiro [m/s]. 49
Figura 26 – Fluxo considerado a quarenta e cinco graus do primeiro [m/s]. 49
Figura 27 – Concentração ao final de 2 horas de trabalho inicial considerando-se somente difusão [kg/m^3]. 51
Figura 28 - Concentração ao final de 2 horas de trabalho inicial considerando-se o arraste convectivo [kg/m^3]. 52
Figura 29 - Concentração ao final de 2 horas de trabalho inicial considerando-se o arraste convectivo e anteparo [kg/m^3]. 53

Figura 30 – Perfil de concentração considerando a geometria do recheio [kg/m^3]. 54
Figura 31 – Perfil de temperatura após 160 segundos do inicio do aquecimento [K]..... 56
Figura 32 – Perfil de temperatura após 340 segundos do inicio do aquecimento [K]..... 57
Figura 33 - Perfil de temperatura após 460 segundos do inicio do aquecimento [K]. 58
Figura 34 - Perfil de temperatura após 600 segundos do inicio do aquecimento [K]. 59
Figura 35 – Perfil de aquecimento do gás da coluna a 500 segundos do inicio do processo [K]. 60
Figura 36 - Perfil de aquecimento do gás da coluna a 3600 segundos do inicio do processo [K]..... 61
Figura 37 - Perfil de aquecimento do gás da coluna a 7200 segundos do inicio do processo [K]..... 62

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Configuração do computador utilizado. 34
Tabela 2 – Propriedades físicas do PTFE. 42
Tabela 3 – Custos fornecidos pela empresa. 45
Tabela 4 – Custos iniciais de operação. 46
Tabela 5 – Novo custo de operação. 46

LISTA DE ABREVEATURAS E SIGLAS

Sigla	Descrição
pH	Potencial hidrogeniônico
PCI	Poder calorifico inferior
IHM	Interface homem máquina

LISTA DE SIMBOLOS

Letras latinas	Significado	Unidade SI
D_i	Coeficiente de difusão	[m^2/s]
S_i	Fonte, sumidouro ou termo de reação	
$\overline{Nu_L}$	Número de Nusselt	
j_A	Fluxo de massa da espécie A	[kg/s.m^2]
j_A^*	Fluxo de massa da espécie A	[kmol/s.m^2]
$N''_{A,x}$	Fluxo molar provocado pela difusão/advecção	[kmol/s.m^2]
$\vec{v}$	Velocidade de advecção/convecção	[m/s]
∇	Gradiente	
∇^2	Laplaciano	
c	Concentração	
C	Concentração molar	[kmol/m^3]
$\dot{C}$	Custo por corrente especificada	[R$/s]
c_p	calor especifico	[J.kg^{-1}.K^{-1}]
$\dot{E}_f$	Taxa de transferência de exergia	[W]
f	Fração de moles que evaporam	
Gr	Número de Grashof	
h	Fonte de calor	[J]
K	Condutividade térmica	[W.m^{-2}.K^{-1}]
L	Comprimento	[m]
p	pressão	[Pa]
P	Pressão	[Pa]
p_{acido_velho}	Percentual final de ácido recuperado	
Pr	Número de Prandtl	
q	Calor	[J]
T	Temperatura	[K]
t	Tempo	[s]
t	Tempo	[s]
T	Temperatura	[K]

$x_{A,0}$	Distribuição da concentração da espécie A na superfície 0	[kmol/s.m^2]
$x_{A,L}$	Distribuição da concentração da espécie A no comprimento L	[kmol/ m^3]
x_B	Concentração da corrente de saída	[kmol/m^3]
x_f	Concentração da corrente de entrada	[kmol/m^3]
$\dot{Z}$	Custo relacionado à aquisição e manutenção	[R$/s]
ρ	Densidade	[kg/m^3]

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 1

1.1 A UTILIZAÇÃO DE ÁCIDO NO PROCESSO DE GALVANIZAÇÃO A FOGO 1

1.2 O PASSIVO AMBIENTAL 1

1.3 SISTEMA DE RECUPERAÇÃO DE ÁCIDO CLORÍDRICO 2

1.4 ABORDAGENS DE TRABALHOS ANTERIORES 4

1.5 SOFTWARES LIVRES NA ENGENHARIA 4

1.6 OBJETIVO GERAL 6

1.6.1 Objetivos específicos 6

2 REVISÃO BIBLIOGRAFICA 8

2.1 TERMOECONOMIA 8

2.2 DESTILAÇÃO FLASH 9

2.3 COLUNAS DE LEITO FIXO 11

2.4 DIFUSÃO 13

2.4.1 Lei da Difusão de Fick 13

2.4.2 Evaporação em uma coluna 14

2.4.3 Advecção Difusão 16

2.5 EQUAÇÃO DO CALOR 18

2.6 METODOLOGIA UTILIZADA PELO *SOFTWARE* ELMER 19

2.7 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL 20

2.8 PERDA DE CALOR EM CILINDROS VERTICAIS 21

3 METODOLOGIA 23

3.1 COLETA E VALIDAÇÃO DOS DADOS 23

3.2 ANÁLISE TERMOECONÔMICA 24

3.3 ANÁLISE DA CALDEIRA 24

3.4 ANÁLISE DO TROCADOR DE CALOR 26

3.5 CUSTO FINAL DO ÁCIDO RECUPERADO 29

3.6 ESCOAMENTO DO VAPOR DE ÁCIDO CLORÍDRICO ATRAVÉS DA COLUNA DE LEITO FIXO 29
3.7 DIFUSÃO DO ÁCIDO CLORÍDRICO NA COLUNA DE DESTILAÇÃO 34
3.8 AQUECIMENTO DO RECHEIO 40
3.9 PERDA DE CALOR NO TROCADOR DE CALOR 43
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES 45
4.1 ANÁLISE TERMOECONÔMICA 45
4.2 ESCOAMENTO DO VAPOR DE ÁCIDO CLORÍDRICO ATRAVÉS DA COLUNA DE LEITO FIXO 48
4.3 DIFUSÃO ADVECÇÃO DO ÁCIDO CLORÍDRICO NA COLUNA DE DESTILAÇÃO 50
4.4 AQUECIMENTO DO RECHEIO 55
4.5 PERDA DE CALOR NO TROCADOR DE CALOR 63
5 CONCLUSÃO 65
REFERÊNCIAS 66
APÊNDICE A – ARTIGO PUBLICADO EM PERIÓDICO 68

1 INTRODUÇÃO

1.1 A UTILIZAÇÃO DE ÁCIDO NO PROCESSO DE GALVANIZAÇÃO A FOGO

Por que ainda utilizar a galvanoplastia, já que esta produz grandes quantidades de passivo ambiental e as leis ambientais estão a cada dia mais severas? De acordo com Lumegal (2007), a galvanoplastia confere melhores características aos produtos ferrosos no que diz respeito à corrosão com um bom custo benefício em relação aos demais processos de tratamento superficial, como pintura, cromação, niquelamento ou anodização. Seu mecanismo de proteção à corrosão baseia-se na utilização do princípio do metal de sacrifício. Trata-se do uso do zinco, que possui potencial de oxidação maior que o ferro, cedendo íons antes da liga do metal base, que é toda liga de ferro que se deseja tratar, no processo de corrosão. Esse processo de tratamento superficial necessita de uma superfície livre de impurezas, tais como graxas e óxidos para que o processo de deposição ocorra regularmente. Para a limpeza do metal base, são utilizados banhos de materiais alcalinos para retirada de graxa e de ácido clorídrico para a remoção das camadas de óxidos.

De acordo com Romagnole (2011), o ácido clorídrico deve ser utilizado em uma diluição com a água, entre 22% até 2,5%, em base volumétrica, sendo que para o processo de regeneração ele deve possuir diluição mínima de 6,5% para que se tenha um bom rendimento do processo. Tal procedimento, se executado conforme a tradição da indústria brasileira necessita de adequações e modernizações para se adequar aos requisitos legais que se tornam a cada dia mais severos. Nos próximos tópicos, será abordada uma alternativa a estes resíduos tóxicos gerados por esse processo.

1.2 O PASSIVO AMBIENTAL

Segundo Ladeira e Pereira (2008) os efluentes dos banhos galvânicos são geralmente tratados por precipitação, seguidos de uma correção de pH. No entanto este procedimento leva a produção de resíduos sólidos difíceis de serem descartados. Os custos são tão altos e a falta de locais apropriados (aterros classe I, que são locais impermeáveis, drenados e confinados, destinados à alocação de materiais de alto risco de contaminação ambiental) é grande, fazendo que muitas empresas venham a manter dezenas de toneladas deste material neutralizado

armazenado, aguardando destinação. Além disso, existe a responsabilidade eterna pelo lodo descartado no aterro. Diante deste fato, o que fazer com os resíduos?

Uma opção adequada seria a transformação destes resíduos em classes menos perigosas, facilitando assim o seu descarte, ou que venham a ter algum valor comercial para destinação a outros processos fabris, amenizando-se assim o impacto do passivo ambiental que seria gerado pelo lodo galvânico sem tratamento. A seguir será discutida uma alternativa para o ácido que seria descartado, podendo assim tornar-se uma forma de economizar insumos industriais e minimizar o impacto ambiental.

1.3 SISTEMA DE RECUPERAÇÃO DE ÁCIDO CLORÍDRICO

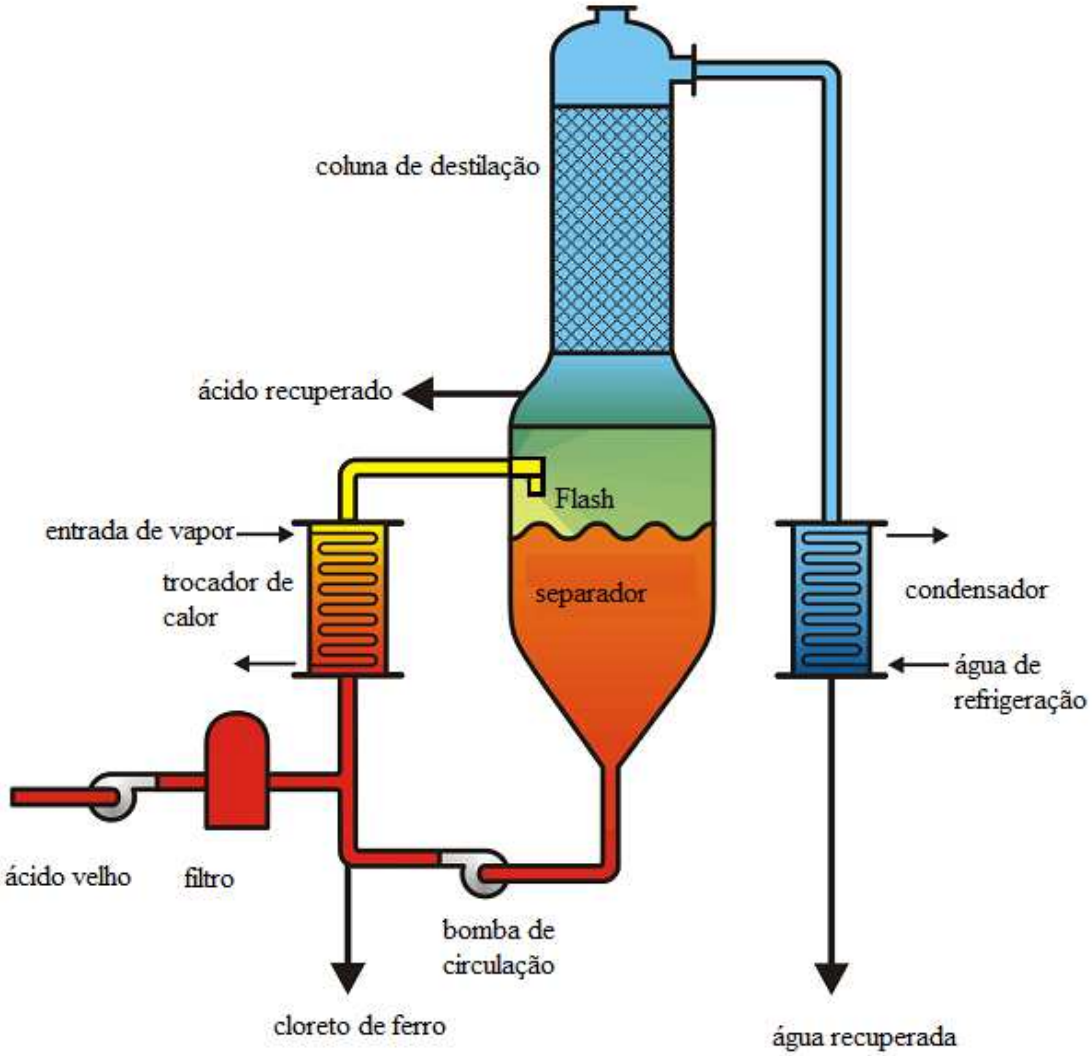
Como uma solução aos resíduos gerados pelo processo de galvanização, utiliza-se o equipamento de regeneração de ácido. O referido sistema de recuperação proporciona soluções sustentáveis e econômicas com reaproveitamento do ácido que seria descartado, não gerando assim passivo ambiental e proporcionando economia no consumo de ácido. Tal sistema possui um funcionamento simples, em que o ácido gasto, por meio de uma bomba centrífuga é impelido para um trocador de calor que descarrega em um evaporador, passando por um sistema flash, que provoca uma queda de pressão e consequentemente a evaporação da mistura água ácido, que começa seu processo de evaporação a 102 ºC. Quando a concentração aumenta, o cloreto de ferro ($FeCl_2$) resultante do processo de decapagem é drenado, sendo armazenado em um container adequado. Forçados pela expansão, os vapores de ácido são condensados e sua concentração é controlada por meio da injeção de água na parte superior do retificador. Por fim, os vapores de água do processo são sub-resfriados e condensados em um trocador de calor, que é denominado pelo fabricante como condensador (BETACONTROL, 2011).

Esse equipamento além de recuperar parte do ácido que seria neutralizado e descartado em aterros industriais, também realiza a precipitação dos compostos presentes na solução, podendo então assim facilitar a sua destinação, pois o cloreto de ferro e o cloreto de amônia extraídos no equipamento possuem utilidade em outros processos industriais, podendo assim vir a se tornar uma fonte de renda alternativa.

Ilustra-se na Figura 1 o diagrama de funcionamento do recuperador de ácido. Este sistema é composto por uma caldeira que fornece vapor saturado seco como fonte energética ao sistema, um trocador de calor do tipo casco-tubo, com um passe na carcaça e um passe nos

tubos (estes tubos são fabricados em grafite, para resistir ao efeito corrosivo do ácido clorídrico), uma câmara de evaporação que se baseia no sistema de evaporação do tipo flash, e uma torre retificadora ou torre de destilação por leito fixo, a qual é preenchida por esferas irregulares fabricadas em material inerte, um trocador de calor, responsável por resfriar o vapor de água recuperada, identificado como condensador, e uma bomba de circulação, responsável por circular a mistura de ácido e água a serem recuperados através do trocador de calor. O equipamento funciona por regime de batelada, operando entre 60% até 80% do volume do separador preenchido. O flash, composto por um bico do tipo chuveiro, descarrega a mistura aquecida na direção contrária a da coluna de destilação, sendo que em seguida acontece a evaporação devido à queda de pressão.

Figura 1 – Diagrama do Sistema de Recuperação de Ácido.



Fonte: Adaptado do catálogo BETACONTROL (2011).

1.4 ABORDAGENS DE TRABALHOS ANTERIORES

Johansson (2010) relata em seu trabalho a análise fluidodinâmica de um regenerador do modelo acionado por lança chamas. O ácido, nesse aparelho, é borrifado contra um queimador, sendo que a água e o ácido clorídrico são assim evaporados e os resíduos sólidos precipitam no aparelho pelo efeito ciclone. Esse trabalho tem por objetivo criar conhecimento a respeito do processo interno do equipamento, pois existe uma grande lacuna na literatura técnica a respeito dos processos de regeneração de ácido.

Já Rosocka (2010) descreve em seu trabalho uma comparação entre os vários tipos de regenerador de ácido clorídrico existentes, como por diálise, eletrodiálise, eletrólise por membrana, destilação por membrana, evaporação, precipitação e evaporação por lança chamas. Também faz uma comparação entre os diversos tipos de recuperação metálica, sendo elas, troca de íons, retardação, cristalização de solvente e excitação de membrana. Apesar da importância deste artigo sobre regeneradores, nenhum tipo construtivo descrito se equivale ao regenerador estudado e relatado nesta dissertação.

Por sua vez, Schiemann *et al* (2012) apresenta o desenvolvimento de um modelo de fluidodinâmica computacional a respeito da precipitação do cloreto de ferro nos regeneradores do tipo lança chamas. Ele desenvolve em laboratório experimentos para poder quantificar as variáveis envolvidas no processo e com isto comprovar a eficácia do modelo computacional.

Apesar dos regeneradores descritos nos trabalhos citados não possuírem características construtivas equivalentes ao equipamento relatado nesta dissertação, e que as análises executadas não são equiparáveis às descritas neste trabalho, este fato vem a exaltar o ineditismo desta pesquisa, além de confirmar a dificuldade na obtenção de dados na literatura técnica devido à falta de trabalhos correlatos.

1.5 SOFTWARES LIVRES NA ENGENHARIA

Atualmente há um grande uso de *softwares* proprietário para as análises de engenharia, sendo desconhecido ou até mesmo ignorado por muitos profissionais os recursos presentes nos softwares livres. Estes *softwares* são tratados pela grande maioria dos engenheiros e cientistas somente como tendo valor acadêmico, ou seja, utilizados para o aprendizado de alguns princípios numérico computacionais.

Na contrapartida desta corrente, tem-se alguns softwares, que apesar de serem livres, possuem recursos computacionais que os colocam no páreo contra os *softwares* pagos. Alguns destes programas foram utilizados na elaboração dos estudos descritos por esta dissertação. Faz-se a seguir uma pequena descrição destes programas e a qual objetivo ele é mantido.

O *software* ELMER é um pacote multifísico, tal como seus concorrentes proprietários COMSOL® e ANSYS®. Este software utiliza-se do princípio dos elementos finitos para suas análises, não possuindo gerador de malha interna e ferramentas para modelagem (CAD) interna. Ele começou seu desenvolvimento no ano de 1995 por um grupo de colaboradores coordenados pela instituição CSC, mantida pelo governo finlandês e sem fins lucrativos. Este programa foi publicado sob licença GNU (livre e de código aberto) no ano de 2005 e possui distribuições para os sistemas operacionais Windows e Linux.

O *software* GMSH é um gerador de malha para análise de elementos finitos publicado sob a licença GNU e mantido pelos colaboradores Christophe Geuzaine e Jean-François Remacle. Este programa apesar de possuir ferramentas CAD integradas permite a importação de geometrias geradas por outros sistemas em diversas extensões (igs, bmp ou stl) e pode exportar a malha gerada também em diversos formatos (msh, unv, med, stl ou vtk).

O programa SALOME é mantido por um consórcio de empresas francesas (CEA, EDF e OPENCASCADE) e publicado sob licença GNU. Este *software* é uma poderosa ferramenta de pré e pós-processamento, podendo gerar ou importar geometrias e exportar para outros *softwares*, tanto geometrias quanto malhas. Para a geração de malhas ele faz uso de um algoritmo baseado em GMSH e integrado a suas ferramentas. Este programa é distribuído para os sistemas operacionais Windows e Linux.

O *software* OpenFoam foi criado pela empresa OpenCfd Ltd, pertencente ao grupo ESI e distribuído pela fundação OpenFoam Fundation sob licença GNU. Este é uma biblioteca em C++ destinada a análise fluidodinâmica pelo método dos volumes finitos. A geometria utilizada pode ser descrita via linhas de programação dentro de qualquer editor de texto, ou discretizada pelo uso do programa DISCRETIZER, também publicado sob licença GNU. Os principais concorrentes proprietários para este programa são os programas COMSOL® e ANSYS®. O OpenFoam é distribuído somente para o sistema operacional Linux.

O programa COCO Simulator, apesar de gratuito, é distribuído sob licença proprietária. Este programa tem por finalidade a simulação de processos químicos, permitindo a modelagem e exportação de propriedades físicas e químicas para outros *softwares*, como

Matlab®, Scilab ou até mesmo Microsoft Excel®. Este *software* possui distribuição somente para o sistema operacional Windows.

Um artigo baseado nesta dissertação sobre análise do aquecimento das esferas que constituem o recheio da coluna utilizando-se dos softwares SALOME, GMSH e ELMER foi publicada pelo periódico Revista de Engenharia e Tecnologia e consta no APÊNCICE A.

1.6 OBJETIVO GERAL

O equipamento, tomado como objeto para este estudo está instalado em uma empresa do ramo metalúrgico, localizada no norte do Paraná e possui alguns pontos que o tornam pouco viável do ponto de vista econômico. Estes pontos, tal como escape de ácido com a água recuperada, vem a gerar gastos extras com a neutralização deste efluente para descarte e um custo elevado se comparado com o ciclo de vida normal do ácido utilizado no processo de preparação das peças para o processo de zincagem, que seria a neutralização e descarte.

Este trabalho tem como propósito a simulação e avaliação da eficiência do processo de regeneração do ácido clorídrico, buscando-se assim melhorias com relação à operação do equipamento envolvido, na tentativa de estabelecer um ponto ótimo de operação e desta forma viabilizar economicamente a utilização deste processo.

1.6.1 Objetivos específicos

Os objetivos específicos deste trabalho são:

i) Construir um modelo baseado nos princípios da termodinâmica para avaliação das eficiências exergéticas e termoeconômica da caldeira e do trocador de calor, bem como fazer uma avaliação dos custos com os insumos utilizados;

ii) Simular o escoamento do vapor de ácido clorídrico na coluna de destilação de leito fixo e verificar a eficiência do recheio utilizado, de modo a avaliar a possibilidade do ácido estar sendo arrastado para a saída de água recuperada;

iii) Simular a difusão do vapor ácido na coluna de destilação e verificar as causas e possíveis soluções para o ácido que está sendo descartado com a água recuperada;

iv) Simular o aquecimento do recheio da coluna de destilação e verificar possíveis causas na demora da coluna em entrar no regime permanente;

v) Investigar a perda de calor pelo não isolamento térmico do corpo do trocador de calor;

2 REVISÃO BIBLIOGRAFICA

2.1 TERMOECONOMIA

Segundo Bejan *et al* (1996) termoeconomia é um ramo da engenharia que toma como base para suas análises princípios que não são avaliáveis com a análise convencional energética e da economia. É considerada como objetivo desses estudos a minimização das receitas ou a minimização dos custos exergéticos. Técnicas têm sido desenvolvidas para avaliar as ineficiências termodinâmicas destes sistemas, por meio das estimativas da destruição e perda de exergia. Conhecimentos dos custos envolvidos nestas instalações são muito usuais para prover os custos da efetividade do sistema, e com isto, reduzir os custos finais do produto deste sistema.

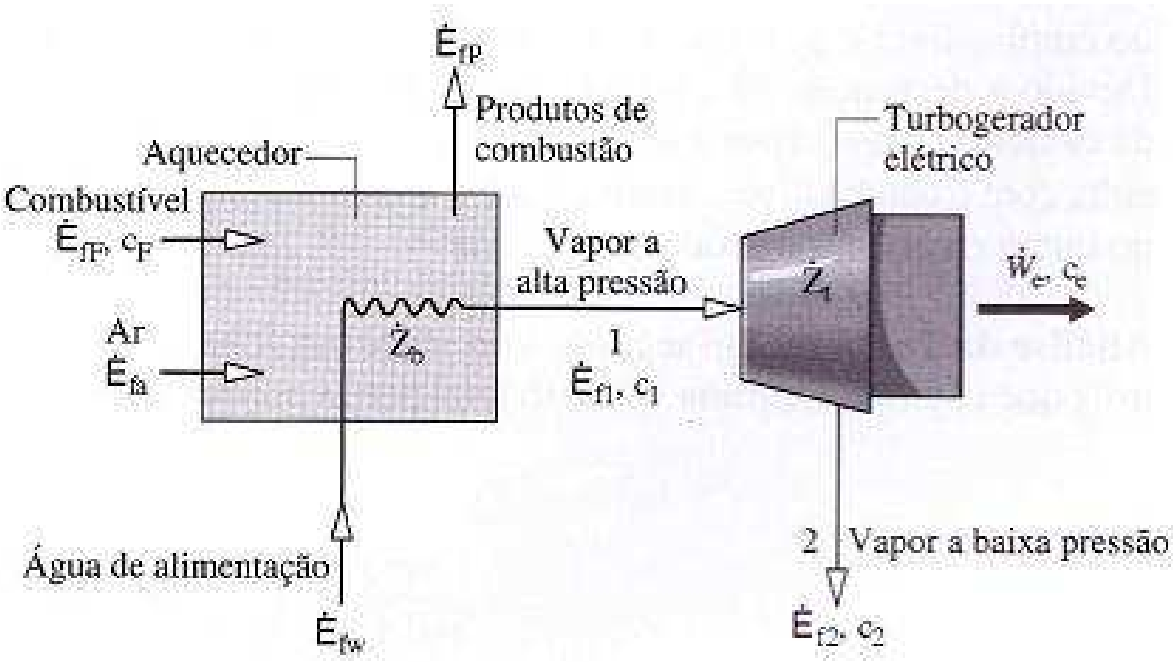
É necessário conhecer os custos de cada produto do sistema (o produto é algo final ou que é fornecido ao sistema posterior). Este é um problema comum em plantas químicas, plantas de geração de potência, caldeiras, compressores de ar e vários outros sistemas em que uma forma de energia produzida por um setor é fornecida a outro. O sistema deve ter seus custos calculados separadamente para então estender-se a fração deste custo no custo total do processo e então aperfeiçoar-se o processo como um todo.

Moran e Shapiro (2000) utilizam para ilustrar este princípio uma instalação de geração de potência, na qual o produto é a potência elétrica e são atribuídos valores a água de entrada, ao combustível, ao calor rejeitado, bem como o custo de aquisição e manutenção dos equipamentos. Esta afirmação é expressa matematicamente pela Equação 1.

$$\dot{C}_1 + \dot{C}_P = \dot{C}_F + \dot{C}_a + \dot{C}_w + \dot{Z}_b \tag{1}$$

O termo $\dot{C}$ é a taxa da respectiva corrente e $\dot{Z}$ leva em conta o custo de aquisição e manutenção da caldeira. Ilustra-se na Figura 2 o sistema equacionado anteriormente.

Figura 2 – Sistema de potência genérico.



Fonte: Moran e Shapiro (2000).

Ademais, os custos designados por $\dot{C}$ podem ser avaliados de diversas maneiras, mas em termoeconomia é utilizado somente em termos de exergia. A exergia é uma forma racional para avaliação dos custos, já que ela mede os valores termodinâmicos reais de calor, trabalho e outras interações entre um sistema e suas vizinhanças. Com o custo da exergia, cada corrente é avaliada em termos de uma taxa de transferência de exergia e um custo unitário. Desta forma, para uma corrente entrando ou saindo pode-se escrever a Equação 2.

$$\dot{C} = \dot{c}\dot{E}_f \tag{2}$$

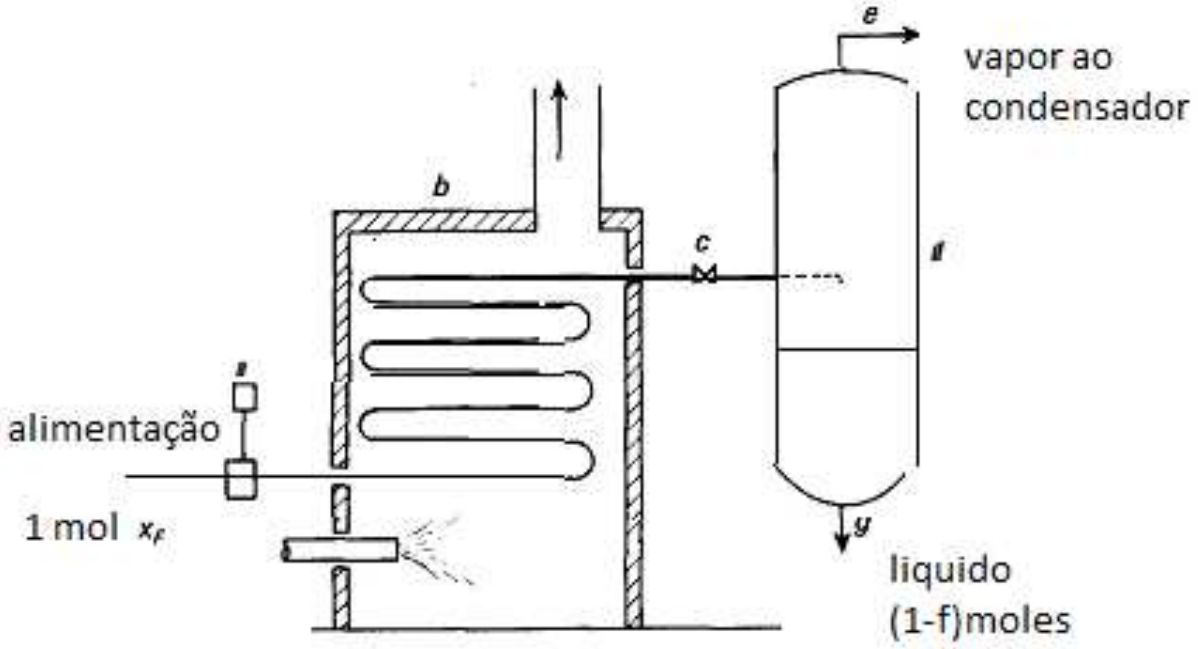
Onde c designa o custo por unidade de exergia e $\dot{E}$ é a taxa de transferência de exergia (MORAN e SHAPIRO, 2000).

2.2 DESTILAÇÃO FLASH

Segundo McCabe *et al* (1991), a destilação flash consiste na vaporização de uma fração definida do líquido de tal forma que o vapor formado está em equilíbrio com o líquido e posteriormente há uma separação do vapor e condensação. A alimentação se dá de forma

circular, onde o líquido recebe calor em um trocador de calor e posteriormente passa por uma válvula antes de entrar na câmara de evaporação, onde perde pressão. A mescla de vapor e líquido entra no evaporador e permanece um tempo suficiente para que se separem e posteriormente o líquido remanescente novamente executa o ciclo de troca térmica e evaporação. Ilustra-se na Figura 3 o sistema de destilação flash.

Figura 3 - Sistema de destilação FLASH.



Fonte: McCabe *et al* (1991). Tradução do autor.

Ainda segundo McCabe *et al* (1991) tem-se para cada mol de mistura que se adentra no equipamento, sendo x_f a concentração de alimentação em fração molar, f a fração de moles que evaporam, 1-f a fração de moles que saem na forma liquida, y_d e x_b as concentrações de vapor e liquido em fração molar respectivamente, através de um balancete chega-se na Equação 3, a qual relaciona as concentrações das correntes de entrada e saída.

$$x_f = f.y_d + (1-f).x_b \tag{3}$$

Este tipo de destilação é muitas vezes usado para separar componentes que evaporam a temperaturas diferentes. Isto não é efetivo na separação de componentes de volatilidade comparáveis, desde que ambos os vapores condensados e o liquido residual não sejam puros. Utilizando-se muitas sucessivas re-destilações, pequenas quantidades de componentes puros podem ser obtidas, mas este processo não é industrialmente viável.

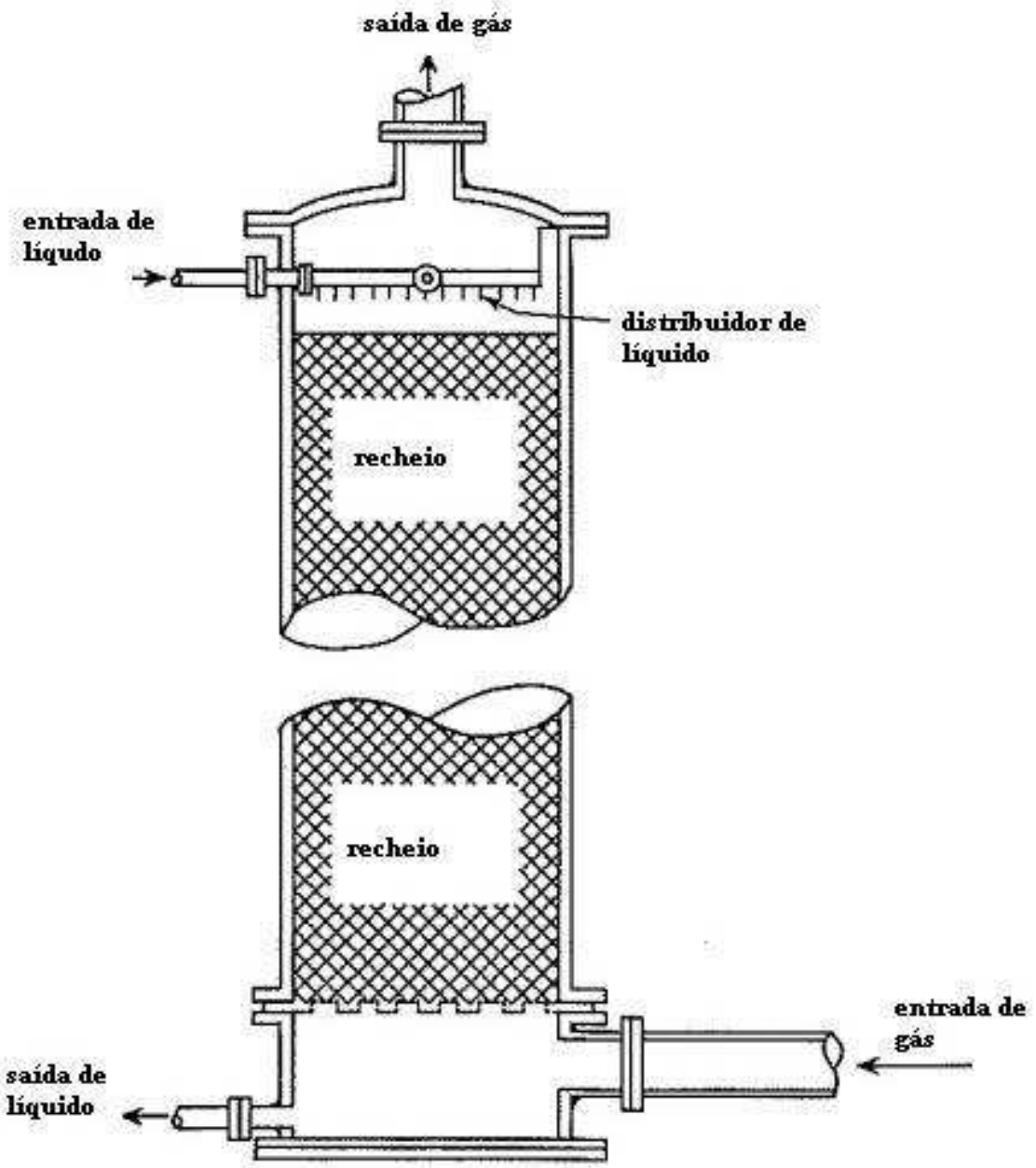
2.3 COLUNAS DE LEITO FIXO

McCabe *et al* (1991) relata que um aparato comum utilizado para a absorção de gases e certamente em outros processos é a coluna de leito fixo. Estes equipamentos consistem em uma coluna cilíndrica, ou torre, equipada com uma entrada de gás e um espaço de distribuição na parte inferior, uma entrada de líquido e um distribuidor na parte superior, e uma saída de gás e de líquido na parte superior e inferior respectivamente. Este dispositivo é preenchido com uma massa de sólidos inertes, chamada de leito fixo. O suporte do recheio ou pacote é tipicamente um espelho, com uma grande área aberta para permitir a passagem do gás.

O líquido injetado pode ser um solvente puro, ou uma solução diluída de soluto no solvente que é denominada líquor fraco. Este líquido é injetado no topo do pacote por um distribuidor e em uma operação ideal, uniformemente molha o recheio. O soluto contendo gás, ou gás rico, entra no espaço do distribuidor abaixo do recheio e flui no sentido ascendente, através dos interstícios no empacotamento e contra a corrente de fluxo líquido.

O recheio provê uma grande área de contato entre o líquido e o gás e força um contato entre as fases. O gás rico (soluto) é absorvido pela corrente de líquido que entra na torre, e o diluto ou gás pobre vai para o topo. O líquido enriquecido em soluto desce com o fluxo a torre, e sai pela parte inferior. O recheio da torre é dividido em três principais tipos: os que são despejados randomicamente na torre, os que são empilhados a mão e os que são cuidadosamente empilhados. É ilustrada por meio da Figura 4 uma representação esquemática de uma torre com leito preenchido.

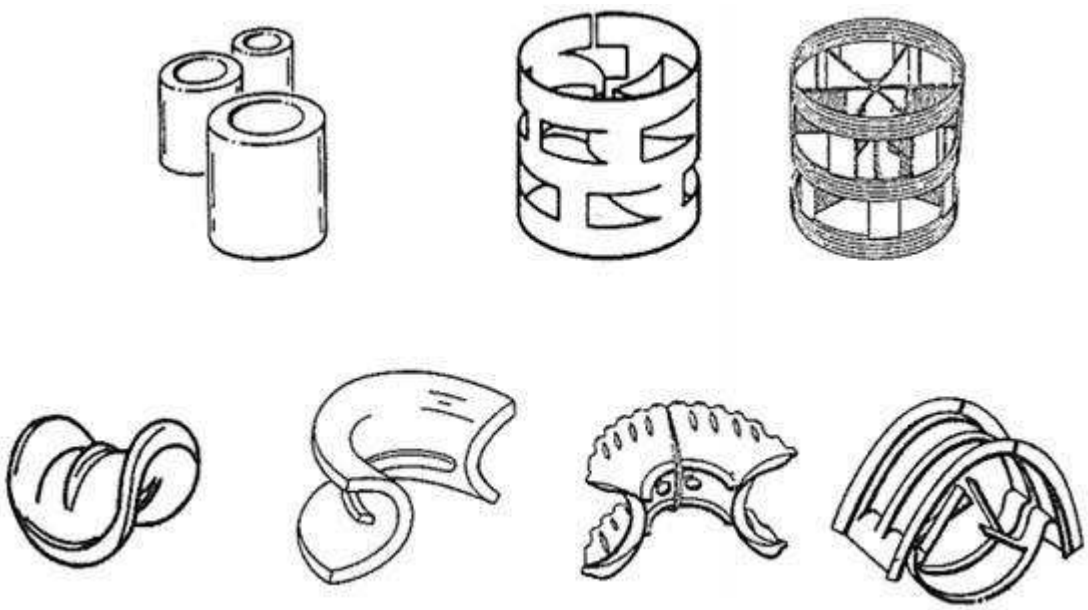
Figura 4 – Coluna de leito fixo.



Fonte: Adaptado de McCabe *et al* (1991). Tradução do autor.

Muitos preenchimentos são comercialmente avaliáveis e cada um possui uma vantagem especifica com relação ao custo, a superfície avaliada, interface de regeneração, queda de pressão, peso e resistência à corrosão. Desta maneira, ácidos e muitos outros materiais corrosivos podem sem manuseados neste tipo de equipamento, pois o preenchimento pode ser de cerâmica, carbono ou outro material resistente. Alguns tipos representativos de preenchimento são ilustrados na Figura 5.

Figura 5 – Tipos representativos de recheio para coluna de leito fixo.



Fonte: Adaptado de McCabe *et al* (1991).

2.4 DIFUSÃO

Para Incropera e Witt (1990), o processo de transferência mássica por difusão, assim como a transferência de calor é um processo que depende da atividade molecular. Este processo permite o transporte entre espécies químicas até que seja atingido um ponto de equilíbrio. A difusão ocorre em líquidos e sólidos, bem como em gases, porém este fenômeno é mais forte em gases do que em líquidos e melhor em líquidos do que em sólidos, pois depende do espaçamento molecular.

2.4.1 Lei da Difusão de Fick

A equação, que modela a difusão mássica, é conhecida como lei de Fick e para o transporte de uma espécie A em uma mistura binária é expressa em forma vetorial na Equação 4 e na Equação 5.

$$j_A = -\rho D_{AB} \nabla m_A \tag{4}$$

$$j_A^* = -C D_{AB} \nabla x_A \tag{5}$$

A quantidade j_A (kg/s.m^2) é definida como o fluxo de massa da espécie A, isto é o montante da espécie A que é transferida por unidade de tempo e unidade de área perpendicularmente a direção de transferência e isto é proporcional a densidade da mistura mássica ρ (kg/m^3), o coeficiente de difusão D_{AB} (m^2/s) e ao gradiente da fração de espécies mássicas m_A. Já a Equação 5 é definida em base molar j_A^* (kmol/s.m^2), onde C é a concentração molar da mistura (kmol/m^3) e x_A é o gradiente de fração molar das espécies.

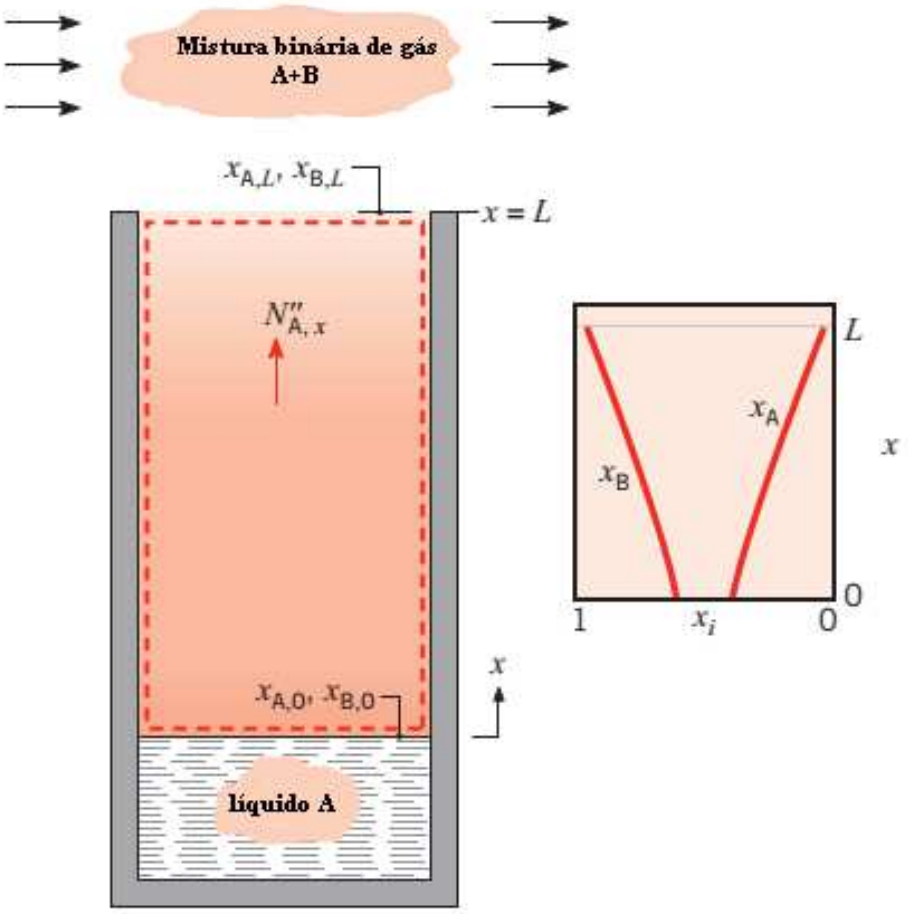
A difusividade D_{AB}, assumindo-se um comportamento como um gás ideal pode ter seu comportamento previsto pela Equação 6 (INCROPERA e WITT, 1990).

$$D_{AB} = \frac{1}{3}\bar{c}\lambda_{mfp} \sim p^{-1}T^{3/2} \tag{6}$$

2.4.2 Evaporação em uma coluna

Ainda segundo Incropera e Witt (1990), desde que exista equilíbrio entre o vapor e a fase líquida na interface líquida, a concentração do vapor corresponde à condição de saturação. Desde que a concentração de A na posição 0 seja maior que na posição L ($C_{A,0}$>$C_{A,L}$), a espécie A evapora da interface líquida e é transferida sobretudo por difusão. Ilustra-se esta suposição na Figura 6.

Figura 6 – Evaporação do líquido A numa mistura binária de gás A+B.



Fonte: Adaptado de Incropera e Witt (1990). Tradução do autor.

Não pode haver acúmulo neste volume de controle e o fluxo molar de A deve ser constante ao longo da coluna. Então se pode definir a Equação 7, que é uma importante afirmação sobre o fluxo através da coluna.

$$\frac{dN''_{A,x}}{dx} = 0 \tag{7}$$

Onde $N''_{A,x}$ representa o fluxo molar provocado pela difusão e advecção.

Para determinar a razão de evaporação da espécie A, é utilizada a Equação 8 a seguir.

$$N''_{A,x} = \frac{CD_{AB}}{L} \ln\left(\frac{1 - x_{A,L}}{1 - x_{A,0}}\right) \tag{8}$$

2.4.3 Advecção Difusão

Segundo Råback *et al* (2012), a equação de advecção difusão, também chamada de difusão convecção, descreve o transporte de uma espécie química por convecção e difusão. Esta equação é derivada do princípio da conservação da massa de cada espécie química na mistura e pode ter fontes ou sumidouros devido a reações químicas. A lei de Fick é utilizada para modelar o fluxo difusivo, e este pode ser anisotrópico. Se o campo de velocidade pode ser considerado zero, a equação de difusão advecção pode ser reduzida a equação da difusão, podendo esta ser aplicada a corpos sólidos.

Ademais, a equação de advecção difusão pode ser expressa em termos de massa absoluta ou concentração molar. Como foi utilizado no *software ELMER,* quando uma quantidade é transportada por um fluido incompressível ou difusa em um sólido, a concentração mássica relativa é expressa conforme demonstrado na Equação 9.

$$c_i = \frac{C_i}{\rho} \tag{9}$$

Onde o C_i é a concentração mássica absoluta em kg/m^3 do componente i e o ρ é a densidade da mistura. A equação da advecção difusão é demonstrada pela Equação 10.

$$\rho\left(\frac{\partial c_i}{\partial t} + \left(\vec{v}\cdot\nabla\right)c_i\right) = \rho\nabla\cdot\left(D_i\nabla c_i\right) + S_i \tag{10}$$

Onde $\vec{v}$ é a velocidade de advecção/convecção, D_i é o coeficiente de difusão e S_i é uma fonte, sumidouro ou termo de reação química.

Onde a substância é transportada através da fronteira com mudança de fase é conveniente fazer uso da formulação de massa em escala absoluta com a respectiva solubilidade para as diferentes fases. Este é o caso, por exemplo, de um liquido que é evaporado no interior de um material gasoso. Esta fração é apresentada na Equação 11.

$$x_i = \frac{C_i}{C_{i,\max}} \tag{11}$$

Onde x_i é a concentração da espécie i relativa à máxima solubilidade no material corrente em termos de massa absoluta. É possível também incluir a difusão dependente da temperatura. Para isto é adicionado ao lado direito da Equação 10 o termo descrito na Equação 12.

$$\nabla \cdot \left(\rho D_{i,T} \nabla T \right) \tag{12}$$

Onde o termo $D_{i,T}$ é o coeficiente de difusão da espécie i e é dado em m^2/Ks. Como condição de contorno para o equacionamento apresentado, pode-se ter prescritos a concentração ou o fluxo mássico. É apresentada pela Equação 13 e Equação 14 a condição de contorno de Dirichlet.

$$c_i = c_{i,b} \tag{13}$$

$$C_i = C_{i,b} \tag{14}$$

Se a concentração é designada em função da solubilidade máxima, a condição de Dirichlet é dada por valores segundo a Equação 11. Pode-se também especificar a condição de fronteira como fluxo $\vec{j_i}$ perpendicular à fronteira considerada. Esta condição é expressa pela Equação 15 a seguir.

$$\vec{j_i} \cdot \vec{n} = -D_i \frac{\partial C_i}{\partial n} = g \tag{15}$$

Ou em termos de massa relativa, pode-se escrever como a Equação 16:

$$\vec{j_i} \cdot \vec{n} = -D_i \frac{\partial c_i}{\partial n} = g \tag{16}$$

A unidade de fluxo através da fronteira é dada em kg/m^2s, com exceção onde ele é definido em temos da solubilidade máxima. A condição de fronteira em termos de fluxo pode ser definida em função do coeficiente de transferência mássico β e a máxima concentração externa C_{ext}, conforme demonstrado da Equação 17 a seguir.

$$-D_i \frac{\partial C_i}{\partial n} = \beta\left(C_i - C_{i,ext}\right) \tag{17}$$

Onde as condições de fronteira não são aplicadas, o software *ELMER* por padrão atribui o valor g=0.

2.5 EQUAÇÃO DO CALOR

Ainda segundo Råback *et al* (2012) a equação do calor é resultante da equação da conservação da energia. A lei de Fourier é usada para modelar a equação da condução do calor. A linearidade desta equação pode ser alterada pela dependência térmica da condutividade ou pela radiação.

A equação da transferência de calor para meios incompressíveis é apresentada pela Equação 18 a seguir.

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \left(\vec{u} \cdot \nabla\right) T \right) - \nabla \cdot \left(k \nabla T\right) = \overline{\overline{\tau}} : \overline{\overline{\varepsilon}} + \rho h \tag{18}$$

Onde ρ é a densidade, c_p é o calor especifico a pressão constante, T é a temperatura, $\vec{u}$ é a velocidade de convecção, k é a condutividade térmica, h é a fonte de calor e o termo $\overline{\overline{\tau}} : \overline{\overline{\varepsilon}}$ representa o aquecimento por fricção viscosa.

Para fluidos newtonianos o tensor torna-se de acordo com a Equação 19:

$$\overline{\overline{\tau}} = 2\mu \overline{\overline{\varepsilon}} \tag{19}$$

Para uma temperatura, pode ser aplicada a condição de contorno e ter ou temperatura ou fluxo de calor prescrito. A condição de contorno de Direichlet (temperatura é prescrita) se apresenta como na Equação 20:

$$\mathrm{T} = \mathrm{T_B} \tag{20}$$

O valor T_B pode ser constante, função do tempo, posição ou outra variável.

Fluxo de calor dependente do coeficiente de transferência de calor α e da temperatura externa T_{ext} pode ser escrito como a Equação 21:

$$-k\frac{\partial T}{\partial t}=\alpha\left(T-T_{ext}\right) \tag{21}$$

Ambas as variáveis α e T_{ext} podem ser constantes ou funções do tempo, posição ou outra variável. Se o coeficiente de transferência de calor α é igual à zero, o fluxo de calor pela fronteira é igual à zero. A condição de fronteira de Neumann pode ser usada em um eixo simétrico 2D ou problemas cilíndricos. Esta condição pode ser escrita como a Equação 22:

$$k\frac{\partial T}{\partial n}=0 \tag{22}$$

2.6 METODOLOGIA UTILIZADA PELO *SOFTWARE* ELMER

Råback *et al* (2012) cita que o *software* ELMER utiliza tradicionalmente a aproximação por elementos finitos, utilizando para isto a abordagem de Galerkin. Faz-se uso da formulação fraca através da interpolação de polinômios de Lagrange. O grau dos polinômios utilizados fica entre um e três para problemas bidimensionais e um e dois para problemas tridimensionais.

De outra maneira, para funções dependentes do tempo a metodologia de discretização utilizada é a Backward Differences Formulae (BDF) de vários graus, ficando a cargo do usuário a escolha do valor que mais se adequar a sua análise, lembrando que quanto maior o grau, maior é a precisão da resposta e maior é o tempo de processamento.

Ademais, ainda para Råback *et al* (2012), a metodologia utilizada pelos solvers em questão nesta análise para a resolução de sistemas lineares são os conhecidos métodos LAPACK, que são sub-rotinas de manipulação algébrica. Dentre estas sub-rotinas a que veio a ser utilizada neste trabalho é o Biconjugate Gradinet Stabilized (BICGSTAB), que nada mais é do que uma das sete abordagens do método dos subespaços de Krylov. Esta metodologia foi selecionada devido ao fato de trabalhar com uma fracionalização maior do sistema, sendo assim, a resolução se estende por um tempo maior, mas por outo lado é exigida menor capacidade de memória do sistema computacional utilizado, evitando-se assim estouro de memória física.

2.7 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Tannehill *et al* (2005) relata que as equações de NAVIER-STOKES governam tanto os fluxos internos quanto os externos. Computar uma solução para essas equações é, às vezes, difícil ou até impraticável em muitas aplicações. Entretanto, para meios incompressíveis, sem adição de calor externo e sem forças de corpo as equações de NAVIER-STOKES para continuidade, momento e energia apresentam-se conforme ilustrado na Equação 23, Equação 24 e Equação 25 respectivamente.

$$\nabla \cdot V = 0 \tag{23}$$

$$\rho \frac{DV}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 V \tag{24}$$

$$\rho c_v \frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T + \Phi \tag{25}$$

Onde ∇ é o divergente, V é a velocidade, D é a derivada substancial, ρ é a densidade, t é o tempo, p é a pressão, μ é a viscosidade absoluta, c_v é o calor especifico a volume constante, T é a temperatura e Φ é o termo dissipativo em função da viscosidade.

Cada termo em uma equação diferencial parcial é representada individualmente no código *OpenFoam* usando classes de funções estáticas pelo métodos dos volumes finitos (Cf. Openfoam programmers guide, online 2013). Dentro da biblioteca deste programa, existe o pacote *Icofoam*, o qual considera o escoamento incompressível e viscoso. Como método iterativo de solução para as equações de NAVIER-STOKES, o *IcoFoam* faz uso do algoritmo PISO (pressure-implicit splitting operator) (Cf. Openfoam userguide, online 2013). A partir desses esclarecimentos, cabe analisar a lógica do algoritmo PISO, que segue os seguintes passos:

1-Supor a pressão e o fluxo (do passo anterior ou valor inicial)

2-Predizer a velocidade: resolver a equação de momento para obter *Ux*, *Uy* e *Uz*

3- Resolver a equação da pressão (Equação 26).

$$\nabla \left[\frac{1}{A} \nabla p \right] = termo.do.fluxo \tag{26}$$

4- Verificar se o termo do fluxo satisfaz a equação da continuidade

5- Voltar ao passo 2 até que a convergência seja alcançada.

Os erros associados com o método são suficientemente pequenos e uma solução precisa pode ser obtida sem aplicações iterativas do algoritmo (TANNEHILL, ANDERSON e PLETCHER, 2005).

2.8 PERDA DE CALOR EM CILINDROS VERTICAIS

O trocador de calor, por possuir um corpo cilindro e em posição vertical, pode ser caracterizado no modelo de cilindro vertical descrito por Bejan *et al* (2003). Segundo esse autor, para grandes valores de D/L, onde D é o diâmetro do cilindro e L é a altura, o fluxo pode ser aproximado como uma placa reta, como sempre, desde que o resultado for baseado na camada limite e este valor seja dependente do número de Grashof (Gr_L).

Já, segundo Incropera (1990), para uma convecção natural aplicada a uma placa plana, a transferência de calor pode ser definida pela lei de resfriamento de Newton, conforme Equação 27 a seguir.

$$q = \bar{h} A_s \left(T_s - T_\infty \right) \tag{27}$$

Onde o termo $\bar{h}$ é o coeficiente convectivo, A_s é a área superficial de troca térmica, T_s é a temperatura da superfície considerada e T_∞ é a temperatura ambiente. O termo $\bar{h}$ para este caso pode ser definido por meio da Equação 28, a seguir.

$$\overline{Nu_L} = \frac{\bar{h} L}{k} = \frac{4}{3} \left(\frac{Gr_L}{4} \right)^{\frac{1}{4}} g\left(\mathrm{Pr}\right) \tag{28}$$

Onde o termo *k* é a condutividade térmica, o termo *g(Pr)* pode ser definido por meio da Equação 29 e o termo Gr_L pela Equação 30.

$$g\left(\mathrm{Pr}\right)=\frac{0.75\,\mathrm{Pr}^{1/2}}{\left(0.609+1.221\,\mathrm{Pr}^{1/2}+1.238\,\mathrm{Pr}\right)^{1/4}} \tag{29}$$

$$Gr_L=\frac{g\beta\left(T_s-T_\infty\right)}{\nu^2} \tag{30}$$

Onde o termo Pr é o número de Prandtl, o termo β é o inverso da temperatura superficial, ν é a viscosidade cinemática, sendo que todas as unidades são consideradas segundo o sistema internacional.

3 METODOLOGIA

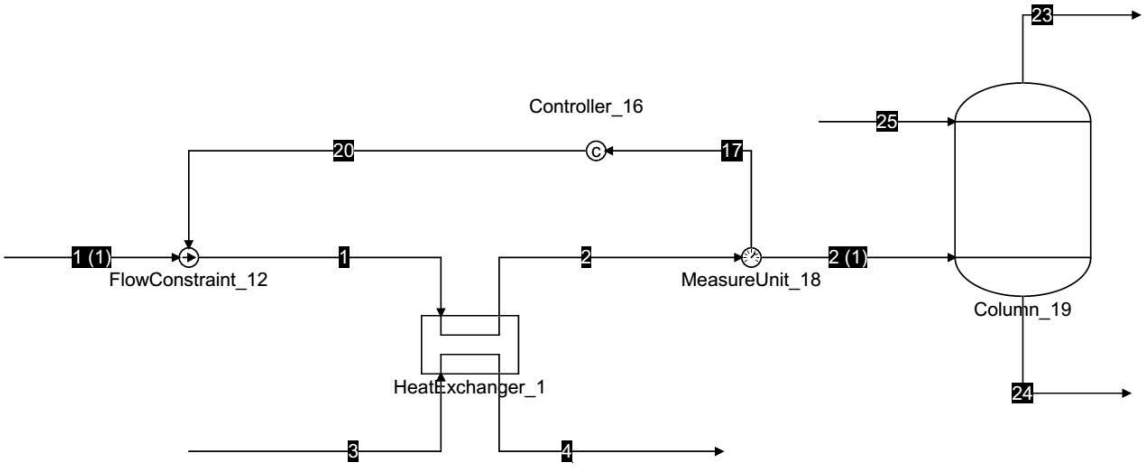
Fazendo-se uso das teorias apresentadas no capítulo sobre revisão bibliográfica, procurou-se avaliar o equipamento de regeneração de ácido clorídrico sob diferentes aspectos. Busca-se desta forma levantar as razões das ineficiências do sistema e quando possível sugerir modificações baseadas nos resultados obtidos e que estas modificações conduzam a um trabalho mais racional deste equipamento, ou em caso de não possibilidade de modificação para atingir este patamar de melhor eficiência, justificar o estado atual de operação. Para este trabalho serão utilizados os *softwares opensource ELMER Multifisics* e o *software OpenFoam*. O primeiro será utilizado nas análises de transferência de calor e difusão e o segundo será utilizado nas análises de escoamento. Para a elaboração do código utilizado na análise termoeconômica será utilizado o *software* proprietário *MATLAB*®.

3.1 COLETA E VALIDAÇÃO DOS DADOS

Para uma maior confiabilidade dos dados coletados, visto que o ambiente de operação do regenerador é de alta agressividade, ou seja, com elevada corrosão e desgaste dos equipamentos e instrumentos de medição, os dados de fluxo de vapor d'água e do ácido usado que passa pelo equipamento e as temperaturas de operação foram confrontados por balanço mássico e energético através do *software COCO SIMULATOR*. Somente desta forma, pode-se ter uma maior credibilidade dos dados utilizados nas demais simulações, já que devido à agressividade ambiental os instrumentos utilizados poderiam perder a sua precisão e fornecer dados errôneos. As medições de pressão foram realizadas através da leitura fornecida pelo IHM do equipamento e as medições de temperatura foram realizadas pelo uso de um termômetro infravermelho. As medidas de fluxo ácido foram estimadas por média da produção pelo tempo de operação e o fluxo de briquete para a caldeira foi estimado pelo consumo diário. A quantidade de vapor fornecida pela caldeira foi estimada por tabela de consumo de vapor fornecida pelo fabricante Betacontrol (2011).

Ilustra-se na Figura 7 o diagrama funcional inserido neste software.

Figura 7 – Diagrama funcional do sistema.



Fonte: Autoria própria.

3.2 ANÁLISE TERMOECONÔMICA

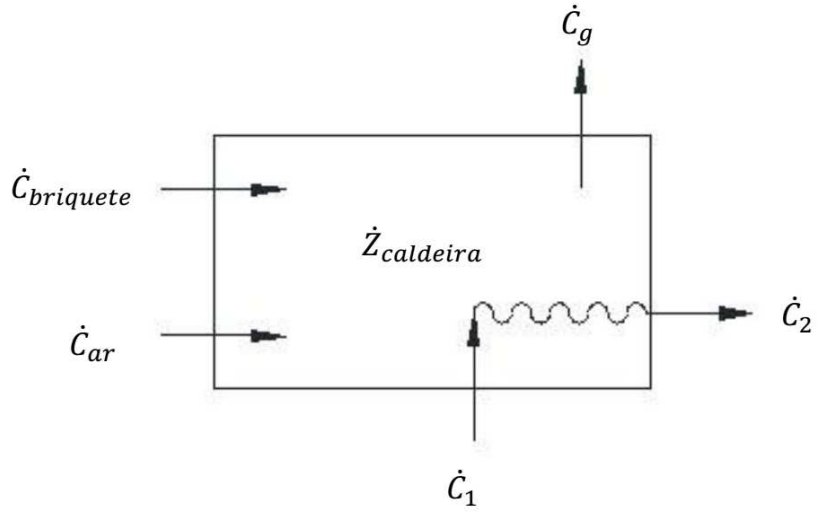
Após a aferição dos dados a serem utilizados, realizou-se uma avaliação termoeconômica no sistema de regeneração como um todo, ou seja, no gerador de vapor (caldeira), no trocador de calor e na coluna de destilação de leito fixo. Foi atribuído valor a cada corrente de entrada e saída, com o objetivo de se mapear as perdas exergéticas, e por consequência, perdas financeiras que ocorrem neste sistema. Por fim, foi avaliado o impacto financeiro da troca de combustível da caldeira.

3.3 ANÁLISE DA CALDEIRA

A caldeira utilizada para alimentação de vapor do sistema de regeneração é do tipo construtivo misto, ou seja, possui características tanto da aquatubular, quando flamotubular. Os dados relativos à produção de vapor foram levantados em manual fornecido pelo fabricante. As temperaturas de retorno do condensado foram obtidas por leitura em termômetro acoplado ao equipamento. A temperatura do vapor foi medida de forma direta, ou seja, fazendo-se uso de um termômetro infravermelho, com o qual se mediu a temperatura do flange de saída da caldeira. O fabricante deste equipamento é a indústria de caldeiras EIT LTDA e possui capacidade de até 800 kg de vapor por hora a uma pressão manométrica de até

8,43 bar a uma temperatura média de trabalho de 163,8 °C. O ar de alimentação não recebe nenhum tipo de tratamento antes de ser enviado para a fornalha da caldeira. Os gases resultantes da combustão também não recebem nenhum tratamento posterior e são descartados diretamente na atmosfera por uma chaminé. Estes gases saem a uma temperatura média de 250 °C (temperatura medida por termômetro infravermelho). Por sua vez, a água de alimentação faz uso do condensado que retorna do trocador de calor a uma temperatura de 85 °C. O combustível utilizado neste gerador de vapor é o briquete, constituído por aglomerados de cavaco de madeira, provindos das indústrias de móveis locais. Segundo Gonçalves *et al* (2009), o poder calorífico inferior (PCI) deste combustível é de cerca de 18.135,68 kJ/kg . Ilustra-se na Figura 8 o fluxograma da caldeira com suas respectivas correntes de entrada e saída.

Figura 8 – Representação dos fluxos de entrada e saída da caldeira.



Fonte: Autoria própria.

Tomando-se como base as correntes fornecidas, pode-se aplicar a Equação 1, adequando a esta para as correntes consideradas de acordo com a Equação 31.

$$\dot{C}_2 + \dot{C}_g = \dot{C}_1 + \dot{C}_{ar} + \dot{C}_{briquete} + \dot{Z}_{caldeira} \tag{31}$$

Na Equação 31 faz o balanço dos custos envolvidos na geração de vapor, onde $\dot{C}_{briquete}$ é o custo relacionado ao combustível, $\dot{C}_{ar}$ é o custo relacionado ao tratamento e fornecimento do ar de combustão, $\dot{C}_1$ é o custo relacionado ao tratamento da água, $\dot{C}_{gás}$ é o valor do gás

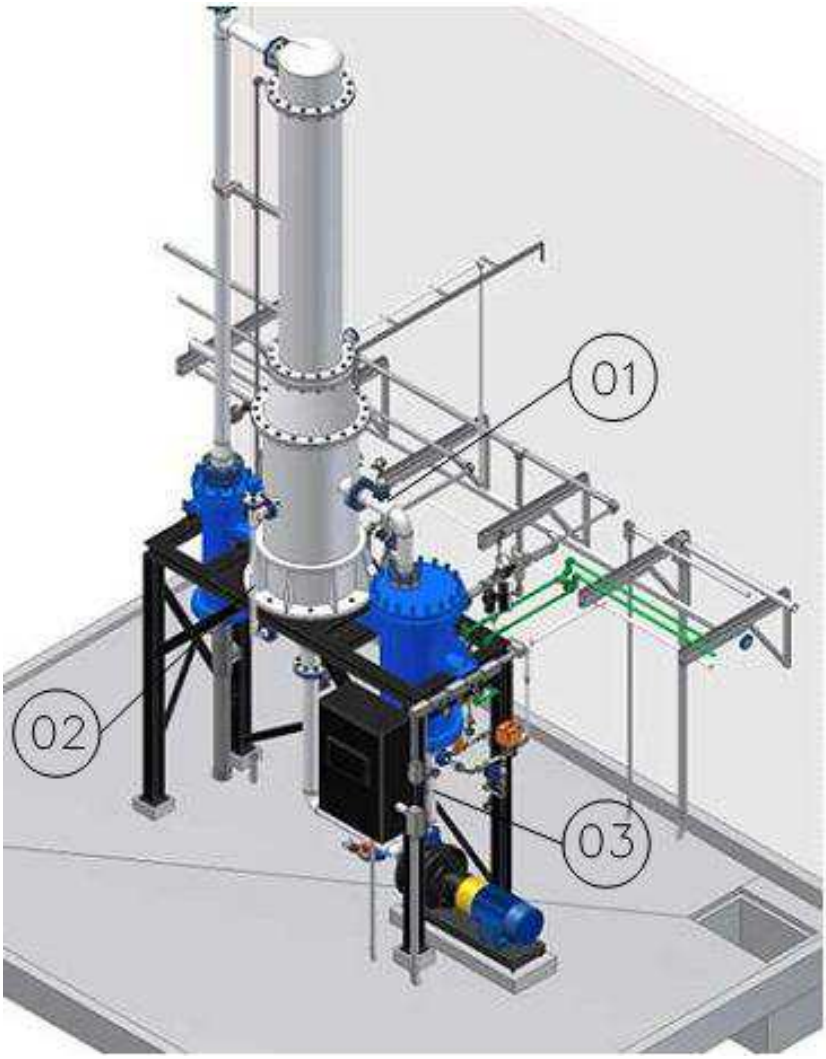
gerado, se utilizado por outro processo, $\dot{C}_2$ é o valor do vapor gerado e $\dot{Z}_{caldeira}$ são os custos relacionados com a aquisição e manutenção do equipamento.

Para esta análise, os custos do ar de alimentação e os custos do gás gerado foram considerados nulos, pois o ar não recebe nenhum tratamento antes de entrar na caldeira e os gases gerados são descarregados diretamente na atmosfera, sem fornecer exergia a nenhum outro processo.

3.4 ANÁLISE DO TROCADOR DE CALOR

Ademais, por sequencia da caldeira, tem se o trocador de calor, responsável pelo aquecimento do ácido que está sendo processado. Este dispositivo recebe vapor diretamente da caldeira e por meio de um purgador termodinâmico somente o libera após completa condensação. O vapor entra no trocador a uma temperatura de 163,8 °C e o deixa a uma temperatura de 85 °C. O ácido por sua vez entra no trocador a aproximadamente 83 °C e o deixa a aproximadamente 118 °C e 100 kPa de pressão. Estas medidas foram realizadas quando o equipamento já operava em regime permanente. A seguir, ilustram-se na Figura 9 as principais grandezas mesuradas no trocados de calor e no reservatório que contém o ácido a ser aquecido.

Figura 9 – Regenerador e trocador de calor.



Fonte: Catálogo BETACONTROL (2011).

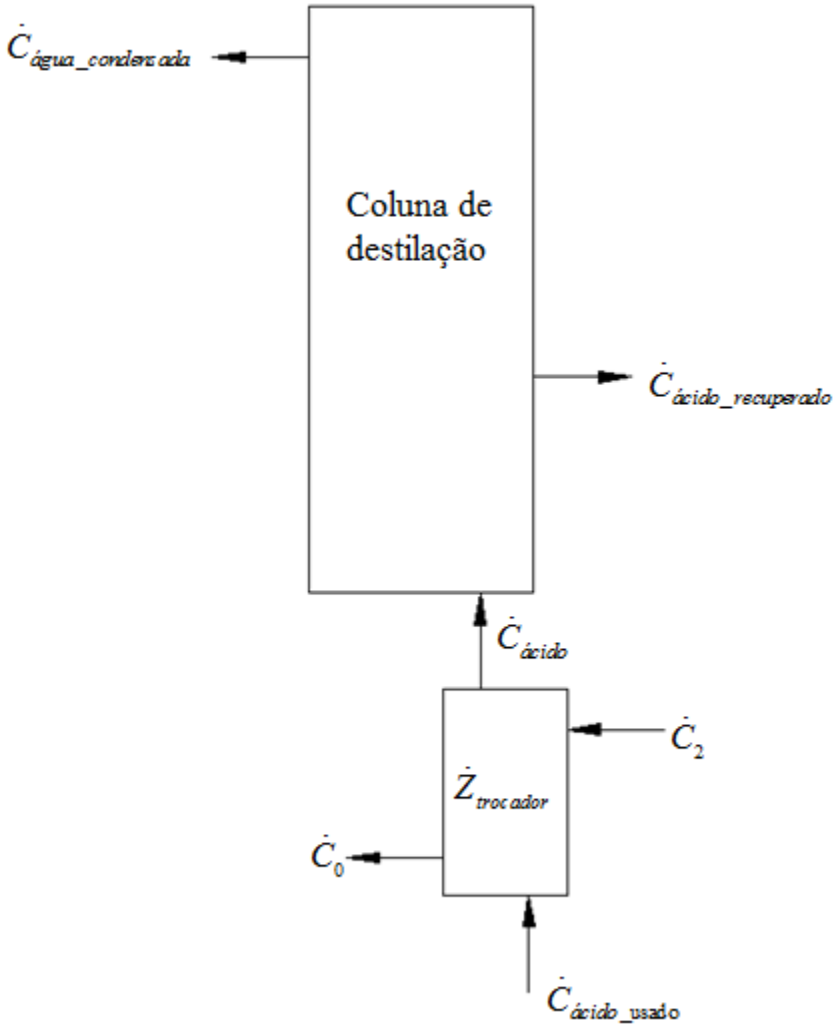
Tem-se no ponto 01 a pressão de operação entre 90 kPa até 100 kPa e a temperatura média de 118 °C, no ponto 02 está a pressão atmosférica e 80 °C de temperatura e no ponto 03 a saída do cloreto precipitado entre 110 °C e 115 °C.

Desta maneira, dispondo-se dos dados das correntes de entrada e saída do trocador de calor e aplicando-se o balanço termoeconômico, chega-se na Equação 32 a seguir, sendo que esta quantifica o custo do ácido aquecido após sair do trocador de calor e antes de passar pela coluna de destilação.

$$\dot{C}_{ácido} = \dot{C}_{ácido_\text{usado}} + \dot{C}_2 - \dot{C}_0 + \dot{Z}_{trocador} \tag{32}$$

Este custo é dependente somente dos custos do vapor que fornece calor e dos custos de aquisição e manutenção do trocador de calor, conforme ilustrado na Figura 10.

Figura 10 – Diagrama de custos do trocador de calor e coluna de destilação.



Fonte: Autoria própria.

O $\dot{C}_{ácido_usado}$ foi considerado zero, pois o custo de bombeamento do ácido das cubas em que é utilizado até o regenerador é desprezível. O custo $\dot{C}_0$ também foi considerado zero, pois este é o valor do condensado que será reaproveitado e reenviado à caldeira.

3.5 CUSTO FINAL DO ÁCIDO RECUPERADO

O custo final do ácido recuperado tem que levar em consideração a quantidade de água que é precipitada no condensador e o percentual sobre o total de ácido velho evaporado que irá se condensar novamente como ácido recuperado. O custo do ácido recuperado é demonstrado pela Equação 33.

$$\dot{C}_{ácido_recuperado} = \frac{\dot{C}_{ácido}}{p_{acido_recuperado}} \tag{33}$$

Onde $\dot{C}_{ácido_recuparado}$ é o custo final do ácido regenerado, $\dot{C}_{ácido}$ é o custo do ácido velho aquecido e p_{acido_velho} é o percentual final de ácido que é recuperado. Esta é uma relação inversamente proporcional, ou seja, quanto menor o percentual de ácido recuperado, maior é o seu custo. Por fim tem-se também o custo de neutralização da água que é obtida no condensador, pois esta sai com resíduos de ácido, devendo ser neutralizada antes de ser destinada. Este custo é demonstrado na Equação 34.

$$\dot{C}_{água_condensada} = vol_{água/hora} \cdot c_{neutralização} \tag{34}$$

Onde $\dot{C}_{água_condensada}$ é o custo pela neutralização da água condensada, $vol_{água/hora}$ é o volume de água condensada por hora e $c_{neutralização}$ é o custo unitário do insumo para neutralização da água.

No capítulo Resultados, o valor do ácido recuperado será confrontado com o valor do ácido neutralizado e descartado, tentando-se desta forma justificar a viabilidade econômica do regenerador, bem como analisar o efeito da troca de combustível da caldeira sobre o custo do ácido recuperado.

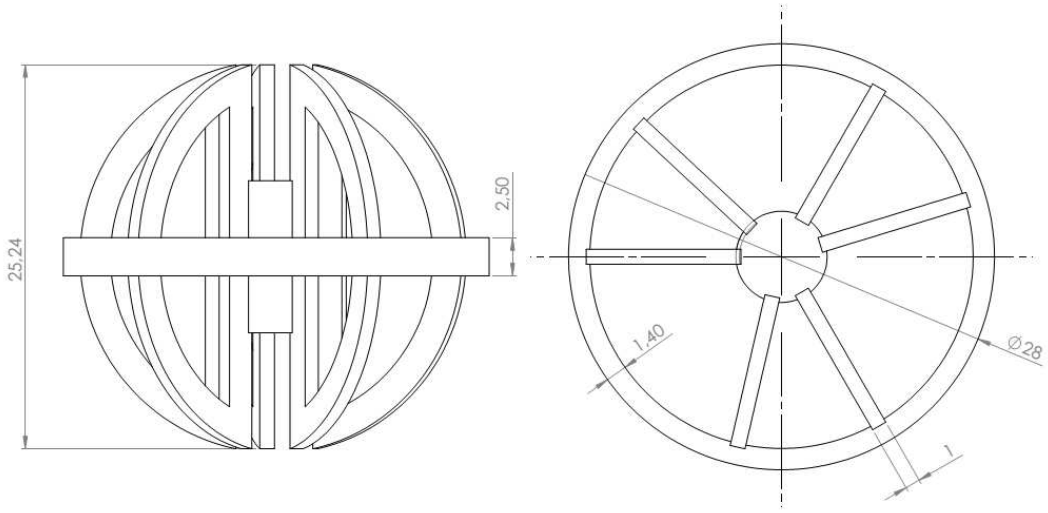
3.6 ESCOAMENTO DO VAPOR DE ÁCIDO CLORÍDRICO ATRAVÉS DA COLUNA DE LEITO FIXO

Tem-se por objetivo da simulação do escoamento de vapor ácido através das partículas que constituem o recheio, a verificação da existência de arraste do ácido provocado pelo fluxo imposto pela bomba de circulação, ou se existe somente o fenômeno da difusão/advecção

como meio de transferência mássica na coluna. Este ácido supostamente arrastado pode ser o responsável pelo baixo pH da água recuperada, que para seu descarte tem que passar por um processo de neutralização, encarecendo o custo do ácido recuperado. Cabe então verificar a eficiência da geometria das partículas que constituem o recheio.

A simulação foi executada em somente uma partícula, que compõe o recheio da coluna retificadora, pois ao se avaliar o efeito em uma partícula, pode-se prever o efeito de todo o conjunto, pois ao passar pelas esferas adjacentes à estudada, o fluxo de vapor deve experimentar uma redução de velocidade do mesmo percentual que a esfera analisada, tornando-se nulo ao cruzar pelo interior de um número pequeno de esferas. É ilustrada na Figura 11 a geometria em estudo.

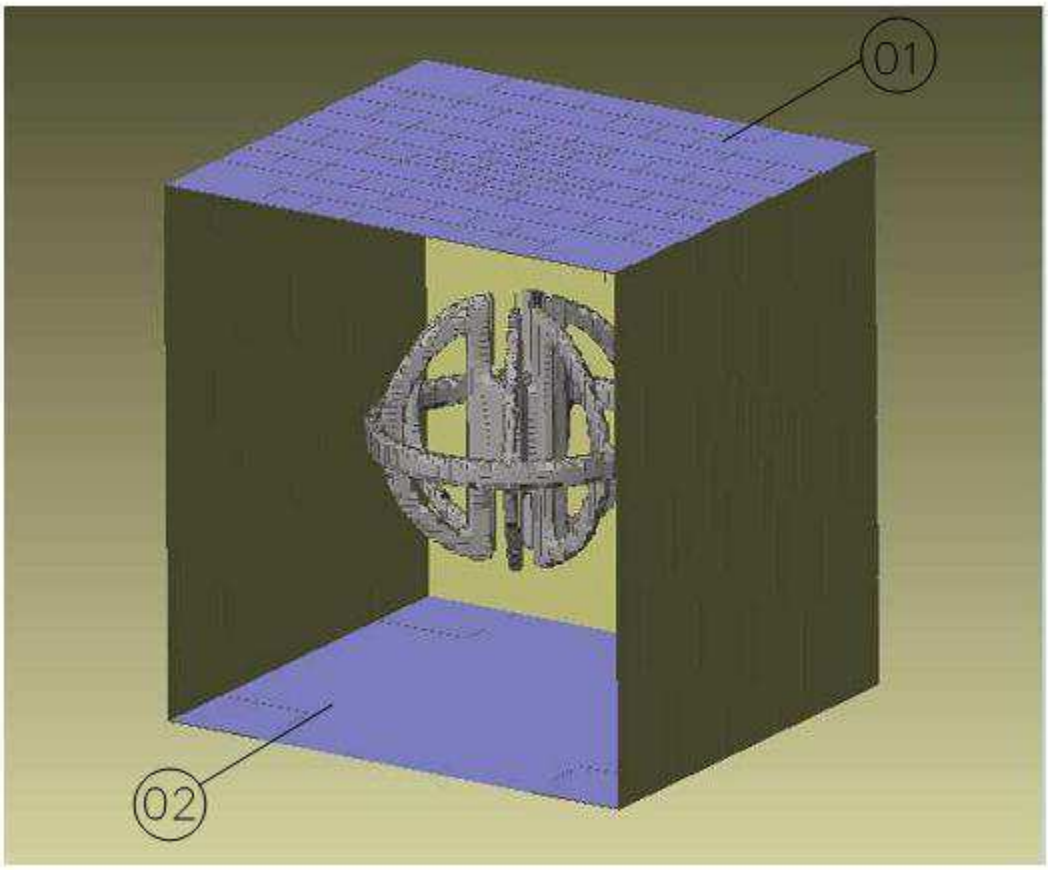
Figura 11 – Partícula do recheio da coluna de destilação.



Fonte: Autoria própria.

Utilizando se os pacotes *snappyhexmesh* e *blockmesh*, presentes no software *OpenFoam*, foram geradas as malhas do ambiente e da esfera. A malha do ambiente possui geometria cúbica e a malha da esfera possui geometria hexaédrica, ambas com tamanho mínimo de 1mm. As condições de fronteira foram estabelecidas conforme ilustrado na Figura 12.

Figura 12 – Condições de fronteira.



Fonte: Autoria própria.

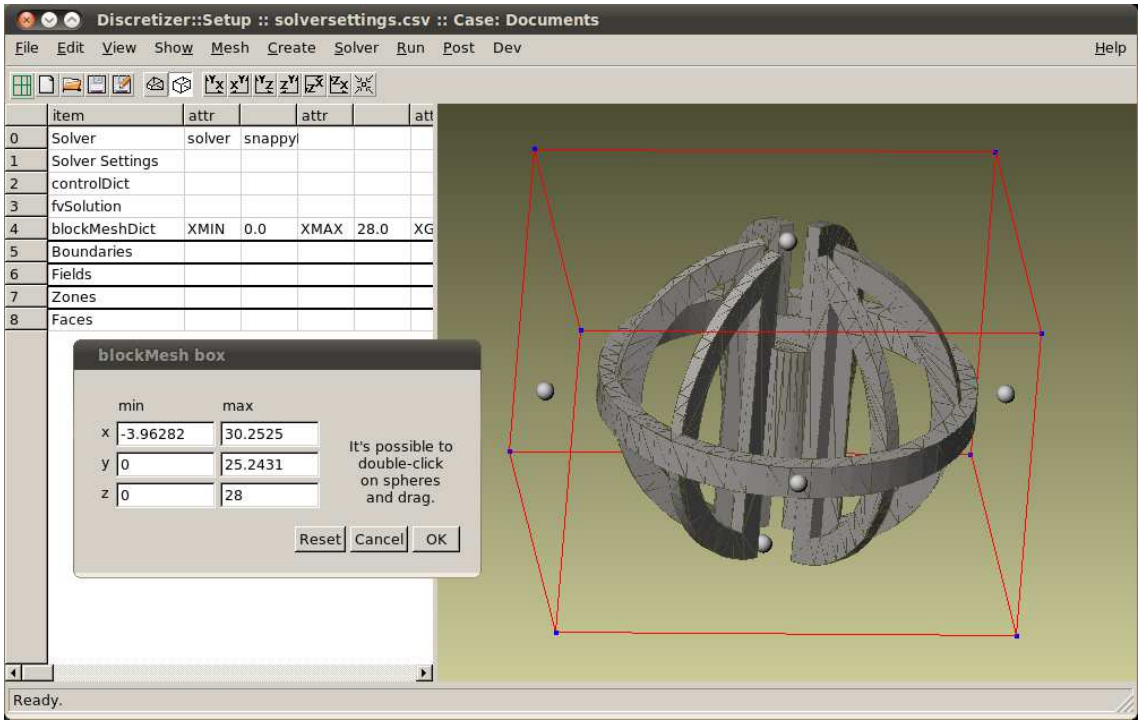
Considerando a Figura 12, na fronteira 01, a pressão é considerada zero, pois a superfície é aberta. Na fronteira 02 a velocidade é considerada como $5x10^{-5}$m/s. Essa teve seu valor estimado considerando a vazão de ácido pelo tempo e área transversal da coluna. As demais fronteiras são consideradas simétricas, ou seja, não existe fluxo por elas.

A viscosidade cinemática é obtida pela Equação 35 (WHITE, 2002).

$$\upsilon = \frac{\mu}{\rho} \tag{35}$$

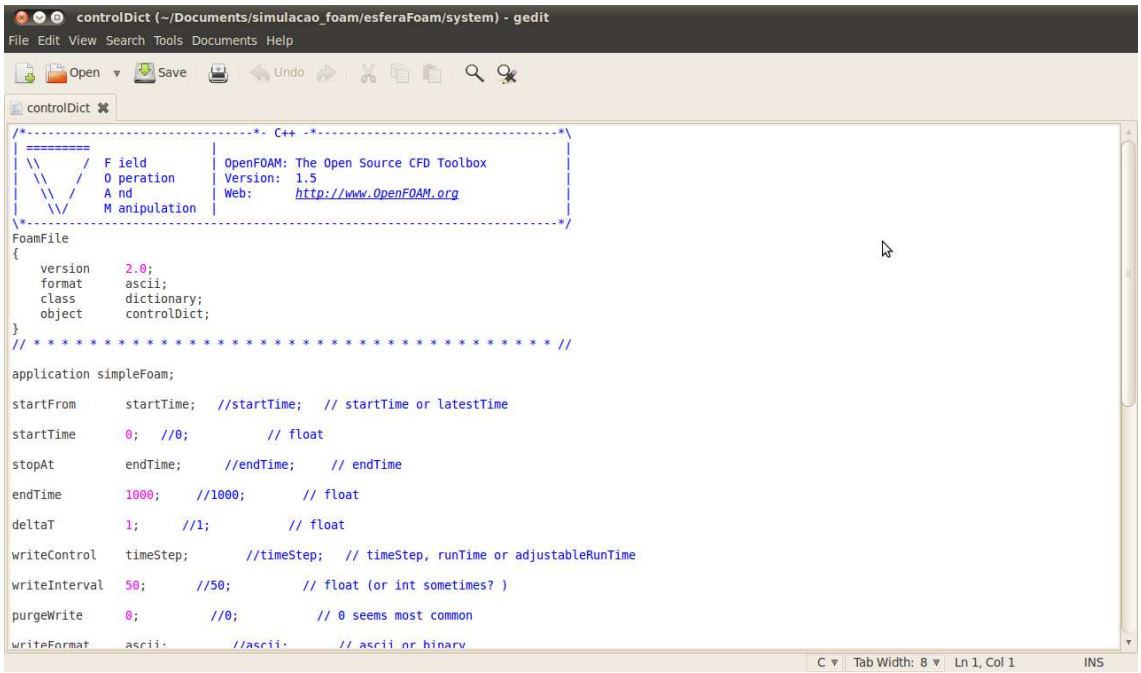
Onde υ é a viscosidade cinemática, μ é a viscosidade dinâmica e ρ é a densidade. Os parâmetros geométricos são definidos no pré-processador *Discretizer*, ilustrado na Figura 13 e as variáveis são definidas no editor *gedit*, ilustrado na Figura 14.

Figura 13 – Pré-processador *Discretizer*.



Fonte: Autoria própria.

Figura 14 – Pré-processador gedit.

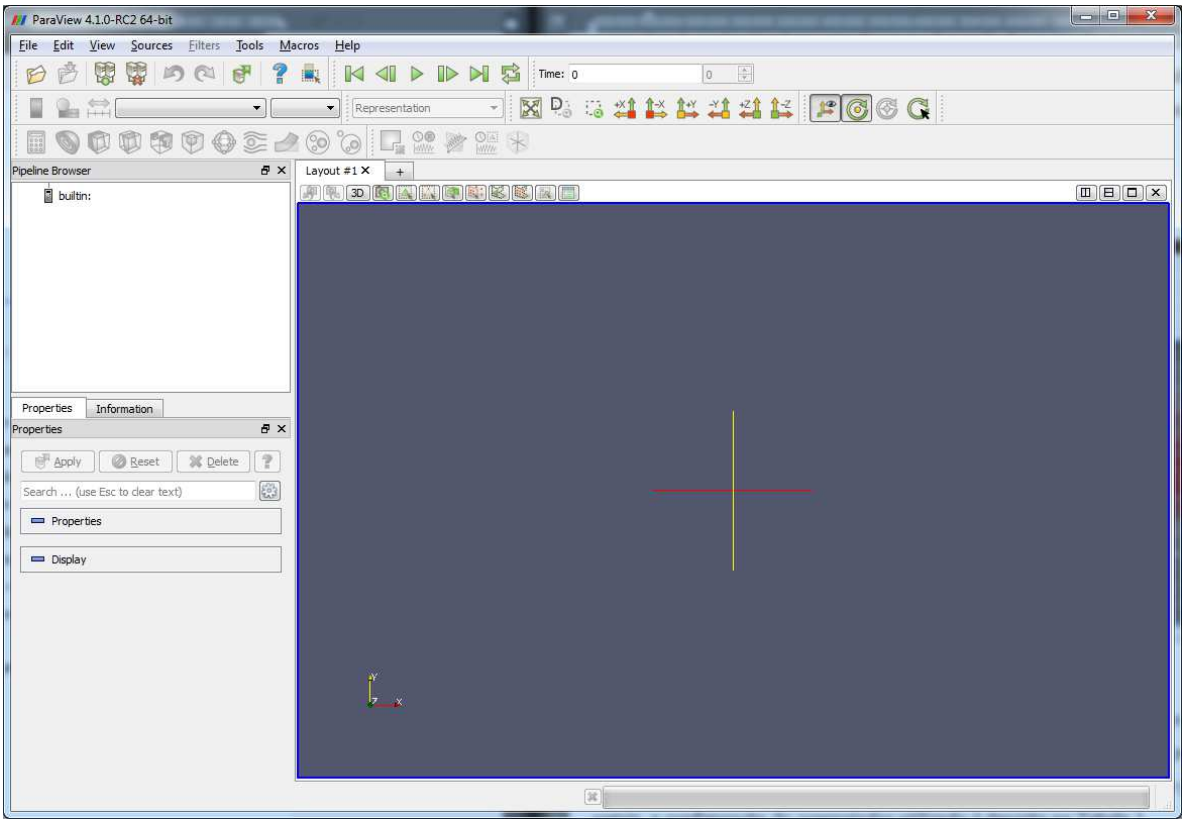


Fonte: Autoria própria.

O programa *gedit* é somente um editor de texto do ambiente Linux, mas devido aos arquivos de descrição da simulação ser do tipo texto, este software é adequado à definição e alteração de variáveis devido a sua simplicidade de uso.

A execução da simulação se dá por meio de comandos de texto no terminal do sistema operacional, onde simplesmente faz-se a chamada do nome do arquivo do solver utilizado dento da pasta que contém os arquivos de descrição. O pós-processador utilizado foi o *paraFoam*, que nada mais é do que uma versão especializada do programa *parawiew* para *OpenFoam*. É ilustrada a tela inicial do *paraFoam* na Figura 15.

Figura 15 – Tela inicial do pós-processador *paraFoam*.



Fonte: Autoria própria.

A simulação foi executada considerando três posições diferentes da esfera para a avaliação da dependência ou não da perda de velocidade e função da posição relativa da esfera ao fluxo. Cada etapa da simulação consumiu cerca de 50 minutos de processamento. A seguir, a configuração do computador utilizado é descrita na Tabela 1.

Tabela 1 - Configuração do computador utilizado.

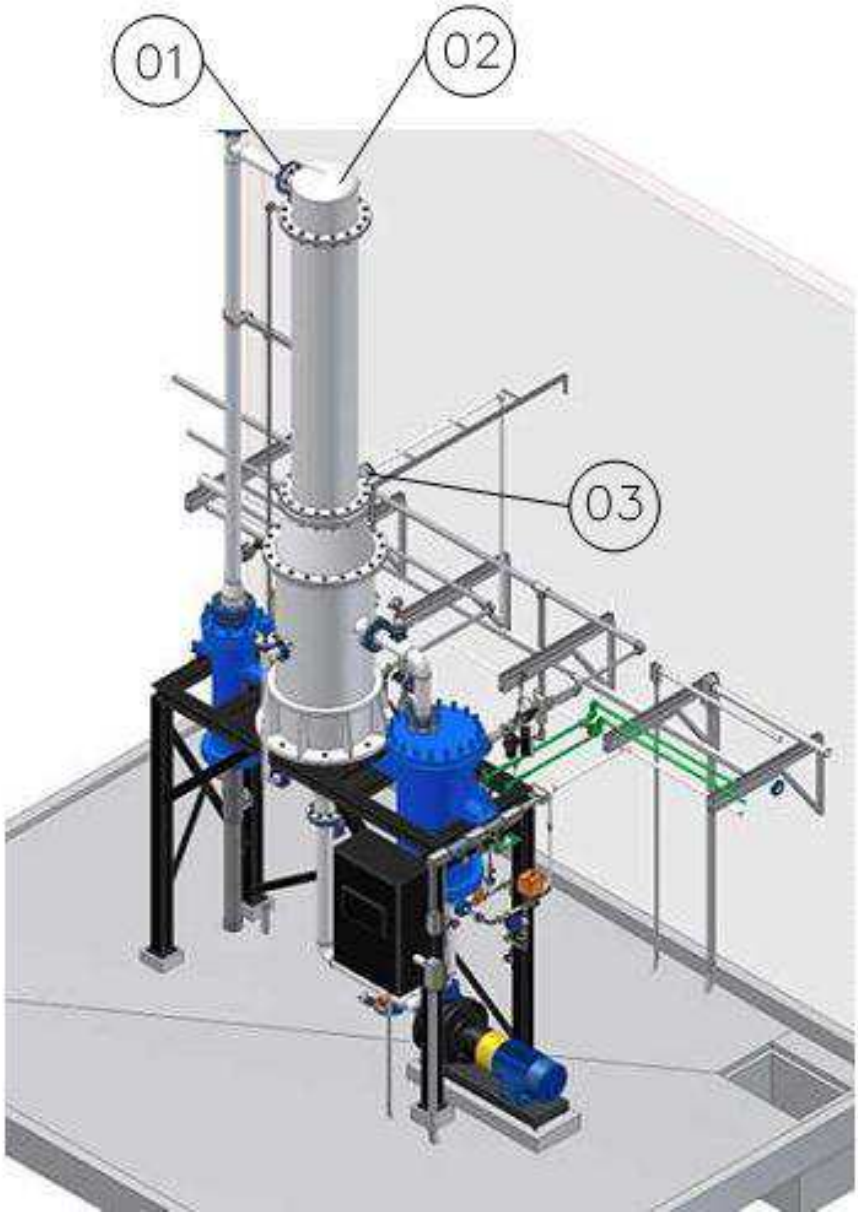
Ítem	Configuração
Processador	Core 2 Duo 2.1 GHz
Memória	4 GB DDR2
Placa de Vídeo	128 MB
HD	SATA 320 GB
Sistema Operacianal	Ubuntu 10.04 LTS

Fonte: Autoria própria.

3.7 DIFUSÃO DO ÁCIDO CLORÍDRICO NA COLUNA DE DESTILAÇÃO

Ademais, este tópico tem por objetivo investigar como ocorre a difusão do ácido clorídrico ao longo da coluna de destilação de leito fixo. A primeira investigação é se as esferas do recheio exercem alguma influência no perfil de concentração do ácido ao longo da coluna. Para isto foram efetuadas duas simulações. Uma primeira considerando uma simplificação em duas dimensões da coluna de esferas e uma segunda também em duas dimensões considerando que a coluna está preenchida somente por vapor de água e ácido. Uma terceira investigação simula se é possível, com a instalação de um anteparo, diminuir a concentração de vapor ácido perto do bico de lavagem, pois também é nesta região que se encontra o flange de captação da água recuperada. Portanto se a concentração de ácido for mantida baixa nesta periferia, possivelmente também o arraste de ácido junto com esta água recuperada seria minimizado, podendo assim diminuir o custo do ácido regenerado. A seguir são ilustrados na Figura 16 os pontos de injeção de água, o ponto de recuperação da água a ser condensada e o ponto onde é recuperado o ácido regenerado.

Figura 16 – Pontos de injeção de água, recuperação de água e extração de ácido.

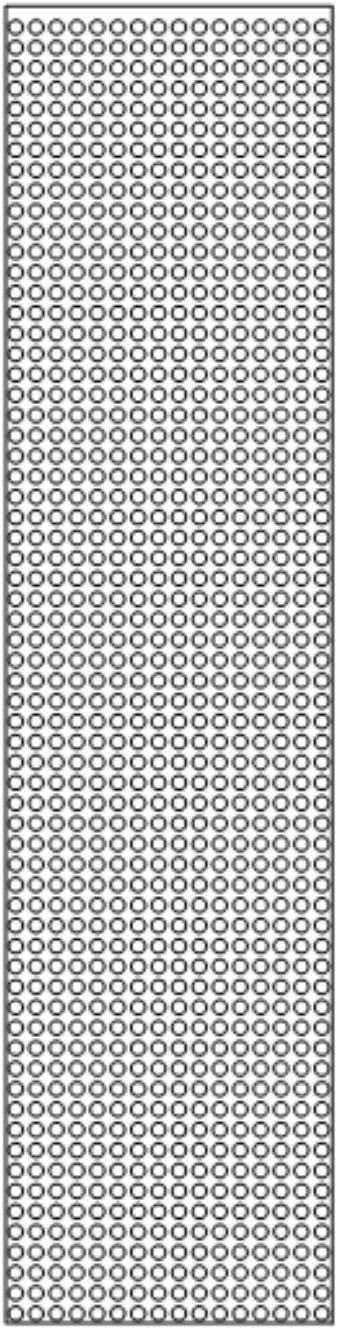


Fonte: Catálogo BETACONTROL (2011).

O ponto número 01 é o flange de conexão da tubulação que conduzirá o vapor d'água ao condensador. O ponto número 02 é o local onde é instalado o bico de lavagem. Já o ponto 03 é onde é instalado o ponto de recuperação do ácido.

A análise foi realizada por meio de uma simplificação da coluna para um modelo de duas dimensões, já que existem aproximadamente 35.000 esferas no interior deste leito. Neste modelo, foram consideradas inicialmente o diâmetro interno da coluna como sendo 640mm, a altura 2.580mm e o diâmetro da partícula do recheio como sendo 28mm. É ilustrado na Figura 17 o modelo utilizado na simulação inicial.

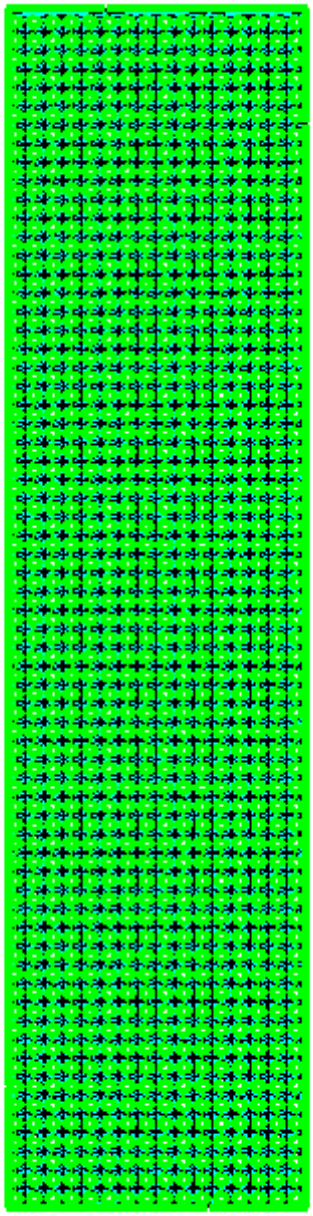
Figura 17 – Modelo simplificado da coluna de destilação considerando o recheio.



Fonte: Autoria própria.

A partir deste modelo, com a utilização do *software opensource GMSH*, foi possível a geração da malha a ser inserida no programa de análise numérica. Para esta simulação foi utilizado o software também de código aberto *ELMER Multifisics*, considerando para isto o modelo de advecção e difusão presentes neste. É ilustrada na Figura 18 a malha utilizada nesta primeira simulação.

Figura 18 – Malha gerada considerando as esferas do recheio.



Fonte: Autoria própria.

O tamanho mínimo de malha considerado para esta configuração foi de 2mm, do tipo triangular. Este tamanho foi estipulado para se obter uma convergência mais rápida, sem o prejuízo da precisão computacional, pois fez se simulações utilizando tamanho de malha maior e menor que este até chegar-se em uma dimensão satisfatória. A equação utilizada pelo software Elmer para o modelo de advecção difusão é ilustrada na Equação 10.

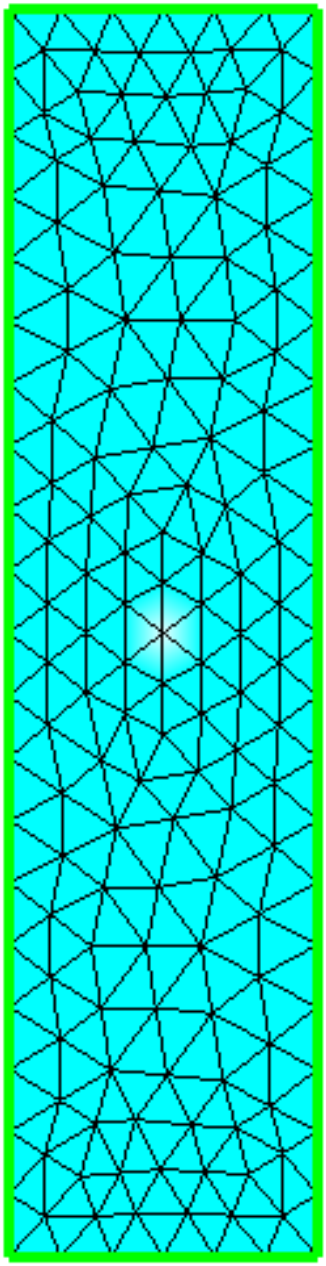
$$\rho\left(\frac{\partial c_i}{\partial t}+\left(\vec{v}\cdot\nabla\right)c_i\right)=\rho\nabla\cdot\left(D_i\nabla c_i\right)+S_i \tag{10}$$

Onde $\vec{v}$ é a velocidade de advecção , que nada mais é do que o arraste provocado pelo fluxo convectivo do vapor de água. O termo D_i é o coeficiente de difusão e S_i é uma fonte, sumidouro ou termo de reação química, que também é considerada zero, pois não existe reação química no interior da coluna. Para o termo D_i foi considerado o valor indicado por Drakos *et al* (2003), feita a correção para a temperatura interior da coluna, utilizando-se a Equação 6. As condições de contorno utilizadas foram as de Von Neumann, ou seja, foram valores de fluxo calculados a partir das concentrações estimadas no topo e na base da coluna, utilizando-se para isto a Equação 36.

$$N''_A = \frac{D_{AB}}{L}\left(C_{A,s} - C_{A,0}\right) \tag{36}$$

Considerando-se as mesmas condições de contorno, foram executadas também as simulações sem considerar o recheio da coluna e considerando abas interna, sendo que estas tem o objetivo de dificultar a alta concentração do ácido próximo a flange de captação da água recuperada. É ilustrada na Figura 19 a malha utilizada na coluna sem considerar as esferas.

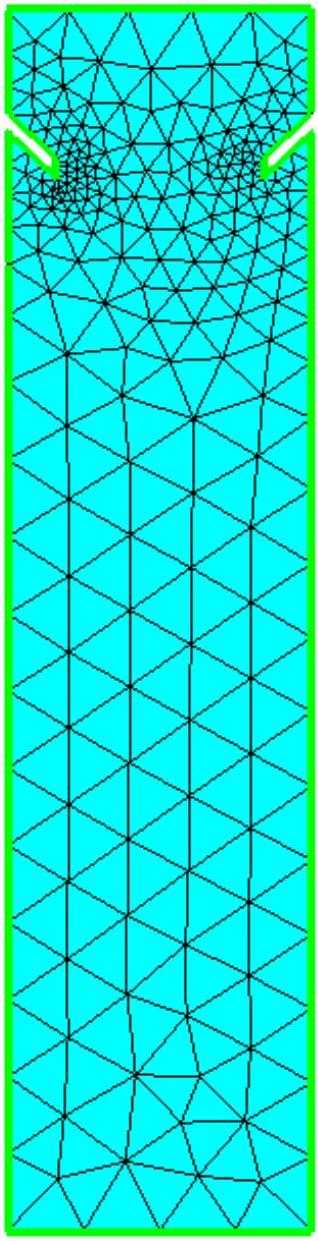
Figura 19 – Malha utilizada sem considerar as esferas do recheio.



Fonte: Autoria própria.

Foi também considerada a simulação com a torre contendo anteparos que objetivam dificultar o acesso do vapor ácido a saída da água recuperada. Este fluxo é suposto ser forçado pelo arraste convectivo do vapor de água. É ilustrada na Figura 20 a malha utilizada nesta simulação.

Figura 20 – Malha sem considerar esferas e considerando barreiras.



Fonte: Autoria própria.

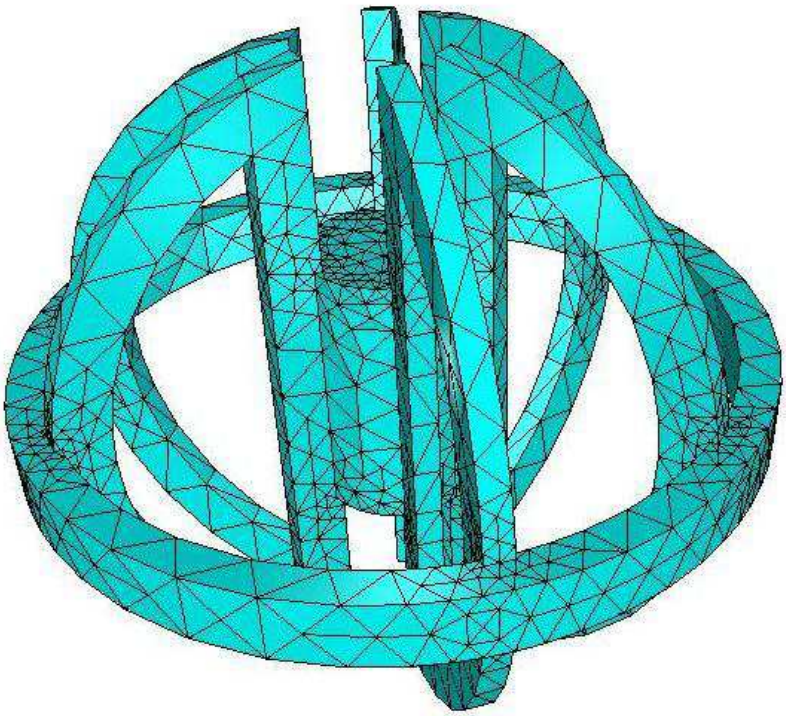
3.8 AQUECIMENTO DO RECHEIO

Esta investigação é realizada devido ao longo período decorrente desde o início da operação do equipamento até o momento em que ele entra em regime permanente de operação, ou seja, inicia o processo de envio do ácido regenerado ao reservatório apropriado.

Este intervalo de tempo é de cerca de duas horas e representa um grande consumo de combustível da caldeira, sem recuperação de ácido.

Desta maneira, foi utilizado o software *ELMER Multifisics* (ELMER, 2012) para executar esta simulação. O modelo geométrico do recheio foi realizado no software de código aberto *SALOME MECA* (SALOME - The Open Source Integration Plataform for Numerical Solutions, 2012) e a malha foi gerada pelo software *GMSH* (Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities, 2012), também de código aberto. Ilustra-se na Figura 21 a malha utilizada na simulação. O tamanho máximo de malha utilizada foi de 4 mm e o mínimo foi de 1 mm, possuindo esta geometria tetraédrica.

Figura 21 – Malha utilizada na discretização das partículas.



Fonte: Autoria própria.

As partículas que constituem o recheio da coluna são fabricadas em PTFE® (politetrafluoretileno) e tiveram suas propriedades físicas levantadas junto ao catálogo do fabricante (DUPONT, 2012) e são ilustradas na Tabela 2.

Tabela 2 – Propriedades físicas do PTFE.

ρ [kg.m^{-3}]	c_p [J.kg^{-1}.K^{-1}]	K [W.m^{-2}.k^{-1}]
2200	1000	0.25

Fonte: Dupont (2012).

Onde ρ é a densidade em, c_p é o calor especifico e k é a condutividade térmica.

Para se desenvolver um modelo consistente, as seguintes considerações são feitas:

a) A transmissão de calor é considerada em regime transiente.

b) As perdas para o ambiente são desconsideradas.

c) O material do preenchimento é considerado isotrópico.

d) A fonte de calor é considerada constante.

e) O contato entre partículas é desconsiderado.

f) As propriedades do meio são consideradas constantes.

Baseado nessas considerações, pode se utilizar o solver do software ELMER, fazendo-se as seguintes considerações a respeito da Equação 37.

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \left(\vec{u} \cdot \nabla \right) T \right) - \nabla \cdot \left(k \nabla T \right) = \overline{\overline{\tau}} : \overline{\overline{\varepsilon}} + \rho h \tag{37}$$

A densidade ρ é considerada constante para efeito de cálculos, c_p também é considerada constante, a temperatura T é considerada entre a temperatura ambiente (25 °C) e a temperatura de trabalho (aproximadamente 110 °C), k é considerada constante, a fonte de calor h é considerada em regime permanente e o termo $\overline{\overline{\tau}} : \overline{\overline{\varepsilon}}$ é considerado nulo. As condições de contorno utilizadas foram as de Dirichlet, ou seja, as temperaturas internas da coluna de destilação as quais o recheio é exposto e as condições de Von Neumann, ou seja, o fluxo de calor provocado pelo arraste convectivo que neste caso foi considerado de 0.005 m/s. O tempo considerado para a simulação é entre 0 até 10 minutos. Devido à falta de dados apropriados na literatura e que grande parte do vapor que entra na coluna é composta por vapor d'água, as propriedades físicas de condução térmica foram consideradas como somente sendo do vapor de água, segundo tabelas fornecidas por Incropera (1990). Foi executada também uma simulação prevendo o aquecimento da coluna utilizando-se um modelo de duas dimensões (utiliza-se a mesma malha do estudo de difusão sem esferas) onde objetiva-se

entender se a dificuldade de aquecimento é dependência somente do recheio do leito fixo ou também é devido às dimensões da coluna.

3.9 PERDA DE CALOR NO TROCADOR DE CALOR

É investigada também a perda de calor pelo não isolamento do corpo do trocador de calor. De acordo com Bejan *et al* (2003), pode-se considerar a parte cilíndrica do trocador de calor como uma parede plana, desde que a razão diâmetro/comprimento seja elevada o suficiente. Como este autor não deixa claro o valor mínimo desta relação considerou-se esta abordagem válida para a geometria do trocador utilizado. Desconsideram-se os flanges de entrada e saída do trocador, pois representam uma área insignificante de troca térmica. Ilustra-se na Figura 22 o trocador analisado.

Figura 22 – Trocador de calor.

Fonte: Catálogo BETACONTROL (2011).

O diâmetro da carcaça deste equipamento é de 530mm e sua altura é de 1.450mm. O ar é considerado parado e a temperatura ambiente de 25 °C e a temperatura da superfície metálica é de 157 °C. As propriedades do ar foram obtidas de tabelas fornecias por Incropera

e Witt (1990). A resolução deste problema é a simples implementação da Equação 27, Equação 28, Equação 29 e Equação 30 já apresentadas no capitulo da revisão bibliográfica.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 ANÁLISE TERMOECONÔMICA

Primeiramente têm-se os resultados considerando as condições de operação atual, utilizando-se apenas briquete como combustível na geração de vapor e uma nova condição de operação, onde se faz uso de restos de madeira provenientes de caixotes de peças utilizados por outra empresa do grupo como combustível. Estes restos de madeira não possuem custo, pois antes de serem utilizados como combustível tinha de ser destinados a um receptor especifico que fazia cobrança de um valor para fazer esta coleta.

Constam na Tabela 3 os custos atuais de produção, fornecidos pela empresa em que o equipamento é instalado. O custo do ciclo de vida do ácido são os custos envolvidos com a neutralização e o descarte do ácido, quando não passa pelo processo de regeneração.

Tabela 3 – Custos fornecidos pela empresa.

Dado fornecido	valor
Custo de ciclo de vida do ácido [R$/kg]	0,645
Percentual de ácido recuperado [%]	25,000
Custo de neutralização água de rejeito [R$/kg]	0,094
Percentual de água de rejeito [%]	40,000
Custo do briquete [R$/kg]	0,290

Fonte: Autoria própria.

A vazão de vapor da caldeira foi considerada 156,3 kg/h, baseado em dados obtidos no IHM do regenerador, a pressão de operação manométrica foi de 6 Bar, a temperatura de 163,8 ºC, a temperatura da água de retorno 85 ºC e a vazão de briquete foi de 0,0076 kg/s.

Baseado nestes dados fornecidos pela empresa e fazendo-se uso do algoritmo desenvolvido no ambiente Matlab®, plota-se na Tabela 4 os custos iniciais referentes ao ácido regenerado. Foram consideradas sete casas decimais após a vírgula, devido ao padrão utilizado pela empresa detentora do regenerador. Este padrão é utilizado devido ao fato de que são processados milhões de litros de ácido ano, e qualquer desvio por arredondamento causa grandes diferenças monetárias.

Tabela 4 – Custos iniciais de operação.

Tipo de Custo	Valor
custo do vapor por hora [R$/h]	26,240000
custo da exergia do vapor por kJ [R$/kJ]	0,0002209
custo do ácido por hora [R$/h]	28,3300000
custo da exergia do ácido por kJ [R$/kJ]	0,0004439
custo por kg de solução bruta [R$/kg]	0,1968000
custo por kg de ácido recuperado [R$/kg]	0,8246000

Fonte: Autoria própria.

Após esta primeira análise, calculou-se um novo custo de operação, considerando o uso de somente metade do briquete inicialmente utilizado e o restante do combustível utilizado sendo composto pelos restos de madeira conforme descrito anteriormente. A seguir ilustram-se estes novos custos na Tabela 5.

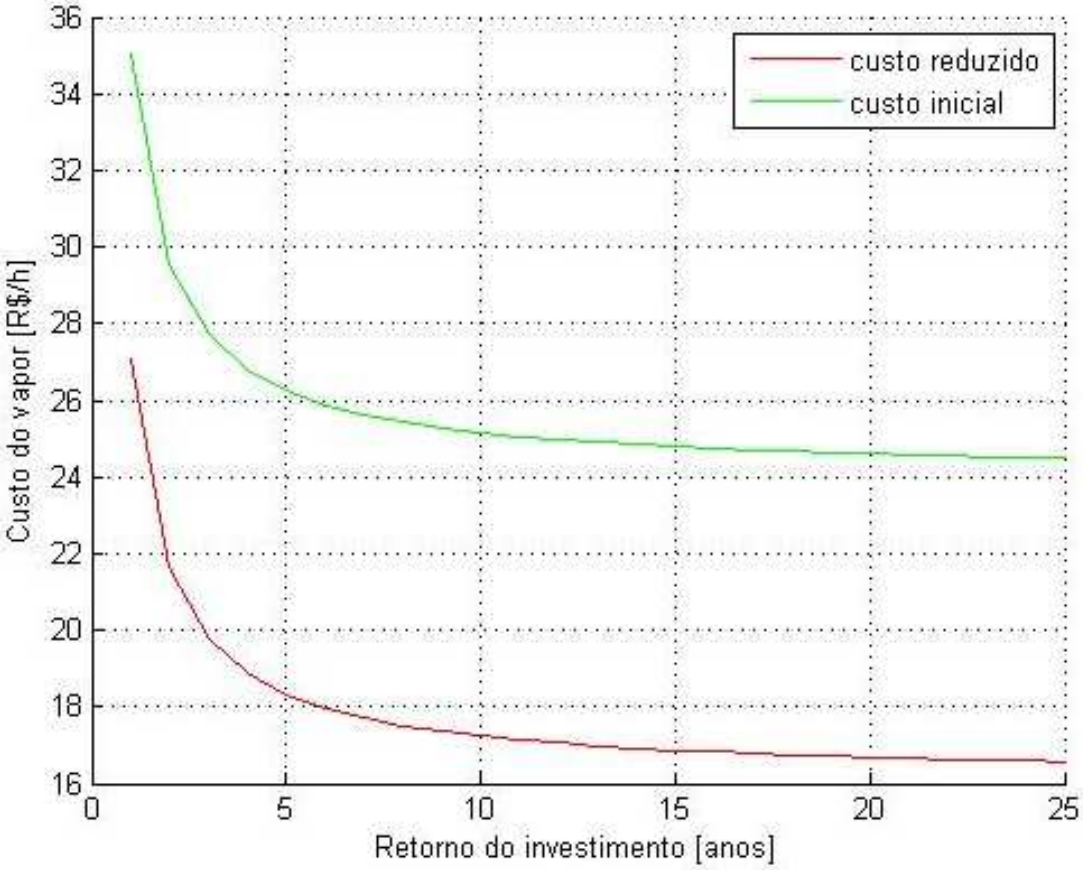
Tabela 5 – Novo custo de operação.

Tipo de custo	Valor
custo do vapor por hora [R$/h]	7,2874000
custo da exergia do vapor por kJ [R$/kJ]	0,00015433
custo do ácido por hora [R$/h]	28,3300000
custo da exergia do ácido por kJ [R$/kJ]	0,0003190
custo por kg de solução bruta [R$/kg]	0,1418000
custo por kg de ácido recuperado [R$/kg]	0,6049000

Fonte: Autoria própria.

Nota-se que devido a esta modificação no combustível da caldeira, já foi atingida a viabilidade econômica do equipamento, pois o custo do ácido recuperado por hora fica abaixo do custo do ácido em seu ciclo normal de vida. Os cálculos anteriores foram executados considerando-se um tempo de retorno de investimento médio de cinco anos. Já que o custo de aquisição do equipamento influencia diretamente nos custos de operação é necessário uma análise do custo do vapor em função do tempo de retorno esperado para o equipamento. Plota-se na Figura 23 o custo do vapor em função do tempo de retorno esperado para a situação inicial e para a situação de troca de combustível.

Figura 23 – Custo do vapor em função do tempo de retorno para a situação inicial.



Fonte: Autoria própria.

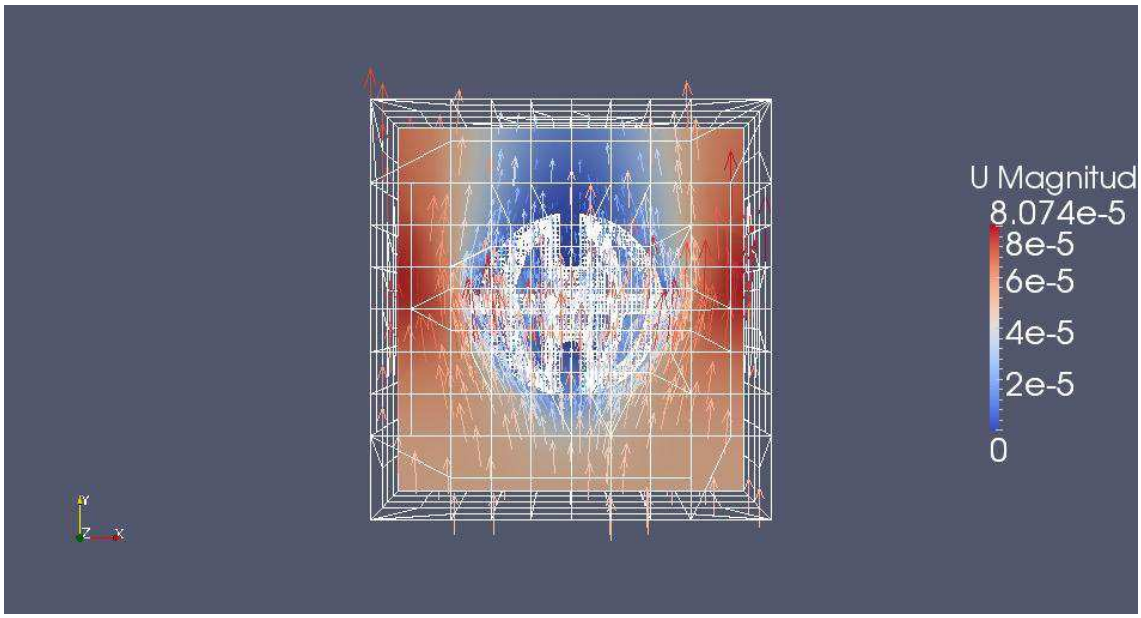
Comparando-se estas curvas, nota-se uma grande redução dos custos de produção de vapor (o novo custo é cerca de 27,74% do custo inicial). A análise do custo do vapor em termos do tempo de retorno esperado para o equipamento é importante, pois pode ajudar na decisão de qual o melhor período para se contratar um financiamento para aquisição deste sistema e tornar sua viabilidade mais evidente para outras galvanizações que venham a adquiri-lo. Um bom custo para o vapor seria a partir do ponto em que a curva começa a se aproximar de uma constante. É somente desta forma que a análise de engenharia pode ajudar com relação à aquisição do equipamento, ficando os demais fatores financeiros, tal como juros por ano a cargo da administração e gerência da empresa.

4.2 ESCOAMENTO DO VAPOR DE ÁCIDO CLORÍDRICO ATRAVÉS DA COLUNA DE LEITO FIXO

Este tópico apresenta os resultados de uma simulação considerando-se o fluxo de vapor através de uma esfera para observação da perda de velocidade desta corrente. Com isto se prova que qualquer movimentação do gás analisado provocada possivelmente pelo fluxo do líquido forçado pela bomba de circulação é anulado, pois a bomba não imprime a velocidade diretamente sobre recheio da coluna conforme ilustrado na Figura 1, devendo-se prevalecer somente os fluxos difusivos e de arraste convectivo, os quais serão apresentados em tópicos a seguir.

Esta análise foi executada considerando-se três posições diferentes da esfera em relação ao fluxo, provando-se ou não a dependência da perda de velocidade à posição da esfera. O valor de μ utilizado é de 1,9290x10^{-5} kg/m.s e o valor de ρ é de 1,1182 kg/m^3 (Cf. COCO, 2013), a velocidade é considerada como 5x10^{-5}m/s, a concentração utilizada ao longo da coluna foi de 13 kgHCl/m^3, e a concentração no topo da coluna, deduzida através da titulação da água recuperada foi de 0,0024 kgHCl/m^3. Ilustra se na Figura 24 o resultado desta primeira consideração.

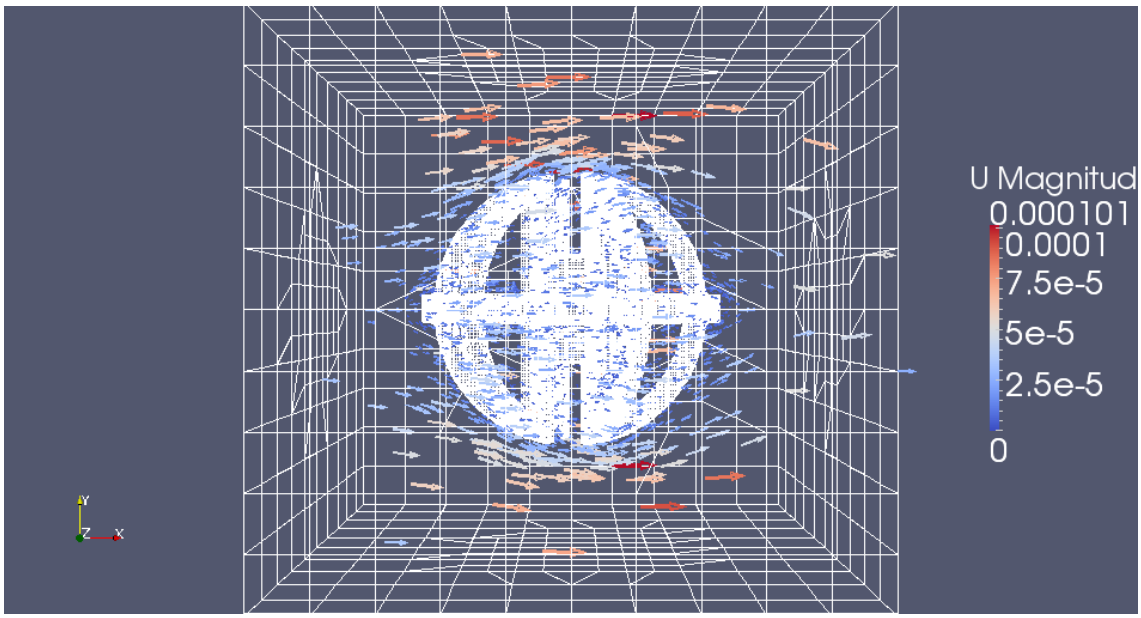
Figura 24 – Perda de velocidade do fluxo para a primeira consideração [m/s].



Fonte: Autoria própria.

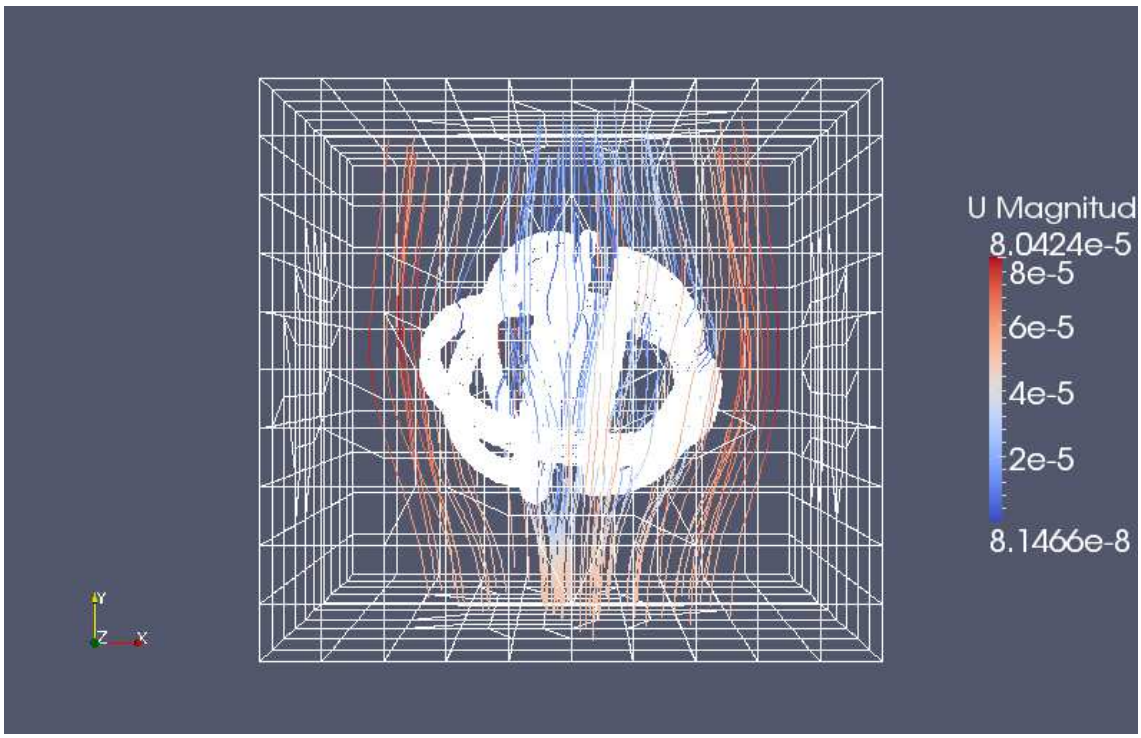
Inicialmente a velocidade considerada é em torno de $7x10^{-5}$ m/s, mas pode-se observar que ela tem seu módulo reduzido para valores inferiores a $2x10^{-5}$ m/s. São ilustradas na Figura 25 e na Figura 26 os fluxos considerados perpendiculares ao primeiro e a quarenta e cinco graus em relação à posição inicial.

Figura 25 – Fluxo considerado perpendicular ao primeiro [m/s].



Fonte: Autoria própria.

Figura 26 – Fluxo considerado a quarenta e cinco graus do primeiro [m/s].



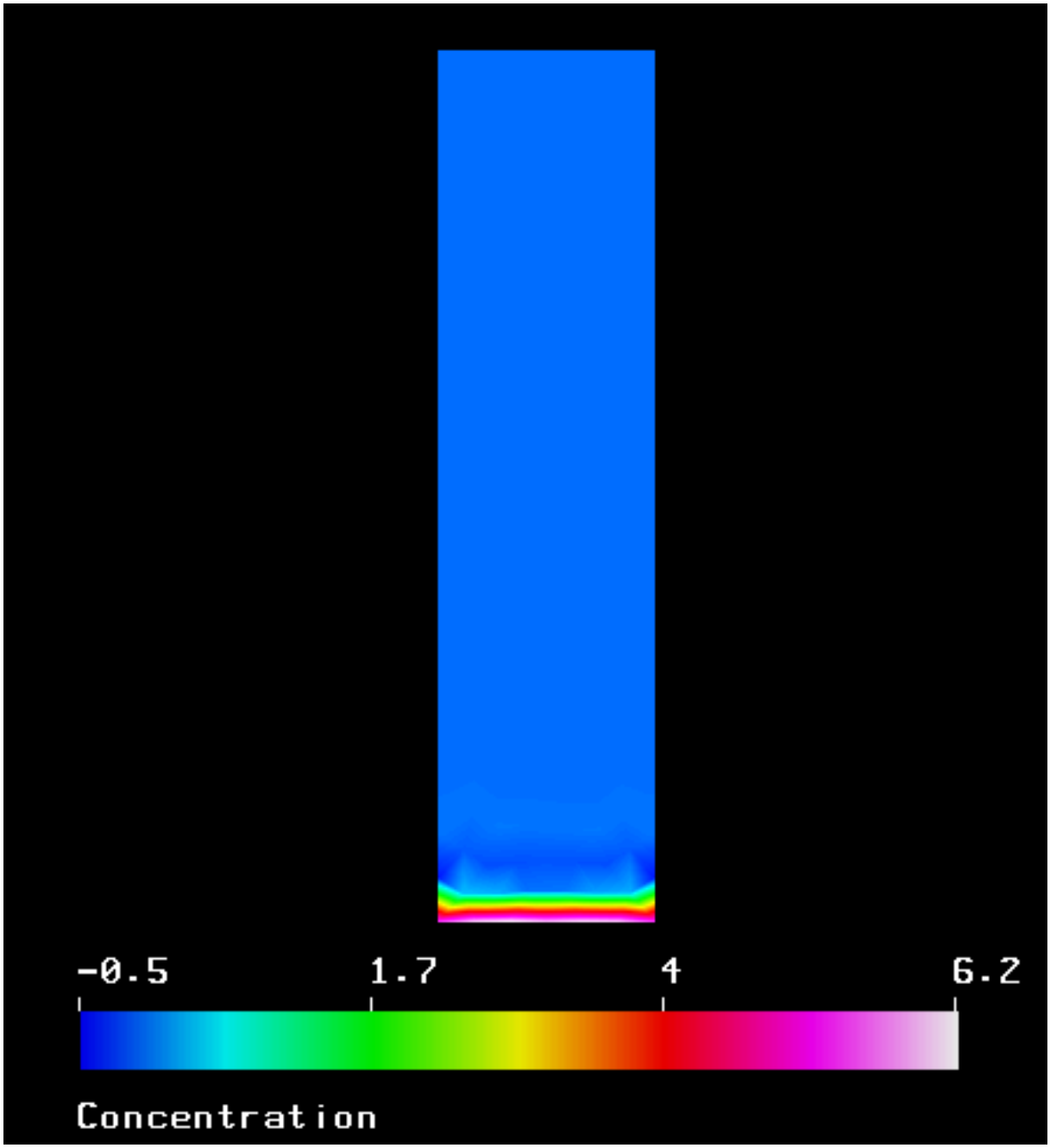
Fonte: Autoria própria.

Pode-se observar que a perda de velocidade é independente da posição da partícula. Também é observável a grande redução do módulo da velocidade considerada (deve-se somente observar o módulo da velocidade do fluxo que passa pela parte interior da esfera, pois devido à utilização de um volume de controle pequeno na análise, a velocidade aumenta ao passar entre a borda exterior da esfera e o final do volume de controle). Desta maneira, acredita-se que o recheio da coluna cumpre o seu papel de frear o arraste provocado pelo fluxo imposto pela movimentação do líquido no interior do equipamento. Cabe a seguir a investigação de outras formas de transporte mássico que sejam responsáveis pelo arraste do ácido com a água recuperada.

4.3 DIFUSÃO ADVECÇÃO DO ÁCIDO CLORÍDRICO NA COLUNA DE DESTILAÇÃO

Diante do estudo realizado, pode-se agora discutir os resultados da simulação da difusão do ácido clorídrico na coluna, considerando-se inicialmente somente o fenômeno da difusão, em seguida considerando-se o arraste devido ao fluxo convectivo do vapor de água na coluna e por fim ilustrar a simulação do efeito de um anteparo no interior da coluna, com o objetivo de minimizar o arraste convectivo. Ilustra-se na Figura 27 a distribuição de concentração de ácido considerando o final do período inicial de trabalho, ou seja, aproximadamente duas horas de operação do equipamento logo após uma manutenção na coluna, já que nestas condições a concentração inicial é considerada zero e o fluido que inicialmente ocupa a coluna é o ar atmosférico. A velocidade é considerada como $5x10^{-5}$m/s, a concentração utilizada ao longo da coluna foi de 13 kgHCl/m^3, e a concentração no topo da coluna, deduzida através da titulação da água recuperada foi de 0,0024 kgHCl/m^3.

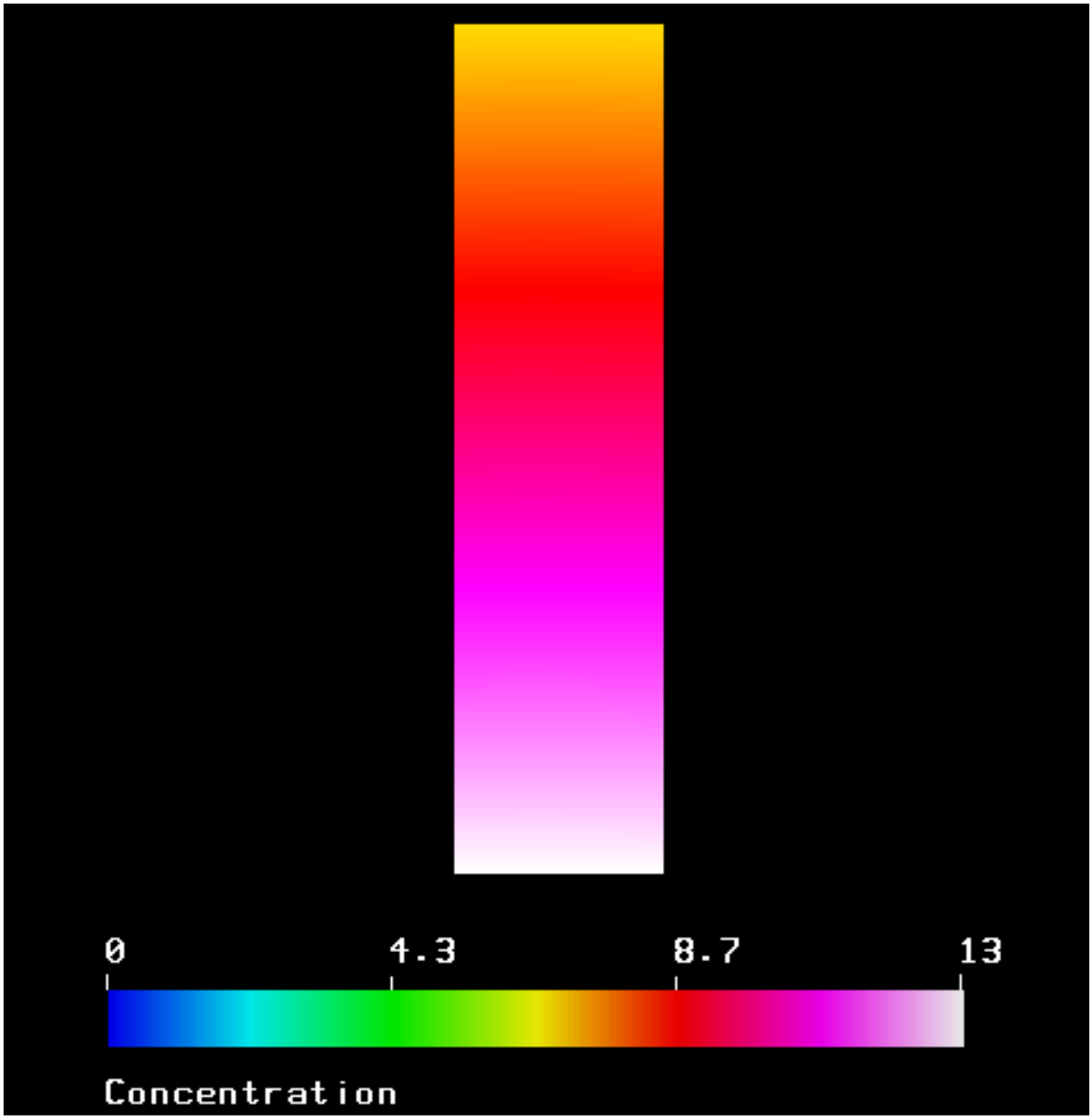
Figura 27 – Concentração ao final de 2 horas de trabalho inicial considerando-se somente difusão [kg/m^3].



Fonte: Autoria própria.

O modelo considerando-se somente difusão é insignificante, pois não existe arraste do ácido para além do inicio da coluna. Faz-se então a consideração do arraste convectivo provocado pela movimentação do vapor de água através da coluna.

Figura 28 - Concentração ao final de 2 horas de trabalho inicial considerando-se o arraste convectivo [kg/m^3].

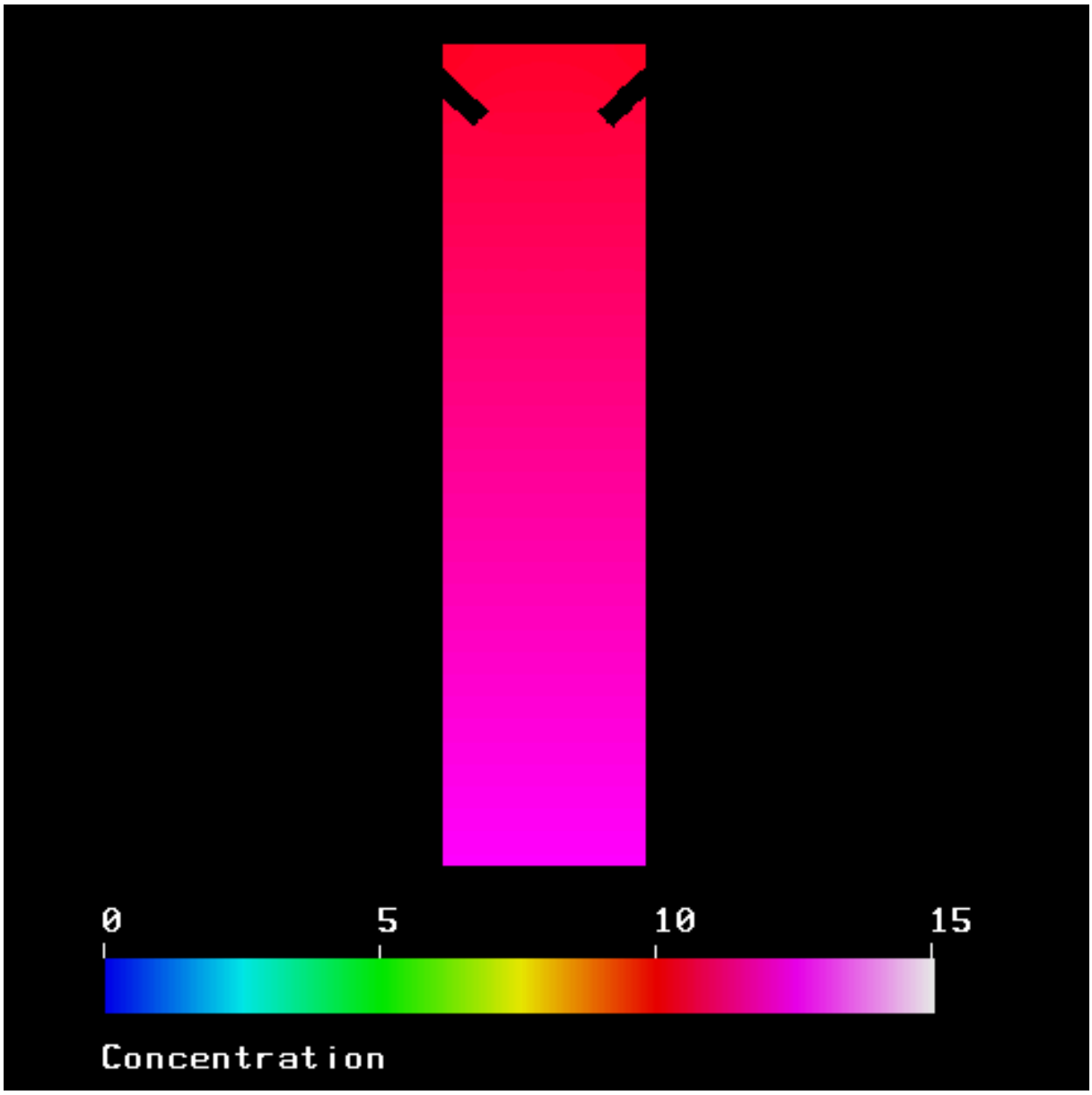


Fonte: Autoria própria.

Pode ser visto na Figura 28, considerando uma velocidade de convecção de 0,005 m/s, o perfil de concentração presente no interior do equipamento no momento anterior ao disparo do bico de lavagem. Acredita-se que este modelo seja fiel a realidade encontrada durante o processo de regeneração, pois os dados de processo são correspondentes aos resultados da simulação. Já que a coluna foi modelada considerando difusão/arraste convectivo, torna-se necessário verificar a eficiência de um anteparo para restringir este fluxo próximo à aresta de

captação da água recuperada. Plota-se na Figura 29 o perfil de concentração considerando o anteparo.

Figura 29 - Concentração ao final de 2 horas de trabalho inicial considerando-se o arraste convectivo e anteparo [kg/m^3].

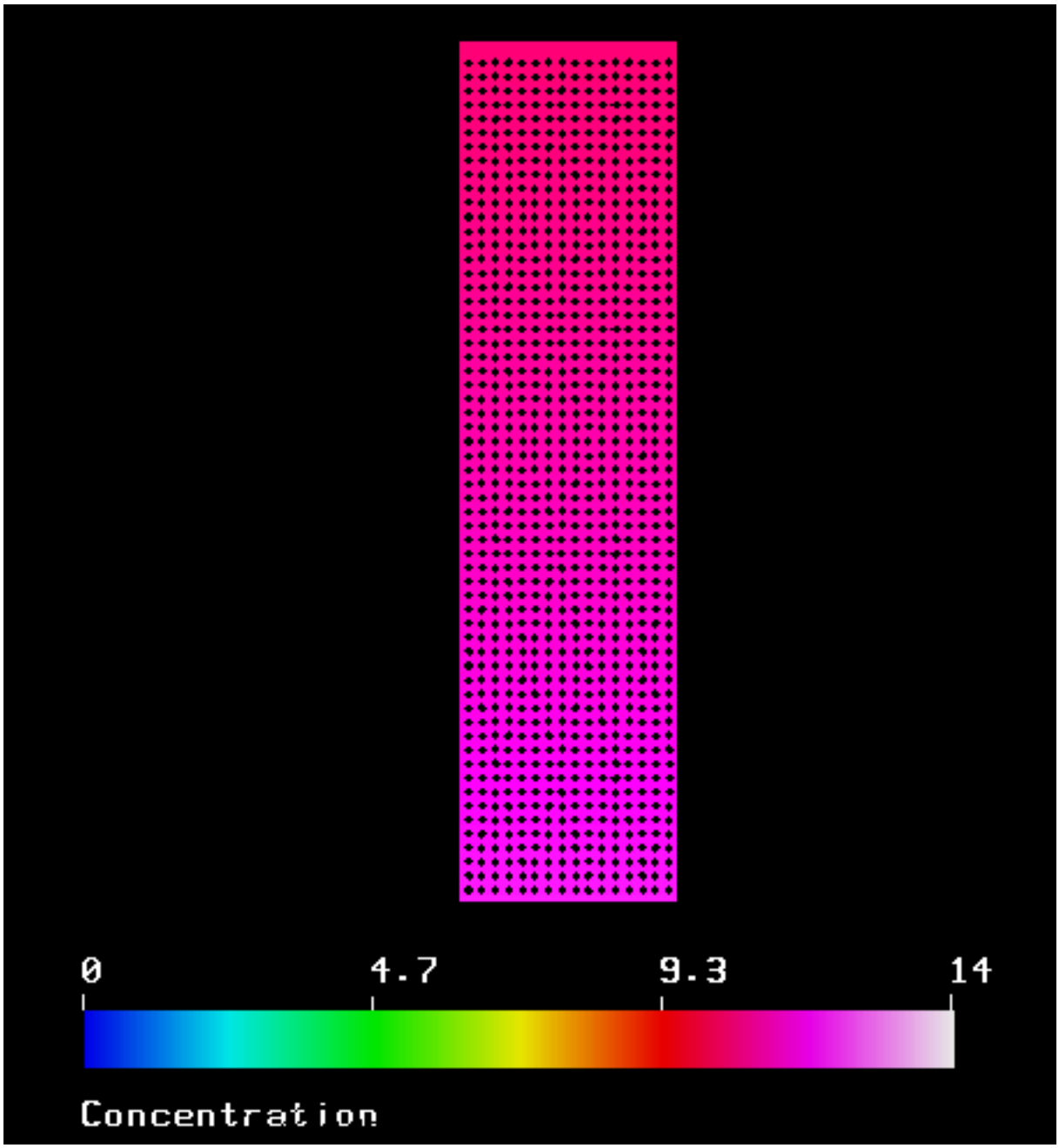


Fonte: Autoria própria.

O anteparo não exerceu nenhuma influência na diminuição da concentração próxima ao flange de captação da água recuperada. Desta forma a única forma de controle da concentração fica a cargo do bico de lavagem. Na prática chegou-se a um valor limite do fluxo de água do bico, pois se aumentado o fluxo de água a concentração do ácido recuperado cai. Então, desta forma o arraste de ácido pelo fluxo convectivo é um problema que ainda terá

que se conviver. Por fim, mostra-se na Figura 30 a não dependência do perfil de concentração da consideração da presença do recheio na simulação. Este fato é importante, pois o número de nós da malha considerando o perfil do recheio é muito elevado, o que vem a aumentar em muito o tempo de processamento e consequentemente atrapalhar o desenvolvimento da análise.

Figura 30 – Perfil de concentração considerando a geometria do recheio [kg/m^3].

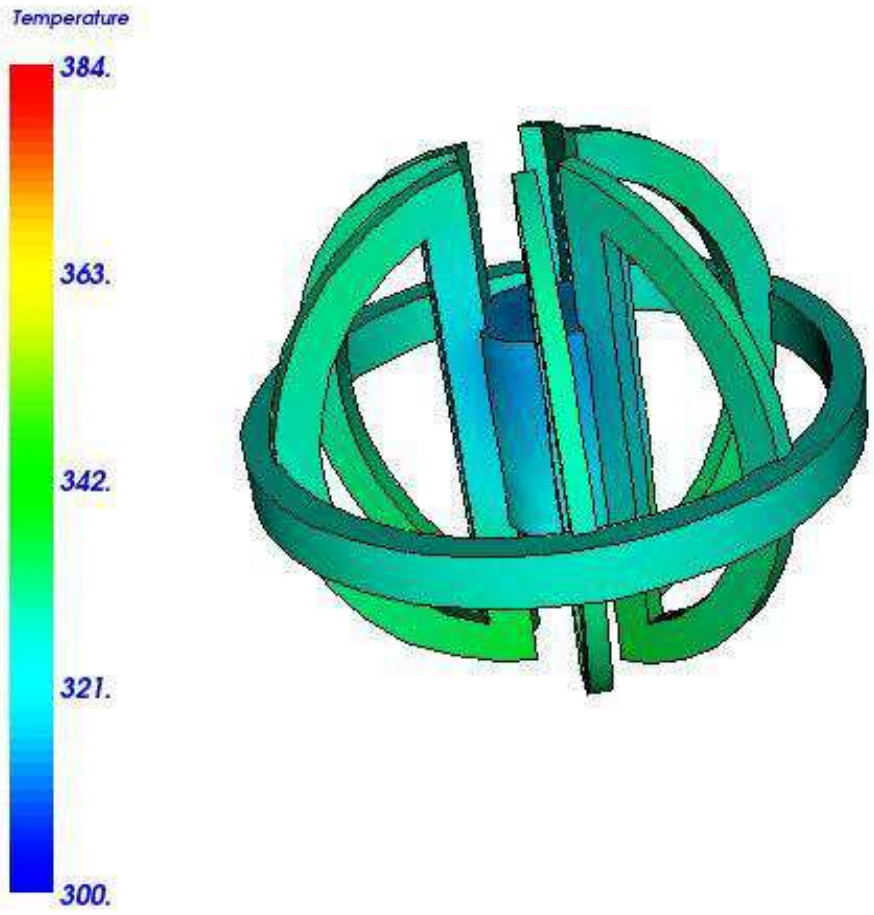


Fonte: Autoria própria.

4.4 AQUECIMENTO DO RECHEIO

Além do problema descrito no item anterior, tem-se também por hipótese da demora a entrar em trabalho no regime permanente devido à dificuldade do aquecimento do recheio da coluna. Este recheio é composto pelo material PTFE, que é pouco sensível à variação da temperatura. Então a simulação descreve duas situações, a primeira em que é feita a consideração de somente uma esfera, estando submetida a um campo de temperatura ambiente e a um fluxo convectivo provocado pela passagem do vapor de água. Também foi considerada uma segunda simulação, onde analisa-se o campo de temperatura sem a consideração de recheio. Considera-se somente o preenchimento inicial da coluna por ar, situação esta a que é submetida à coluna logo após as operações de manutenção. O tempo considerado nesta simulação, para a coluna como um todo, foi o de duas horas, que é o tempo estimado em que o bico de lavagem entra em funcionamento, acionado pelo termopar instalado no topo da coluna e que tem seu *set point* em 110 °C. O tempo considerado para somente uma esfera foi de dez minutos. A temperatura inicial da esfera é considerada ambiente. Ilustra-se na Figura 31 o perfil de temperatura encontrado após 160 segundos do início do aquecimento.

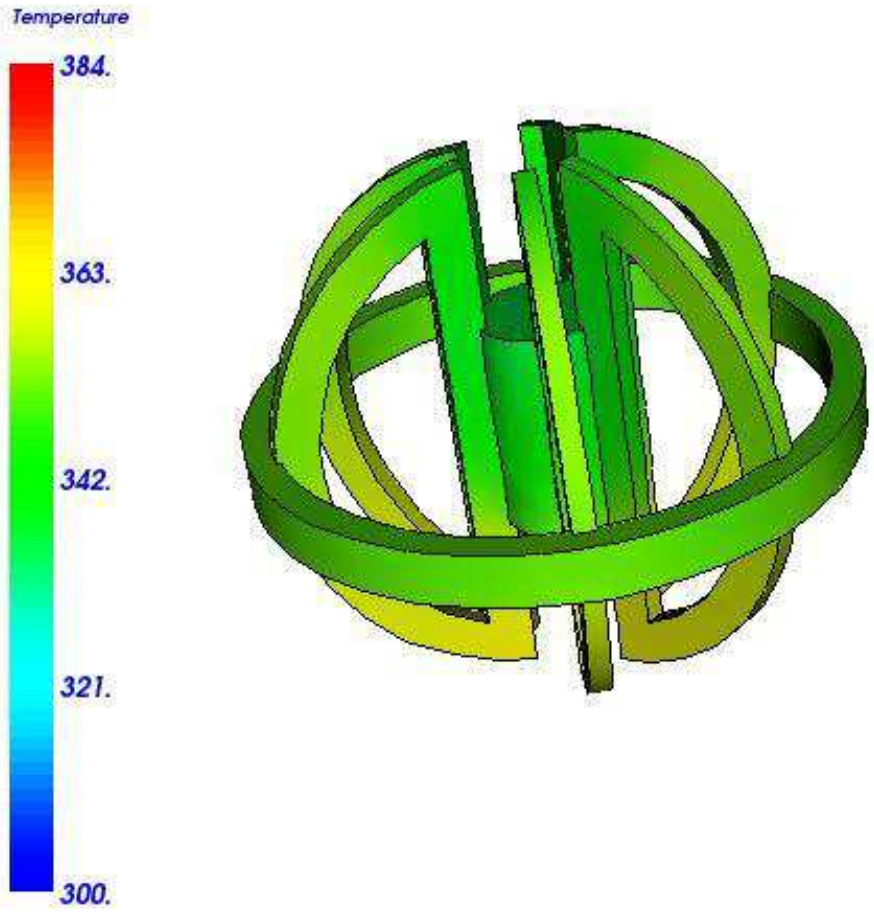
Figura 31 – Perfil de temperatura após 160 segundos do inicio do aquecimento [K].



Fonte: Autoria própria.

Ilustra-se na Figura 32 o campo de temperaturas após 340 segundos do inicio do aquecimento.

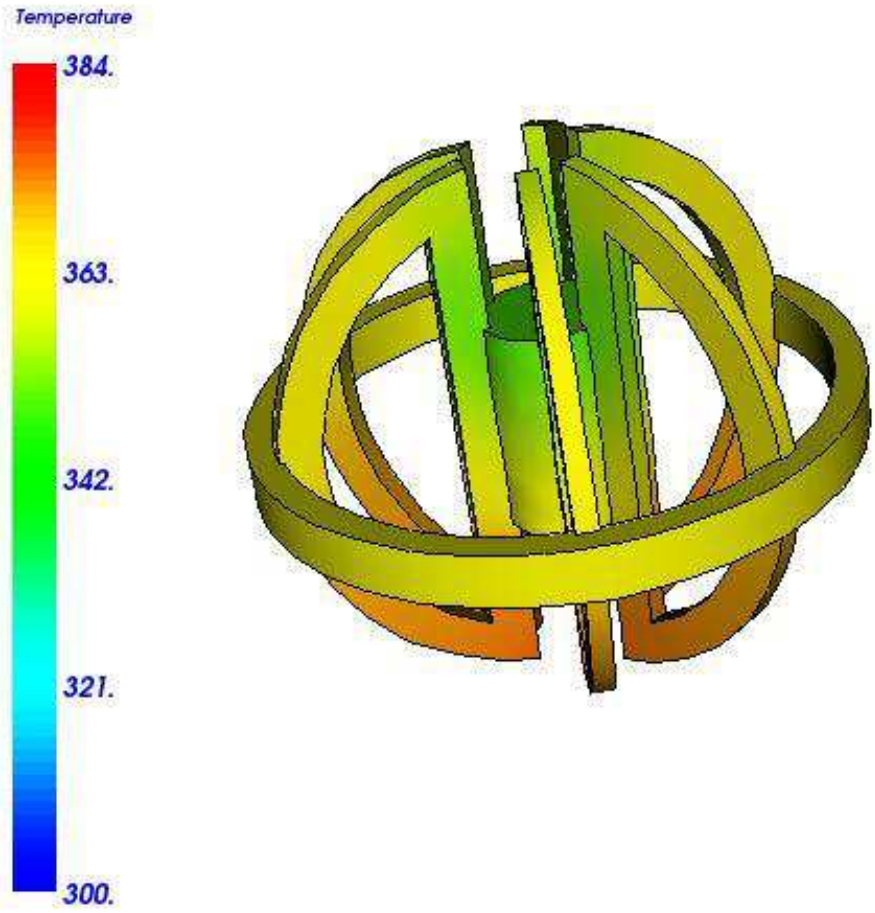
Figura 32 – Perfil de temperatura após 340 segundos do inicio do aquecimento [K].



Fonte: Autoria própria.

Ilustra-se na Figura 33 o campo de temperaturas após 460 segundos do inicio do aquecimento.

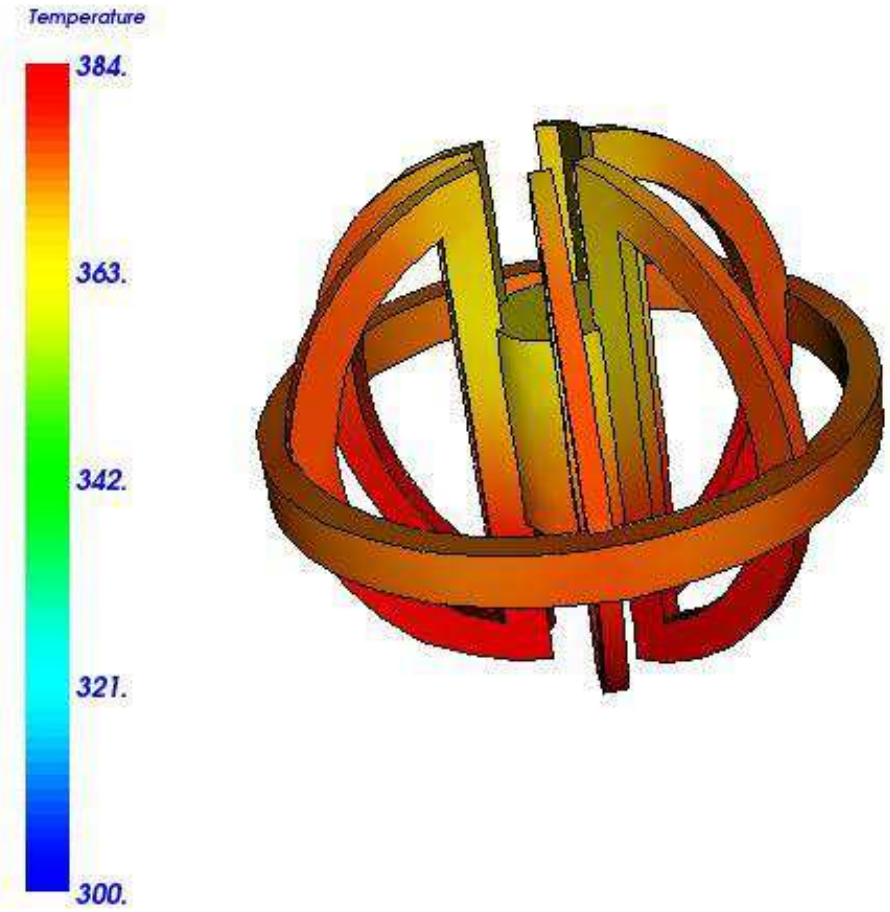
Figura 33 - Perfil de temperatura após 460 segundos do inicio do aquecimento [K].



Fonte: Autoria própria.

Ilustra-se na Figura 34 o perfil após 600 segundos do inicio do aquecimento.

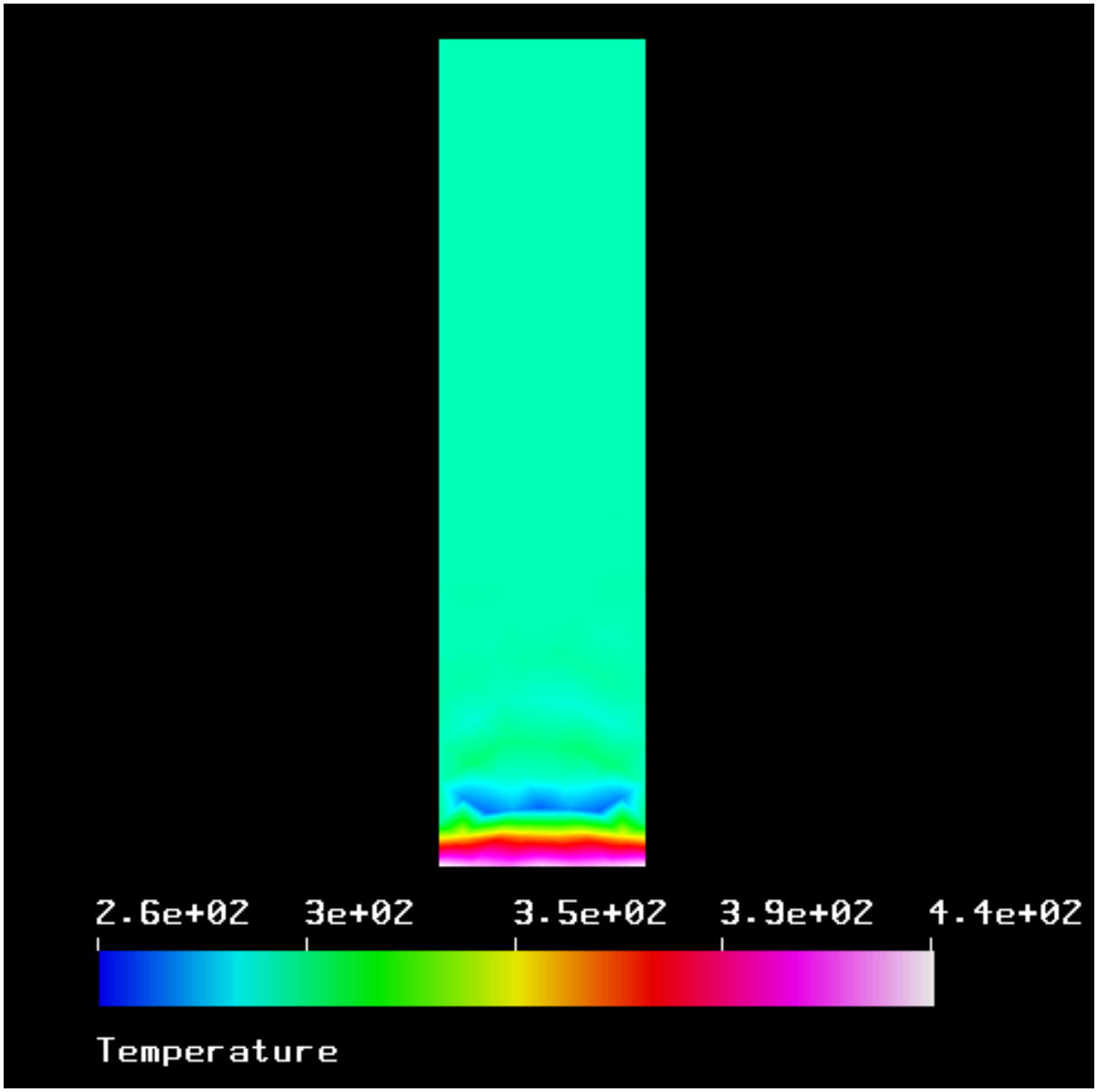
Figura 34 - Perfil de temperatura após 600 segundos do inicio do aquecimento [K].



Fonte: Autoria própria.

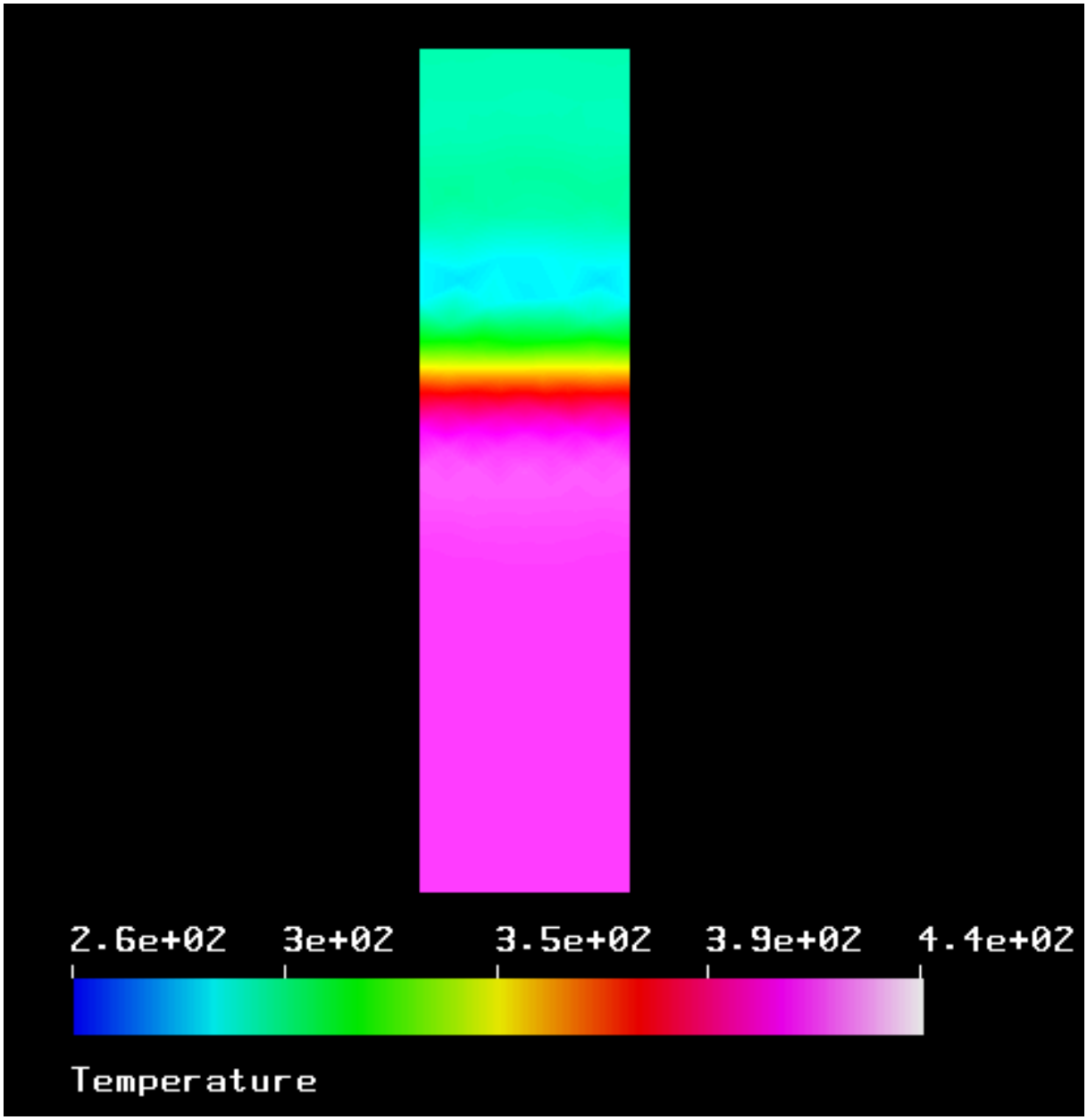
Nos resultados apresentados da Figura 31 a Figura 34 que apesar das arestas inferiores, que recebem primeiro o calor transmitido pelo fluxo convectivo, já estarem em uma temperatura mais próxima a temperatura de trabalho ao final do período considerado na simulação, o núcleo resiste à mudança de temperatura. Além da dificuldade do aquecimento do recheio, existe a resistência ao aquecimento do próprio gás que está dentro da coluna. Mostra-se na Figura 35, Figura 36 e Figura 37 o perfil de temperatura experimentado pelo vapor de dentro da coluna em três momentos diferentes, sendo em 500 segundos, a 3600 segundos e a 7200 segundos.

Figura 35 – Perfil de aquecimento do gás da coluna a 500 segundos do inicio do processo [K].



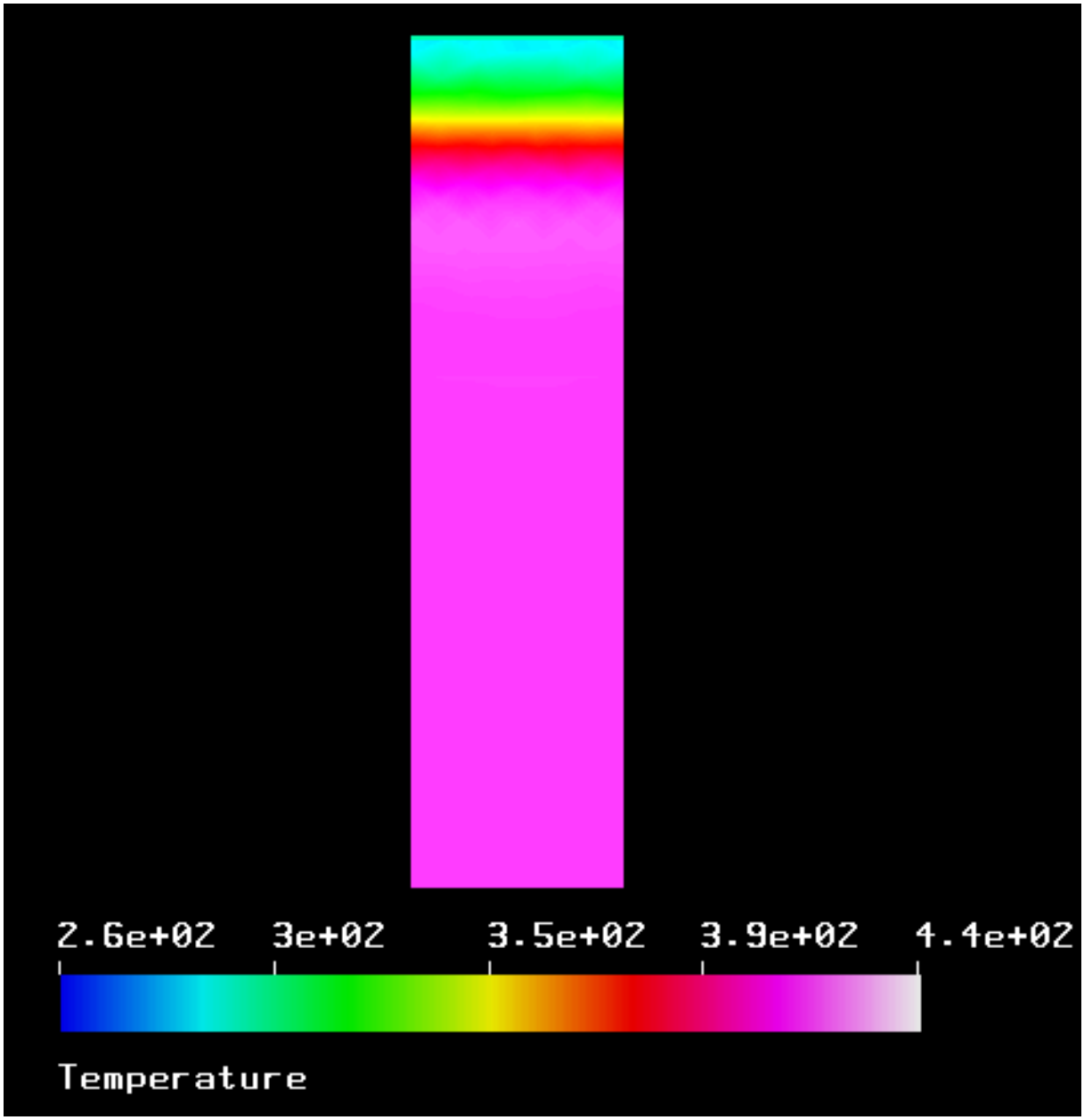
Fonte: Autoria própria.

Figura 36 - Perfil de aquecimento do gás da coluna a 3600 segundos do inicio do processo [K].



Fonte: Autoria própria.

Figura 37 - Perfil de aquecimento do gás da coluna a 7200 segundos do inicio do processo [K].



Fonte: Autoria própria.

Na Figura 37 representa-se o instante anterior à abertura do bico de lavagem, que é acionado quando o termopar é exposto a uma temperatura de 110 °C no topo da torre. Esta simulação demonstra que a dificuldade de aquecimento não é somente devido a não sensibilidade das partículas que constituem o recheio ao aquecimento, mas existe uma grande dependência do aquecimento do gás que preenche a coluna. Como solução viável para este problema, seria o ajuste da vazão de ácido processado por unidade de tempo para que o equipamento trabalhe ininterruptamente. Desta forma o conteúdo da coluna não

experimentaria resfriamento e, portanto não haveria este tempo morto, ou seja, sem destilação de ácido no inicio do sistema.

4.5 PERDA DE CALOR NO TROCADOR DE CALOR

Por fim, verificou se a perda de calor pelo não isolamento do trocador de calor é significativa. Aplicando-se a Equação 29, Equação 30, Equação 28 e Equação 27 na respectiva ordem e considerando-se β como 0,0025K^{-1}, *Pr* como 0,686, a temperatura ambiente como 25 °C, a temperatura superficial do trocador como 157 °C a altura como 1,450 m, a área superficial como 2,41m^2, o *k* como 37,3x10^{-3}W/mK tem-se:

$$g(\mathrm{Pr}) = \frac{0,75 \cdot 0.686^{\frac{1}{2}}}{\left(0,609 + 1,221 \cdot 0,686^{\frac{1}{2}} + 1,238 \cdot 0,686\right)^{\frac{1}{4}}} = 0,4955$$

$$GRL = \frac{9,81 \cdot 0,0023 \cdot 132 \cdot 1,450^3}{\left(32,39 \cdot 10^{-6}\right)^2} = 8,65 \cdot 10^9$$

$$\overline{Nu_L} = \frac{\overline{h} \cdot 1,450}{37,3 \cdot 10^{-3}} = \frac{4}{3}\left(\frac{8,65 \cdot 10^9}{4}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot 0,4955$$

Desta última equação pode-se tirar o valor de $\overline{Nu_L}$ como sendo 142,46 e o valor de $\overline{h}$ como sendo 3,66. Assim aplicando a Equação 27 pode-se obter:

$$q = 3,66 \cdot 2,241 \cdot 132 = 1082,67$$

Sabendo-se que a quantidade de calor permutada pelo trocador de calor é de 53,83 kW e de que a perda pelo não isolamento é de 1,082 kW, ou seja, 2,01%, observa-se que este valor descartado para o ambiente é insignificante, dispensando maiores preocupações com o

isolamento, já que o trocador de calor necessita de reaperto semanais em suas molas tensionadoras dos tirantes de fechamento e um isolamento somente iria dificultar a operação.

5 CONCLUSÃO

Este trabalho veio a ressaltar o uso do software livre nas análises de engenharia, desmitificando o uso somente acadêmico desta classe de programa. Os resultados obtidos em nada ficam devendo aos resultados que seriam obtidos de *softwares* proprietário. Além do mais, o software *opensource* permite que se explorem as minúcias de como o programa foi concebido, podendo assim o usuário vir a conhecer detalhes dos métodos matemáticos utilizados, suas limitações e pontos fortes, deixando de ser desta forma o programa apresentado como uma caixa fechada, onde não se conhece detalhes do seu funcionamento, como ocorre com os *softwares* comerciais.

Com relação à análise termoeconômica, a maior dificuldade para se viabilizar economicamente é o custo do combustível utilizado, mas este problema foi resolvido quando da substituição parcial do briquete para os resíduos de madeira provindos dos caixotes de peças adquiridas por outra unidade da empresa estudada, pois o maior valor monetário na composição do custo do ácido é o custo do vapor que alimenta o sistema.

Quanto à eficiência do recheio da coluna de leito fixo, fica evidente que este executa bem a sua função, pois se acredita que a geometria utilizada elimina qualquer possibilidade de arraste de ácido provindo do movimento do fluido imposto pelo sistema de bombeamento. Já a respeito da dificuldade de aquecimento do sistema e início da operação em regime permanente, fica evidente que a operação do sistema continuamente, ou seja, sem paradas, melhoraria em muito sua eficiência, pois não haveria o tempo morto de operação no início e, portanto eliminaria o desperdício de combustível.

Com relação à perda de calor pelo não isolamento do trocador de calor é insignificante se comparado com o montante de calor trocado por este dispositivo, não justificando assim a utilização de isolamento, já que este dificultaria a operação de reaperto das molas de tensionamento dos tirantes do trocador de calor.

Por fim, fica ainda em aberto o estudo sobre o arraste de ácido provocado pelo fluxo convectivo e este tópico pode ser pauta para futuras discussões, pois devido à dificuldade de obtenção de dados, já que devido à agressividade do processo interno do regenerador não se pode realizar coleta de dados mais detalhada, e a falta de ensaios em laboratórios, ainda não se pode chegar a uma conclusão final neste tópico.

REFERÊNCIAS

BANCO de dados do software COCO (CAPE-OPEN TO CAPE-OPEN). **COCO (CAPE-OPEN TO CAPE-OPEN)**, 2013. Disponivel em: <www.cocosimulator.org/index_download.htm>. Acesso em: 08 jan. 2013.

BEJAN, A.; KRAUS, A. D. **Heat Transfer Handbook**. Hoboken: John Willey & Sons, 2003.

BEJAN, A.; TSATSARONIS, G.; MORAN, M. **Thermal Design and Optimization**. New York: Joh Wiley & Sons, 1996.

BETACONTROL. **Sistema de Recuperação de Acido Cloridrico**. Beaverton, p. 4. 2011.

DRAKOS, N.; MOORE, R. First Principles Computer Simulations, 2003. Disponivel em: <http://molsim.chem.uva.nl/users/ensing/thesis/node21.html>. Acesso em: 12 dez. 2012.

DUPONT. PTFE Handbook, 2012. Disponivel em: <http://www.rjchase.com/ptfe_handbook.pdf>. Acesso em: 01 out. 2012.

ELMER , 2012. Disponivel em: <http://www.csc.fi/english/pages/elmer>. Acesso em: 01 out. 2012.

GMSH: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities, 2012. Disponivel em: <http://geuz.org/gmsh/>. Acesso em: 15 out. 12.

GONÇALVEZ, J.; SARTORI, M.; LEÃO, A. Energia de briquetes produzidos com rejeitos de resíduos sólidos. **SCIELO-Scientific Electronic Library Online**, 13 jan. 2009. 657. Disponivel em: <http://www.scielo.br/scielo.php?pid=S1415-43662009000500021&script=sci_arttext>. Acesso em: 26 ago. 2012.

INCROPERA, F. P.; WITT, D. P. **Fundamentals of Heat and Mass Transfer**. 3. ed. New York: Wiley, 1990.

JOHANSSON, S. CFD Simulation of Hydrochloric Acid Regeneration With a Ruthener Process, 2010. Disponivel em: <https://pure.ltu.se/ws/files/31186198/LTU-EX-10144-SE.pdf>. Acesso em: 20 novembro 2012.

LADEIRA, A. Q.; PEREIRA, D.. Avaliação do Potencial Poluidor da Indústria Galvânica: Caracterização, Classificação e Destinação de Resíduos. **SCIELO**, 2008. Disponivel em: <http://www.scielo.br/pdf/rem/v61n3/a18.pdf>. Acesso em: 14 out. 2012.

LUMEGAL. **Manual de Zincagem por Imersão à Quente**. Indaiatuba: [s.n.], 2007.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOTT, P. **Operaciones Unitarias en Ingenieria Quimica**. 4. ed. Madrid: McGrawHill, 1991.

MORAN, M. J.; SHAPIRO, H. N. **Principios de Termodinâmica para Engenharia**. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, v. 1, 2000.

RÅBACK, P. et al. Elmer Models Manual, 2012. Disponivel em: <http://www.nic.funet.fi/pub/sci/physics/elmer/doc/ElmerModelsManual.pdf>. Acesso em: 2013.

RÅBACK, P.; MALINEN, M. Elmer Overview, 2012. Disponivel em: <http://www.nic.funet.fi/pub/sci/physics/elmer/doc/ElmerOverview.pdf>. Acesso em: 01 jan. 2013.

ROMAGNOLE. **INFORMAÇÕES PESSOAIS**. [S.l.]: [s.n.], 2011.

ROSOCKA, M. R. Journal of Hazardous Materials. **ScienceDirect**, 2010. Disponivel em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304389409020147>. Acesso em: 20 ago. 2013.

SALOME - The Open Source Integration Plataform for Numerical Solutions, 2012. Disponivel em: <http://www.salome-platform.org/downloads/current-version>. Acesso em: 15 out. 2012.

SCHIEMANN, M. et al. Powder Technology. **ScienceDirect**, 2012. Disponivel em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591012003531>. Acesso em: 01 out. 2012.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer**. Washington: Taylor&Francis, 2005.

WHITE, F. M. **Mecânica dos Fluidos**. 4. ed. Rio de Janeiro: McGrawHill, 2002.

APÊNDICE A – ARTIGO PUBLICADO EM PERIÓDICO

É apresentado neste capítulo o artigo publicado no periódico Revista de Engenharia e Tecnologia no endereço:

http://www.revistaret.com.br/ojs-2.2.3/index.php/ret/article/viewFile/199/249

ANÁLISE DO AQUECIMENTO DO PREENCHIMENTO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO DE LEITO FIXO EM SOFTWARE OPEN-SOURCE

Reinaldo Burcon Junior, Universidade Estadual de Maringá, E-mail: rburcon@gmail.com
Wagner André dos Santos Conceição, Universidade Estadual de Maringá, E-mail: wasconceicao@uem.br
Marcio Higa, Universidade Estadual de Maringá, E-mail: mhiga@uem.br
Júlio César Dainezi de Oliveira, Universidade Estadual de Maringá, E-mail: jcdoliveira@uem.br

Resumo: Este artigo apresenta o modelo matemático utilizado baseado no modelo de transferência de calor, discretizado pela metodologia dos elementos finitos e os resultados de uma simulação numérica do aquecimento de uma partícula do recheio de uma coluna utilizada na destilação de ácido clorídrico durante seu processo de recuperação, utilizando-se softwares livres para isto. Fica demonstrada a dificuldade de se atingir uma temperatura uniforme em todo o material do recheio e, portanto a dificuldade do aparelho atingir regime permanente de operação.

Palavras-chave: Destilação, leito fixo, transferência de calor, preenchimento, Open-source.

ANALYSIS OF HEATING OF THE FILLING OF DISTILLATION COLUMNS OF FIXED BED IN OPEN-SOURCE SOFTWARE

Abstract: This paper presents the mathematical model used in the model-based heat transfer discretized by finite element method and the results of a numerical simulation of a particle heating of the filling of a column used in the distillation of hydrochloric acid during the recovery process, using up for this free software. It demonstrates the difficulty of achieving a uniform temperature throughout the material of the filling and thus the difficulty of the unit achieve steady-state operation.

Keywords: Distillation, fixed bed, heat transfer, filling, Open-source.

1. INTRODUÇÃO

Colunas de leito fixo para o contato gás-liquido são extensamente usadas para absorção, separação e operações de destilação. Usualmente as colunas são preenchidas com partículas dispostas em uma orientação randômica, mas para um grande numero de aplicações, como por exemplo o desumidificador de óleo, o preenchimento é muito cuidadosamente posicionado na coluna. Ademais, a questão no projeto deste tipo de coluna é a seleção do material e geometria do preenchimento, assim o recheio provê o efeito de contato de fases sem uma excessiva queda de pressão. Muitos preenchimentos são comercialmente disponíveis e cada um possui uma vantagem especifica com relação ao custo, a superficie avaliada, interface de regeneração, queda de pressão, peso e resistencia a corrosão. Desta maneira, acidos e muitos outros materiais corrosivos podem ser manuseados neste tipo de equipamento, pois o preencimento pode ser de cerâmica, carbono ou outro material resistente (MCCABE et al, 1991). Alguns tipos representativos de preenchimento são ilustrados por meio da Figura 1.

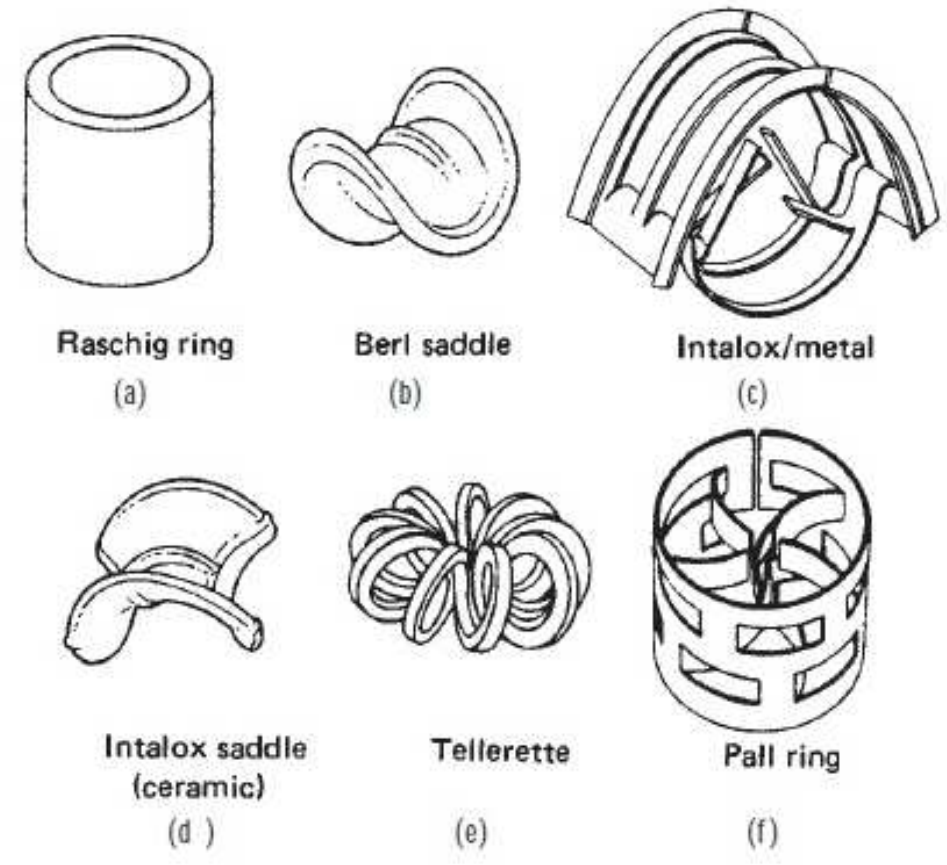


Figura 1. Tipos de preenchimento comuns em colunas de leito fixo (MCCABE et al, 1991).

O objetivo deste trabalho é estudar o aquecimento do preenchimento de uma coluna de leito fixo aplicada na regeneração de ácido clorídrico como parte de um equipamento e entender os motivos pelo qual o equipamento demora a entrar em regime permanente de operação, utilizando-se para isto softwares open-source para a resolução das equações diferenciais que governam este fenômeno através do método dos elementos finitos. Para tanto, tem-se o software ELMER, que é um pacote voltado à solução de equações diferenciais através do método dos elementos finitos permitindo a análise de sistemas multifísicos. Além do mais, este software permite a modificação dos solvers e procedimentos de resolução pelo usuário, tornando-se assim flexível a resolução de qualquer sistema de equações diferenciais (RÅBACK, 2013a).

2. MATERIAIS E MÉTODOS

A simulação é feita somente sobre uma única partícula do preenchimento, mantendo-se a pressão do meio constante e negligenciando-se as perdas de calor para o ambiente. Por motivo de simplificação do modelo, também foi omitida a transmissão de calor entre partículas. É ilustrada por meio da Figura 2 a geometria das partículas do preenchimento. O material utilizado para fabricar o recheio é o politetrafluoretilino (PTFE).

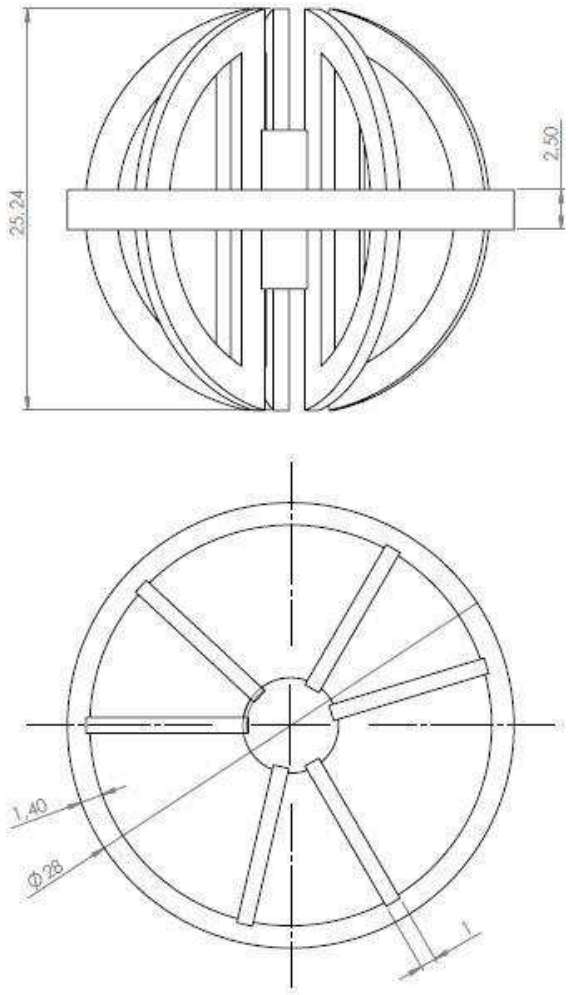


Figura 2. Geometria utilizada no preenchimento da coluna.

2.1 SUPOSIÇÕES DO MODELO

Para desenvolver-se um modelo consistente, as seguintes considerações são feitas:

a) A transmissão de calor é considerada em regime transiente.

b) As perdas para o ambiente são desconsideradas.

c) O material do preenchimento é considerado isotrópico.

d) A fonte de calor é considerada constante.

e) O contato entre partículas é desconsiderado.

f) As propriedades do meio são consideradas constantes.

2.2 EQUAÇÕES QUE REGEM O FENOMENO

Baseado nessas considerações, as seguintes equações governamentais podem ser definidas.

Equação da transferência de calor para meios incompressíveis:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \left(\vec{u} \cdot \nabla \right) T \right) - \nabla \cdot \left(k \nabla T \right) = \overline{\overline{\tau}} : \overline{\overline{\varepsilon}} + \rho h \quad (1)$$

Onde ρ é a densidade, c_p é o calor especifico a pressão constante, T é a temperatura, $\vec{u}$ é a velocidade de convecção, k é a condutividade térmica, h é a fonte de calor e o termo $\overline{\overline{\tau}} : \overline{\overline{\varepsilon}}$ representa o aquecimento por fricção viscosa.

Para fluidos newtonianos o tensor torna-se:

$$\overline{\overline{\tau}} = 2\mu \overline{\overline{\varepsilon}} \quad (2)$$

2.3 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Para uma temperatura, pode ser aplicada a condição de contorno e ter ou temperatura ou fluxo de calor prescrito. A condição de contorno de Direichlet (temperatura é prescrita) se apresenta como:

$$T = T_B \quad (3)$$

O valor T_B pode ser constante, função do tempo, posição ou outra variável.

Fluxo de calor dependente do coeficiente de transferência de calor α e da temperatura externa T_{ext} pode ser escrito como:

$$-k \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(T - T_{ext} \right) \quad (4)$$

Ambas as variáveis α e T_{ext} podem ser constantes ou funções do tempo, posição ou outra variável. Se o coeficiente de transferência de calor α é igual à zero, o fluxo de calor pela fronteira é igual à zero. A condição de fronteira de Neumann pode ser usada em um eixo simétrico 2D ou problemas cilíndricos (RÅBACK, 2013b). Esta condição pode ser escrita como:

$$k \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad (5)$$

2.4 SOLUÇÃO NUMÉRICA

O modelo da partícula do preenchimento foi desenvolvido no software de pré-processamento SALOME (SALOME, 2012). Dispondo deste arquivo, utilizou-se o software GMSH (GMSH, 2012) para geração da malha, a qual foi criada utilizando se formato tetraédrico adaptativo, com tamanho máximo de malha de 4 mm e tamanho mínimo de 1 mm. Procurou-se manter o tamanho do elemento o menor possível sem que aumentasse em muito o tempo de processamento, garantindo-se assim uma boa convergência do sistema e a confiabilidade dos resultados. Ilustra-se por meio da Figura 3 a malha gerada. As propriedades físicas do material constituinte da esfera são listadas na Tabela 1.

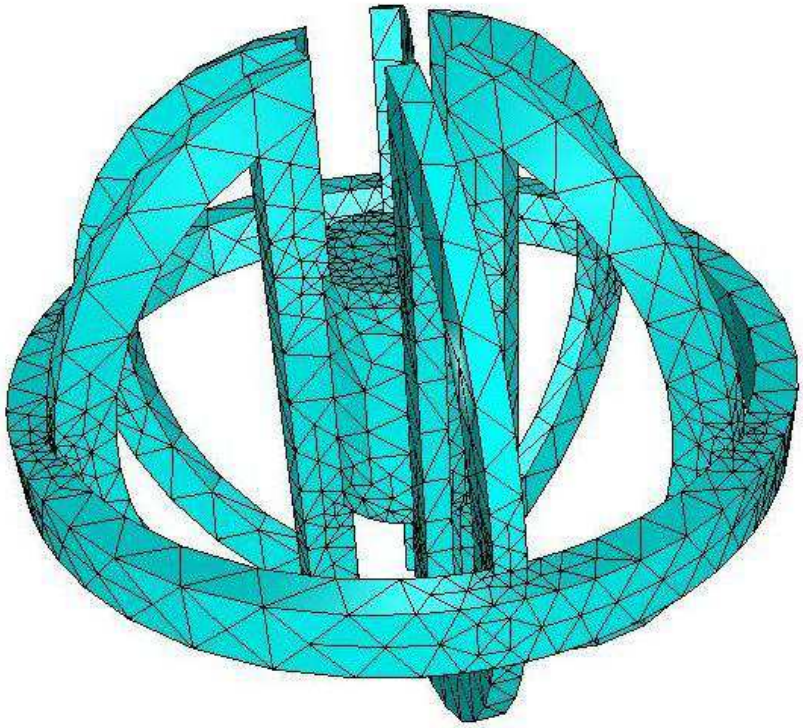


Figura 3. Malha tetraédrica gerada pelo software GMSH.

Tabela 1-Propriedades físicas do politetrafluoretilino (PTFE) (DUPONT, 2012).

ρ	c_p	K
2200	1000	0.25

Onde ρ é a densidade em [$kg.m^{-3}$], c_p é o calor especifico em [$J.kg^{-1}.K^{-1}$] e k é a condutividade térmica em [$W.m^{-2}.k^{-1}$].

Esta simulação foi executada no software ELMER (ELMER, 2012), considerando-se o regime transiente no intervalo de tempo entre 0s até 10s, resolvendo-se a Equação 1 e desconsiderando o termo de aquecimento viscoso presente nesta. Utilizou-se a condição de contorno de Neumann, pois o recheio estará à temperatura ambiente no inicio da operação do equipamento e é estimado o fornecimento de calor ao meio onde se encontra a partícula, possibilitando-se assim uma aproximação da solução.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A simulação foi executada considerando-se uma única partícula, com o objetivo de entender o processo de aquecimento e o tempo para uma partícula atingir a temperatura de trabalho do equipamento de destilação. Desta maneira, pode-se entender o porquê da demora de mais de duas horas para o equipamento entrar em regime permanente de trabalho.

Foi considerado o tempo de aquecimento no intervalo de 0 a 10 segundos. A temperatura ideal de trabalho encontra-se aos 400 K. Ilustra-se por meio da Figura 4(a) o campo de temperaturas no inicio da simulação, considerando-se 5 segundos de simulação Figura 4(b) e ao final dos 10 s de simulação Figura 4(c).

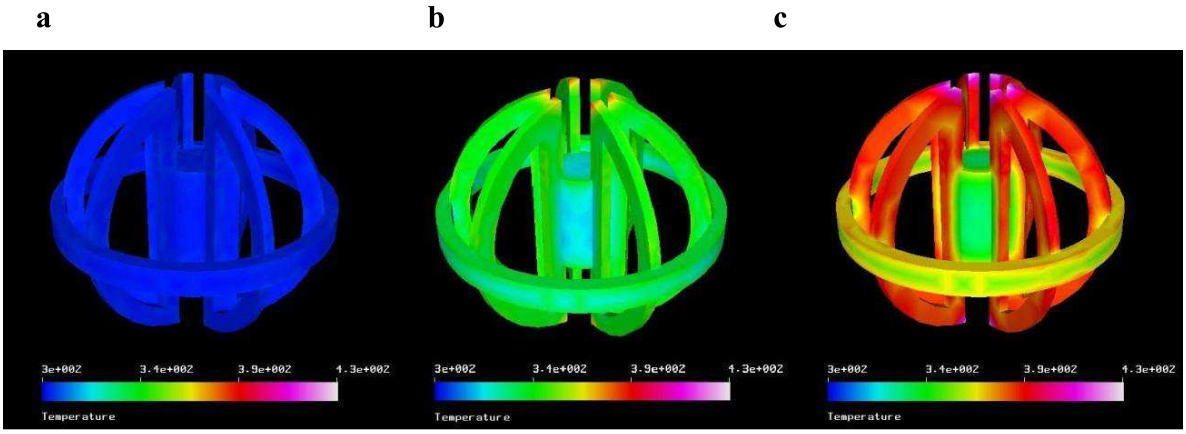


Figura 4. Faixa de temperaturas durante a simulação.

Como se pode observar a partícula não atingiu uma temperatura uniforme ao final do tempo de 10 segundos, o que ressalta a dificuldade prática do equipamento em entrar em regime permanente de trabalho. Ilustra-se na Figura 5 o gráfico onde é representada a faixa de temperatura máxima, mínima e média durante o processo.

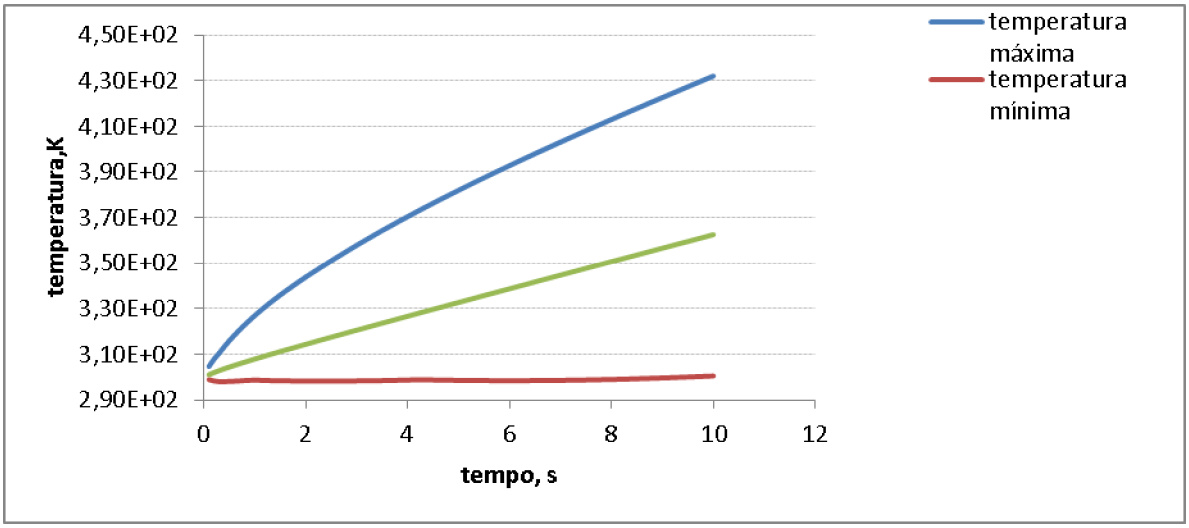


Figura 5. Faixa de temperaturas máximas, minimas e médias durante a simulação

Pode-se observar que ao final da simulação, apesar das extremidades da partícula já ter atingido a temperatura ideal de trabalho do equipamento, o núcleo experimenta somente 2 K de aumento em sua temperatura.

4. CONCLUSÕES

Neste artigo foi demonstrado o uso de softwares livres na simulação de sistemas com aplicações práticas na indústria, desmistificando o uso somente acadêmico deste tipo de software. Foi demonstrado como se desenvolve o aquecimento de uma partícula que forma o conjunto do recheio de colunas de leito fixo utilizadas na destilação de acido clorídrico, o que demonstrou a dificuldade deste equipamento em iniciar sua operação em regime permanente, pois ao mesmo tempo em que as extremidades da partícula já atingiram a temperatura ideal de operação, se núcleo praticamente não experimentou alteração significativa na temperatura.

REFERÊNCIAS

DUPONT. PTFE Handbook. Disponivel em: <http://www.rjchase.com/ptfe_handbook.pdf>. Acesso em: 01 out. 2012.

ELMER. Disponivel em: <http://www.csc.fi/english/pages/elmer>. Acesso em: 01 out. 2012.

GMSH: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities, 2012. Disponivel em: <http://geuz.org/gmsh/>. Acesso em: 15 out. 2012.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOTT, P. **Operaciones Unitarias en Ingenieria Quimica**. 4. ed. Madrid: McGrawHill, 1991.

RÅBACK, P. et al. Elmer Models Manual, 2012a. Disponivel em: <http://www.nic.funet.fi/pub/sci/physics/elmer/doc/ElmerModelsManual.pdf>. Acesso em: 01 jan. 2013.

RÅBACK, P.; MALINEN, M. Elmer Overview, 2012b. Disponivel em: <http://www.nic.funet.fi/pub/sci/physics/elmer/doc/ElmerOverview.pdf>. Acesso em: 01 jan. 2013.

SALOME - The Open Source Integration Plataform for Numerical Solutions. Disponivel em: <http://www.salome-platform.org/downloads/current-version>. Acesso em: 15 out. 2012.