

UNIVERSIDADE DO EXTREMO SUL CATARINENSE - UNESC

CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA

LUIZ FERNANDO SCARPATTO BARCELOS

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FLUIDODINÂMICA EM UM REATOR DE
PRODUÇÃO DE URÉIA A PARTIR DO GÁS CARBÔNICO E AMÔNIA**

CRICIÚMA

2016

LUIZ FERNANDO SCARPATTO BARCELOS

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FLUIDODINÂMICA EM UM REATOR DE
PRODUÇÃO DE URÉIA A PARTIR DO GÁS CARBÔNICO E AMÔNIA**

Trabalho de Conclusão de Curso, apresentado para obtenção do grau de Engenheiro Químico no curso de Engenharia Química da Universidade do Extremo Sul Catarinense, UNESC.

Orientador: Prof. MSc. Maykon Cargnin

CRICIÚMA

2016

LUIZ FERNANDO SCARPATTO BARCELOS

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FLUIDODINÂMICA EM UM REATOR DE
PRODUÇÃO DE URÉIA A PARTIR DO GÁS CARBÔNICO E AMÔNIA**

Trabalho de Conclusão de Curso aprovado pela Banca Examinadora para obtenção do Grau de Engenheiro Químico, no Curso de Engenharia Química da Universidade do Extremo Sul Catarinense, UNESC, com Linha de Pesquisa em Simulação Computacional.

Criciúma, 02 de dezembro de 2016.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Maykon Cargnin – Mestre em Engenharia Química - (UNESC) - Orientador

Prof.^a Maria Alice Prado Cechinel - Mestre em Engenharia Química - (UNESC)

Prof. Thauan Gomes - Mestre em Engenharia Química - (UNESC)

Dedico este trabalho, com muito carinho e amor aos meus pais, Luiz Carlos e Janes, e a minha família, que foram a fonte de inspiração para a realização deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

A Deus, que me dá forças nos momentos em que mais preciso e ilumina os caminhos que tomo diariamente.

Aos meus pais, Luiz Carlos e Janes, meus eternos professores, por todo amor, carinho, incentivo e preocupação.

A toda a minha família, em especial ao meu irmão Luiz Gustavo, que participou direta e indiretamente na conclusão deste trabalho.

A minha namorada Thamiris Uggioni, também colega de profissão, pelo companheirismo, auxílio, apoio e compreensão durante todo o período acadêmico.

À UNESC e seus educadores, que contribuíram para minha formação ética-profissional, em especial ao meu orientador e professor, Msc. Maykon Cargnin, pela ótima orientação e dedicação ao fornecer o melhor aprendizado durante a formação deste estudo.

Ao professor Anderson José Antonietti, pela ajuda com a implementação das simulações.

Aos meus amigos, Ana Carolina, Janaina e Luiz Henrique, que me acompanharam durante toda trajetória acadêmica, incluindo as muitas noites insones, proporcionando momentos de estudo, diversão e companheirismo.

Aos professores Luiz Alexandre e Nadja Zim Alexandre, por todas as vezes que nos acolheram para a orientação em trabalhos complicados e pelos conselhos profissionais passados durante a graduação.

Aos profissionais do I-parque, em especial aos funcionários do IDT e do TI, por permitirem o uso da sala de computação avançada, para a implementação do trabalho.

Aos meus amigos do grupo PDM, em especial ao Biomédico Gustavo Mastella, que possibilitou a ampliação da pesquisa bibliográfica feita no trabalho.

A todos aqueles que colaboraram, direta ou indiretamente, para a concretização deste trabalho.

**“Somente haverá tecnologia amanhã se
houver dedicação e investimento em ciência
no agora, no hoje.”**

Edilson Gomes de Lima

RESUMO

A aplicabilidade da ureia em sua forma comercial é comumente encontrada como fertilizante agrícola nitrogenado, por possuir alta concentração de nitrogênio em sua composição. Os processos de obtenção comercial da ureia são basicamente: uma zona de síntese, zonas de purificação, reciclo dos reagentes e o acabamento final do produto para expedição. A principal operação do processo em questão se encontra no reator, sendo ele uma autoclave submetida a condições de alta pressão e temperatura, onde ocorre a produção total de ureia. Neste contexto, nota-se a importância em otimizar o desempenho do reator, no intuito de obter maior conversão dos produtos desejados, com menor custo de operação. Diante desta questão, foram efetuadas, neste trabalho, simulações computacionais utilizando-se *softwares* de simulação avançada de CFD em duas geometrias. Sendo que uma separada em três módulos e a outra contemplando o reator inteiro. Foram aplicadas diferentes condições operacionais, visando encontrar o comportamento dos fluidos durante o seu escoamento. As simulações foram desenvolvidas no *software* de simulação em CFD ANSYS *Fluent*, juntamente com testes de sensibilidade de malha e de convergência. Os resultados obtidos para o campo de velocidade da fase líquida, assemelham-se ao comportamento previsto pela literatura, porém o campo de velocidade da fase gasosa não foi compatível com os trabalhos referenciados que foram utilizados como base para este trabalho

Palavras-chave: fertilizante nitrogenado, ANSYS *Fluent*, simulação em reatores, fluidodinâmica, análise sensitiva de malha, CFD.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Gráfico de capacidade instalada e demanda de ureia por ano.	14
Figura 2 – Comportamento do sistema reacional em condições de síntese.	18
Figura 3 – Diagrama ternário do equilíbrio líquido-vapor em condições de síntese de ureia	19
Figura 4 – Processo convencional de produção de ureia em reciclo total.....	23
Figura 5 – Processo de produção de ureia: <i>Stamicarbon CO₂ Stripping Process</i>	24
Figura 6 – Diagrama de blocos de produção de ureia: <i>Stamicarbon CO₂ Stripping Process</i>	25
Figura 7 – Processo de produção de ureia: <i>Snamprogetti Self-Stripping Process</i>	26
Figura 8 – Diagrama de blocos de produção de ureia: <i>Snamprogetti Self-Stripping Process</i>	27
Figura 9 – Representação ilustrativa de um reator de produção de ureia.	28
Figura 10 – Ilustração de um prato perfurado <i>sieve tray</i>	29
Figura 11 – Ilustração da instalação das placas no interior do reator de ureia.....	29
Figura 12 – Comportamento ideal para o reator de ureia.....	30
Figura 13 – Reator de síntese de ureia com troca de calor interna.....	31
Figura 14 – Característica perfil laminar e turbulento	32
Figura 15 – Exemplo de perfil laminar e perfil turbulento	33
Figura 16 – Representação de análise diferencial de escoamento ao redor de uma parabólica.....	35
Figura 17 – Exemplo de perfil laminar e perfil turbulento ao redor de um cilindro	36
Figura 18 – Perfil de escoamento por uma expansão repentina.	37
Figura 19 – Escoamento em uma placa de orifício.	37
Figura 20 – Subcamadas de interação de parede.....	38
Figura 21 – Caracterização de fluxos multifásicos gás-líquido.....	40
Figura 22 – Representação em 2D de quatro elementos de malha.	43
Figura 23 – Comparação de organização dos tipos de solver baseados em pressão.	46
Figura 24 – Representação tridimensional e bidimensional de um reator de síntese de ureia	50
Figura 25 – Prato perfurado modelo <i>sieve tray</i> utilizado no reator de síntese de ureia	50

Figura 26 – Representação da instalação dos pratos perfurados no reator de síntese de ureia.	51
Figura 27 – Geometria 2D utilizada na simulação, referente a dois módulos do reator.	51
Figura 28 – Geometria 2D utilizada na simulação, referente ao reator inteiro.....	52
Figura 29 – Ilustração das perfurações nos pratos <i>sieve tray</i>	53
Figura 30 – Geometria do reator com as respectivas condições de contorno.....	55
Figura 31 – Representação do <i>set up</i> utilizado nas simulações.....	56
Figura 32 – Gráfico de velocidade de saída do líquido por número de iterações.....	56
Figura 33 – Gráfico de erro residual por número de iterações	57
Figura 34 – Representação dos pontos de monitoramento para o teste de malha. ..	58
Figura 35 – Ilustração das malhas utilizadas no teste de refinamento.	59
Figura 36 – Resultados obtidos com a análise de sensibilidade de malha.....	62
Figura 37 – Perfis de velocidade superficial da fase líquida das simulações a, b, c, d, e e f.	63
Figura 38 – Simulação 2: campo de velocidade superficial da fase gasosa.....	64
Figura 39 – Simulação 2: campo de velocidade superficial da fase líquida.....	65
Figura 40 – Simulação 2: campo de velocidade superficial vetorial da fase gasosa.	65
Figura 41 – Simulação 2: campo de velocidade superficial vetorial da fase líquida.	66
Figura 42 – Simulação 1: Perfil de queda de pressão.....	67
Figura 43 – Simulação 2: Perfil de queda de pressão.....	67
Figura 44 – Simulação 3: Perfil de queda de pressão.....	68
Figura 45 – Simulação 4: Perfil de queda de pressão.....	68
Figura 46 – Resultados de queda de pressão para as simulações 1, 2, 3 e 4 em função da viscosidade da solução líquida.	69
Figura 47 – Simulação 5: campo de velocidade superficial da fase líquida com alimentação de líquido em $0,2 \text{ m s}^{-1}$	70
Figura 48 – Simulação 6: campo de velocidade superficial da fase líquida com alimentação de líquido em $1,0 \text{ m s}^{-1}$	70
Figura 49 – Simulação 7: campo de velocidade superficial da fase líquida com alimentação de líquido em $2,0 \text{ m s}^{-1}$	71
Figura 50 – Simulação 8: campo de velocidade superficial da fase líquida com alimentação de líquido em $3,0 \text{ m s}^{-1}$	71

Figura 51 – Simulação 8: campo de velocidade superficial da fase líquida com alimentação de líquido em $4,0 \text{ m s}^{-1}$	72
Figura 52 – Simulação 5: Ponto de monitoramento de backmixing.....	73
Figura 53 – Perfis de velocidade superficial do gás para as simulações 5, 6, 7, 8 e 9.	74
Figura 54 – Perfis de queda de pressão para as simulações 5, 6, 7, 8 e 9.....	75
Figura 55 – Perfil de queda de pressão para as simulações 5, 6, 7, 8 e 9 ao variar a velocidade do fluido líquido em $0,2; 1,0; 2,0; 3,0$ e $4,0 \text{ m s}^{-1}$	76
Figura 56 – Perfis de velocidade da fase gasosa para as simulações 10, 11, 12, 13 e 14.	77
Figura 57 – Simulação 11: Velocidade superficial da fase líquida.....	78
Figura 58 – Simulação 13: Velocidade superficial da fase líquida.....	79
Figura 59 – Simulação 14: Velocidade superficial da fase líquida.....	79
Figura 60 – Perfil de queda de pressão ao variar a velocidade do fluido gasoso.....	80
Figura 61 – Simulação do reator completo: Perfil de velocidade superficial do líquido.	81
Figura 62 – Simulação do reator completo: Perfil de velocidade superficial do gás.	82
Figura 63 – Campos de velocidade da simulação 1.....	89
Figura 64 – Campos de velocidade da simulação 3.....	90
Figure 65 – Campos de velocidade da simulação 4.....	91

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Tabela de comparação de assimetria por qualidade de malha.	44
Tabela 2 – Tabela de comparação dos tamanhos de malha.....	59
Tabela 3 – Tabela representativa das simulações com diferentes composições.	60
Tabela 4 – Tabela representativa das simulações com diferentes velocidades.	60
Tabela 5 – Tabela representativa das simulações com diferentes velocidades.	60
Tabela 6 – Resultados da análise de <i>backmixing</i> no Ponto 3	73

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ELV	Equilíbrio líquido-vapor
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CAD	<i>Computer Aided Design</i>
CSTR	<i>Continuous Stirred Tank Reactor</i>
PFR	<i>Pistoned Flow Reactor</i>
CNTP	Condições Normais de Temperatura e Pressão
SST	Shear Stress Transport
CFX	Software de simulação em CFD

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	11
1.1 OBJETIVOS	12
1.1.1 OBJETIVO GERAL	12
1.1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	12
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	13
2.1 UREIA	13
2.2 SÍNTESE DE UREIA	14
2.2.1 Relações Termodinâmicas	15
2.2.1.1 Espécies Químicas.....	15
2.2.1.2 Equilíbrio Químico	16
2.2.1.3 Equilíbrio líquido vapor (ELV)	17
2.2.2 Reações Paralelas	20
2.2.2.1 Formação de biureto	21
2.2.3 Corrosão	21
2.2.4 Processos de Produção	22
2.2.4.1 Stamicarbon CO ₂ Stripping Process.....	24
2.2.4.2 Snamprogetti Ammonia Self-Stripping Process.....	25
2.2.5 Reator de síntese	27
2.2.6 Relações fluidodinâmicas de escoamento	31
2.2.6.1 Análise diferencial de escoamento	34
2.2.6.2 Escoamentos multifásicos	40
2.3 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	41
2.3.1 ANSYS	41
2.3.1.1 ANSYS Fluent	41
2.2.1.1.1 <i>Geometria</i>	42
2.2.1.1.2 <i>Malha</i>	42
2.2.1.1.3 <i>Set Up</i>	44
2.2.1.1.3.1 Condições de contorno.....	45
2.2.1.1.4 <i>Solver</i>	45
2.2.1.1.5 <i>CFD-Post</i>	46
2.3 ABORDAGENS ANTERIORES SOBRE A SIMULAÇÃO EM REATORES DE PRODUÇÃO DE UREIA.....	47
3 METODOLOGIA	49

3.1 CONDIÇÕES OPERACIONAIS DE UM REATOR DE PRODUÇÃO COMERCIAL DE UREIA.	49
3.2 GEOMETRIA DO REATOR DE PRODUÇÃO DE UREIA EM OPERAÇÃO.....	49
3.3 IMPLEMENTAÇÃO DO REATOR NO SOFTWARE ANSYS FLUENT.....	53
3.4 CONDIÇÕES DE CONVERGÊNCIA DAS SIMULAÇÕES.	56
3.5 TESTE DE INDEPENDÊNCIA DA MALHA.	57
3.6 SIMULAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO	59
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	62
4.1 TESTE DE MALHA.....	62
4.2 SIMULAÇÕES DAS CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO	64
4.2.1 Variação de concentração no reator.....	64
4.2.2 Variação de velocidade da fase líquida	69
4.2.3 Variação de velocidade da fase gasosa	77
4.2.4 Simulação do reator completo	81
5 CONCLUSÃO	83
6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	85
7 REFERÊNCIAS.....	86

1 INTRODUÇÃO

A simulação computacional de processos de produção de ureia como, *Stamicarbon CO₂-Stripping Process*, *ACES Process*, *Snamprogetti Ammonia and Self-Stripping Process*, entre outros, é alvo de diversos estudos presentes na literatura (Dente et al., 1988; Dente et al., 1992; Isla et al., 1993a; Isla et al., 1993b; Zhang et al., 2005; Hamidipour et al., 2004), porém os trabalhos publicados utilizam certas considerações que podem não ser condizentes com a realidade do processo, como simplificações do modelo fluidodinâmico para a realização dos cálculos, por exemplo, em Isla et al. (1993b) foi suposto que a fase líquida se comportaria como um reator CSTR (reator de mistura perfeita) para cada módulo do reator de síntese, já a fase gasosa foi considerada com um perfil de escoamento pistonado, aproximando-se a um reator PFR (reator de fluxo pistonado).

Tratando-se de indústrias químicas, não são comumente observados processos de síntese que podem ser aproximados a um regime ideal, portanto o comportamento fluidodinâmico real que ocorre no reator pode alterar várias características de projeto, como principalmente a conversão total de reagente no produto.

Este estudo procura averiguar a veracidade das condições de contorno utilizadas em trabalhos anteriores, efetuando-se simulações de comportamento fluidodinâmico, do reator de síntese de ureia, em um *software* de computação avançada, onde será avaliado o possível comportamento dos campos de velocidade no sistema H₂O-NH₃-CO₂-ureia em um reator de síntese.

A simulação apresentada neste estudo foi realizada em duas geometrias bidimensionais do reator de síntese, baseadas na patente do cessionário DSM N.V. (2000), sendo a primeira dividida em três módulos, ou seja, três pratos perfurados, e a segunda contemplando o reator inteiro.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 OBJETIVO GERAL

Avaliar o comportamento fluidodinâmico em um reator de produção comercial de ureia, através de simulação computacional, utilizando o *software* ANSYS.

1.1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Pesquisar as condições operacionais de um reator de produção comercial de ureia;
- Levantar estudos anteriores sobre a simulação em reatores industriais de produção de ureia;
- Criar a geometria do reator de produção de ureia em operação;
- Realizar o *set up* de condições de contorno impostas no reator, utilizando o *software* ANSYS *Fluent*;
- Atestar as condições de convergência das simulações;
- Realizar um teste de malha, para atestar a real necessidade de refinamento da malha escolhida;
- Realizar simulações variando as condições de operação, como velocidade da fase gasosa, velocidade da fase líquida e composição no reator;
- Analisar os resultados e comparar o comportamento com o esperado pela literatura.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 UREIA

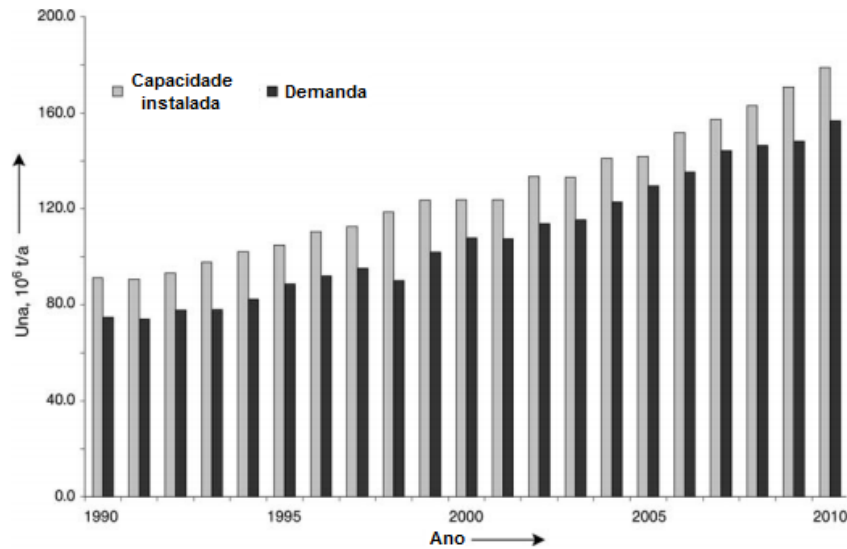
A ureia, de fórmula molecular $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$, é um composto branco e inodoro que sob condições normais de temperatura e pressão (CNTP) é encontrado em estado sólido, com formato semelhante ao de uma agulha de espessura muito fina, porém, comercialmente é comumente encontrada em formato granulado, após submetida ao processo de granulação, no qual oferece propriedades físicas favoráveis para o transporte e manuseio do produto. (MEESSEN e PETERSEN, 2005).

A principal aplicação comercial da ureia, traduz-se na forma de fertilizante agrícola (mais de 90% do mercado total), por ser um dos compostos sólidos com maior concentração de nitrogênio em sua composição, aproximadamente 46% em base mássica. Apesar do seu uso como fertilizante prevalecer, a ureia também pode ser utilizada como alimento em rações animais, reagente da indústria farmacêutica e mais recentemente em solução aquosa no processo de redução catalítica seletiva, onde o objetivo consiste em diminuir a exaustão de NO_x na atmosfera, provenientes de motores à diesel, produto conhecido no Brasil como ARLA (Agente Redutor Líquido de óxido de nitrogênio Automotivo). (MEESSEN, 2012).

A produção global de fertilizante, em 2010, excedeu o valor de 150 milhões de toneladas métricas, e continua crescendo com o passar do tempo junto ao aumento populacional e à demanda por alimentos. O crescimento do emprego em fertilizantes segue de forma linear, com aproximadamente 3% de acréscimo ao ano, de 1990 até 2010. Os grandes responsáveis deste uso, são países asiáticos industrializados, como a China e a Índia, que são os maiores comercializadores do produto, devido à alta incidência populacional e por se tratarem de países subdesenvolvidos em ascensão industrial.

A capacidade de produção de ureia instalada mundialmente, ao longo do tempo, se manteve a uma taxa de 10–20% acima da demanda de mercado, conforme o gráfico de capacidade instalada e demanda de 1990 á 2010, representado na Figura 1. (MEESSEN, 2012)

Figura 1 – Gráfico de capacidade instalada e demanda de ureia por ano.

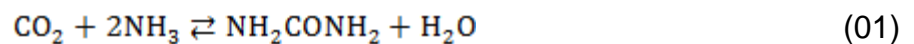


Fonte: Meessen, (2012). Adaptado pelo autor.

2.2 SÍNTESE DE UREIA

A síntese de ureia é fortemente consolidada e possui vasta literatura publicada (Meessen e Petersen, 2005; Meessen, 2012; Irazoqui e Isla, 1993; DSM N.V., 2000; Ammonia Casale S.A., 1986), de forma geral segundo Zhang et al. (2001).

A produção comercial de ureia segundo Meessen (2012) ocorre através da reação reversível (Equação 01) entre o dióxido de carbono e amônia, porém a síntese é dividida em duas etapas, no primeiro estágio o gás carbônico e a amônia são convertidos em carbamato de amônio (Equação 02) de forma reversível, altamente exotérmica e extremamente rápida, na segunda etapa ocorre a desidratação do carbamato de amônio (Equação 03) tendo como produto água e ureia, em reação reversível, relativamente lenta e levemente endotérmica. Isla et al. (1993a) cita em seu trabalho que todo o carbamato de amônio gerado ao longo do reator, devido ao caráter fortemente iônico, pode ser considerado como dissociado em formato iônico (H_2NCOO^- e NH_4^+), seguindo portanto, as reações das Equações 4 e 5.



$$\Delta H = -101,5 \text{ kJ/mol}$$

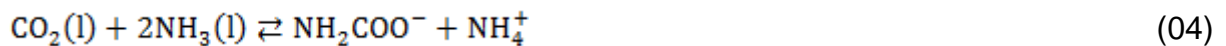


$$\Delta H = -117 \text{ kJ/mol}$$

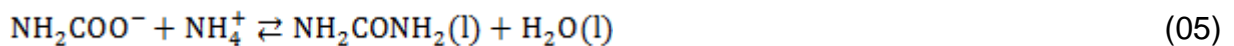


$$\Delta H = +15,5 \text{ kJ/mol}$$

Ou:



$$\Delta H = -117 \text{ kJ/mol}$$



$$\Delta H = +15,5 \text{ kJ/mol}$$

2.2.1 Relações Termodinâmicas

Para a representação do sistema reacional encontrado na síntese de ureia é necessário um modelo termodinâmico confiável e completo, diversos artigos publicados (Isla et al., 1993a; Hamidipour et al., 2004; Zhang et al., 2005) contém estudos precisos com resultados atestados e comparados com dados experimentais de empresas de produção de fertilizantes nitrogenados. Os autores utilizam considerações de simulação como condições de contorno onde é possível compreender o sistema estudado e apresentar algoritmos para representá-los. (ZHANG et al., 2005).

2.2.1.1 Espécies Químicas

As principais espécies químicas envolvidas na zona de síntese se tratam dos compostos presentes nas Equações 1 a 5, sendo eles: NH_3 , CO_2 , H_2O , $\text{NH}_2\text{COONH}_4$ (Carbamato de amônio), NH_2CONH_2 (Ureia) e também o gás O_2 que

não interfere nas reações de produção de ureia, mas funciona como apassivante das reações de corrosão (Seção 2.2.3). (HAMIDIPOUR et al., 2004).

Autores como Hamidipour et al. (2004) citam a importância de serem considerados todos os produtos possíveis no meio reacional para a representação termodinâmica, porém no reator é possível assumir que somente as reações principais ocorrem, pois as condições de formação dos outros produtos não são favorecidas na etapa de síntese e podem ser negligenciadas (Seção 2.2.2).

2.2.1.2 Equilíbrio Químico

O equilíbrio químico é um fenômeno que ocorre em reações reversíveis, que são representadas pela capacidade dos produtos reagirem de forma inversa e se tornarem reagentes novamente. As concentrações das espécies envolvidas em reações do tipo, tendem a ser consumidas ou produzidas até atingirem um limite, chamado de concentração de equilíbrio. O estado é alcançado quando a velocidade em que os reagentes são consumidos se iguala a de consumo de produtos. (FOGLER, 2009).

Segundo Fogler (2009, p. 69)

“Todas as leis de velocidade de reação para reações reversíveis devem ser reduzidas à relação termodinâmica que relaciona as concentrações das espécies reagentes no equilíbrio. No equilíbrio, a velocidade de reação é igual a zero para todas as espécies (*i. e.*, $-r_A \equiv 0$).”

Utilizando a reação exemplificada na Equação 6:



Pode-se concluir, segundo Fogler (2009), que as concentrações das espécies quando alcançado o equilíbrio químico estão relacionadas pela relação termodinâmica da constante de equilíbrio K_c , que pode ser calculada através das concentrações de equilíbrio dos compostos envolvidos, conforme a Equação 7.

$$K_c = \frac{C_{Ce}^c C_{De}^d}{C_{Ae}^a C_{Be}^b} \quad (07)$$

Em que

$$K_c = \frac{k_{AD}}{k_{AI}} \quad (08)$$

Onde C_{Ae}^a representa a concentração da espécie A no equilíbrio e k_{AD} e k_{AI} são as constantes cinéticas de sentido direto e inverso respectivamente.

Para algumas reações o valor da constante de equilíbrio em função das concentrações das espécies já basta para representar o sistema termodinâmico, porém em reações de caráter iônico muito forte e submetidas à alta pressão (como a reação de produção do carbamato e da ureia) a constante de equilíbrio pode ser afetada pela atividade (a_i) das espécies em solução. Para a representação destes tipos de reações deve ser calculada a constante de equilíbrio em função da atividade dos compostos (K_γ). Utilizando a mesma reação da Equação 6, pode-se calcular a constante de equilíbrio real (K), segundo Isla et al. (1993) através das Equações 9 e 10 (FOGLER, 2009).

$$K = K_\gamma + K_c \quad (09)$$

$$K = \frac{\gamma_C^c \gamma_D^d}{\gamma_A^a \gamma_B^b} \cdot \frac{C_C^c C_D^d}{C_A^a C_B^b} \quad (10)$$

Onde γ_A^a é o coeficiente de atividade do componente A em função da temperatura (T) e composição (x).

2.2.1.3 Equilíbrio líquido vapor (ELV)

Segundo Van Ness et al. (2005) o equilíbrio é uma condição estática em que nenhuma mudança ocorre nas propriedades macroscópicas de um sistema ao longo do tempo, essa condição sugere um balanço entre todas as potências que podem causar alguma mudança.

Em um sistema fechado contendo duas fases, uma gasosa e outra líquida, a composição tende a atingir um estado de equilíbrio, onde, pressão, temperatura e composição das fases permanecem fixas, porém, analisando o sistema microscopicamente, ao longo do tempo nota-se que as moléculas presentes em uma fase, outrora se difundem para a fase oposta, esse fenômeno acontece

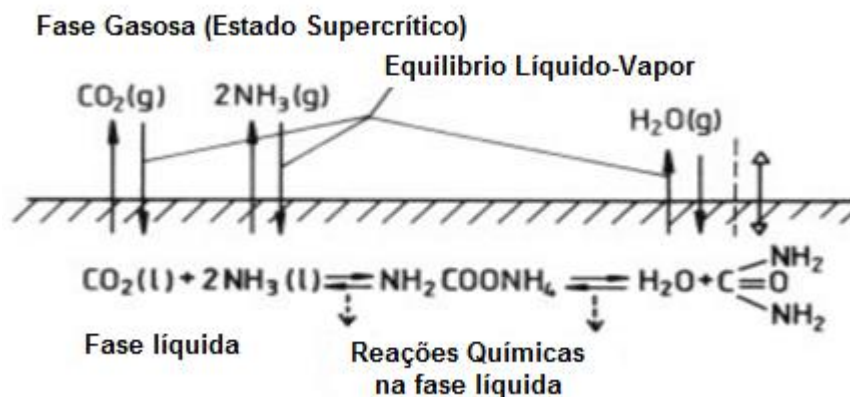
porque as velocidades de transferência entre os estados termodinâmicos para o líquido e o gás são iguais, portanto o sistema está em equilíbrio líquido-vapor (VAN NESS et al., 2005).

As condições de equilíbrio líquido-vapor das reações de produção de ureia estão exemplificadas segundo Meessen (2012) conforme a Figura 2, onde ocorre o equilíbrio entre fases na interface líquido-gás. Segundo Isla et al. (1993a) as reações ocorrem somente na fase líquida, por isso o ELV imposto no sistema é muito importante para a determinação da conversão de dióxido de carbono em ureia. Os compostos em forma iônica não podem ser dissociados para a fase gasosa e não são contabilizados no equilíbrio entre fases, em Isla et al. (1993a) é considerado que a volatilização de ureia para o meio gasoso é muito baixa e negligenciável.

As Equações 4 e 5 representam as reações citadas pelo autor para melhor representar o sistema de síntese de ureia e as Equações 11–13 referem-se ao equilíbrio líquido-vapor que ocorre ao longo do reator.



Figura 2 – Comportamento do sistema reacional em condições de síntese.

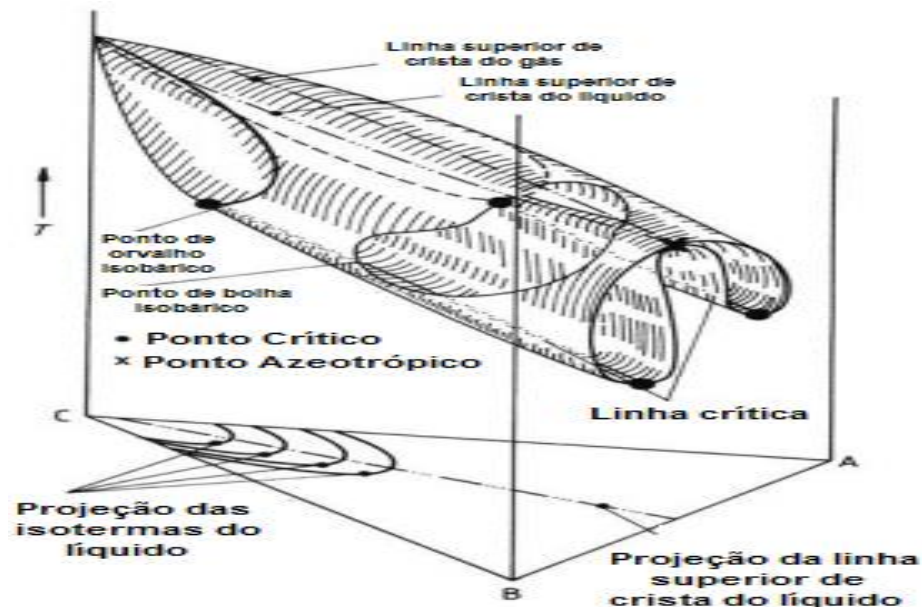


Fonte: Meessen, (2012). Adaptado pelo autor.

Em todos os processos comerciais de produção de ureia as condições de temperatura e pressão estão acima do ponto crítico para o dióxido de carbono e amônia. Ambos os componentes presentes na fase gasosa estão submetidos a um estado supercrítico, onde não há distinção entre as fases, porém a água presente no equilíbrio não está submetida a condições acima de seu ponto crítico (ISLA et al., 1993a).

Conforme citado por Meessen (2012) a Figura 3 representa o diagrama ternário do equilíbrio líquido-vapor entre CO_2 (A) e NH_3 (B) em água (C), representada como solvente. A interação química entre A e B possui forte característica azeotrópica no sistema binário A–B, portanto ao incluir um solvente menos volátil C, sendo que os outros componentes estão submetidos à pressão acima do seu ponto crítico, os valores em T–X do sistema ternário, das fases líquida e gasosa, assumem um formato peculiar seguindo caminhos descritos pelos pontos de ebulição das soluções alteradas. (MEESSEN, 2012).

Figura 3 – Diagrama ternário do equilíbrio líquido-vapor em condições de síntese de ureia



Fonte: Meessen, (2012). Adaptado pelo autor.

Analisando a Figura 3 pode-se observar no equilíbrio líquido-vapor do sistema $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-NH}_3\text{-Ureia}$ um ponto máximo de temperatura à certa pressão variando em função da fração A–B presente na solução. (MEESSEN, 2012).

O forte comportamento azeotrópico do sistema $\text{NH}_3\text{-CO}_2$ e a temperatura máxima evidenciada nos sistemas ternário e quaternário tem importância prática para o processo comercial de ureia. Outro aspecto importante é a baixa solubilidade do dióxido de carbono em água, em relação à solubilidade da amônia em água, como resultado o gradiente da pressão à temperatura constante é mais íngreme no lado com maior concentração de CO_2 da linha superior de crista do gás. Além disso, a diferença de solubilidade dos compostos faz com que a pressão mínima (temperatura máxima) mude o equilíbrio para maiores frações de $\text{NH}_3\text{:CO}_2$ quando a concentração dos solventes (ureia e água) cresce. Por isso para alcançar pressões relativamente baixas em uma certa temperatura a razão de $\text{NH}_3\text{:CO}_2$ é implementada acima da razão estequiométrica, geralmente 2:1 á 4:1 (MEESSEN, 2012).

Para representar o equilíbrio entre fases Isla et al. (1993a) utiliza a relação estendida de Lewis-Randall (Equação 14) para água e amônia e utiliza a lei de Henry com coeficiente de atividade implícito (Equação 15) para o gás carbônico.

$$py\phi_i = \gamma_i x_i f_i^0 \exp\left(\frac{v_i^L P}{RT}\right) \quad i = \text{H}_2\text{O}; \text{NH}_3 \quad (14)$$

$$py\phi_i = \gamma_i x_i H_{\text{CO}_2} \exp\left(\frac{v_i^L P}{RT}\right) \quad i = \text{CO}_2 \quad (15)$$

Onde ϕ_i representa a fugacidade da espécie i , γ_i representa o coeficiente de atividade do componente i , f_i^0 é a fugacidade padrão à temperatura do sistema e pressão nula ($P=0$), H_{CO_2} é o coeficiente de Henry para o CO_2 em água, v_i^L é o volume molar de i , p é a pressão de vapor na fase gasosa, y e x_i são as frações molares de i na fase gasosa e líquida respectivamente.

2.2.2 Reações Paralelas

Além das reações principais como as Equações 4 e 5, o sistema $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-NH}_3\text{-Ureia}$ pode apresentar reações indesejáveis para a produção de ureia, se submetido às condições apresentadas na sessão seguinte. (ISLA et al.,

1993a)

2.2.2.1 Formação de biureto

O biureto é o principal contaminante a ser monitorado pelo controle de qualidade na produção de ureia, sua conversão total em um processo de produção convencional em reciclo total, resulta em uma fração mássica de no máximo 4,0% do contaminante em ureia granulada. A principal cautela ao obter biureto no produto é de que o composto exerça um efeito agressivo à maioria das plantas, sendo incomum o uso da ureia com uma concentração acima de 2,5% de biureto em massa. Estudos, como o apresentado por Kaasenbrood et al. (1963), apontam que até em concentrações de 0,5% em massa do contaminante podem causar efeitos negativos na plantação e o autor estipula que a concentração mencionada como limite máximo é de 0,25% em massa. (KAASENBROOD et al., 1963).

Segundo Meesen e Petersen (2005) a principal reação de obtenção de biureto a partir da síntese comercial de ureia ocorre por meio da Equação 16, onde a ureia se dissocia, sob reação reversível, em biureto e amônia, sendo favorecida por altas temperaturas e altas concentrações do reagente em meio líquido. Os autores citam que a formação de biureto no reator também atinge o equilíbrio junto com a formação de carbamato, porém o excesso de amônia desloca a reação para a esquerda fazendo com que a formação do composto seja pequena ao ponto de negligenciá-la. Após os primeiros processos de separação, onde a ureia está disposta em forma mais concentrada e ainda quente, a formação do biureto se intensifica e deve ser considerada.



2.2.3 Corrosão

O sistema $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-NH}_3\text{-Ureia}$ é extremamente corrosivo em condições de síntese, uma vez que exerce um papel eletrolítico muito forte. Autores como Dente et al. (1988), Isla et al. (1993b) e Zhang et al. (2001) citam que a função eletrolítica das soluções de ureia é exercida pela formação do carbamato, devido a sua dissociação iônica, representada na Equação 17. Os autores assumem como

consideração nos seus trabalhos que todo o carbamato presente no reator está dissociado em íons (ISLA et al., 1993b)



Segundo Meessen e Petersen (2005) o processo de corrosão nas paredes do reator pode ser altamente reduzido se juntamente aos gases de síntese for injetado ar atmosférico na entrada do reator. Segundo o autor, o aço inoxidável utilizado na construção, exerce sua função protetiva por existir uma camada passiva em sua superfície composta de óxidos. Enquanto a camada estiver intacta a corrosão é baixa, porém a corrosão causada no sistema tem caráter eletroquímico e pode quebrar facilmente as camadas protetoras do aço, portanto ao adicionar oxigênio na solução de síntese a proteção de óxido do metal pode ser religada constantemente, mantendo um nível de corrosão de <0,01 a 0,10 mm ao ano.

2.2.4 Processos de Produção

Ambas as reações de produção de ureia, segundo Hamidipour et al. (2005) ocorrem em zona de síntese submetida à alta pressão (13–30 MPa) e à alta temperatura (170–200 °C). As condições variam com a escolha da tecnologia utilizada, o autor cita três processos produtivos principais, que são chamados de: ciclo simples, reciclo parcial e reciclo total.

No processo de ciclo simples, a amônia não convertida é neutralizada com ácidos (comumente ácido nítrico) para a geração de sais amoníacos, que são utilizados como subprodutos do processo de produção de ureia. A sua principal desvantagem é a alta obtenção de sais amoníacos e a baixa conversão de gás carbônico. (MEESSEN, 2012).

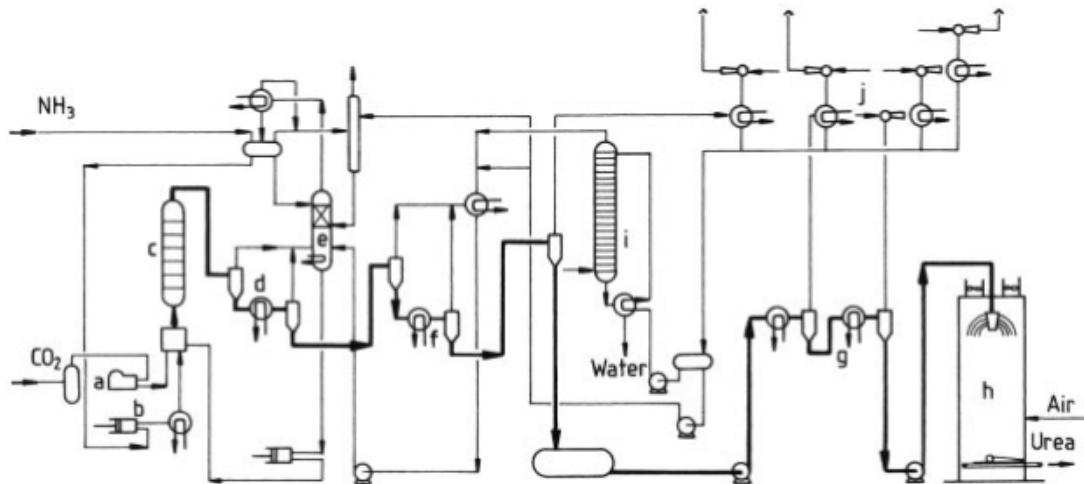
A produção em reciclo parcial é comumente encontrada em pequenas instalações com rendimentos menores, onde somente parte dos reagentes é reciclado no sistema e a outra parte é encaminhada para a produção de subprodutos. (HAMIDIPOUR et al., 2005).

O processo de reciclo total convencional, conforme exemplificado na Figura 6, propõe a recirculação de amônia não convertida de volta ao reator, assim, atingindo uma conversão de aproximadamente 99% do reagente, porém, a

necessidade de equipamentos de separação, bombas e compressores adicionais o torna um projeto com maior custo de investimento inicial e maior custo energético. Apesar das despesas adicionais, o processo de reciclo total possui maior viabilidade econômica e é mundialmente aplicado em industriais de produção de ureia. (MEESSEN, 2000).

Geralmente uma planta industrial utilizando o processo convencional de produção de amônia, conforme a Figura 4, possui duas zonas de reciclo, de média e baixa pressão, operando de 18–25 bar e 2–5 bar, respectivamente. O primeiro estágio de recirculação possui ao menos um aquecedor de decomposição (d), onde o carbamato é decomposto em gás carbônico e amônia, e o amoníaco em excesso contido na solução de ureia evapora facilmente. Os gases de saída são retificados em uma torre de separação onde o carbamato em solução líquida é encaminhado à bomba de alta pressão para a recirculação no reator, e a amônia em estado gasoso é condensada e levada até o tanque de armazenamento, também para o reciclo do reagente. (MEESEN e PETERSEN, 2005)

Figura 4 – Processo convencional de produção de ureia em reciclo total



a) compressor de CO₂; b) bomba de alimentação de amônia de alta pressão; c) reator de síntese; d) torre decomponedora operando em média pressão; e) coluna de separação de amônia/carbamato; f) torre decomponedora operando em baixa pressão; g) evaporador para concentração de produto; h) torre de perolação (opcional segundo a forma de comercialização do produto e a demanda do mercado); i) torre de desorção para tratamento de água; j) condensação á vácuo para tratamento de efluentes.

Fonte: Meessen, (2012). Adaptado pelo autor.

Diversas empresas envolvidas no ramo de produção de fertilizantes nitrogenados buscam incessantemente por rotas comerciais mais econômicas e

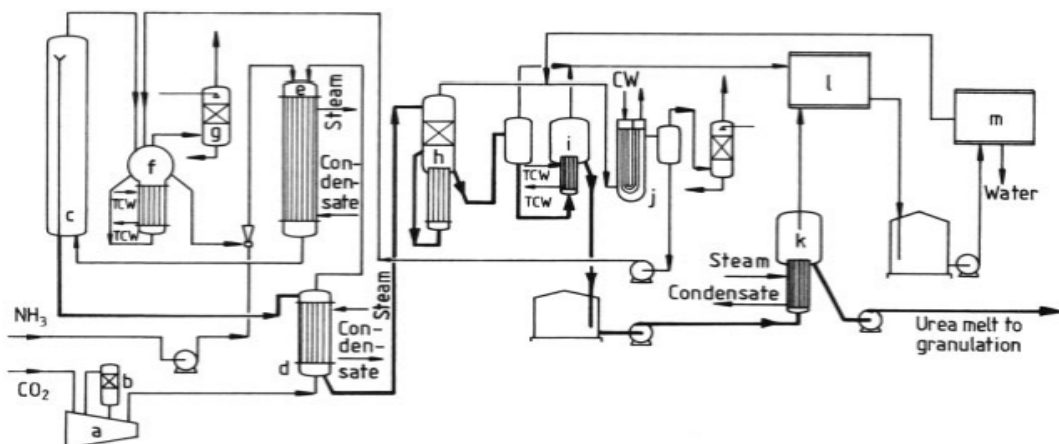
eficientes, de aplicação do processo (Snamprogetti S.p.A., 1976; Ammonia Casale S.A., 1986; Urea Casale S.A., 1997; DSM N.V., 2000; Stamicarbon B.V., 2012; Urea Casale S.A., 2012).

2.2.4.1 Processo de *Stripping* de CO₂ da Stamicarbon B.V.

O processo proposto pela empresa Stamicarbon B.V. ilustrado segundo a Figura 5, opera em condições de 140 bar aproximadamente e razões molares de alimentação NH₃/CO₂ próximo a 3:1. O principal diferencial proposto pela empresa foi a invenção do CO₂ *Stripper*, uma torre vertical utilizada para decompor o carbamato residual do processo de síntese. Essa etapa é realizada com o contato em contracorrente entre o gás carbônico de alimentação em pressão de síntese e a solução líquida de saída do reator, onde a aplicação do *Stripper* minimiza o reciclo na torre de decomposição de baixa pressão. (MEESSEN, 2012).

O fluxograma proposto pela empresa se diferencia do processo convencional na etapa de síntese da ureia que envolve o reator (c), o *stripper* para a decomposição do carbamato (d), o condensador de carbamato (e) e o *scrubber* para separação das fases líquido/gás (f). As etapas de separação utilizadas junto à síntese operam sob alta pressão (pressão do reator) e podem ser recicladas livremente ao reator (MEESSEN e PETERSEN, 2005).

Figura 5 – Processo de produção de ureia: *Stamicarbon CO₂ Stripping Process*

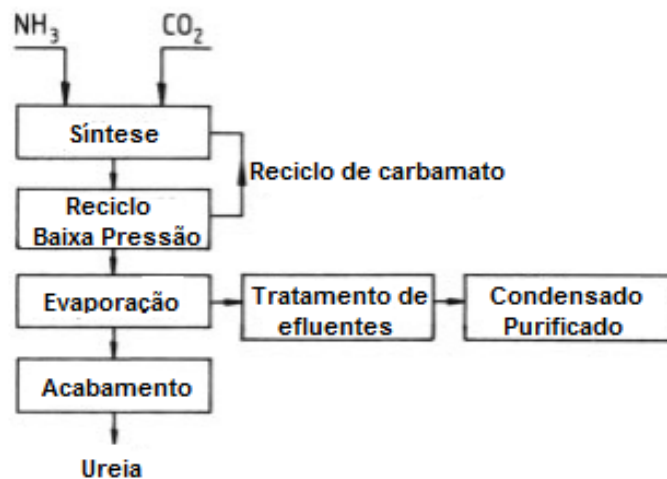


a) compressor de gás carbônico; b) purificador para remoção de hidrogênio; c) reator de síntese; d) *stripper* de CO₂ operando em alta pressão; e) condensador de carbamato de alta pressão; f) purificador de gás do tipo *scrubber* operando em alta pressão; g) torre de absorção de baixa pressão; h) torre decomponente de baixa pressão; i) etapa de pré-evaporação; j) trocador de calor de condensação de carbamato operando em baixa pressão; k) um evaporador de carbamato de reciclo de baixa pressão; l) processo de condensação a vácuo; m) tratamento do efluente para reciclo.

Fonte: Meessen, (2012). Adaptado pelo autor.

O fluxograma proposto pela empresa, representado em diagrama de blocos na Figura 6, se trata da alimentação de amônia e dióxido de enxofre à zona de síntese. A solução proveniente do reator é encaminhada à recirculação de baixa pressão, onde o carbamato é reciclado e o produto é conduzido para a evaporação. Nessa etapa é separada a solução de ureia e o efluente para tratamento, onde a ureia é purificada no processo de acabamento do produto e o efluente é tratado para reutilização (MEESSEN e PETERSEN, 2005).

Figura 6 – Diagrama de blocos de produção de ureia: *Stamicarbon CO₂ Stripping Process*



Fonte: Meessen (2012). Adaptado pelo autor

No ano de 2005 o *Stamicarbon CO₂ Stripping Process* era aplicado em cerca de 120 unidades instaladas em escala global, se tornando o processo de produção de ureia mais difundido na época. (MEESSEN e PETERSEN, 2005).

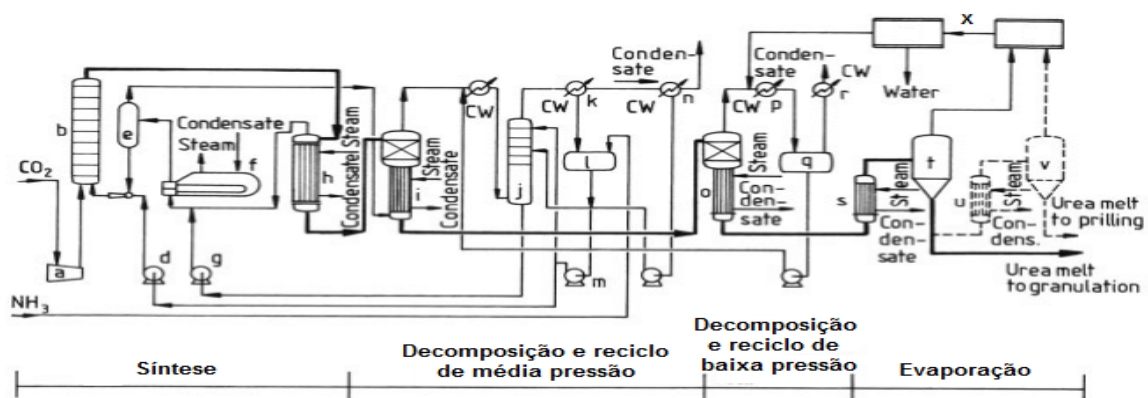
2.2.4.2 Processo de Auto-Stripping de Amônia da Snamprogetti S.p.A.

O projeto elaborado pela empresa italiana Snamprogetti S.p.A. (incorporada atualmente Saipem S.p.A) inicialmente utilizava amônia como agente principal no processo de decomposição do carbamato por *stripping*, porém, devido a alta solubilidade do amoníaco na solução de ureia a corrente resultante do *stripper* continha alta concentração de amônia e necessitava de outra etapa de separação amônia/carbamato no processo. (MEESSEN, 2000).

A empresa logo remodelou o projeto e aplicou o uso do *self-stripper*, onde a etapa de decomposição inicial do carbamato (*stripper*) não ocorre por contato direto entre as espécies, mas sim por fornecimento simples de calor, através de troca térmica ou com o próprio calor exercido pela reação exotérmica ou com vapor de água pressurizado. Apesar da nova tecnologia diminuir os fluxos de reciclos de média e baixa pressão, a corrente de produto que deixa o *stripper*, ainda contém concentração de amônia relativamente alta, necessitando de uma etapa de separação do amoníaco e carbamato, como utilizado em plantas industriais convencionais, porém, em dimensões menores (MEESSEN e PETERSEN, 2005).

O processo de invenção da empresa Snamprogetti S.p.A., ilustrado na Figura 7, se diferencia dos outros na etapa de síntese por utilizar o *self stripper* (h) para a decomposição de carbamato de alta pressão. O *self stripper* utiliza uma fonte de calor proveniente de vapor de alta pressão para trocar calor com a corrente de reciclo e a decompor em CO_2 e NH_3 novamente. Outro diferencial é a aplicação de um condensador de modelo *pool condenser* (f) na corrente de reciclo para condensar os gases e gerar vapor de baixa pressão que é utilizado ao longo do processo. Após condensado, o reciclo passa por uma torre de separação carbamato/amônia, onde o carbamato é realimentado no reator e a amônia conduzida ao decomponedor de média pressão (MEESSEN e PETERSEN, 2005).

Figura 7 – Processo de produção de ureia: *Snamprogetti Self-Stripping Process*

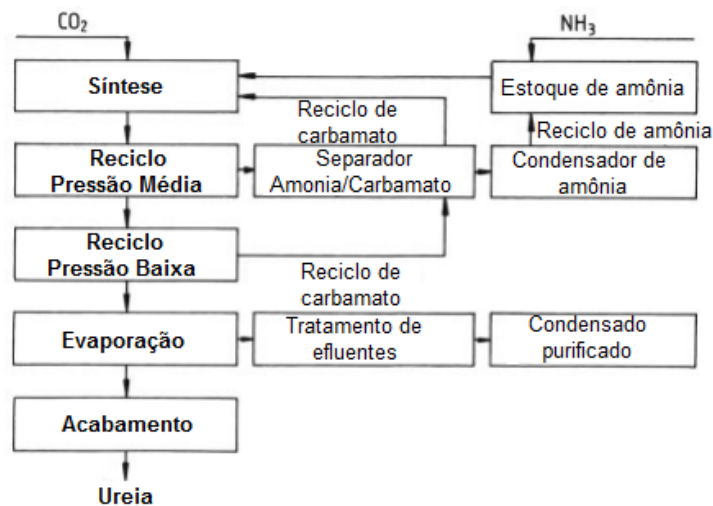


a) compressor de CO_2 ; b) reator de síntese; c) ejetor; d) bomba de alta pressão para alimentação de amônia; e) a torre de separação amônia/carbamato; f) *pool condenser* (Condensador que opera com uma camada de líquido considerável dentro do equipamento, lembrando uma piscina); g) bomba de alta pressão para alimentação de carbamato; h) *stripper* operando em alta pressão; i) torre decomponedora de média pressão junto ao primeiro reciclo; j) coluna de separação de amonia/carbamato; k) condensador de amônia; l) tanque armazenador de amônia; m) bomba de baixa pressão para o reciclo de amônia; n) purificador de corrente gasosa do tipo *scrubber*; o) torre decomponedora de baixa pressão de carbamato; p) condensador de baixa pressão de carbamato; q) tanque armazenador de carbamato; r) segundo purificador de corrente gasosa do tipo *scrubber*; s) queimador do primeiro aquecedor; t) primeiro evaporador; u) queimador do segundo aquecedor; v) segundo evaporador; x) setor de tratamento de água para reaproveitamento no processo.

Fonte: Meessen, (2012). Adaptado pelo autor.

O fluxograma representado em diagrama de blocos, conforme a Figura 8, separa o processo em quatro etapas, a zona de síntese ligada à alimentação de CO_2 , amônia e carbamato de reciclo, a recirculação de média pressão, onde ocorre a separação da solução amônia/carbamato, a recirculação de baixa pressão, onde o carbamato contido na solução é reciclado e o produto segue para a zona de evaporação, onde é concentrado e encaminhado para o acabamento. (MEESEN, 2012).

Figura 8 – Diagrama de blocos de produção de ureia: *Snamprogetti Self-Stripping Process*



Fonte: Meessen, (2012). Adaptado pelo autor.

Segundo Meesen (2012), o projeto elaborado pela Snamprogetti S.p.A. era utilizado por mais de 70 plantas industriais no ano de 2010.

2.2.5 Reator de síntese

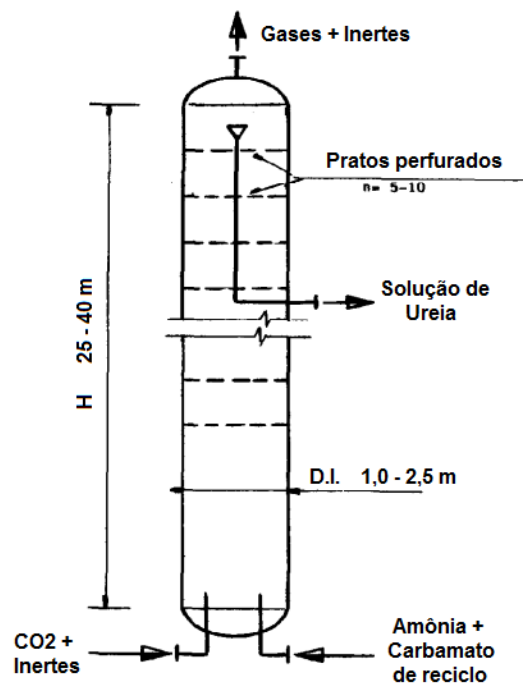
Diversos estudos na literatura foram destinados a aperfeiçoar a geometria e às condições ideais de operação dos reatores de síntese de ureia (DSM N.V., 2000; Ammonia Casale S.A., 1986; Hammidipour, 2004; Stamicarbon B.V., 2012; Urea Casale S.A., 2012).

Um reator convencional de produção de ureia de forma contínua e em grande escala, segundo Shreve (1997), se trata de uma autoclave de alta pressão e alta temperatura, geralmente em sentido vertical, onde o fluxo líquido-gasoso pode

estar disposto em contracorrente, com o líquido sendo adicionado por cima do reator e o gás borbulhando pela entrada de baixo, ou de forma concorrente, onde ambas as fases são adicionadas por baixo do reator e seguem o fluxo vertical.

Um modelo de reator utilizado no trabalho de Dente et al. (1988) pode ser observado conforme a Figura 9, onde a amônia e a corrente de reciclo são alimentadas na parte inferior do equipamento junto à fase gasosa, seguindo o fluxo concorrente através de placas perfuradas. No topo do reator é utilizado um método de separação por densidade, onde a solução de ureia é retirada por tubos no interior da estrutura em que os gases e inertes são expelidos pelo topo.

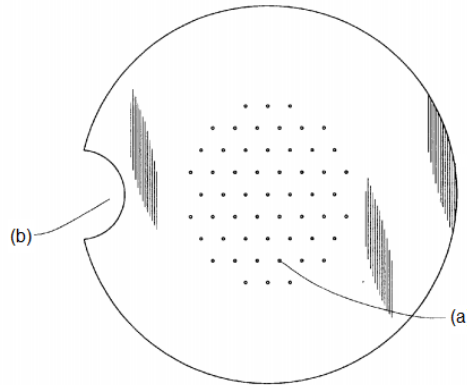
Figura 9 – Representação ilustrativa de um reator de produção de ureia.



Fonte: Dente et al. (1988).

Segundo a patente DSM N.V. (2000) podem ser acopladas placas perfuradas no interior do reator, conhecidas por *sieve trays*. Um modelo ilustrativo da placa pode ser observado, conforme a Figura 10. As peças são posicionadas de forma que os furos (a) estejam em ângulo perpendicular ao fluxo de entrada dos reagentes, de modo a criar um caminho preferencial para a fase gasosa e mantê-la em escoamento pistonado. Segundo a patente, as placas apresentam melhor rendimento se um caminho preferencial (b) for aberto em um dos lados (ou ambos) da geometria para a passagem do fluido em estado líquido.

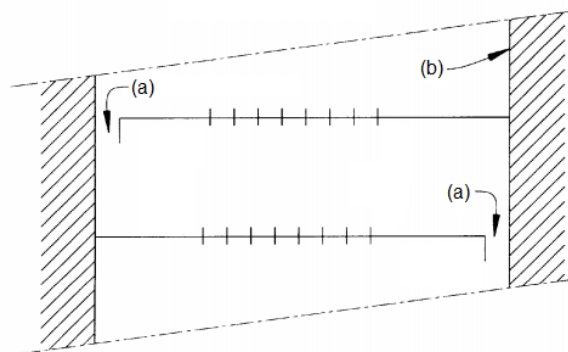
Figura 10 – Ilustração de um prato perfurado *sieve tray*



Fonte: DSM N.V. (2000).

A Figura 11 ilustra a instalação convencional das placas na parede do reator (b). A abertura é disposta, entre duas placas, ou em lados opostos (a), forçando a fase líquida a passar por toda a fase gasosa, antes de atingir a próxima região de contato. Segundo o autor, a placa possui diâmetro semelhante ao diâmetro interno do reator, e pode ser perfurada de 20 a 80% de sua área, tendo como ponto ideal 60% perfurada com buracos preferencialmente de 5 a 10 mm de diâmetro. O reator, conforme a patente, pode ser operado a pressões de 100–350 atmosferas e temperaturas de 125–250 °C (DSM N.V., 2000).

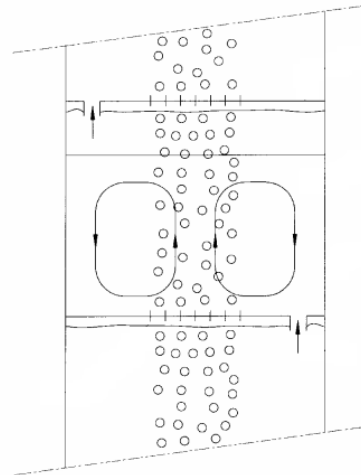
Figura 11 – Ilustração da instalação das placas no interior do reator de ureia.



Fonte: DSM N.V. (2000). Adaptado pelo autor.

A descrição do equipamento segundo a patente DSM N.V. (2000), é implementada para assegurar que o comportamento fluidodinâmico dentro do reator seja semelhante ao escoamento exemplificado na Figura 12.

Figura 12 – Comportamento ideal para o reator de ureia.

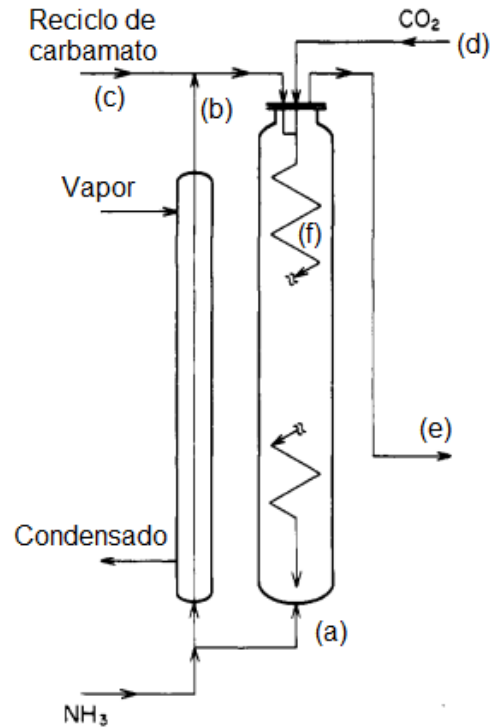


Fonte: DSM N.V. (2000). Adaptado pelo autor.

Outras tecnologias também são citadas em Isla et al. (1993b), em que o reator apresenta-se como vaso de pressão direcionado verticalmente (Figura 13), onde no processo a amônia é alimentada em duas entradas do equipamento superior (b) e inferior (a). Na parte superior a corrente de reciclo (c) e o gás carbônico (d) são misturados com amônia de alimentação e escoam por tubos dentro do reator (f), até aproximar-se da entrada inferior.

Como a formação do carbamato se trata de uma reação exotérmica, o fluido em sua passagem realiza troca de calor entre os tubos e a solução externa, ajudando a manter a temperatura interna ideal para a síntese, aquecendo a mistura exterior com maior concentração de ureia, deslocando a reação para a direita. Na corrente inferior é alimentado outra porção de amônia (para garantir excesso do reagente e diminuir a formação de contaminantes), após percorrer toda a geometria, a solução produto contendo em torno de 32% em massa de ureia é retirada no topo do reator (e). O autor cita que esse tipo de processo pode operar em pressões de 130–300 atmosferas e temperaturas de 170–200°C.

Figura 13 – Reator de síntese de ureia com troca de calor interna.



Fonte: Isla et al. (1993b). Adaptado pelo autor.

2.2.6 Relações fluidodinâmicas de escoamento

Segundo Bird et al. (2004), todo o escoamento de um fluido viscoso possui um perfil característico de velocidade. Tal dedução faz uso das definições da lei de Newton da viscosidade, das expressões para os fluxos moleculares e convectivos de momento, e do conceito geral da equação de balanço de massa. Através dos dados do perfil de escoamento de um fluido ao longo de uma superfície, pode-se obter outras grandezas, tais como a velocidade máxima, a velocidade média ou a tensão cisalhante em uma superfície, que são de interesse em problemas de engenharia.

No perfil de escoamento de fluidos há dois comportamentos distintos relacionados ao campo de velocidade, o regime laminar e o turbulento, junto também as suas fases de transição. Conforme ilustrado na Figura 14, o regime em escoamento laminar (a) é caracterizado por ser ordenado, isto é, se for adicionado partículas muito finas, a ponto de não serem afetadas pela gravidade e sem grande diferença de densidade, em um fluido com velocidade baixa (laminar), será possível observar um perfil linear de partículas na direção paralela ao fluxo, sem se misturar

ou se espalhar pela solução. O perfil turbulento (b) é o oposto do permanente, se comportando de forma caótica, pois ao aplicar o exemplo anterior em velocidades turbulentas todas as partículas estariam espalhadas pelo fluido, seguindo todas as direções, chocando-se contra as paredes e entre si (BIRD et al.,2004).

Figura 14 – Característica perfil laminar e turbulento

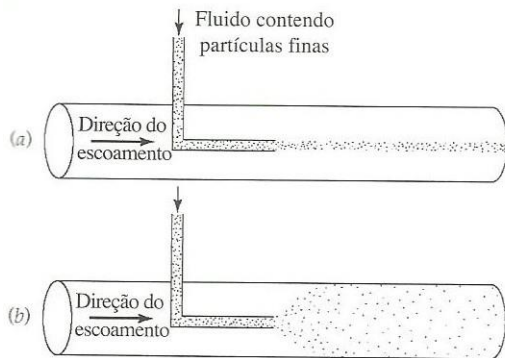


Fig. 2.0-1 (a) Escoamento laminar, no qual as camadas de fluido se movem suavemente umas sobre as outras na direção do escoamento, e (b) escoamento turbulento no qual a configuração de escoamento é complexa e dependente do tempo, com consideráveis movimentos perpendiculares à direção principal de escoamento.

Fonte: Bird et al., 2004, p.151.

O comportamento laminar ou turbulento está diretamente relacionado com o número adimensional de Reynolds para o sistema, sendo que a partir do valor de $Re > 2100$ o perfil começa a se tornar turbulento, passando por fases de transição, até que, quando atinge $Re > 4000$ a agitação se torna totalmente turbulenta. (BIRD et al.,2004).

A comparação entre os dois perfis de escoamento pode ser feita a partir de deduções em análise numérica. Segundo Bird et al. (2004), em um escoamento laminar, permanente e totalmente desenvolvido em um tubo de raio R (Figura 15), sabe-se que a distribuição de velocidade e a velocidade média são representadas pela Equação 18. A queda de pressão imposta pela parede e a vazão mássica estão relacionadas de modo linear segundo a Equação 19. No fluxo turbulento, com o número de Reynolds entre $10^4 < Re < 10^5$, a velocidade flutua caoticamente com o tempo em cada ponto do tubo, portanto deve-se assumir uma velocidade média temporal \bar{v}_z , representada muito aproximadamente pela Equação 20. Os valores de queda de pressão e vazão mássica para esse intervalo não são mais proporcionais e podem ser relacionados aproximadamente pela Equação 21.

$$\frac{v_z}{v_{z,\text{máx}}} = 1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2 \quad \text{e} \quad \frac{\langle v_z \rangle}{v_{z,\text{máx}}} = \frac{1}{2} \quad (18)$$

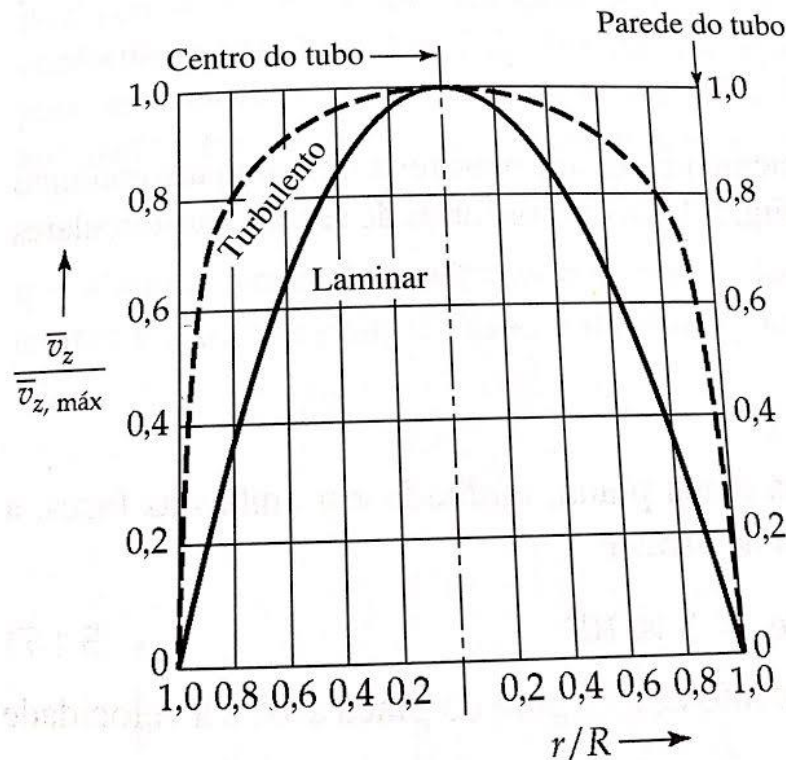
$$P_0 - P_L = \left(\frac{8\mu L}{\pi\rho R^4}\right) \quad (19)$$

$$\frac{\bar{v}_z}{v_{z,\text{máx}}} \approx \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{1/7} \quad \text{e} \quad \frac{\langle \bar{v}_z \rangle}{v_{z,\text{máx}}} = \frac{1}{2} \quad (20)$$

$$P_0 - P_L \approx 0,198 \left(\frac{2}{\pi}\right)^{7/4} \left(\frac{\mu^{1/4}L}{\rho R^{19/4}}\right) w^{7/4} \quad (21)$$

Onde v_z e $v_{z,\text{máx}}$ são a velocidade e a velocidade máxima em z , P_0 e P_L são a pressão inicial e a pressão final, μ é a viscosidade dinâmica do fluido, ρ é a massa específica, L é o comprimento do tubo, r é o comprimento do raio aonde a velocidade está sendo analisada e w é a vazão mássica do componente.

Figura 15 – Exemplo de perfil laminar e perfil turbulento



Segundo Bird et al. (2004, p.151) “A dependência mais forte da queda de pressão com a vazão mássica para o escoamento turbulento resulta do fato de que mais energia tem de ser suprida para manter o violento movimento de vórtices do fluido”. Bird et al. (2004) ainda cita que, a interação entre o fluido e objetos, como paredes perpendiculares, esferas, tubos ou qualquer outra resistência imposta ao fluxo, aliado a um escoamento de ordem turbulenta, gera os vórtices em certos pontos do escoamento. Os vórtices são caracterizados por zonas de baixa pressão em contato com zonas de alta pressão proveniente do fluxo, fazendo com que o fluido se desloque em sentido oposto e crie um movimento circular de estagnação.

2.2.6.1 Análise diferencial de escoamento

Segundo Çengel & Cimbala (2015, p.438)

“A análise diferencial envolve a aplicação de equações diferenciais de movimento do fluido em todos os pontos no campo de escoamento sobre uma região chamada de domínio de escoamento [...] Ao serem resolvidas essas equações fornecem detalhes sobre a velocidade, massa específica, pressão, etc., em cada ponto de todo o domínio.”.

O autor ainda cita que a análise diferencial pode ser aplicada com o método dos volumes finitos, onde o volume de controle é dividido em vários volumes relativamente pequenos, nos quais as equações de conservação de massa (Equação 22) e momento (Equação 23) são aplicadas em suas fronteiras, para prever o comportamento fluidodinâmico em todos os pontos da malha (Figura 16).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_M \quad (22)$$

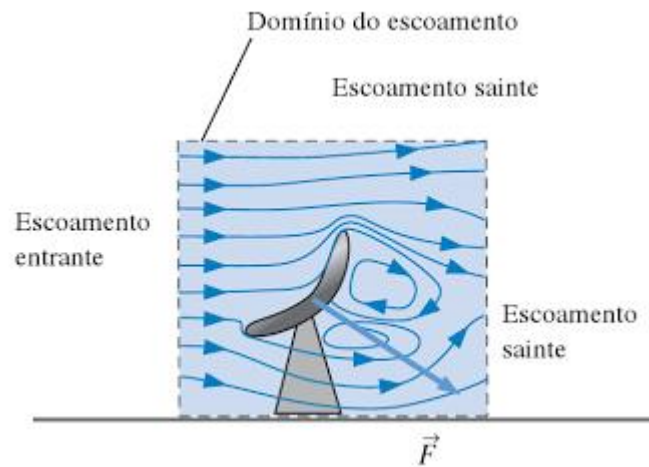
$$\frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + S_M \quad (23)$$

Onde:

$$\tau = \mu \left(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right) \quad (24)$$

Sendo que S_M representa os termos fonte das equações, \vec{v} é a velocidade do fluido, p é a pressão estática, τ representa o tensor de tensão e I é o tensor unitário, ρ é a densidade do fluido e μ é a viscosidade dinâmica.

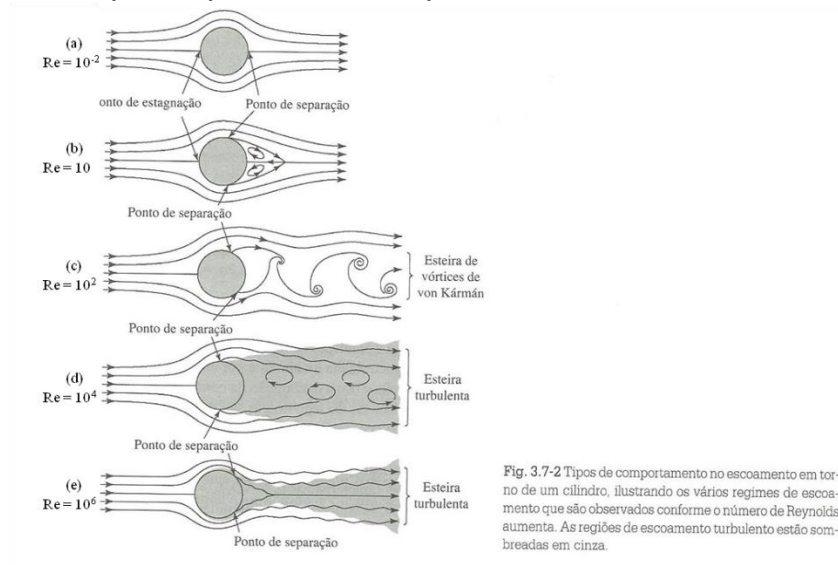
Figura 16 – Representação de análise diferencial de escoamento ao redor de uma parabólica.



Fonte: Çengel & Cimbala, 2015, p.438

Alguns tipos de comportamentos no escoamento de fluidos em torno de geometrias são estudados experimentalmente e apontam o tipo de perfil que ocorre em torno da estrutura, conforme a Figura 17, que apresenta as características possíveis ao escoar um fluido por um cilindro à medida que se aumenta o número de Reynolds. (BIRD et al., 2004).

Figura 17 – Exemplo de perfil laminar e perfil turbulento ao redor de um cilindro

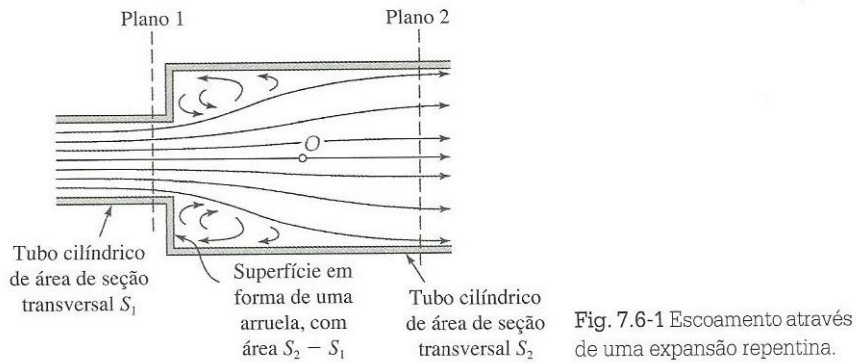


Fonte: Bird et al., 2004,

Para um número de Reynolds de aproximadamente $Re \approx 10^{-2}$ (a), ou seja, um perfil bem laminar, é possível observar o ponto de estagnação (choque do fluido com a parede) e o ponto de separação (fluido deixa a parede) bem alinhados, com valores de Reynolds da ordem de $Re \approx 10$ (b) é possível observar um par de vórtices atrás do cilindro ainda em fluxo laminar, ao aumentar o valor para $Re \approx 10^2$ (c) começa a formação de vórtices em escoamento chamados de esteira de vórtices de von Kármán, com Reynolds de ordem $Re \approx 10^4$ (d) o escoamento turbulento é evidenciado e esteiras de vórtices aparecem ao longo do fluxo. Já na ordem de $Re \approx 10^6$ (e) a esteira turbulenta tende a se estreitar após o contato com o cilindro devido a zona de baixa pressão que é imposta após o ponto de separação.

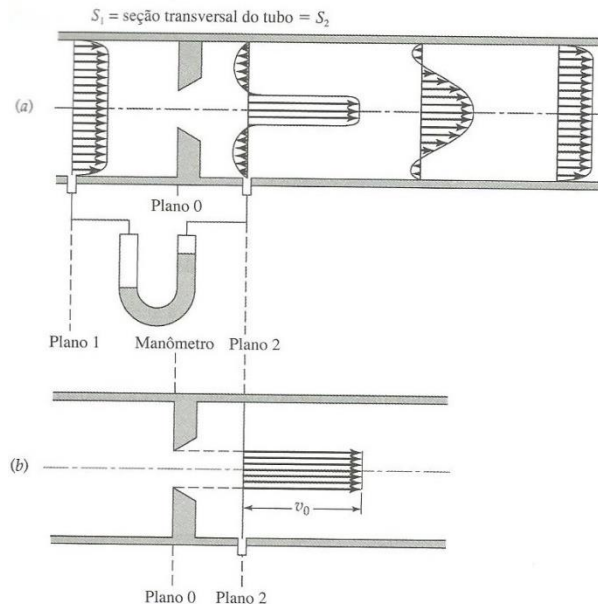
Outro fator de geração de vórtices bastante estudado é a expansão repentina, conforme a Figura 18, um fluido em fluxo turbulento ao passar de um tubo com área de seção transversal de S_1 para um tubo com área de S_2 , a área de superfície $S_2 - S_1$ gera pontos de baixa pressão, que resultam em vórtices e queda de pressão no escoamento, porém ao longo da trajetória o perfil de velocidade tende a retornar ao inicial, conforme exemplificado na Figura 19, onde há a perturbação de fluxo por uma placa de orifício. (BIRD et al., 2004).

Figura 18 – Perfil de escoamento por uma expansão repentina.



Fonte: Bird et al., 2004,

Figura 19 – Escoamento em uma placa de orifício.

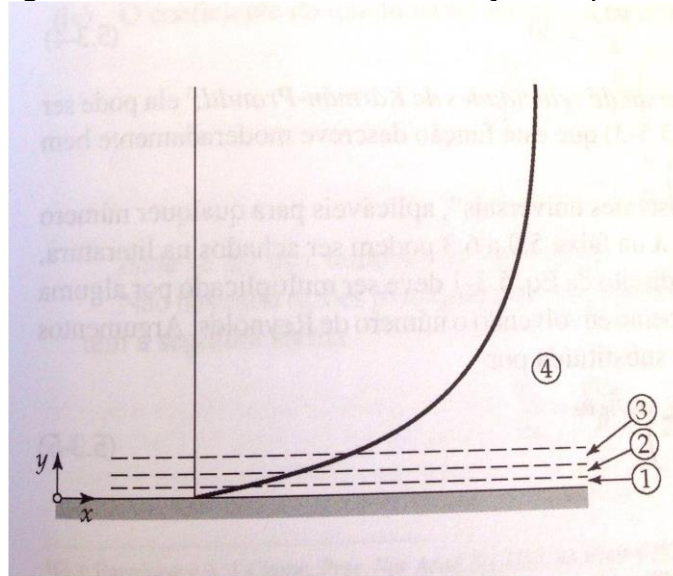


Fonte: Bird et al., 2004,

As principais interações no escoamento de um fluido em qualquer geometria são as condições de comportamento turbulento ao aproximar-se de uma parede. A Figura 20 mostra um fluido em contato com uma parede, onde quatro camadas de proximidade são separadas de modo arbitrário, de acordo com a respectiva interação com a parede do objeto. A primeira camada (1) é denominada subcamada viscosa e é caracterizada por ter alta interação com a parede estática e ser altamente dependente da viscosidade do fluido. A segunda divisão (2) é chamada de camada tampão, onde ocorre a transferência entre as subcamadas viscosa e inercial. A terceira camada (3) é denominada subcamada inercial, onde há

a interação com o fluxo turbulento principal e a subcamada viscosa, sendo dependente parcialmente da viscosidade e da turbulência. A última divisão (4) é chamada de corrente principal turbulenta, onde o perfil de distribuição da velocidade é dependente da turbulência e não da viscosidade.

Figura 20 – Subcamadas de interação de parede.



Fonte: Bird et al., 2004,

A equação de balanço de momento para o fluxo turbulento em termos do tensor tensão pode ser representada conforme a Equação 25, utilizando as correlações de tensões de Reynolds.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \bar{v} = -\nabla \bar{p} - [\nabla \cdot \rho \bar{v} \bar{v}] - [\nabla \cdot (\bar{\tau}^{(v)} + \bar{\tau}^{(t)})] + \rho g \quad (25)$$

Onde $\bar{\tau}^{(v)}$ representa as tensões viscosas e $\bar{\tau}^{(t)}$ são as tensões da correlação de Reynolds para a turbulência, ρ é a massa específica do fluido, g é a aceleração da gravidade, \bar{p} e \bar{v} simbolizam os campos de pressão e velocidade.

Segundo Bird et al. (2004, p.155),

“As tensões de Reynolds $\bar{\tau}^{(t)}$, não estão relacionadas aos gradientes de velocidade de uma maneira simples tal como ocorre com as médias temporais das tensões viscosas, $\bar{\tau}^{(v)}$. Muito pelo contrário elas são funções complicadas da posição e da intensidade da turbulência. Para resolver

problemas de escoamento devemos ter informações experimentais sobre as tensões de Reynolds ou então recorrer a alguma expressão empírica. [...] O problema de introduzir empirismos para obter um conjunto fechado de equações que possa ser resolvido levando às distribuições de velocidades e pressões, é referido como “problema de fechamento”.

Um exemplo de empirismo de segunda ordem é o modelo $k - \omega$ copulado ao modelo SST (*Shear Stress Transport*), que são muito utilizados em estudos de mecânica dos fluidos computacionais juntos com as equações de RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) e o modelo de viscosidade turbulenta de Eddy. (BIRD et al., 2004).

No modelo SST, formulado por Menter (1994), a viscosidade turbulenta é modificada para englobar o transporte da tensão de cisalhamento turbulento. O modelo utiliza funções para maior precisão no escoamento próximo às paredes e utiliza o modelo $k - \omega$ para o restante das regiões. As funções de parede se dividem em duas equações, uma linear para a subcamada viscosa e outra utiliza a lei logarítmica para as outras localizações.

O modelo $k - \omega$ é baseado na aplicação das equações de transporte para k que representa a energia cinética da turbulência e ω que representa a taxa de dissipação específica, conforme as Equações 26 e 27.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial X_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial X_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial X_j} \right) + G_k - Y_k + S_k \quad (26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial X_i}(\rho \omega u_i) = \frac{\partial}{\partial X_j} \left(\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial X_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + S_\omega \quad (27)$$

Onde G_ω e G_k representam a geração de ω e k respectivamente, Y_ω e Y_k representam a dissipação por turbulência, Γ_ω e Γ_k são a difusividade efetiva e S_ω e S_k são os termos fonte, ρ é a densidade do fluido, u_i é a velocidade e X_i representa as direções cartesianas.

2.2.6.2 Escoamentos multifásicos

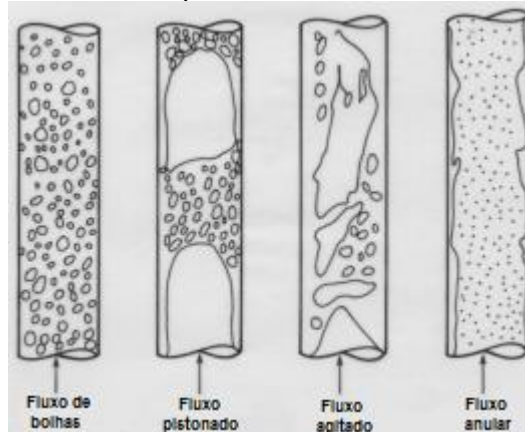
Escoamentos multifásicos estão amplamente presentes na natureza e em processos industriais e são caracterizados pela presença de mais de uma fase em um fluido, como gotas de chuva em contato com o ar ou bolhas de ar escoando na água até a superfície. No escoamento multifásico uma das fases pode ser classificada como um tipo de material em que possui uma resposta inercial peculiar ao escoamento do fluido principal, possuindo um campo de interação entre os dois, porém com campos de velocidade distintos. (ANSYS 16.2, 2015).

O escoamento de um gás disperso, com diâmetro de bolha relativamente pequeno, através de um líquido contínuo é chamado de *bubbly flow* (Fluxo de bolhas). Como a diferença de densidade entre as fases é grande, a gravidade exerce um papel importante para o fluxo gasoso, gerando uma força conhecida como flutuabilidade, que pode ser representado adicionando um termo fonte à equação de momento conforme exemplificado na Equação 28.

$$S_{M,flut} = (\rho - \rho_{ref})g \quad (28)$$

Na Figura 21, segundo Abdulmouti (2014), são exemplificados os tipos de fluxo gás-líquido presentes em processos, tendo por base a relação de velocidade do líquido em comparação com o gás e o fluxo mássico de cada fase.

Figura 21 – Caracterização de fluxos multifásicos gás-líquido



Fonte: Abdulmouti, 2014. Adaptado pelo autor

2.3 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Os computadores revolucionaram a maneira com que engenheiros químicos desenvolvem ou aperfeiçoam processos. Segundo Finlayson (2005), as simulações feitas a 30 ou 40 anos atrás por doutorandos, são similares, em termos de complexidade de cálculo, às feitas por graduandos na atualidade. Devido ao avanço tecnológico das máquinas de cálculo e à criação de softwares de simulação com interfaces simplificadas, que permitem ao usuário realizar as simulações sem precisar programar em linguagem computacional toda a modelagem necessária. Os softwares de simulação atuais possuem interfaces relativamente mais simples de aplicar as condições de contorno necessárias.

Atualmente dois softwares de simulação computacional em CFD dominam o mercado e a preferência dos profissionais do ramo o ANSYS e COMSOL *Multiphysics*, que são produtos de alta confiabilidade e alta capacidade de simular todos os tipos de físicas envolvidas em soluções de engenharia, em análises mecânica estática, elétrica, fluidodinâmica, térmica, química e outras.

2.3.1 ANSYS

A ANSYS é uma empresa cujo principal foco dos seus produtos são softwares de simulação computacional, que englobam todos os campos de estudos da física, assim, os produtos da empresa são aplicáveis à qualquer campo da engenharia de simulação, sendo eles separados por: Fluidos, estruturas, eletrônica, semicondutores, sistemas, software embutido, multifísica e plataformas (ANSYS 16.2, 2015).

O principal software de simulação utilizado é o ANSYS Workbench, que funciona como uma plataforma para a organização do caso de estudo, em que pode-se utilizar em uma interface acessível todos os produtos oferecidos pela empresa e unir as condições de contorno de várias físicas diferentes (ANSYS 16.2, 2015).

2.3.1.1 ANSYS Fluent

O ANSYS Fluent é um software de análise em CFD (*Computational Fluid Dynamics* ou Fluidodinâmica Computacional) capaz de englobar estudos variados

junto ao projeto, para melhor representar as condições do ambiente de simulação. Sua estrutura possui um *solver* avançado com alta capacidade de processamento e pós-processamento. A ferramenta pode ser utilizada em análises do tipo: Regime transiente ou em regime estacionário, fluxos laminar ou turbulento, escoamento subsônico, transônico e supersônico, transferência de calor e radiação térmica, flutuabilidade, fluxos não newtonianos, transporte de componentes escalares sem reação, fluxos multifásicos, combustão, reações, rastreamento de partículas, entre outros. (ANSYS 16.2, 2015).

A estrutura resumida de programação utilizada no software se divide em duas etapas preliminares antes do acesso ao software Fluent, onde primeiramente deve ser criada a geometria de trabalho na qual serão aplicadas as condições de contorno, que pode ser feita no próprio ANSYS com auxílio do programa Design Modeler, ou exportada de vários outros softwares de CAD (Computer aided design ou desenho assistido por computador) compatíveis. Após a primeira etapa é preciso designar a malha de simulação, que também pode ser feita no próprio ANSYS com auxílio do *Meshing Application* ou exportada de outros programas compatíveis. (ANSYS 16.2, 2015).

2.3.1.1.1 Geometria

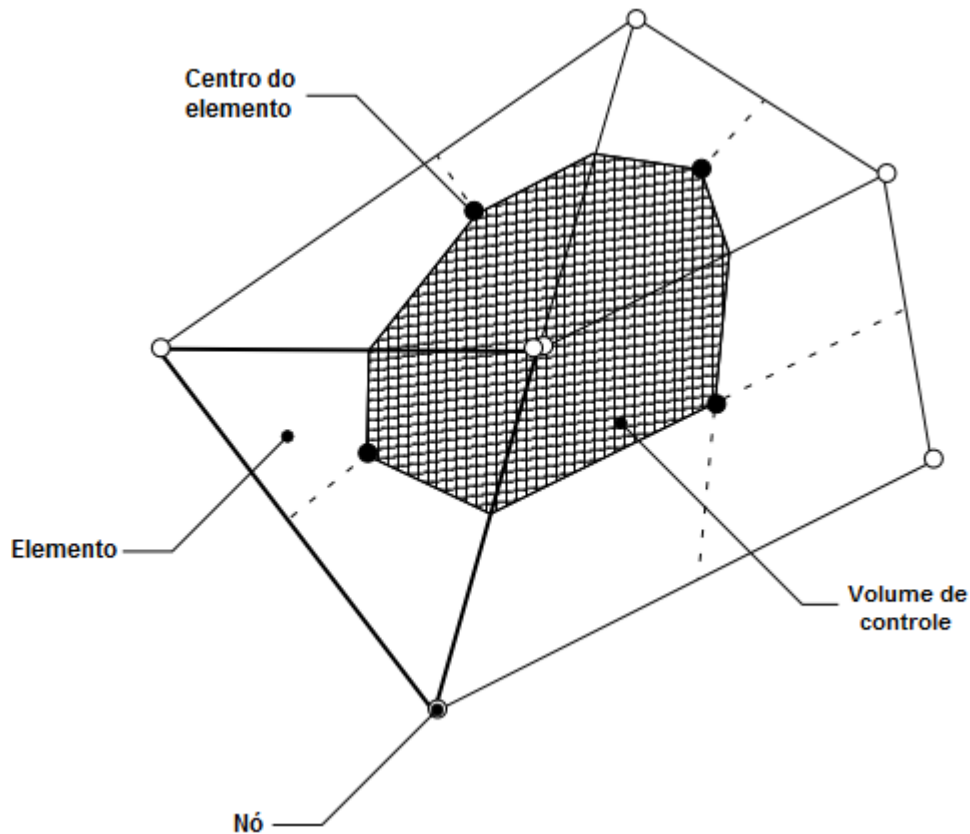
Em se tratando de simulação computacional a escolha da geometria é de suma importância para facilitar a convergência dos resultados. A escolha das condições em que o corpo será analisado pode acarretar em maior tempo de cálculo no *solver*. Portanto o autor do projeto deve estar atento a simplificações que podem ser aplicadas sem alterar os resultados, como em peças com lados idênticos onde é possível utilizar condições de simetria ou em simplificações bidimensionais de um objeto tridimensional (ANSYS 16.2, 2015).

O ANSYS 16.2 possui o Design Modeler, que se trata de um software de desenhos em CAD, capaz de produzir geometrias bidimensionais e tridimensionais (ANSYS 16.2, 2015).

2.3.1.1.2 Malha

A malha (*Mesh*) em simulação computacional é utilizada para a criação de pequenos volumes para a aplicação da análise diferencial de escoamento, que são utilizados para conservar grandezas relevantes para os cálculos como massa, momento e energia. Todas as malhas no ANSYS são tridimensionais e por isso geram volumes de controle, conforme exemplificado na Figura 22. As variáveis da solução e as propriedades dos fluidos estão armazenadas em nós, onde os volumes de controle são construídos ao redor dos pontos médios dos elementos (Centro do elemento) (ANSYS 16.2, 2015).

Figura 22 – Representação em 2D de quatro elementos de malha.



Fonte: ANSYS 16.2 Help, 2015. Adaptado pelo autor.

A malha utilizada exerce extrema influência nos resultados de um projeto de simulação, tanto no tempo de resolução do *solver* quanto na convergência. Uma malha muito fina pode alterar a simulação resultando em divergência dos cálculos, podendo necessitar de um processador muito potente e demorar muito mais tempo do que o devido. Porém uma malha muito grosseira pode gerar pontos inconsistentes de pressão que causaria um erro de cálculo do *solver*, podendo apresentar resultados alterados devido a aproximações grosseiras para a

convergência e deformar algumas regiões da geometria acusando erro de simetria ou erro nas condições de contorno (ANSYS 16.2, 2015).

Alguns aspectos podem ser observados durante a criação da malha para adequá-la às condições requisitadas pela física aplicada no *Fluent*. Um deles é o nível de assimetria (*Skewness*), calculado através de uma equação em que compara o tamanho ideal da célula com o seu tamanho real. Alta assimetria na malha leva a performances grosseiras de escoamento e divergência dos resultados. Malhas de boa qualidade em simulações bidimensionais abrangem um valor aproximado de 0,1, que se encaixa em uma qualidade excelente conforme a Tabela 1. Outro parâmetro de ajuste de malha que pode ser crucial na análise fluidodinâmica é chamado de y^+ , que se trata de um valor adimensional utilizado para determinar a distância entre o primeiro elemento de malha com as paredes da geometria. O y^+ é importante em escoamentos com turbulência incluída, pois alguns modelos de cálculo de turbulência não conseguem convergir se as malhas nas paredes estão muito grosseiras. Por exemplo, a opção $k - \varepsilon$ suporta valores maiores no intervalo de 100-300, sendo menos sensível a essas interferências, a opção $k - \omega$ possui um método de cálculo muito mais refinado e atua com um y^+ de aproximadamente 1 ou menor, convergindo em resultados relativamente mais precisos (ANSYS 16.2, 2015).

Tabela 1 – Tabela de comparação de assimetria por qualidade de malha.

Skewness	Qualidade de malha
1	Corrompida
0.9 — <1	Ruim
0.75 — 0.9	Medíocre
0.5 — 0.75	Aceitável
0.25 — 0.5	Boa
>0 — 0.25	Excelente
0	Equilateral

Fonte: ANSYS 16.2, 2015. Adaptado pelo autor.

2.3.1.1.3 Módulo *Set up*

O *Set Up* do *Fluent* é utilizado para adicionar as condições de contorno, necessárias para a realização da simulação, além das condições em que estão submetidos os fluidos dentro da geometria de controle, a interação na interface entre dois fluidos, reações, trocas de fase e muitas outras. Portanto, o *Set Up* se trata do

corpo da simulação, a condição inicial em que se encontram as fronteiras, junto às físicas aplicadas às mesmas (ANSYS 16.2, 2015).

Essas condições podem ser adicionadas somente nas fronteiras de entrada e saída da geometria, como também podem ser utilizadas como método de inicialização da simulação, onde no ponto inicial as condições já estão presentes em todos os pontos de malha da geometria (ANSYS 16.2, 2015).

2.3.1.1.3.1 Condições de contorno

As condições de contorno presentes no Fluent são: entrada de pressão, entrada de velocidade, entrada de fluxo de massa, entrada de ventilação, saída de pressão, campo de pressão, saída mássica, saída de ventilação, ventilador de exaustão, parede, simetria, periódico, eixo, ventilador, porosidade, parede e interior (ANSYS 16.2 Help, 2015).

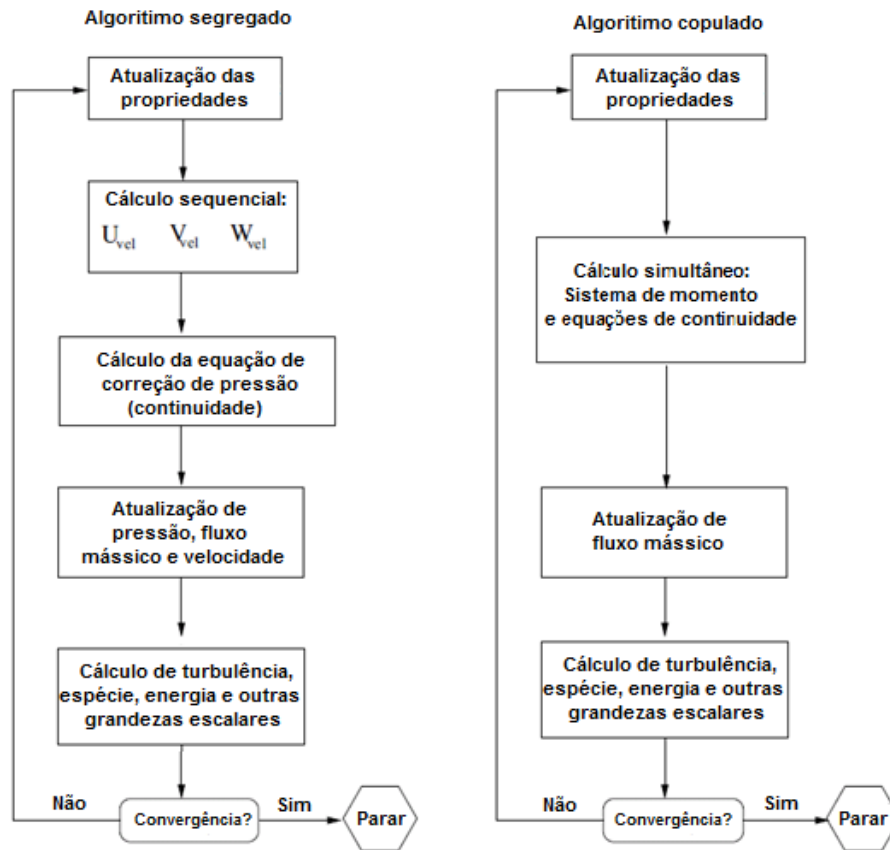
2.3.1.1.4 Solver

O Solver em CFD é o software que recebe as informações das condições de contorno impostas no *set up* e aplica as equações de *Navier-Stokes* para cada espécie dentro de cada volume de controle regulado pela malha da geometria, utilizando o método dos volumes finitos (ANSYS 16.2 Help, 2015).

O Fluent apresenta dois tipos de *Solver*, um baseado na pressão e outro baseado na densidade, sendo o primeiro utilizado para fluidos incompressíveis e levemente compressíveis e o segundo utilizado em fluidos submetidos a altas velocidades e altamente compressíveis (ANSYS 16.2 Help, 2015).

Dois métodos de cálculo baseados em pressão podem ser escolhidos, o de algoritmo segregado e o de algoritmo copulado. Seus métodos são mostrados na Figura 23 (ANSYS 16.2 Help, 2015).

Figura 23 – Comparação de organização dos tipos de solver baseados em pressão.



Fonte: ANSYS 16.2 Help, 2015. Adaptado pelo autor.

O algoritmo copulado, por calcular as equações de momento e continuidade em um passo, garante a convergência de forma mais eficiente, ou seja, em menor número de iterações, porém necessita de maior capacidade de memória para armazenar as equações aplicadas (ANSYS 16.2 Help, 2015).

2.3.1.1.5 CFD-Post

O CFD-Post é uma interface de resultados, ou seja, a interpretação dos resultados gerados pelo *solver*, onde é possível avaliar expressões criadas anteriormente e gerar pontos de monitoramento, que podem ser utilizados para atestar os critérios de convergência da simulação (ANSYS 16.2 Help, 2015).

2.4 ABORDAGENS ANTERIORES SOBRE A SIMULAÇÃO EM REATORES DE PRODUÇÃO DE UREIA

No trabalho realizado por Dente et al. (1992), o escoamento do fluido em estado líquido é considerado perfeitamente agitado, portanto é simulado como um reator de mistura perfeita (CSTR). O autor também leva em consideração que o fluido em estado gasoso percorre um caminho preferencial, passando entre as perfurações das placas, resultando em um escoamento pistonado. Assim o fluxo disperso borbulhante é considerado um reator tubular contínuo (PFR). Dente utiliza a lei de Henry do equilíbrio entre fases para todos os compostos envolvidos. Os balanços de entalpia e massa são modelados e o reator é simulado como uma simples etapa. Os resultados de conversão e perfil de temperatura, obtidos pelo autor foram comparados ao de plantas existentes, e apresentaram erro máximo de 3%.

No estudo feito por Isla et al. (1993) o reator de síntese é dividido em módulos, sendo cada divisão o volume entre duas placas perfuradas (*Sieve Trays*). O autor faz as mesmas considerações que Dente et al. (1992), para o perfil de escoamento das fases. O estudo utiliza um modelo termodinâmico completo, englobando o equilíbrio líquido-vapor, as reações paralelas da produção de ureia e a troca de calor efetuada pelo contato do escoamento interior e o exterior. Para representar a tecnologia da zona de síntese utilizada, o autor considerou vários reatores do tipo CSTR em série, com uma zona de troca de calor para cada módulo, ligando assim o tubo interior ao exterior. Os resultados de conversão e perfil de temperatura, obtidos pelo autor foram comparados ao de plantas existentes, e apresentaram erro máximo de 2%.

Outro estudo mais recente foi efetuado por Hamidipour (2005), em que utiliza as considerações feitas por Dente et al. (1992) e Isla et al. (1993) sobre o escoamento característico das fases, porém para a representação da reação foram utilizados dados experimentais de reatores industriais e foi considerada a formação de biureto dentro do reator. Além de modelar a zona de síntese, o autor também modela o processo de reciclo de alta pressão, que se trata de um condensador, um stripper e um lavador de gases, além do reator. A tecnologia utilizada para a geometria do reator foi idêntica a utilizada por Dente et al. (1992). Hamidipour

compara os resultados com as condições de operação, porém não os compara a estudos experimentais.

3 METODOLOGIA

A criação da geometria e as simulações foram realizadas na sala de computação avançada do Parque Científico e Tecnológico I-parque (UNESC-Universidade do Extremo Sul Catarinense). Os métodos utilizados para a realização deste trabalho estão descritos abaixo.

3.1 CONDIÇÕES OPERACIONAIS DE UM REATOR DE PRODUÇÃO COMERCIAL DE UREIA.

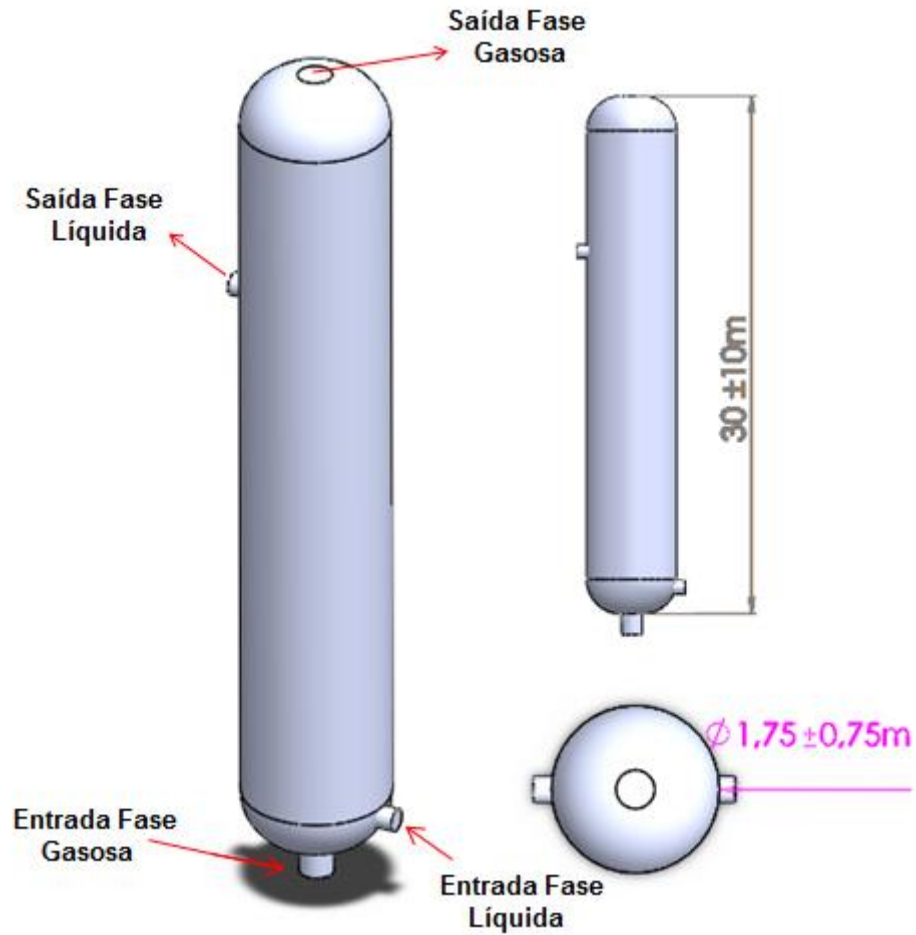
Todos os dados de operação do processo de produção de ureia foram baseados em artigos da literatura de simulação computacional e de processos químicos, além de utilizar patentes de novas tecnologias aplicadas em reatores do tipo. Os perfis de composição dentro do reator foram baseados no trabalho de Isla et al. (1993). As condições operacionais, como temperatura e pressão, além das características gerais do processo foram baseadas no trabalho de Meessen (2012).

Os dados operacionais, tal qual a geometria utilizada foram baseados no trabalho de DSM N.V. (2000).

3.2 GEOMETRIA DO REATOR DE PRODUÇÃO DE UREIA EM OPERAÇÃO.

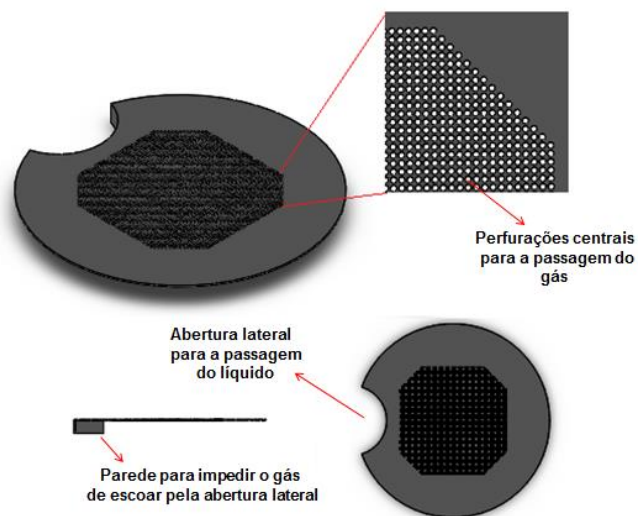
A geometria utilizada para representar o reator no projeto de simulação foi baseada na patente DSM N.V. (2000) e desenhada utilizando o software de desenho em CAD ANSYS Design Modeler. As Figuras 24, 25 e 26 representam tridimensionalmente a estrutura utilizada.

Figura 24 – Representação tridimensional e bidimensional de um reator de síntese de ureia



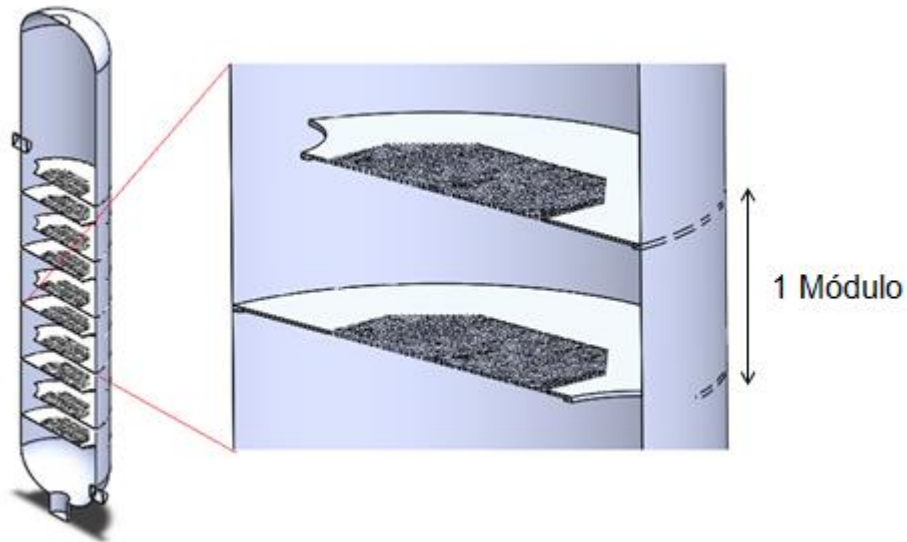
Fonte: Do autor (2016)

Figura 25 – Prato perfurado modelo *sieve tray* utilizado no reator de síntese de ureia



Fonte: Do autor (2016)

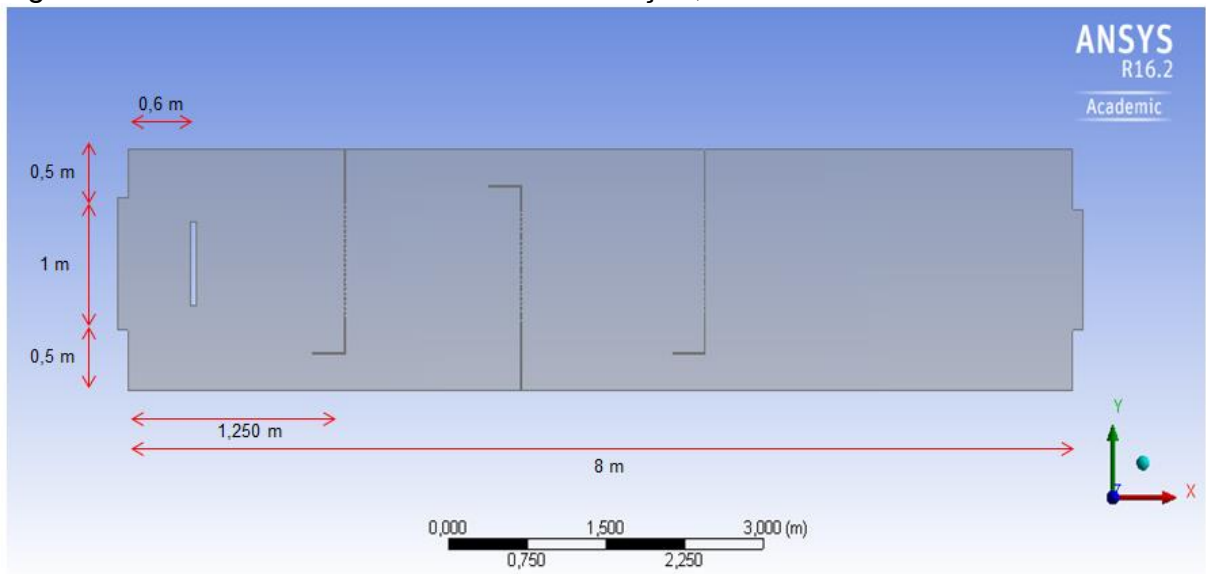
Figura 26 – Representação da instalação dos pratos perfurados no reator de síntese de ureia.



Fonte: Do autor (2016)

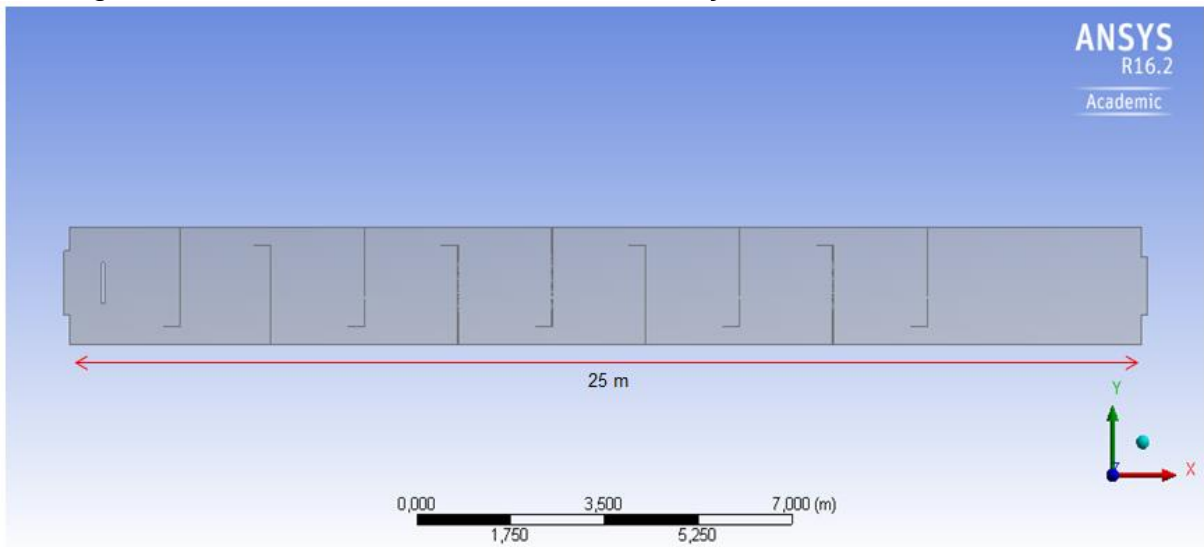
Foram criadas duas geometrias bidimensionais, sendo que, a primeira representa dois módulos do reator e a segunda o reator completo. As geometrias criadas para as simulações estão exemplificadas conforme as Figuras 27 e 28.

Figura 27 – Geometria 2D utilizada na simulação, referente a dois módulos do reator.



Fonte: Do autor (2016)

Figura 28 – Geometria 2D utilizada na simulação, referente ao reator inteiro.

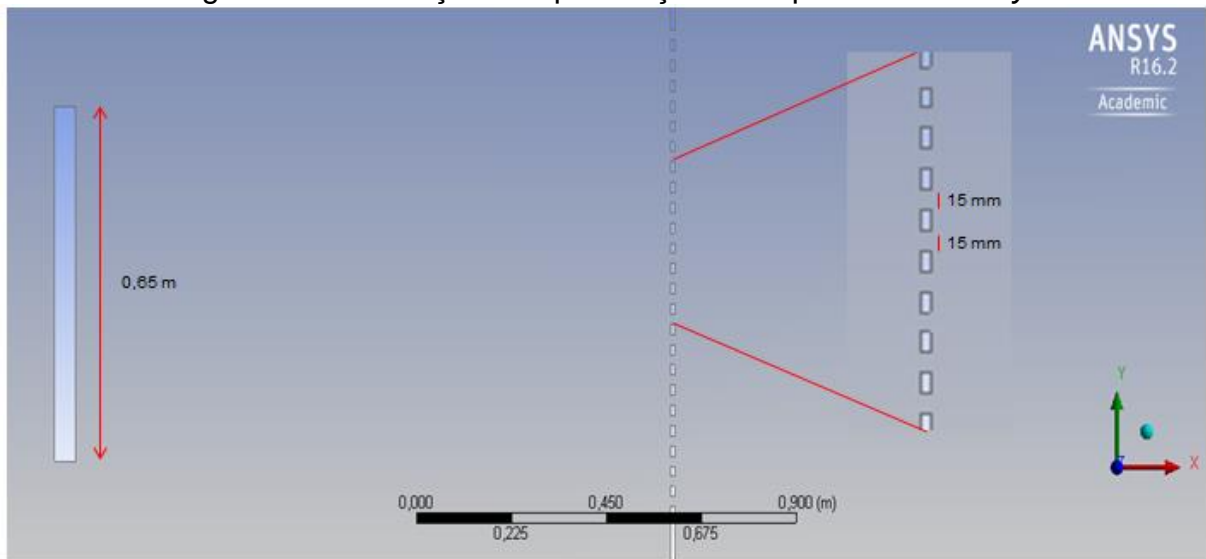


Fonte: Do autor (2016)

A geometria da Figura 27 se trata de uma secção transversal contemplando apenas dois módulos do reator, no qual possui 8m de comprimento (direção x) e 2m de altura (direção y), já a ilustração na Figura 28 refere-se ao reator completo (oito módulos), com comprimento de 25m (direção x) e altura de 2m (direção y). Para ambas as estruturas, a abertura de entrada da fase líquida (*inletliq*) possui diâmetro de 1m e a abertura de entrada da fase gasosa (*inletgas*) possui 0,65m, e estão centralizadas (direção y) em relação à estrutura e separadas por uma distância de 0,7m (direção x).

Os pratos perfurados estão separados entre si por uma distância de 1,25m, para ambos os casos, e possuem perfurações de 15mm em 60% de sua superfície, conforme a Figura 29.

Figura 29 – Ilustração das perfurações nos pratos *sieve tray*.



Fonte: Do autor (2016)

A simplificação da geometria em um modelo bidimensional possibilitou um maior refino de malha, que por sua vez foi capaz de gerar resultados mais confiáveis para a simulação, isto reduziu significativamente o tempo de cálculo. A licença acadêmica do ANSYS possui uma limitação de 500 mil elementos de malha para trabalhos de simulação com fluidos (*Fluent* ou *CFX-Pre*), o que resulta em má qualidade quando aplicado a malhas em geometrias tridimensionais.

3.3 IMPLEMENTAÇÃO DO REATOR NO SOFTWARE ANSYS FLUENT.

Antes de entrar no software de *Set Up* do Fluent é preciso marcar as faces onde serão aplicadas as condições de contorno, como entradas e saídas, que no software *meshing* foram marcadas como *named selection*.

Para as condições gerais de análise selecionou-se um estudo em estado estacionário com *solver* baseado em pressão.

Adicionou-se o efeito gravitacional na direção cartesiana x com o valor de $-9,81 \text{ m/s}^2$, para adicionar o termo fonte de diferença de densidade (Equação 28) na equação da continuidade.

Foi ativado o transporte multifásico utilizando o modelo *Mixture Slip Velocity*, que pode ser aplicado em escoamento multifásico, com campos de velocidade distintos para cada fase, característica de um escoamento em bolhas (*Bubbly flow*). No modelo foi adicionado duas fases, uma gasosa (gás carbônico) e

outra líquida (amônia). O modelo calcula as equações da conservação de continuidade e momento, conforme as Equações 29 e 30 respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m) = 0 \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \vec{v}_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m \vec{v}_m) \\ = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu_m (\nabla \vec{v}_m + \nabla \vec{v}_m^T)] + \rho_m \vec{g} + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \vec{v}_{dr,k} \vec{v}_{dr,k} \right) \end{aligned} \quad (30)$$

Em que ρ_m é a densidade da mistura, \vec{v}_m representa a velocidade da mistura, p é a pressão estática, μ_m é a viscosidade da mistura, $\nabla \vec{v}_m$ e $\nabla \vec{v}_m^T$ representam as velocidades nas interações viscosas e turbulentas, \vec{g} é a gravidade e α_k é a fração volumétrica da fase k.

Para a interação da turbulência viscosa do fluido foi selecionado o modelo $k - \omega$ com as relações adicionais de Shear Stress Transport (SST), que apresenta resultados mais refinados quando zonas de vórtices e pressões adversas estão presentes durante o escoamento.

Como condições de contorno foi selecionado, conforme a Figura 30, em *inletliq* (A) uma condição de entrada com velocidade constante e fração volumétrica de 0,87 para a fase líquida; para *inletgas* (B) foi selecionada condição de entrada com velocidade constante e fração volumétrica de 1 para a fase gasosa. Em *outlet* (C) foi selecionado uma condição de saída baseada em pressão, com pressão constante de 0 Pa e em *refine* (D) foi adicionado uma condição de refino da malha nas paredes dos pratos. O restante das interfaces são automaticamente assumidas como condições de parede sem deslizamento, ou seja, paredes com interação viscosa e sem movimento.

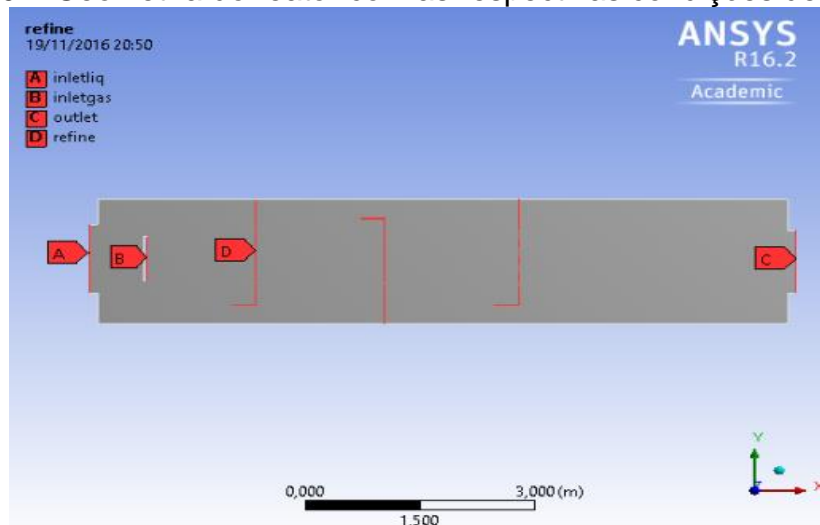
Nos métodos de solução do *solver* utilizaram-se os padrões iniciais mais simples do *Fluent* para a copulação de pressão-velocidade e para as discretizações espaciais das equações de transporte.

Foi adicionado um monitoramento de superfície, registrando a velocidade superficial da fase gasosa, sobre a face do contorno *outlet*, para garantir a constância da variável, que aponta a convergência da simulação.

Para a inicialização da simulação utilizou-se o método de *hybrid initialization*, que resolve equações no domínio Laplaciano para determinar as melhores condições iniciais dos campos de pressão e velocidade. Todas as outras variáveis são determinadas conforme as condições médias dos domínios próximos.

As arestas selecionadas para a adição das condições de contorno estão exemplificadas na Figura 30.

Figura 30 – Geometria do reator com as respectivas condições de contorno.

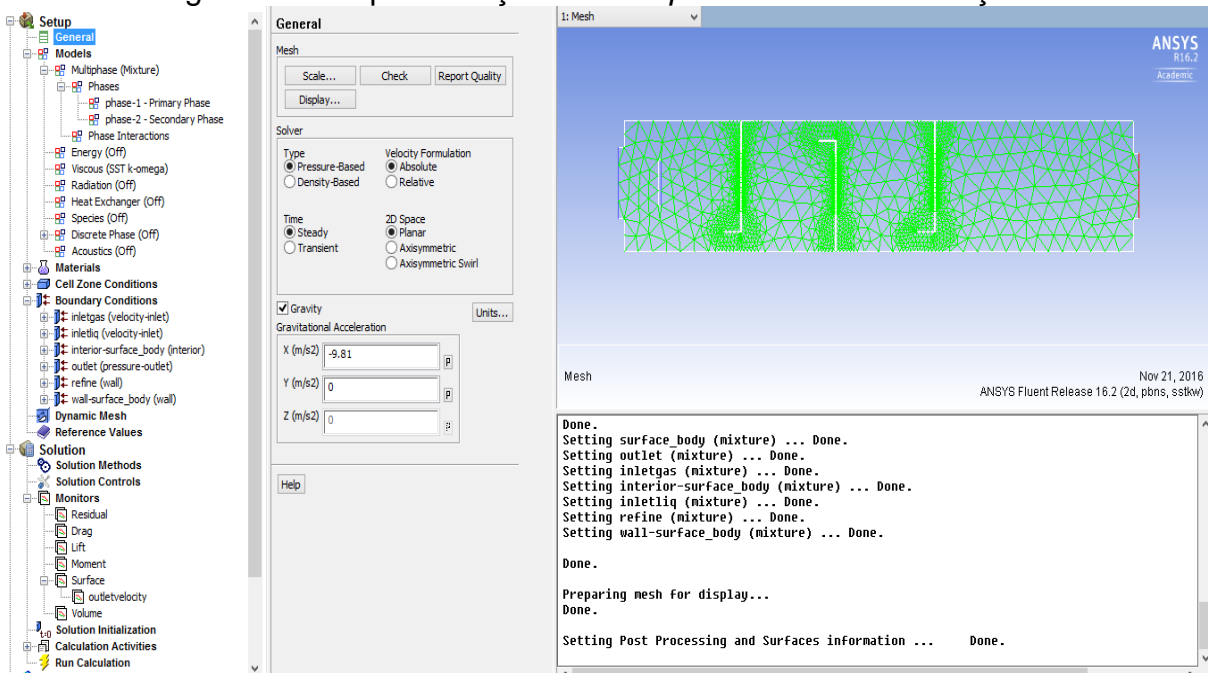


Fonte: Do autor (2016)

As condições de contorno de velocidade utilizadas em *inletliq* e *inletgas* foram variadas conforme as recomendações do autor da patente DSM N.V. (2000). Em *inletgas* podem ser aplicadas velocidades de 2,5 a 5 m/s, tendo como ponto ótimo 3 m/s. No experimento foram avaliadas velocidades abaixo do ponto mínimo e acima do ponto ótimo, já em *inletliq* as velocidades de entrada variam entre 0,05 e 1 m/s, tendo como ponto ótimo 0,2 m/s. Para análises de simulação a velocidade foi variada acima do ponto máximo de operação.

O corpo do *set up* montado neste trabalho pode ser observado conforme a Figura 31.

Figura 31 – Representação do *set up* utilizado nas simulações.

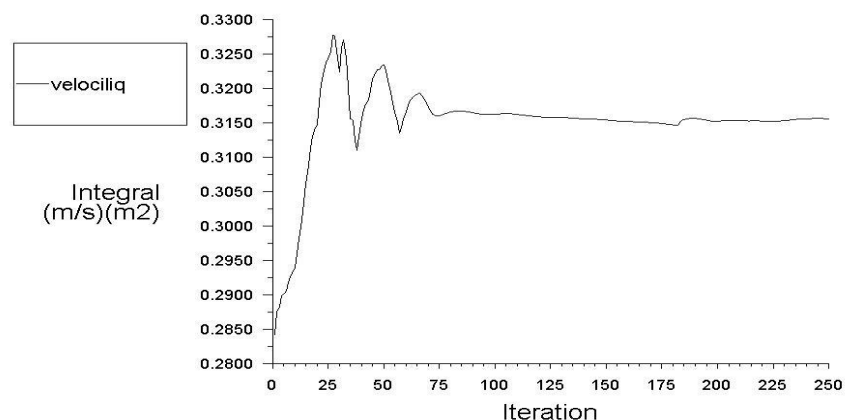


Fonte: Do autor (2016)

3.4 CONDIÇÕES DE CONVERGÊNCIA DAS SIMULAÇÕES.

As condições de convergência da simulação foram atestadas pela constância da leitura de velocidade superficial média na saída do fluido gasoso, conforme a Figura 32. Além do monitoramento, analisou-se a constância do erro residual gerado, representados na Figura 33.

Figura 32 – Gráfico de velocidade de saída do líquido por número de iterações.

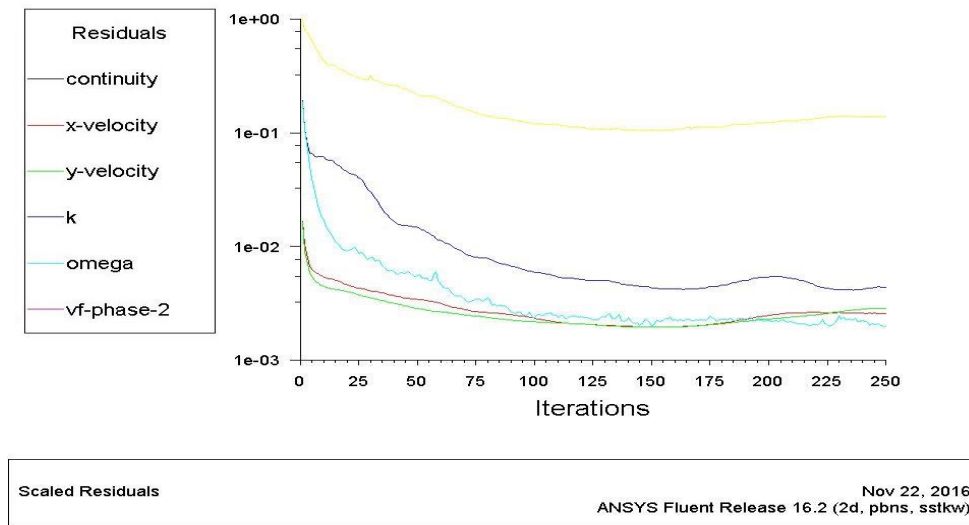


Convergence history of Velocity Magnitude on outlet

Nov 22, 2016
ANSYS Fluent Release 16.2 (2d, pbns, sstk)

Fonte: Do autor (2016)

Figura 33 – Gráfico de erro residual por número de iterações



Fonte: Do autor (2016)

As Figuras 32 e 33 representam a metodologia aplicada a todas as simulações para atestar a convergência dos resultados, através da constância dos valores de velocidade da fase líquida (Figura 32) e dos valores de erros residuais (Figura 33).

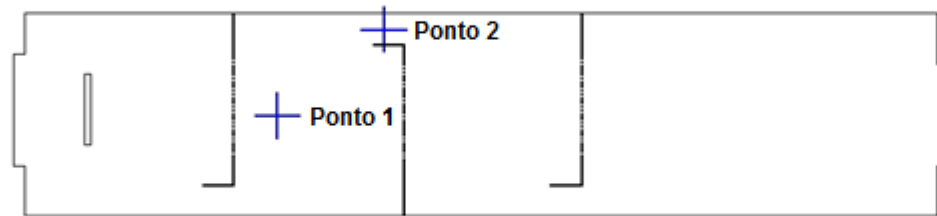
3.5 TESTE DE INDEPENDÊNCIA DA MALHA.

Todas as malhas foram geradas em formato triangular e foi aplicado nas paredes dos pratos perfurados uma condição de refino de malha.

O teste foi realizado para atestar a necessidade de refinamento da malha utilizada na simulação. A análise consiste em variar a malha gerada de tamanhos grosseiros a tamanhos bem refinados e monitorar uma variável em um ponto fixo de cada simulação, quando o ponto apresentar resultados constantes, a malha está possivelmente estável e pode ser representativa.

Foram monitoradas as velocidades superficiais da fase líquida em dois pontos no reator, conforme ilustrado na Figura 34. O primeiro acima do primeiro prato perfurado (Ponto 1) e o segundo no centro da perfuração de escoamento líquido do segundo prato perfurado (Ponto 2).

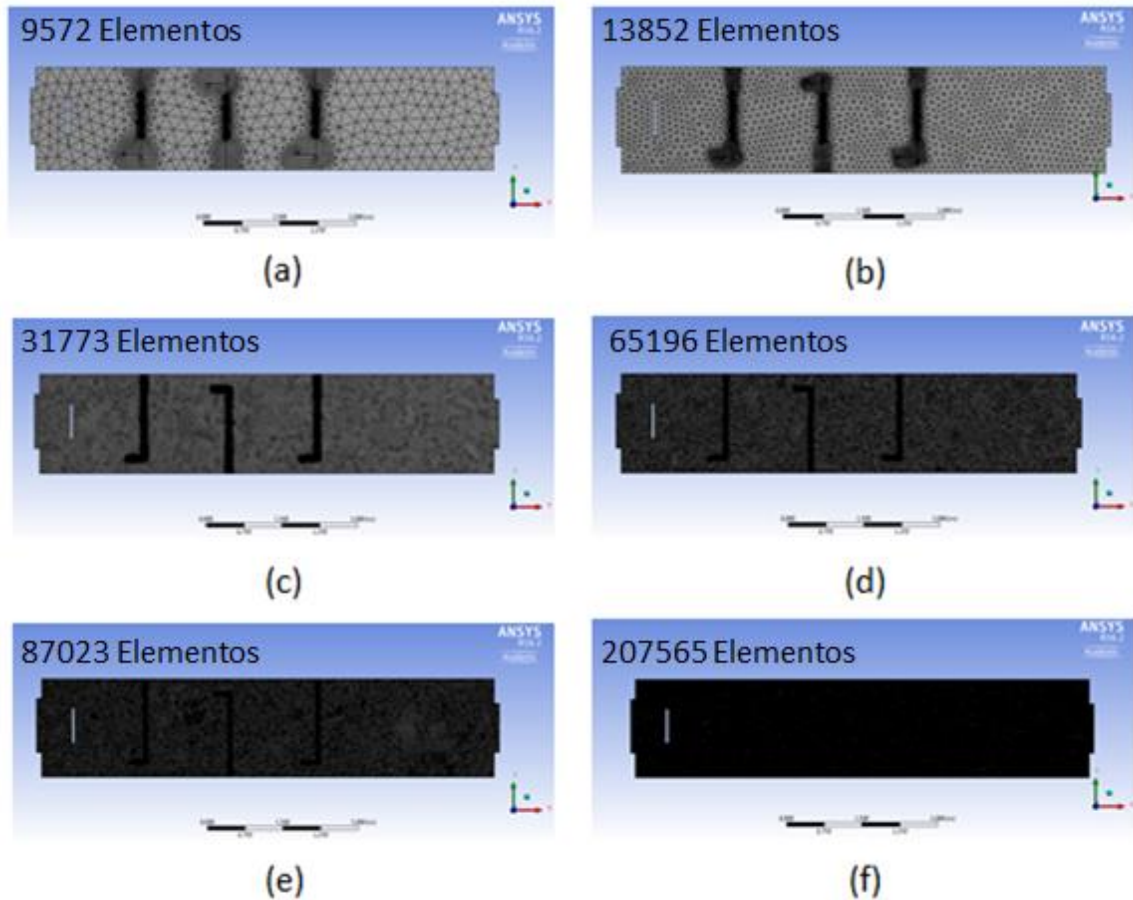
Figura 34 – Representação dos pontos de monitoramento para o teste de malha.

ANSYS
R16.2
Academic

Fonte: Do autor (2016)

O teste de malha foi feito através de seis simulações com condições de contorno idênticas (Simulação 2, conforme a Tabela 3), variando somente o tamanho máximo dos elementos das malhas computacionais. As malhas geradas no teste estão ilustradas na Figura 35 e as respectivas características estão representadas segundo a Tabela 2.

Figura 35 – Ilustração das malhas utilizadas no teste de refinamento.



Fonte: Do autor (2016)

Tabela 2 – Tabela de comparação dos tamanhos de malha.

Mesh	Skewness (med)	Tamanho máximo dos elementos (m)	Elementos	Nós
a	0,43175	0,5	9572	5411
b	0,23596	0,1	13852	7658
c	0,10005	0,06	31773	16889
d	0,069571	0,04	65196	33932
e	0,063061	0,03	87023	45013
f	0,050255	0,02	207565	105948

Fonte: Do autor (2016)

3.6 SIMULAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO

As condições operacionais, em que as velocidades de entrada e a composição da fase líquida, foram alteradas na simulação para atestar as

suposições de comportamento feitas por Isla et al. (1992) e DSM N.V. (2000). As alterações feitas estão representadas nas Tabelas 3, 4 e 5.

Tabela 3 – Tabela representativa das simulações com diferentes composições.

Simulação	Composição (% m/m)				Densidade (kg m ⁻³)	Viscosidade dinâmica (Pa s)	Velocidade de alimentação (m s ⁻¹)	
	NH ₃	H ₂ O	NH ₂ COONH ₄	Ureia			Gás	Líquido
1	50	17	25	8	843,44	0,000226	3,0	0,2
2	65	12	20	3	737,95	0,000187	3,0	0,2
3	75	8	16	1	696,25	0,000138	3,0	0,2
4	100	0	0	0	610,53	0,000106	3,0	0,2

Fonte: Do autor (2016)

Tabela 4 – Tabela representativa das simulações com diferentes velocidades.

Simulação	Composição (% m/m)				Velocidade de alimentação (m s ⁻¹)	
	NH ₃	H ₂ O	NH ₂ COONH ₄	Ureia	Gás	Líquido
5	65	12	20	3	3,0	0,2
6	65	12	20	3	3,0	1,0
7	65	12	20	3	3,0	2,0
8	65	12	20	3	3,0	3,0
9	65	12	20	3	3,0	4,0

Fonte: Do autor (2016)

Tabela 5 – Tabela representativa das simulações com diferentes velocidades.

Simulação	Composição (% m/m)				Velocidade de alimentação (m/s)	
	NH ₃	H ₂ O	NH ₂ COONH ₄	Ureia	Gás	Líquido
10	65	12	20	3	0,5	0,2
11	65	12	20	3	1,5	0,2
12	65	12	20	3	3,0	0,2
13	65	12	20	3	4,0	0,2
14	65	12	20	3	5,0	0,2

Fonte: Do autor (2016)

A Tabela 3 apresenta as simulações realizadas com variação da concentração das espécies no meio líquido, onde a densidade e a viscosidade dinâmica foram calculadas conforme a fração mássica de cada componente, sendo que a simulação 2 está destacada pois representa as condições ótimas de operação segundo DSM N.V. (2000) e concentrações médias das espécies dentro do reator.

A Tabela 4 apresenta as simulações realizadas com variação da velocidade de alimentação da fase líquida e a Tabela 5 apresenta as variações da velocidade de alimentação da fase gasosa.

Todas as simulações descritas acima foram realizadas na geometria de dois módulos do reator. Outra simulação foi realizada na geometria do reator completo, utilizando as mesmas condições de operação da simulação 2, encontrada na Tabela 3.

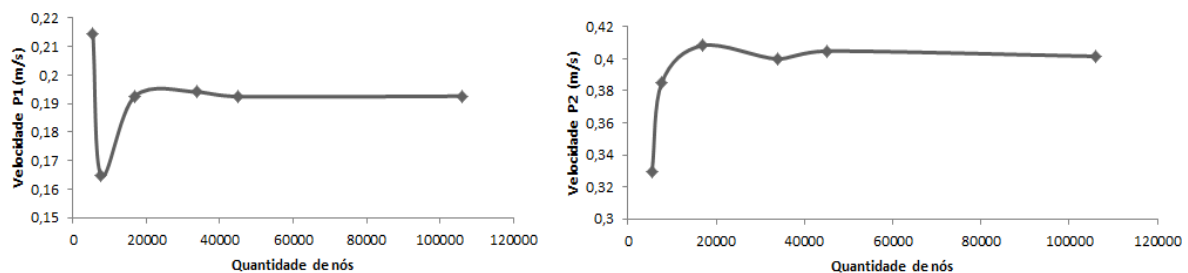
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 TESTE DE MALHA

Os resultados obtidos com a análise em questão estão dispostos na Figura 36.

Figura 36 – Resultados obtidos com a análise de sensibilidade de malha.

ES Mesh	Simulação	Número de nós	Velocidade em Ponto 1 (m/s)	Velocidade em ponto 2 (m/s)
0,5	a	5411	0,2144	0,3292
0,1	b	7658	0,1648	0,3853
0,06	c	16889	0,1927	0,4083
0,04	d	33932	0,1941	0,3999
0,03	e	45013	0,1925	0,4048
0,02	f	105948	0,1926	0,4016



Fonte: Do autor (2016)

Os valores obtidos nos pontos 1 e 2 da simulação a, apresentam grande discrepância se comparados aos resultados das outras simulações. O comportamento se deve à localização de malhas grosseiras em contato com a parede do reator, pois, o primeiro elemento de malha em contato com a parede, dita a espessura da camada viscosa aplicada na simulação. Como a camada está mais grossa nos cantos, o maior fluxo do fluido passará pelo meio dos pratos, assim diminuindo a velocidade no ponto 2 e aumentando-a no ponto 1.

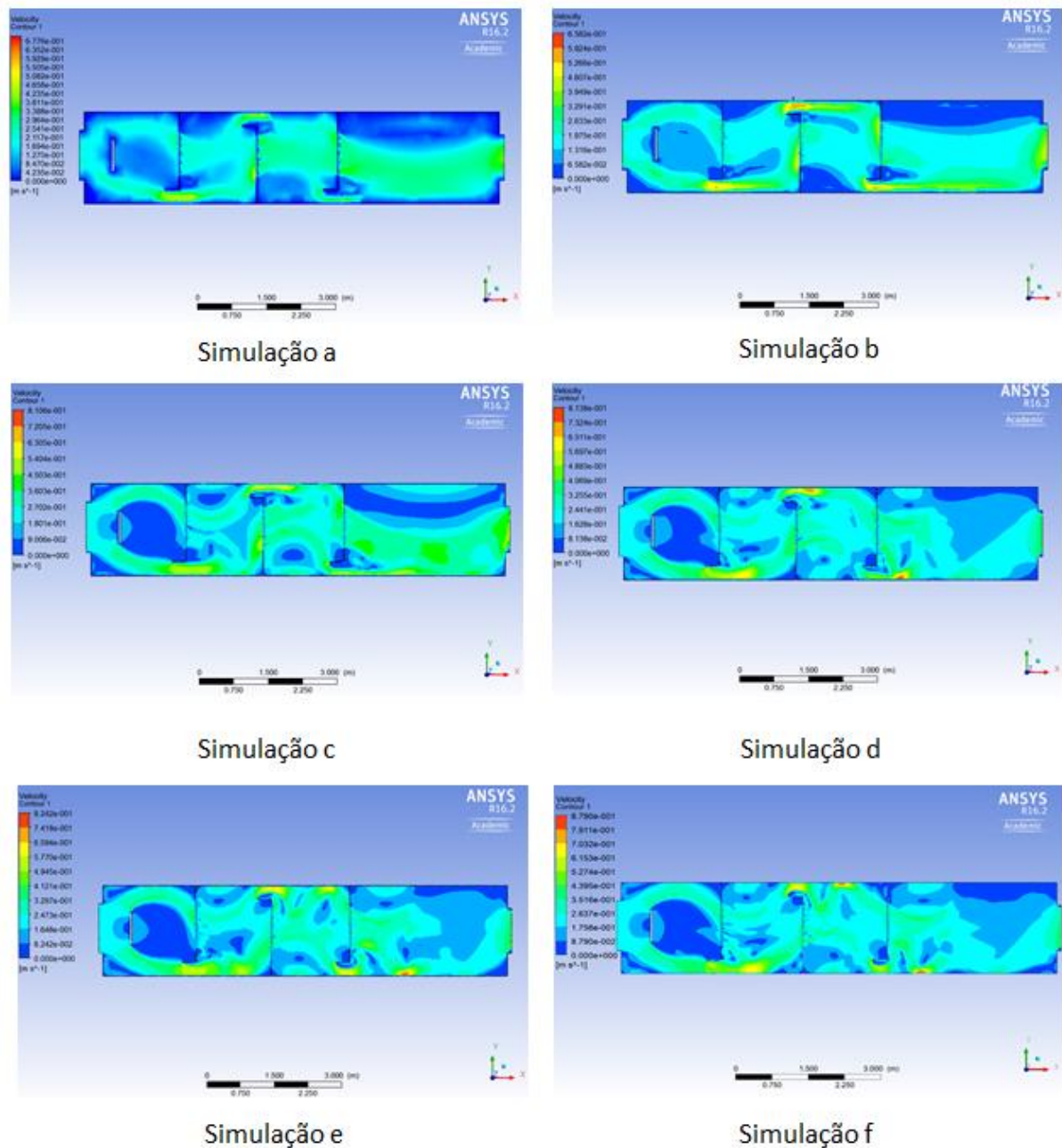
Nos valores obtidos para os pontos 1 e 2 da simulação b, os resultados aparentam ser mais confiáveis, com escoamento do fluido em todas as regiões, porém, se comparado com os demais valores não apresenta constância.

A partir da simulação c, é possível observar certa constância nos valores de velocidade para os pontos 1 e 2, atestando assim que a condição de refinamento mínima de malha já é atendida a partir das condições impostas na simulação c.

A partir dos resultados da análise de sensibilidade foi determinada para a realização das próximas simulações a escolha da malha imposta na simulação d, com um *element size* (Tamanho dos elementos) máximo de 0,04 m e *skewness* de aproximadamente 0,07.

Os perfis de velocidade da fase líquida das simulações envolvidas na análise de malha estão dispostos na Figura 37.

Figura 37 – Perfis de velocidade superficial da fase líquida das simulações a, b, c, d, e e f.



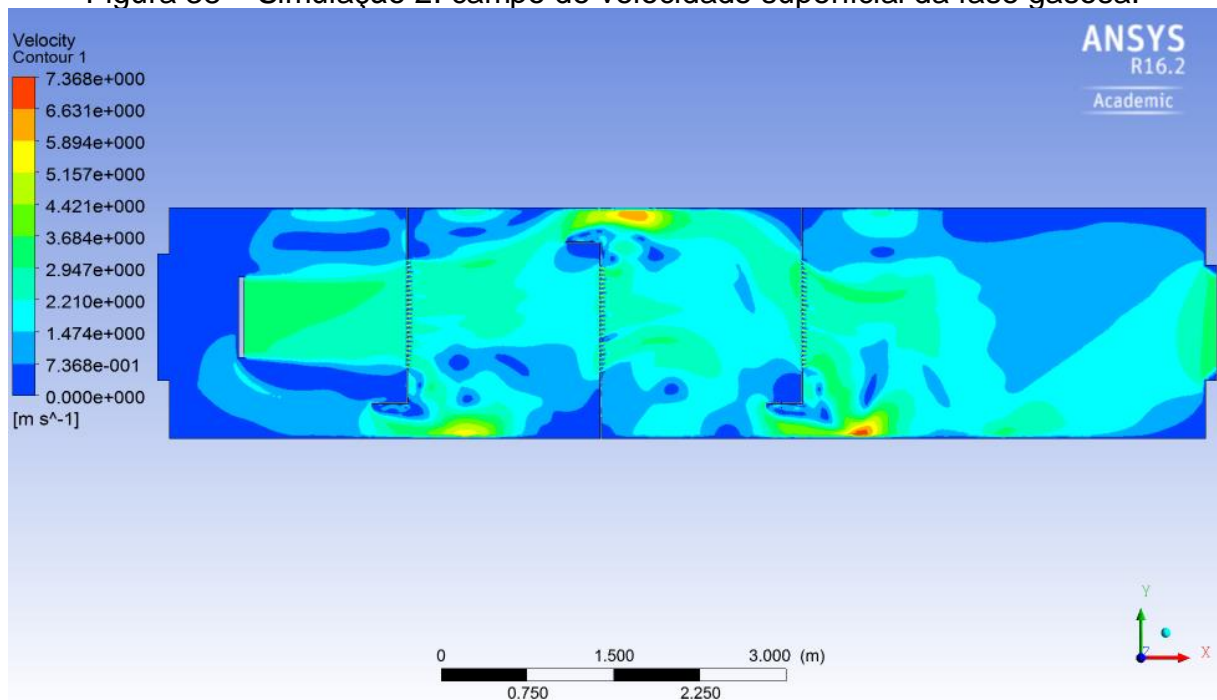
Um ponto importante a ser levantado sobre o teste de malha realizado é de que, a criação do ponto de controle no *CFD-Post*, em um local estabelecido por coordenadas cartesianas contabilizará o valor do elemento de malha que estiver mais próximo do ponto, para malhas mais refinadas, pode não haver problema, pois, a diferença da variável de um elemento a outro é pequena, uma vez que o espaço entre elas é mínimo. Já para malhas grosseiras, onde há diferença de velocidade significativa entre os elementos, os pontos monitorados podem não representar realmente o lugar onde é apontado e sim uma localização próxima, assim quanto maior o tamanho de malha utilizado maiores os erros impostos no método.

4.2 SIMULAÇÕES DAS CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO

4.2.1 Variação de concentração no reator

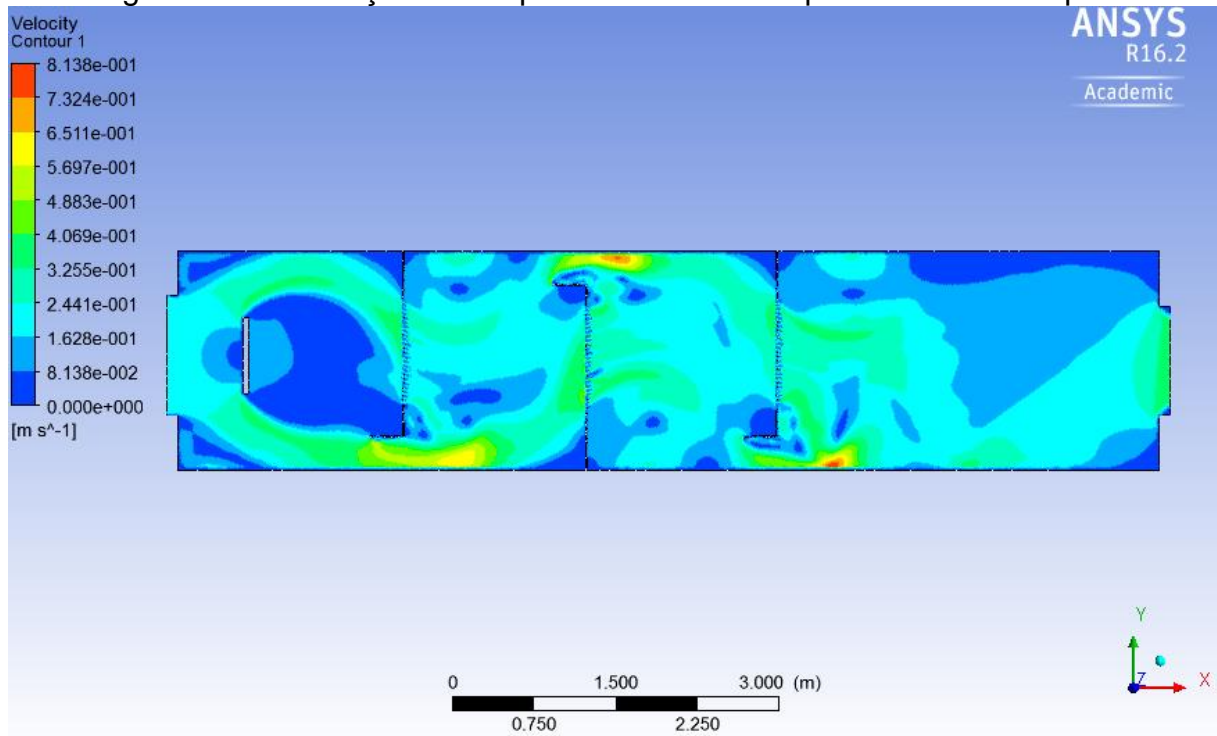
A variação de concentração das espécies no reator ocorreu através da modificação dos parâmetros de transporte da fase líquida, conforme exemplificado na Tabela 2 (Seção 3.7). Os resultados obtidos estão listados a seguir.

Figura 38 – Simulação 2: campo de velocidade superficial da fase gasosa.



Fonte: Do autor (2016)

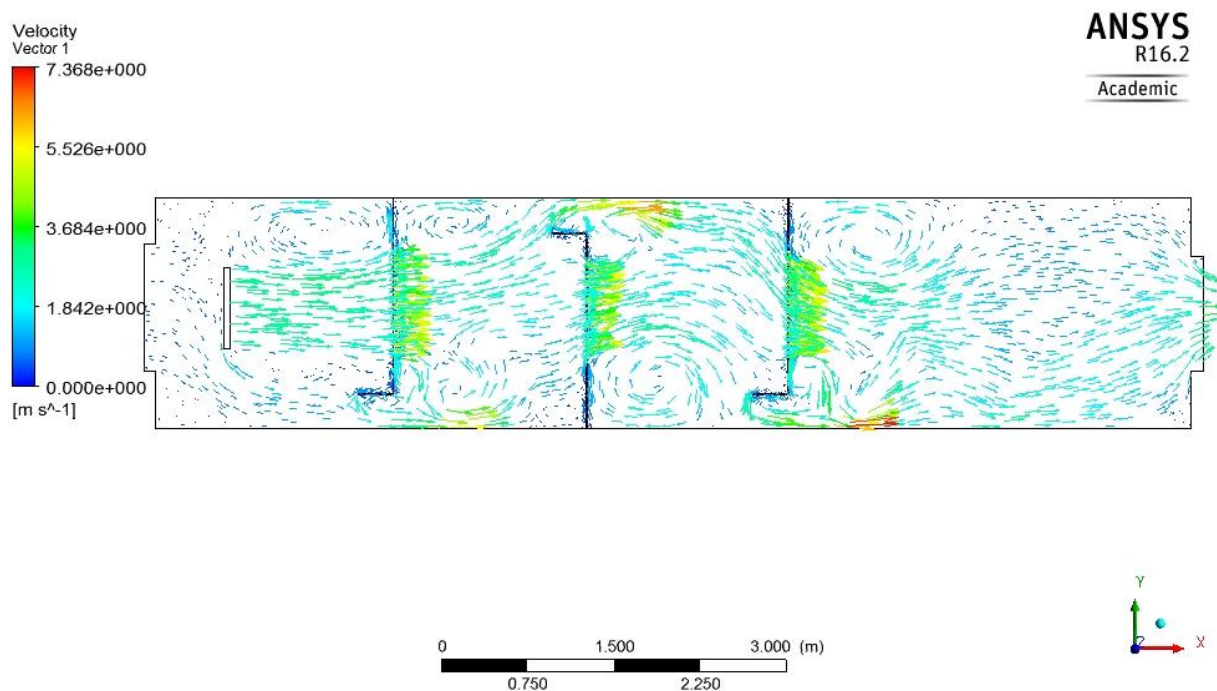
Figura 39 – Simulação 2: campo de velocidade superficial da fase líquida



Fonte: Do autor (2016)

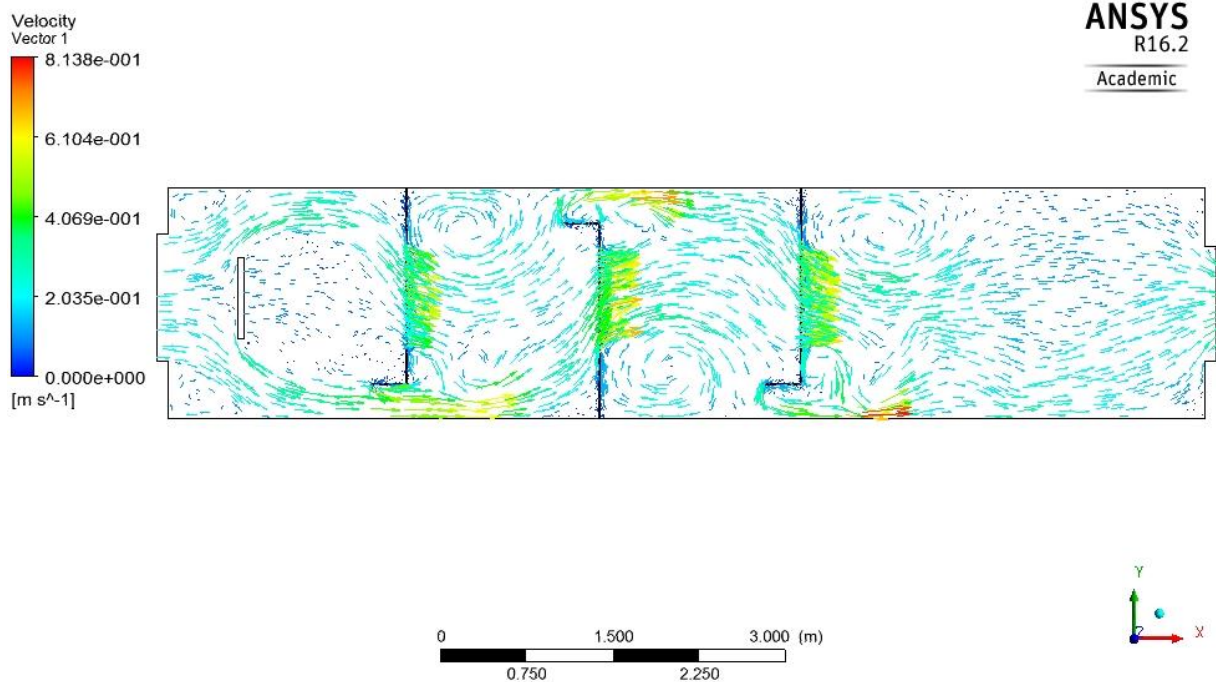
Os campos de vórtices e o perfil de velocidade são melhores observados nas Figuras 40 e 41.

Figura 40 – Simulação 2: campo de velocidade superficial vetorial da fase gasosa.



Fonte: Do autor (2016)

Figura 41 – Simulação 2: campo de velocidade superficial vetorial da fase líquida.



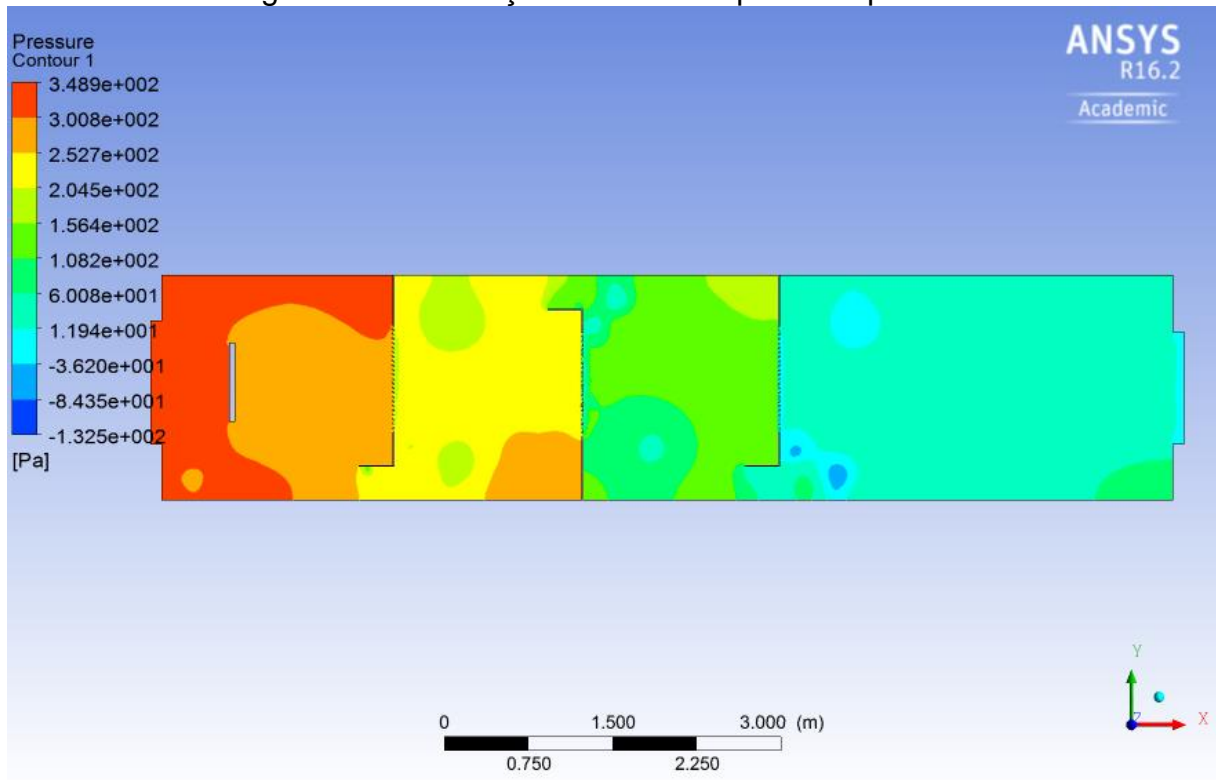
Fonte: Do autor (2016)

O comportamento fluidodinâmico para as simulações 1, 2, 3 e 4 foi semelhante para todas as condições impostas, como exemplificado nas Figuras 40 e 41, com a geração de vórtices em pontos específicos do reator, como nos dois lados opostos após a passagem dos fluidos pelos pratos perfurados, condição prevista pelo autor da patente DSM N.V. (2000).

Os campos de velocidade das simulações 1, 3 e 4, por apresentarem valores semelhantes, não foram mostrados nos resultados, porém podem ser observados no Anexo A.

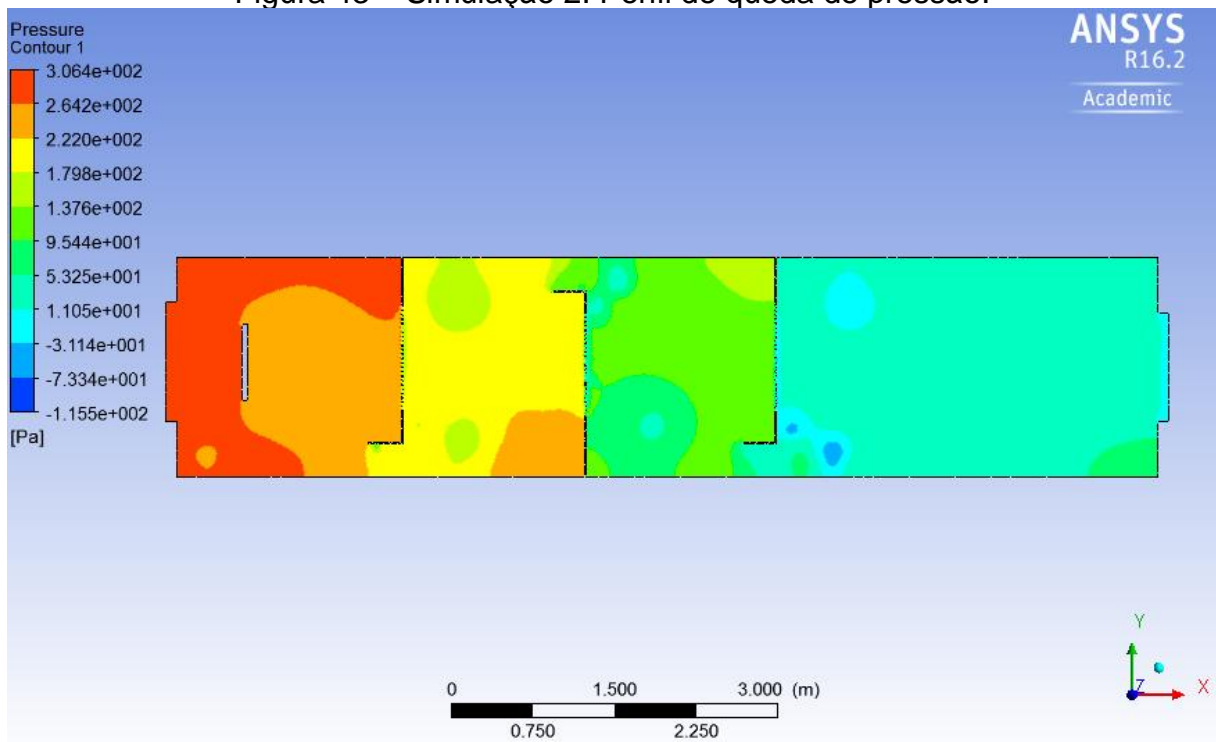
As Figuras 42, 43, 44, 45 representam a queda de pressão imposta no reator nas simulações 1, 2, 3, 4, 5 respectivamente.

Figura 42 – Simulação 1: Perfil de queda de pressão.



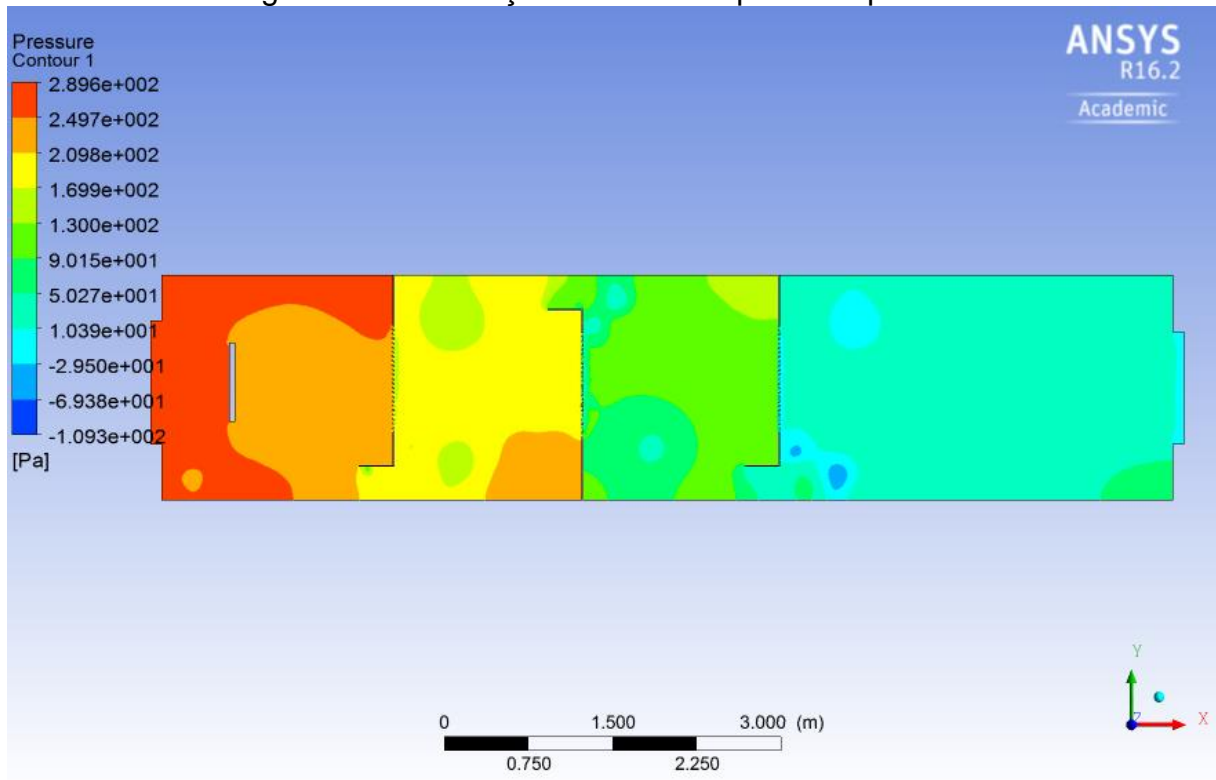
Fonte: Do autor (2016)

Figura 43 – Simulação 2: Perfil de queda de pressão.



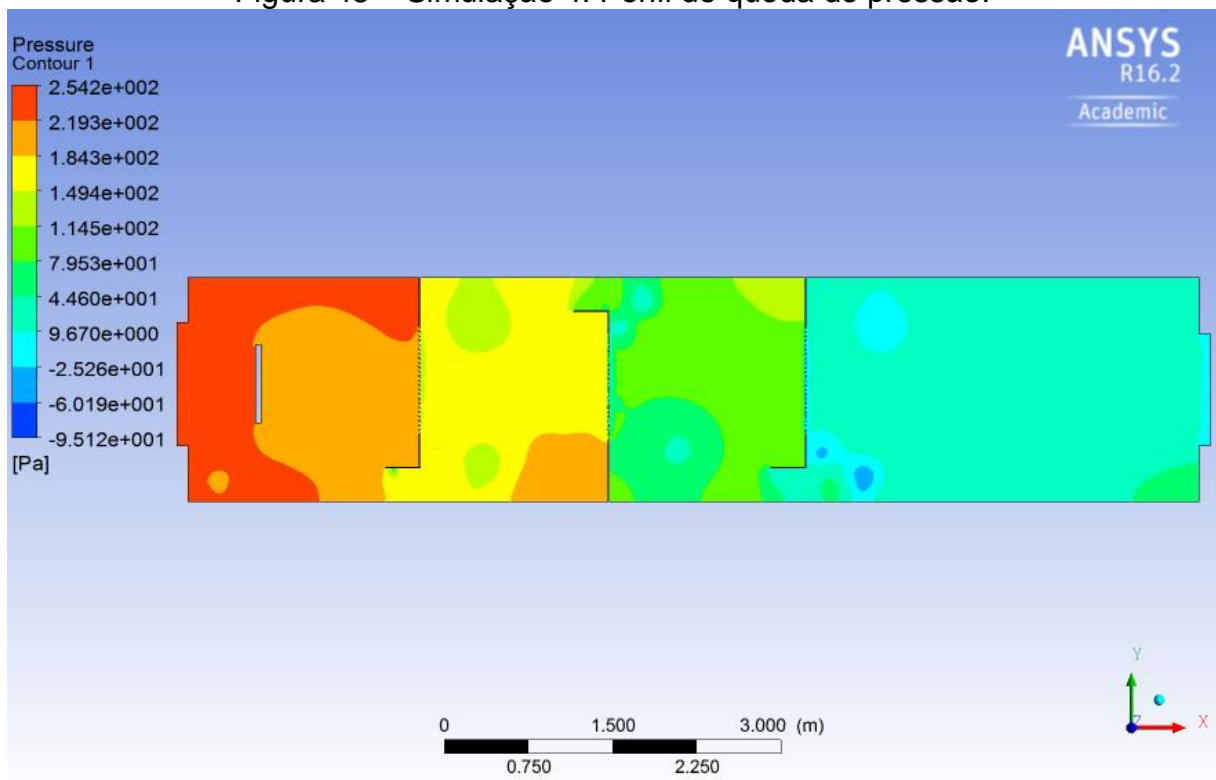
Fonte: Do autor (2016)

Figura 44 – Simulação 3: Perfil de queda de pressão.



Fonte: Do autor (2016)

Figura 45 – Simulação 4: Perfil de queda de pressão.

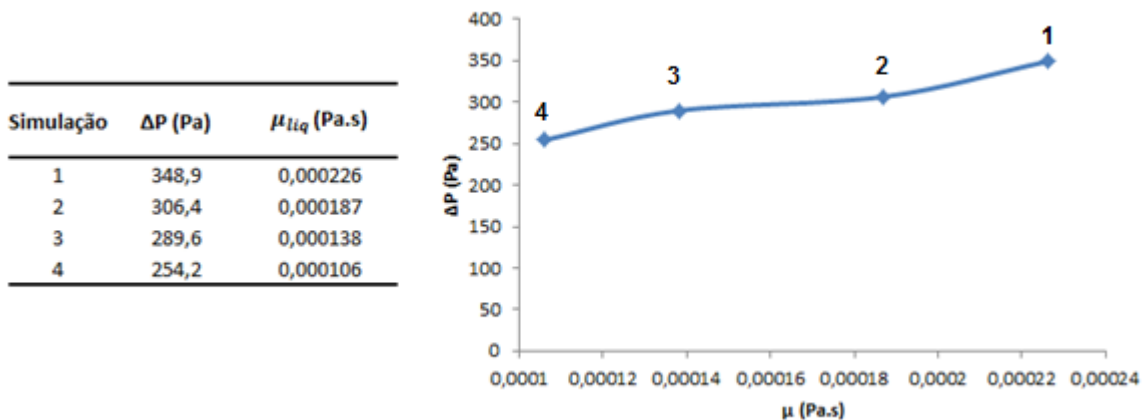


Fonte: Do autor (2016)

A principal diferença notada, ao mudar a composição da fase líquida no reator, foi a queda de pressão causada pela interação viscosa com as paredes, conforme ilustrado nas Figuras 42, 43, 44 e 45.

Os valores de queda de pressão extraídos das simulações 1, 2, 3 e 4 são observados na Figura 46.

Figura 46 – Resultados de queda de pressão para as simulações 1, 2, 3 e 4 em função da viscosidade da solução líquida.



Fonte: Do autor (2016)

A queda de pressão mais acentuada nas simulações de fluidos com maior viscosidade dinâmica e massa específica, comprova que as forças de interação na camada viscosa e a necessidade de maior tensão para movimentar um fluido de maior densidade influenciam no perfil de pressão do escoamento fluidodinâmico.

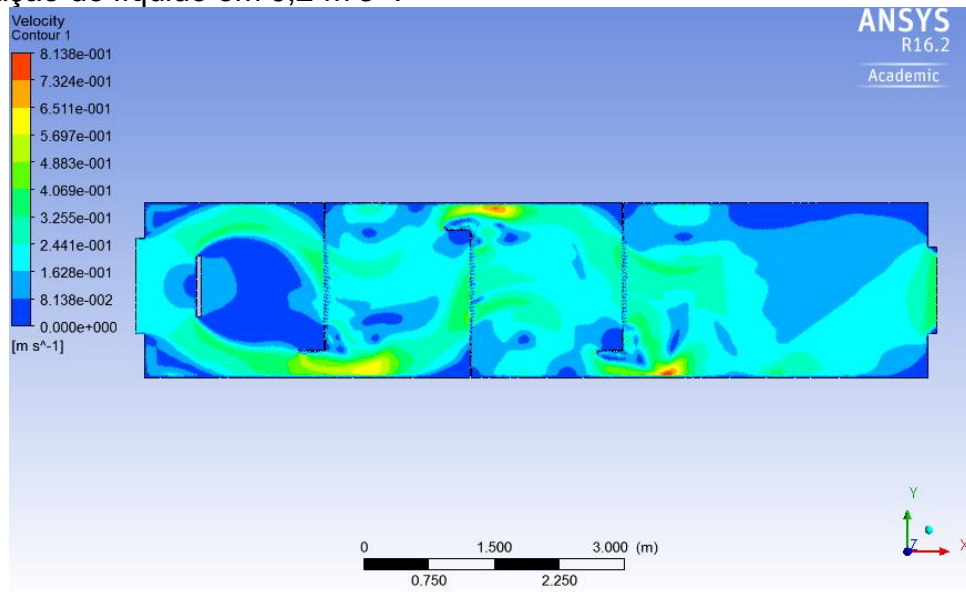
O perfil de variação da queda de pressão em função da viscosidade do líquido, conforme representado na Figura 39, cresce de forma linear para o intervalo estudado, porém, como poucos pontos estão dispostos para a análise é difícil distinguir se o comportamento seria realmente de forma linear ou exponencial.

4.2.2 Variação de velocidade da fase líquida

A variação de velocidade da fase líquida no reator ocorreu através da modificação das condições de contorno, conforme exemplificado na Tabela 4 (Seção 3.6). Os resultados obtidos estão listados abaixo.

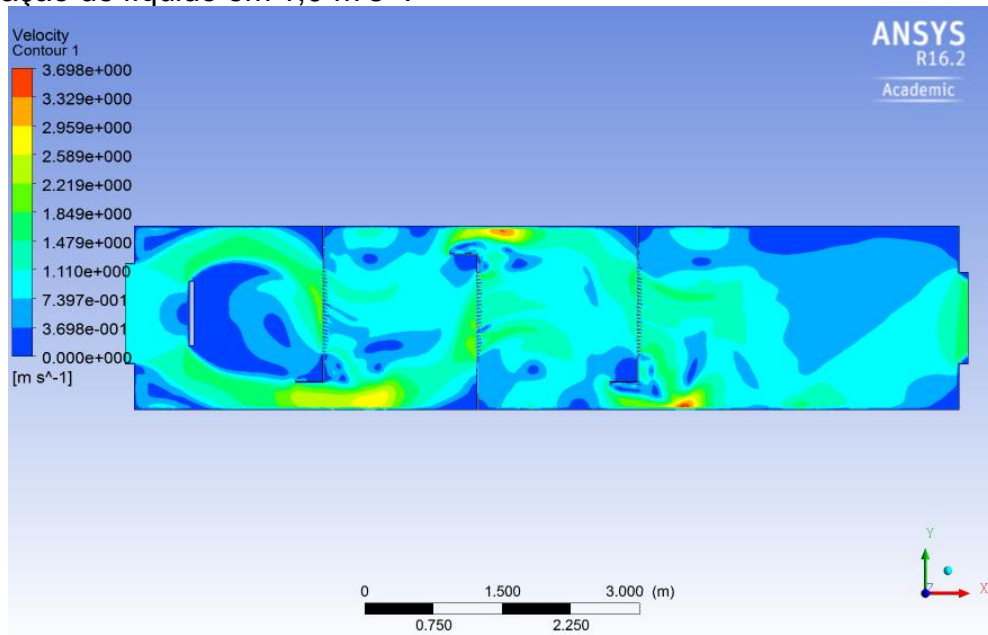
Conforme a velocidade de alimentação é aumentada nas simulações 5, 6, 7, 8 e 9, algumas peculiaridades são notadas no perfil de velocidade superficial da fase líquida, exemplificadas nas Figuras 47, 48, 49, 50 e 51.

Figura 47 – Simulação 5: campo de velocidade superficial da fase líquida com alimentação de líquido em $0,2 \text{ m s}^{-1}$.



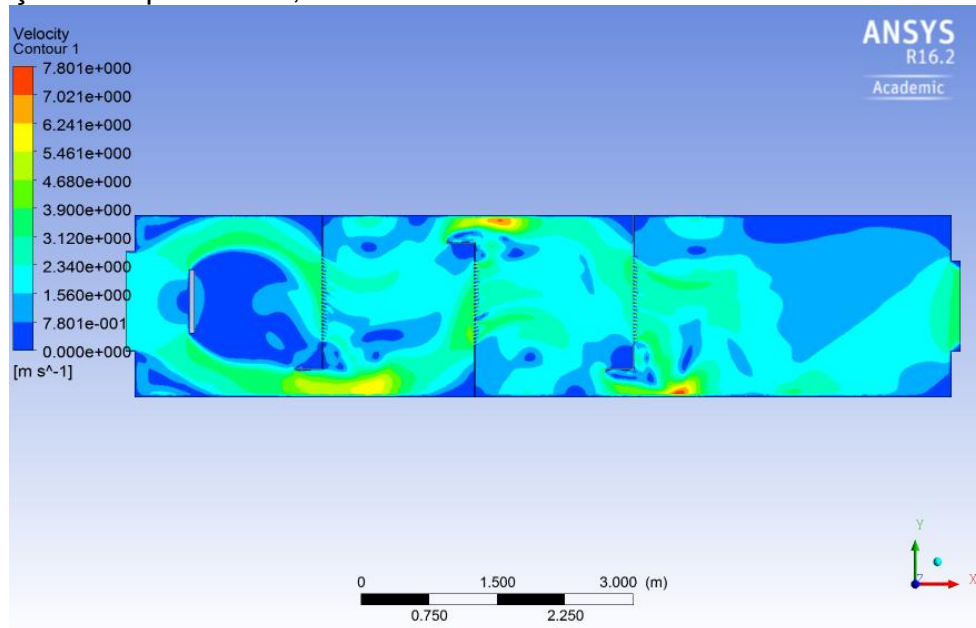
Fonte: Do autor (2016)

Figura 48 – Simulação 6: campo de velocidade superficial da fase líquida com alimentação de líquido em $1,0 \text{ m s}^{-1}$.



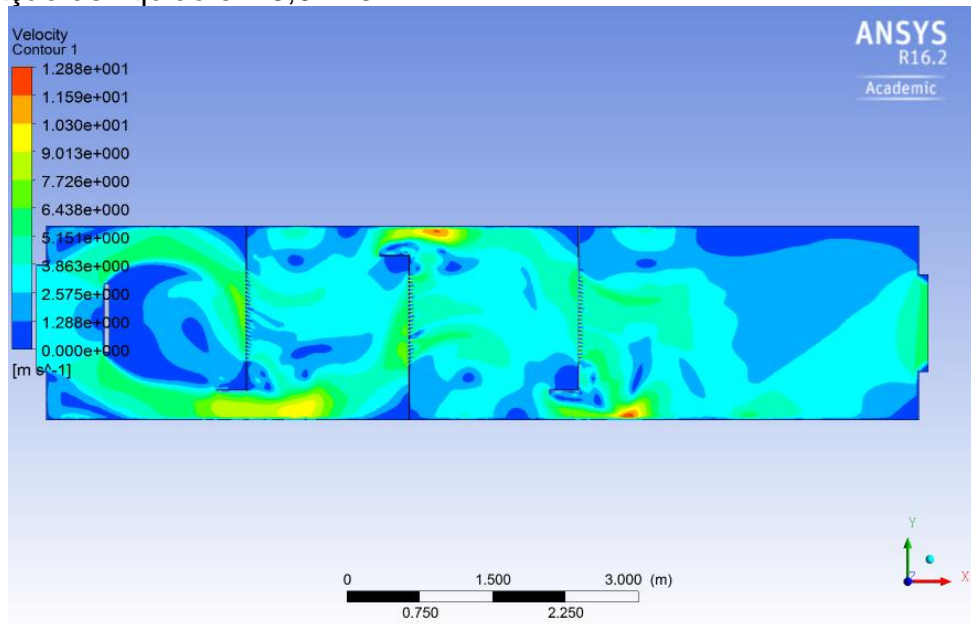
Fonte: Do autor (2016)

Figura 49 – Simulação 7: campo de velocidade superficial da fase líquida com alimentação de líquido em $2,0 \text{ m s}^{-1}$.



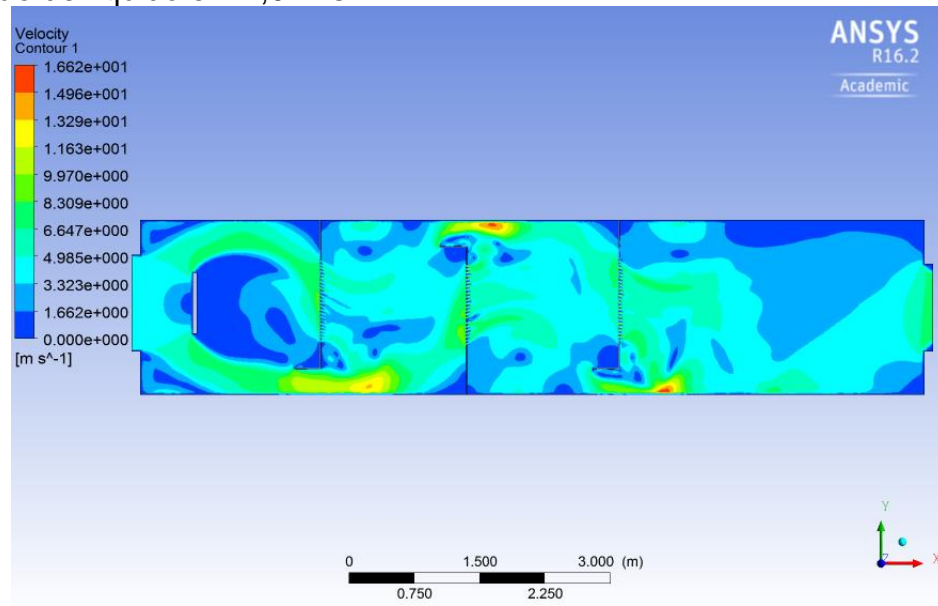
Fonte: Do autor (2016)

Figura 50 – Simulação 8: campo de velocidade superficial da fase líquida com alimentação de líquido em $3,0 \text{ m s}^{-1}$.



Fonte: Do autor (2016)

Figura 51 – Simulação 8: campo de velocidade superficial da fase líquida com alimentação de líquido em $4,0 \text{ m s}^{-1}$.



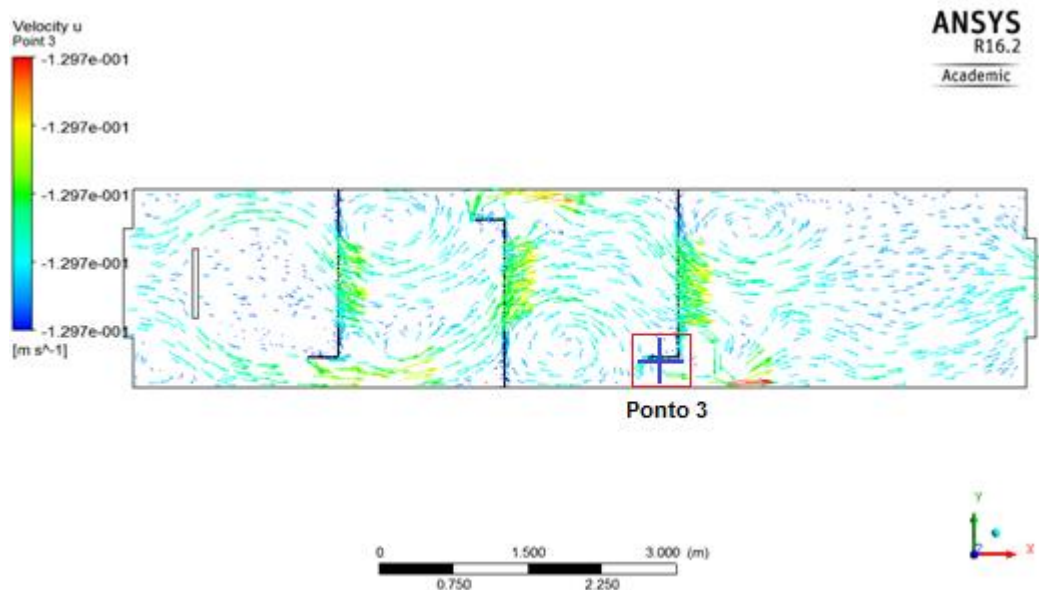
Fonte: Do autor (2016)

Nota-se que ao aumentar a velocidade de entrada da fase líquida, a turbulência na primeira placa perfurada se intensifica, gerando um vórtice logo acima do ponto de alimentação da fase gasosa.

Outro comportamento previsto, que não está bem evidenciado nas figuras é a camada limite de escoamento nas bordas da abertura lateral do prato perfurado, que por sua vez gera pontos de queda de pressão, onde pode ser ocasionado o problema de *backmixing*, conforme citado por DSM N.V. (2000), ou seja, a pressão baixa no vórtice faz com que o fluido em estado líquido se desloque no sentido oposto ao da corrente de alimentação, assim descendo para o módulo anterior. As condições de *backmixing* na produção de ureia podem afetar a pureza e a conversão dos reagentes, uma vez que a fase líquida, com concentração maior de ureia em sua composição, é recirculada para um módulo inferior onde a concentração do produto é relativamente baixa. Como exemplificado na seção 2.2.1.2 (p.16), o valor da constante de equilíbrio está diretamente relacionado às concentrações no equilíbrio e aos coeficientes de atividade dos compostos, que por sua vez são funções de concentração e temperatura da mistura. Portanto, o *backmixing* pode ocasionar o desvio da velocidade de reação para a esquerda, favorecendo a produção de reagentes em certos pontos do reator, devido à presença de um *backmixing* considerável nas placas perfuradas.

Para melhor observar o fator de *backmixing*, foi marcado um ponto de monitoramento (Ponto 3) na região da abertura principal da terceira placa perfurada, onde foi obtida a velocidade superficial do líquido na direção x, em coordenadas cartesianas, conforme a Figura 52.

Figura 52 – Simulação 5: Ponto de monitoramento de *backmixing*.



Fonte: Do autor (2016)

Os resultados da análise de *backmixing* estão representados na Tabela 6.

Tabela 6 – Resultados da análise de *backmixing* no Ponto 3

Simulação	Composição (% m/m)				Velocidade de alimentação (m s ⁻¹)		Velocidade na direção x do Ponto 3 (m s ⁻¹)
	NH ₃	H ₂ O	NH ₂ COONH ₄	Ureia	Gás	Líquido	
5	65	12	20	3	3	0,2	-0,13
6	65	12	20	3	3	1	-0,31
7	65	12	20	3	3	2	-1,60
8	65	12	20	3	3	3	-3,00
9	65	12	20	3	3	4	-3,80

Fonte: Do autor (2016)

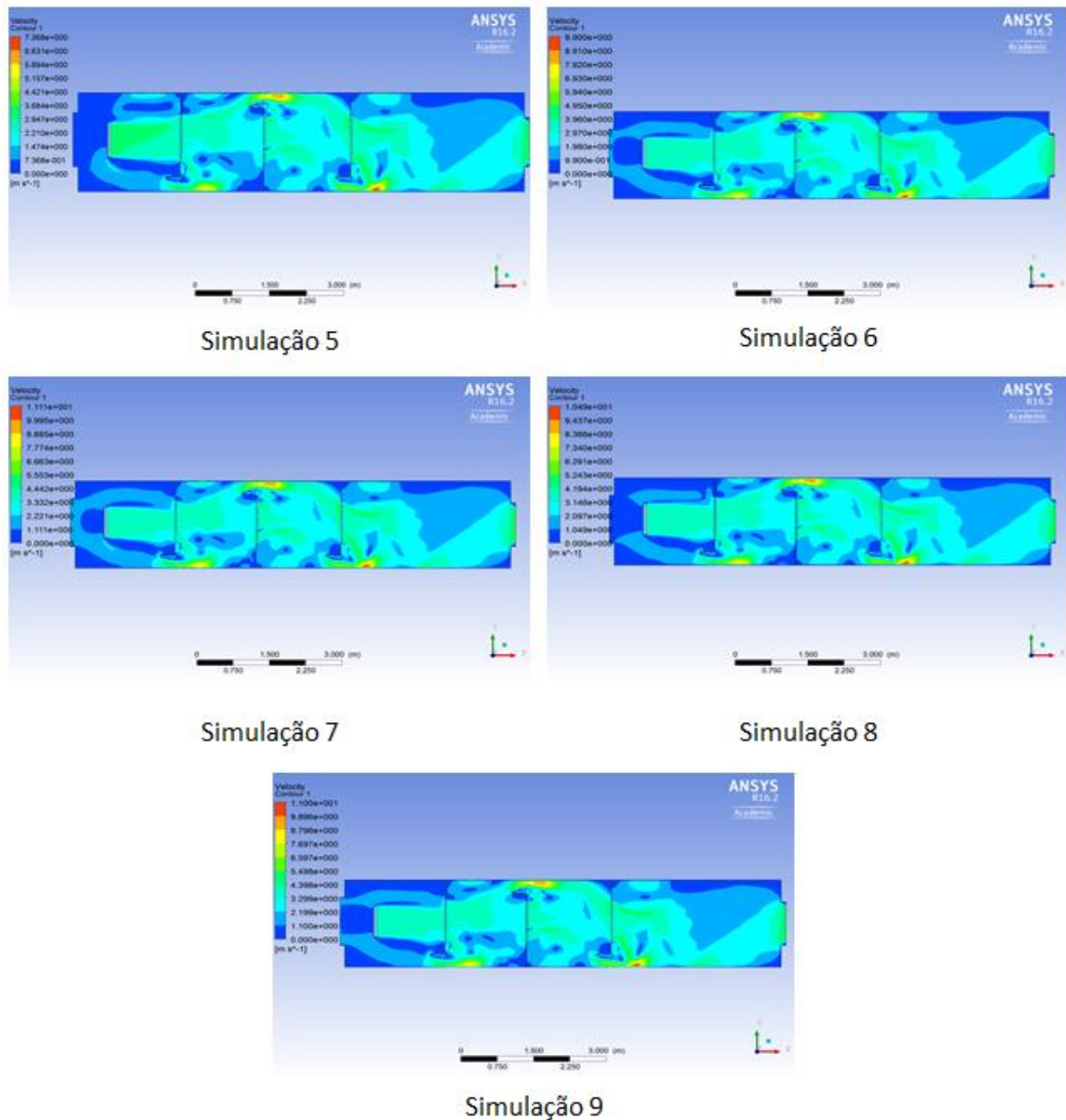
As simulações 5 e 6 apresentaram valores brandos de velocidade inversa ao sentido principal do escoamento, levando a um *backmixing* negligenciável.

As simulações 7, 8 e 9 apresentaram valores significativos de -1,6m/s, -3,0m/s e -3,8 m/s respectivamente, que segundo DSM N.V. (2000), as condições já

se tornam críticas e problemas de baixa conversão total dos reagentes em ureia são evidenciados.

A fase gasosa tende a ser carregada pelo líquido, conforme a velocidade de alimentação aumenta, tornando um perfil de escoamento parecido com o perfil do líquido, conforme a Figura 53.

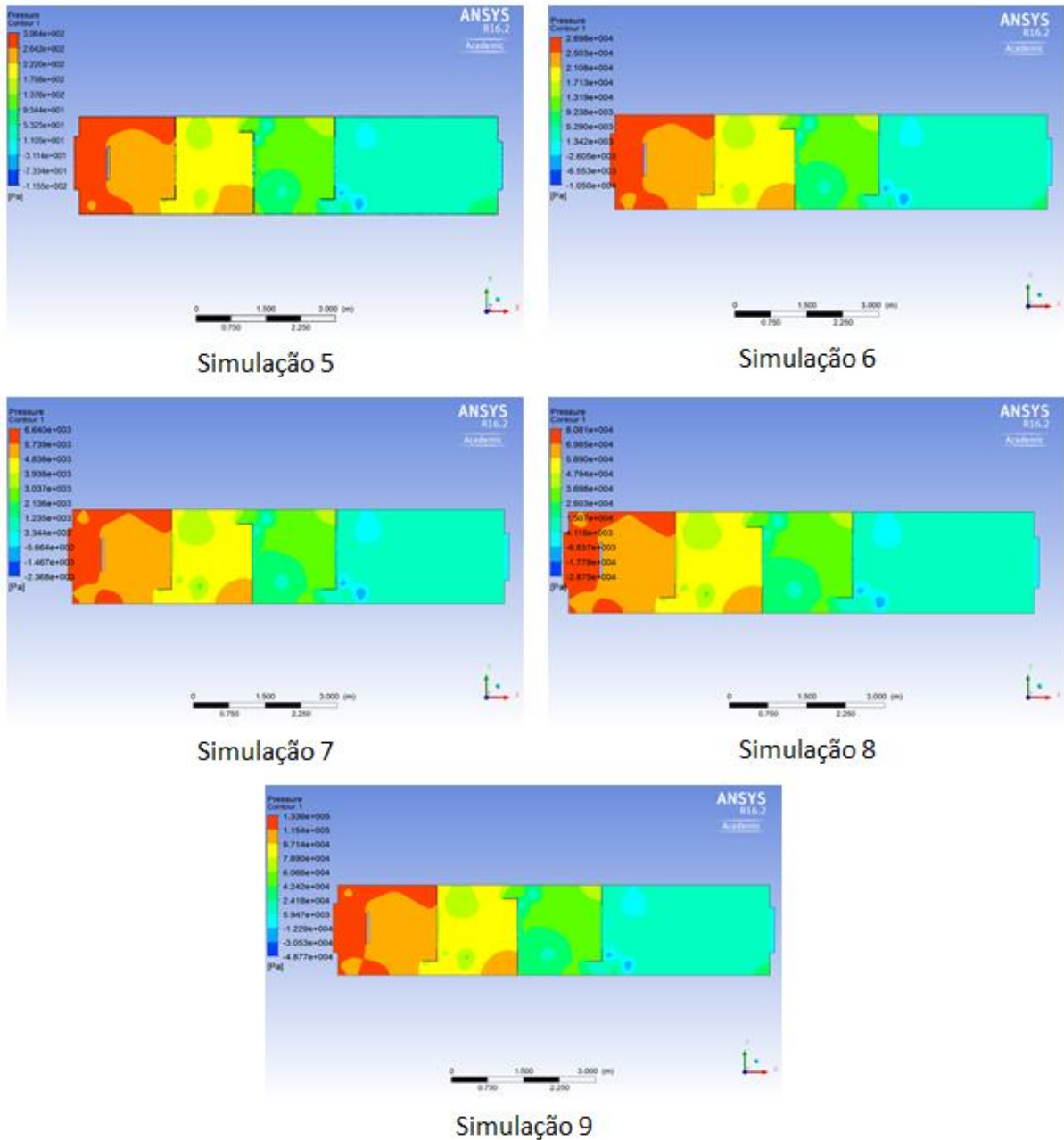
Figura 53 – Perfis de velocidade superficial do gás para as simulações 5, 6, 7, 8 e 9.



Fonte: Do autor (2016)

Os resultados de queda de pressão para as simulações 5, 6, 7, 8 e 9, são apresentados na Figura 54.

Figura 54 – Perfis de queda de pressão para as simulações 5, 6, 7, 8 e 9.

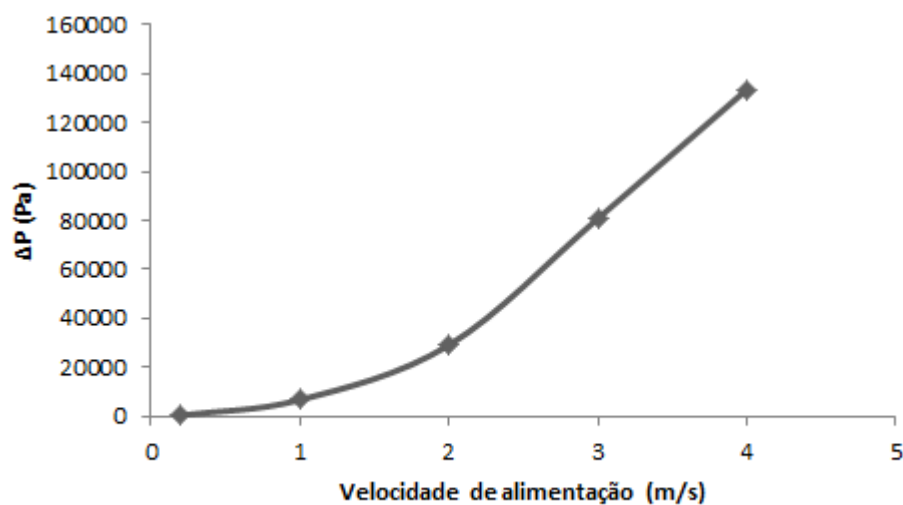


Fonte: Do autor (2016)

Nota-se que os resultados apresentam uma grande dependência do campo de pressão em relação à velocidade de alimentação do líquido, essa dependência pode ser observada na representação da Figura 55.

Figura 55 – Perfil de queda de pressão para as simulações 5, 6, 7, 8 e 9 ao variar a velocidade do fluido líquido em 0,2; 1,0; 2,0; 3,0 e 4,0 m s⁻¹.

Simulação	Velocidade de alimentação (m/s)	ΔP (Pa)
5	0,2	306,4
6	1	6640,3
7	2	28980,5
8	3	80812,7
9	4	133600,1



Fonte: Do autor (2016)

O comportamento do gráfico representado na Figura 55 evidencia uma função de potência para a relação entre a queda de pressão e a velocidade, seguindo assim o princípio de Bernoulli durante o escoamento.

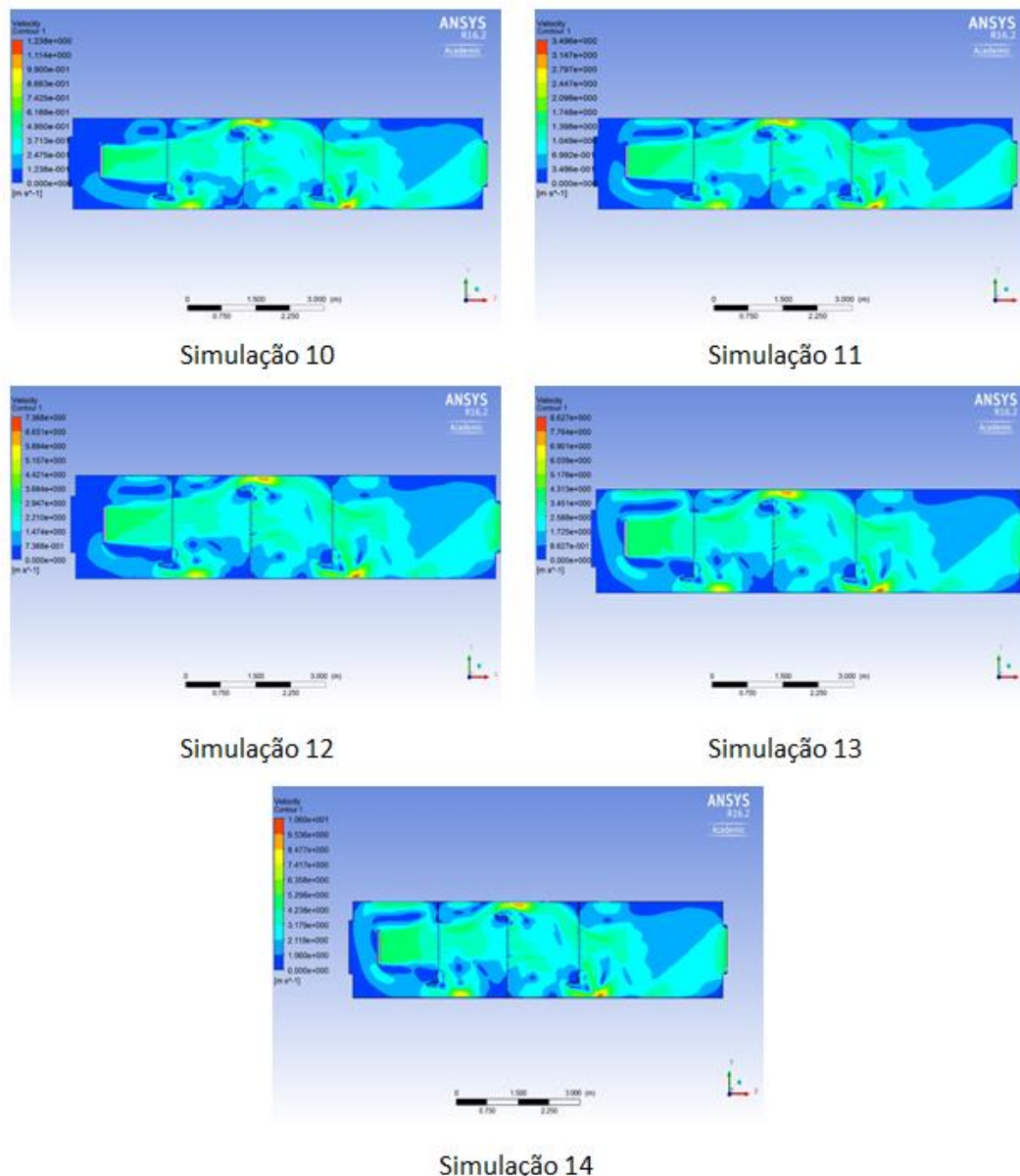
A maior queda de pressão no reator é evidenciada nas paredes das placas perfuradas, sendo que a pressão diminui drasticamente quando o fluxo líquido passa pela abertura lateral da placa, o que evidencia pontos de baixa pressão e aumentam a formação do *backmixing*, que conforme explicado anteriormente pode afetar drasticamente o perfil de conversão do reator.

4.2.3 Variação de velocidade da fase gasosa

A variação de velocidade da fase gasosa no reator ocorreu através da modificação das condições de contorno, conforme exemplificado na Tabela 5 (Seção 3.6 p. 59). Os resultados obtidos estão listados abaixo.

Os resultados obtidos com o experimento apontaram perfis de escoamento diferentes para a fase gasosa em cada alteração da velocidade de escoamento, conforme a Figura 56.

Figura 56 – Perfis de velocidade da fase gasosa para as simulações 10, 11, 12, 13 e 14.

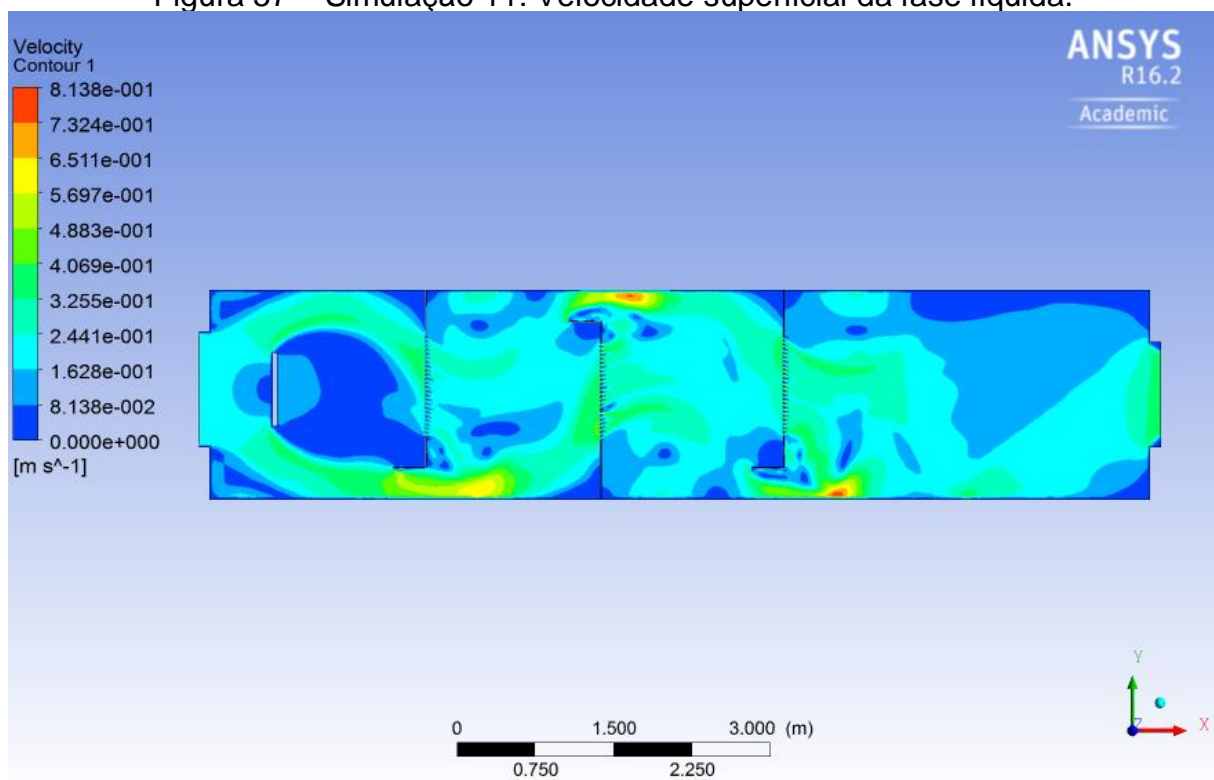


Analisando os perfis de velocidade do gás na Figura 56, nota-se que ao aumentar a velocidade de entrada do fluido gasoso, as propriedades de fluxo pistonado são perdidas, uma vez que a fase gasosa tende a gerar campos adversos de velocidade, seguindo todas as direções da geometria do reator, característica de um fluxo altamente turbulento.

Os valores de velocidade média superficial do gás, retirados de pontos localizados na abertura principal dos pratos e nas perfurações centrais, para as simulações 10, 11, 12, 13 e 14 foram de 0,86m/s, 2,71 m/s, 4,56 m/s, 6,72 m/s e 8,20 m/s respectivamente. Segundo DSM N.V. (2000) as velocidades máximas nos pontos de abertura e nas perfurações centrais das placas, para o fluxo gasoso, deve estar entre 2,5 e 10 m/s, com o intuito de manter o escoamento pistonado. Tais condições foram atingidas para as velocidades de entrada de 1,5 m/s, 3,0 m/s, 4,0 m/s e 5,0 m/s, ou seja, nas simulações 11, 12, 13 e 14.

Os campos de velocidade da fase líquida sofreram pouca variação nas simulações 10, 11 e 12, comportando-se de forma idêntica, conforme a Figura 57.

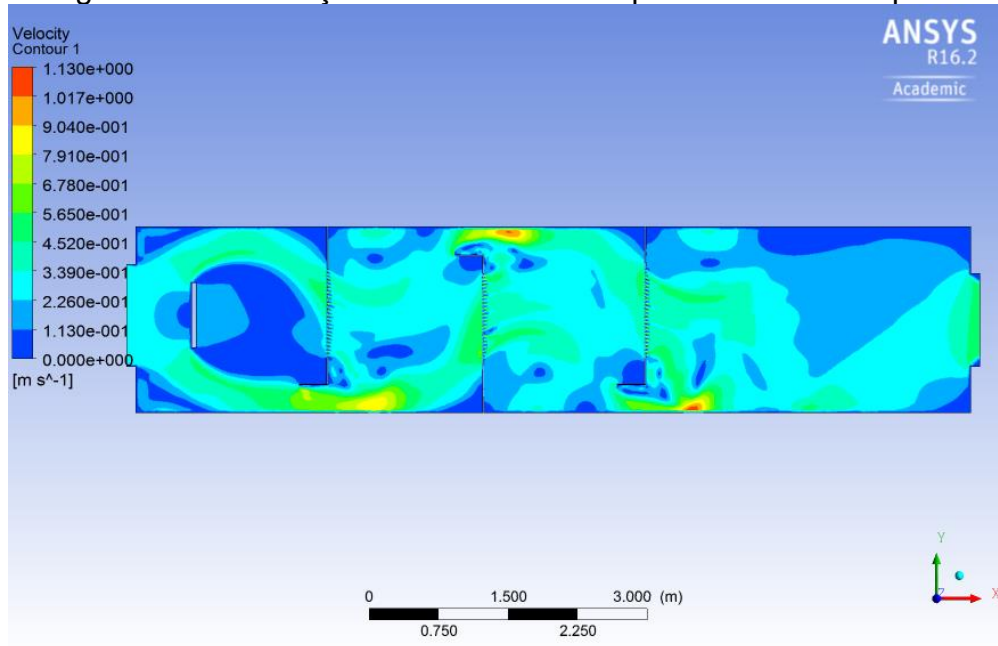
Figura 57 – Simulação 11: Velocidade superficial da fase líquida.



Fonte: Do autor

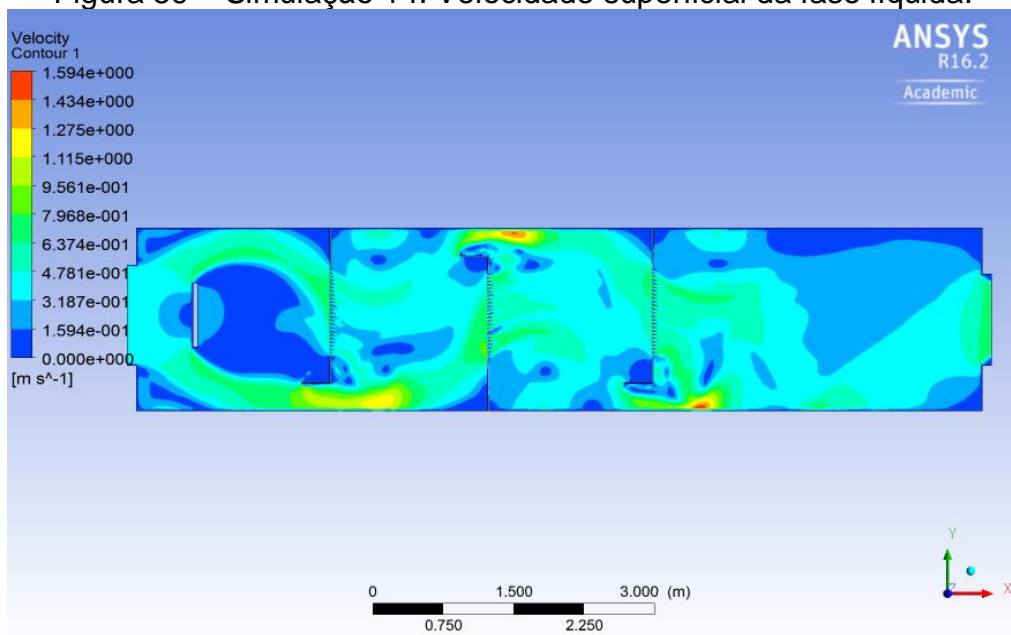
Para as simulações 13 e 14 houve pequenas variações da magnitude do campo de velocidade, conforme representadas nas Figuras 58 e 59, aumentando o campo conforme a velocidade do gás também é aumentada, esse comportamento abrandado, se deve à baixa interação de turbulência entre os campos de velocidade gás-líquido.

Figura 58 – Simulação 13: Velocidade superficial da fase líquida.



Fonte: Do autor (2016).

Figura 59 – Simulação 14: Velocidade superficial da fase líquida.

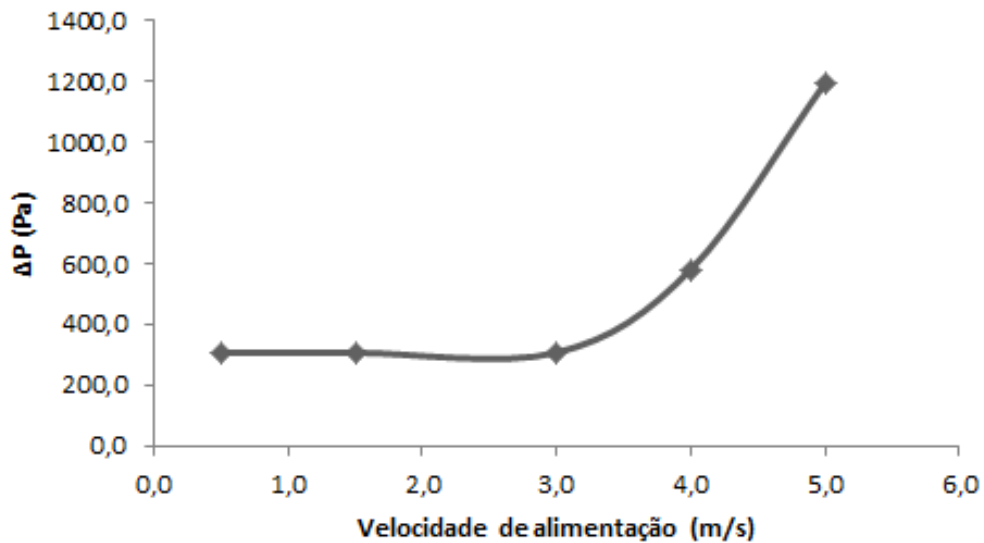


Fonte: Do autor (2016).

A queda de pressão imposta no reator varia muito pouco com a velocidade de entrada do gás, portanto se comportando de forma semelhante nas simulações 10, 11, 12, 13 e 14, e variando somente quando a velocidade do líquido é aumentada pelo contato com o gás em alta velocidade.

Figura 60 – Perfil de queda de pressão ao variar a velocidade do fluido gasoso.

Simulação	Velocidade de alimentação (m/s)	ΔP (Pa)
10	0,5	306,4
11	1,5	306,4
12	3,0	306,5
13	4,0	581,0
14	5,0	1196,0



Fonte: Do autor (2016)

Comparando as Figuras 57, 58 e 59 com a Figura 60 nota-se que é a velocidade do líquido que impõe a maior queda de pressão no reator, uma vez que ao variar a velocidade de alimentação do gás não causou alteração na queda de

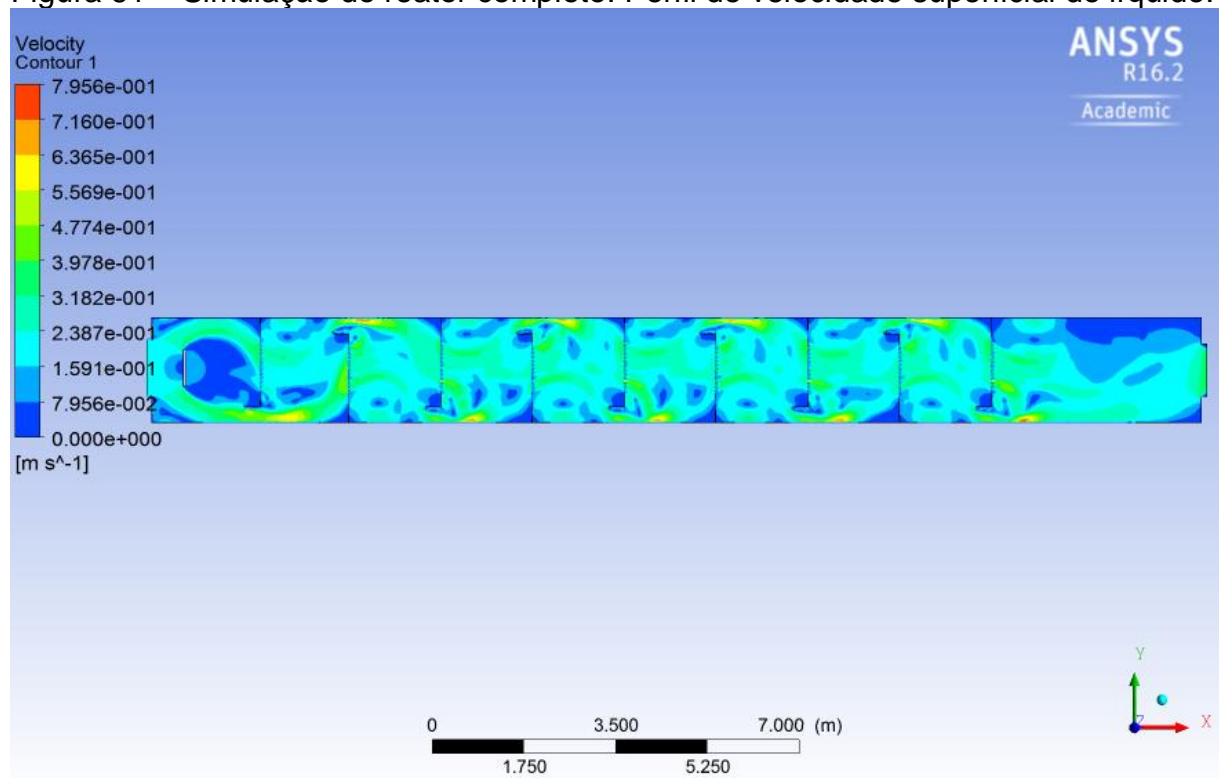
pressão, porém se o gás fornece turbulência o suficiente para alterar a velocidade da fase líquida a queda de pressão é aumentada.

4.2.4 Simulação do reator completo

A simulação contemplando o reator inteiro foi realizada conforme o ponto ótimo de trabalho, apontado por DSM N.V. (2000) (simulação 2 Tabela 3 p. 59). Os resultados obtidos estão listados abaixo.

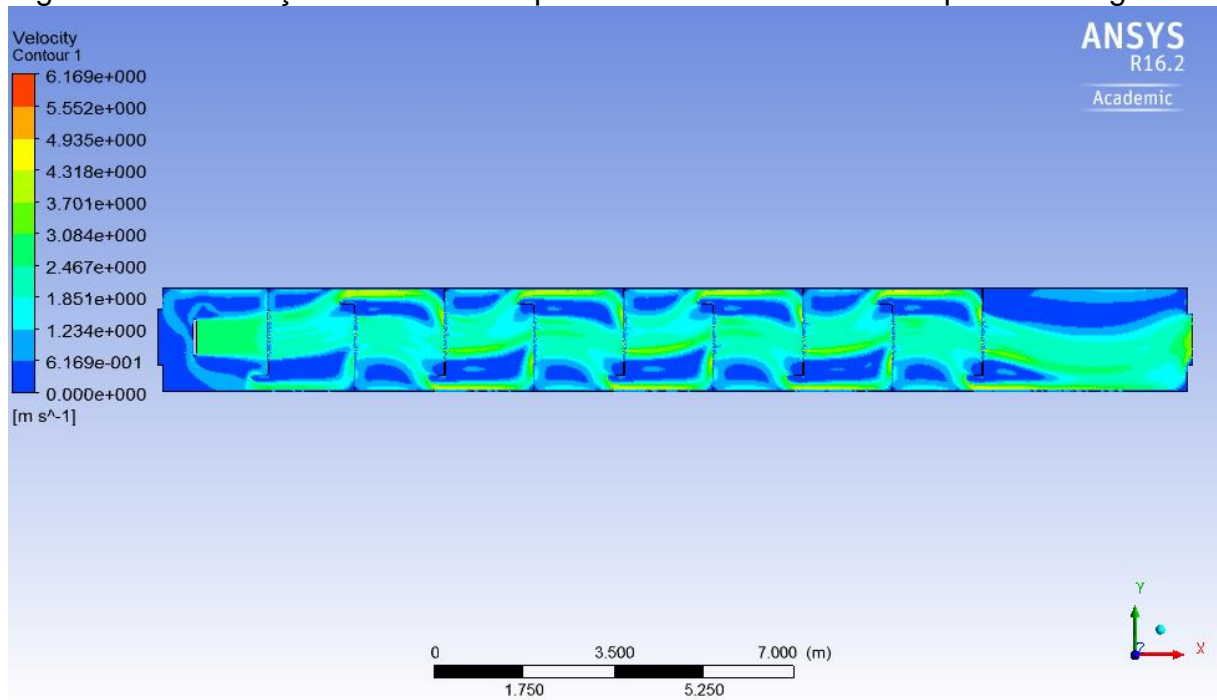
Os perfis de velocidade das fases gasosa e líquida estão representados nas Figuras 61 e 62.

Figura 61 – Simulação do reator completo: Perfil de velocidade superficial do líquido.



Fonte: Do autor (2016).

Figura 62 – Simulação do reator completo: Perfil de velocidade superficial do gás.



Fonte: Do autor (2016).

Os resultados da simulação do reator completo apontaram um escoamento semelhante ao ideal para o fluxo líquido, comparando com a Figura 12 (Seção 2.2.5). Os vórtices do líquido são formados em dois lados opostos, após a passagem do gás através das perfurações do prato, isto é, o líquido exerce um efeito de "zigue-zague" ao percorrer todo o módulo e sair na perfuração principal do lado oposto. Já o resultado do perfil de velocidade do fluxo gasoso não é considerado um escoamento pistonado, conforme previam a literatura de Isla et al. (1993) e Dente et al. (1992), uma vez que a fase gasosa também percorre as regiões de abertura para o escoamento principal do líquido. Outro ponto que desvia o comportamento do ideal é a interação do fluido gasoso com os vórtices gerados no líquido, ou seja as bolhas são arrastadas pelos vórtices e desviam-se do perfil pistonado.

5 CONCLUSÃO

Considerando o estudo realizado, onde foram feitas simulações computacionais para prever o possível comportamento fluidodinâmico dos fluidos dentro de um reator de produção de ureia, pode-se concluir que:

A análise de sensibilidade de malha exerceu uma função vital para a simulação, uma vez que foi apurada constância nos resultados para as simulações envolvendo a geometria de três módulos, utilizando malhas contendo 16.889 nós e *skewness* médio de 0,1. O teste possibilitou que as simulações fossem calculadas de maneira mais rápida possível, de modo representativo e sem iterações desnecessárias.

Verificou-se com os testes de variação de concentração que os perfis de velocidade se mantêm praticamente constantes, para todo o gradiente de composição presente no reator. Porém observou-se o aumento da queda de pressão à medida que a viscosidade da solução crescia. Pode-se constatar, através de análise gráfica que o aumento da queda de pressão juntamente com o aumento da viscosidade dinâmica do líquido, segue uma relação quase linear para o intervalo estudado.

A principal conclusão a ser analisada no teste de variação da velocidade de entrada da fase líquida é a presença de *backmixing*. Analisando os resultados concluiu-se que conforme a velocidade de alimentação de líquido passa do valor de 1 m/s, o fluxo nas aberturas para o escoamento principal do líquido gera pontos de velocidade em contracorrente e acaba ocasionando o *backmixing*, que por vez prejudica a conversão global do reator, por causar a volta de produto ao módulo anterior.

Analisando os perfis de queda de pressão ao longo do reator, é evidenciado que a velocidade da fase líquida exerce muito maior influência do que a fase gasosa. Constatou-se com análise gráfica que os valores de queda de pressão estão relacionados à velocidade do fluido líquido por uma função exponencial, seguindo assim o princípio de Bernoulli para o escoamento.

Concluiu-se com o teste de variação de velocidade de entrada do gás, que baixas velocidades não favorecem a formação do perfil de escoamento pistonado.

Com os resultados da simulação feita na geometria simbolizando o reator completo, foi possível aferir que o perfil de velocidade da fase líquida se comporta de maneira semelhante ao esperado na literatura, com vórtices após a passagem pelas placas perfuradas. Porém o escoamento do fluido gasoso não possui um perfil pistonado perfeito, como exemplificado na literatura, uma vez que nas simulações deste estudo o fluxo é dividido em cada módulo com passagem parcial pelas aberturas maiores dos cantos e o restante escoava pelas perfurações dos pratos.

6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como recomendações para trabalhos futuros de simulação em CFD do reator de produção de ureia em escala comercial, os seguintes parâmetros podem ser adicionados ao projeto.

- A adição das reações químicas que ocorrem na fase líquida comentadas na seção 2.2, utilizando os parâmetros impostos na seção 2.2.1.2.
- A adição do equilíbrio líquido-vapor no sistema $\text{NH}_3\text{-CO}_2\text{-H}_2\text{O}$, submetido a condições de síntese.
- A utilização do software ANSYS CFX para a realização do trabalho em modelo tridimensional.
- A validação do modelo, comparando os perfis de conversão calculados aos encontrados na literatura de Isla et al. (1993), Dente et al. (1992), Zhang et al. (2001) e Hamidipour et al. (2005).

7 REFERÊNCIAS

AMMONIA CASALE (Switzerland). Ammonia Casale. Umberto Zardi. **PROCESS FOR UREA PRODUCTION**. SW nº US 4,613,696, 23 set. 1986, 02 abr. 1975. 1986.

Ansys 16.2. **Workbench Help**. Ansys Inc., March 2015

BIRD, R. Byron; STEWART, Warren E.; LIGHTFOOT, Edwin N. **Fenômenos de transporte**. 2. ed. rev. e atual Rio de Janeiro: LTC, 2004. 838 p. ISBN 8521613938 (broch.)

ÇENGEL, Yunus A.; CIMBALA, Jhon M.. **Mecânica dos fluidos: Fundamentos e aplicações**. 3. ed. Reno, Us: Amgh, 2015.

DENTE, M. et al. Gas-Liquid Reactor in the Synthesis of Urea. **Chemical Engineering Science**, Isimbaldi, v. 47, n. 9-11, p.2475-2480, 1992.

DENTE, M. et al. SIMULATION PROGRAM FOR UREA PLANTS. **Computational Chemical Engineering**, Milan, v. 47, n. 5, p.389-400, 1988.

DSM. N.V. (Heerlen, Netherlands). Dsm. N.v.. Kees Jonckers. **REACTOR FOR THE SYNTHESIS OF UREA**. NL nº US 6165315 A, 26 dez. 2000, 03 maio 1999. 2000.

F. R. Menter. **"Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications"**. *AIAA Journal*. 32(8). 1598–1605. August 1994.

FINLAYSON, Bruce A. **Introduction to chemical engineering computing**. Hoboken, NJ: Wiley-Interscience, 2006. 339 p. ISBN 0471740624 (broch.)

Hassan Abdulmouti, **Bubbly Two-Phase Flow: Part I- Characteristics, Structures, Behaviors and Flow Patterns**, *American Journal of Fluid Dynamics*, Vol. 4 No. 4, 2014, pp. 194-240. doi: 10.5923/j.ajfd.20140404.03.

ISLA, Miguel A.; IRAZOQUI, Horacio A.. **Simulation of a Urea Synthesis Reactor: 1. Thermodynamic Framework**. *Ind. Eng. Chem. Res*, Milan, v. 32, n. 11, p.2662-2670, abr. 1993a.

ISLA, Miguel A.; IRAZOQUI, Horacio A.. **Simulation of a Urea Synthesis Reactor: 2. Reactor Model.** *Ind. Eng. Chem. Res*, Milan, v. 32, n. 11, p.2662-2670, abr. 1993b.

KAASENBROOD; BERG, van Den; REVALLIER. **Biuret Formation in the Manufacture of Urea.** *Central Laboratory Of The Dutch State Mines: FERTILIZER CONTAMINANTS*, Geleen, v. 11, n. 1, p.39-43, fev. 1963.

MEESSEN, Jozef H. & PETERSEN, Harro. **Urea.** *Ullmann's Encyclopedia Of Industrial Chemistry*, [s.l.], v. 35, p.658-693, 15 out. 2005. Wiley-Blackwell.

MEESSEN, Jozef H.. **Urea.** *Ullmann's Encyclopedia Of Industrial Chemistry*, [s.l.], v. 35, p.658-693, 15 out. 2012. Wiley-Blackwell. http://dx.doi.org/10.1002/14356007.a27_333.pub2.

Mohsen Hamidipour, NavidMostoufi, RahmatSotudeh-Gharebagh by “**Modeling the synthesis section of an industrial urea plant**” (2004), *Chemical Engineering Journal* 106 (2005) pg. 205.

SHREVE, R. Norris; BRINK JR., Joseph A. **Indústrias de processos químicos.** 4. ed. Rio de Janeiro: Guanabara, 1997. 717 p. ISBN 8570301766 (broch.)

STAMICARBON B.V. (Netherlands). Stephen Rudolf. **Process for the preparation of urea.** NL n° US 8,283,494 B2, 09 out. 2012, 03 dez. 2007. 2012.

UREA CASALE S.A. (Breganzona (ch)). Urea Casale S.a.. Federico Zardi. **METHOD FOR THE MODERNIZATION OF A UREA PRODUCTION PLANT.** CH n° US 8,158,823 B2, 17 abr. 2012, 12 maio 2009.

UREA CASALE S.A. (Lugano Switzerland). Giorgio Pagani. **PROCESS FOR UREA PRODUCTION INVOLVING A CARBON DIOXIDE STRIPPING STEP.** NL n° US 5684194A, 04 nov. 1997, 07 jun. 1995. 1997.

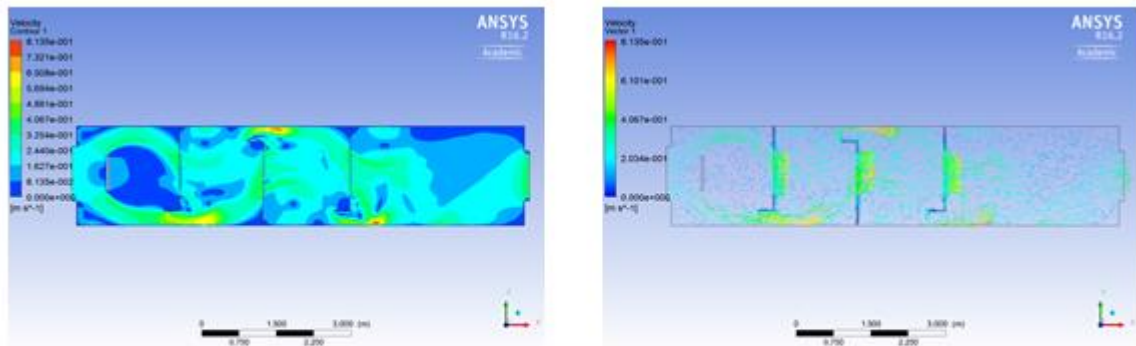
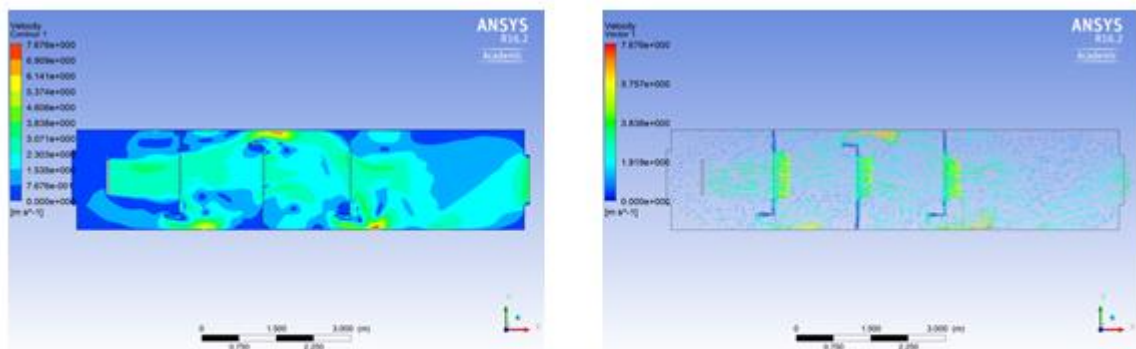
Xiangping Zhang,,Suojiang Zhang, Pingjing Yao, Yi Yuanby “**Modeling and simulation of high-pressure urea synthesis loop**” in2005, *Computers and Chemical Engineering* 29 (2005) pg. 984.

ZHANG, X.p. et al. Simulation of urea reactor of industrial process. **Transactions On Engineering Sciences**, Dalian University Of Technology, v. 30, n. 4, p.65-73, maio 2001.

ANEXO

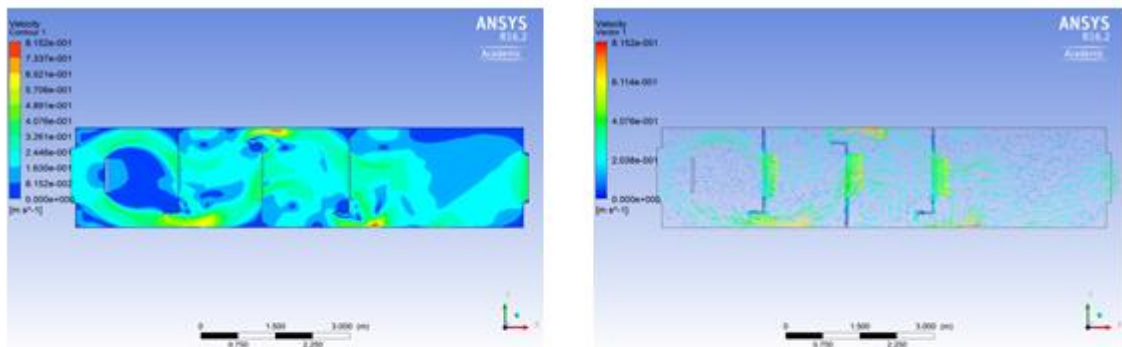
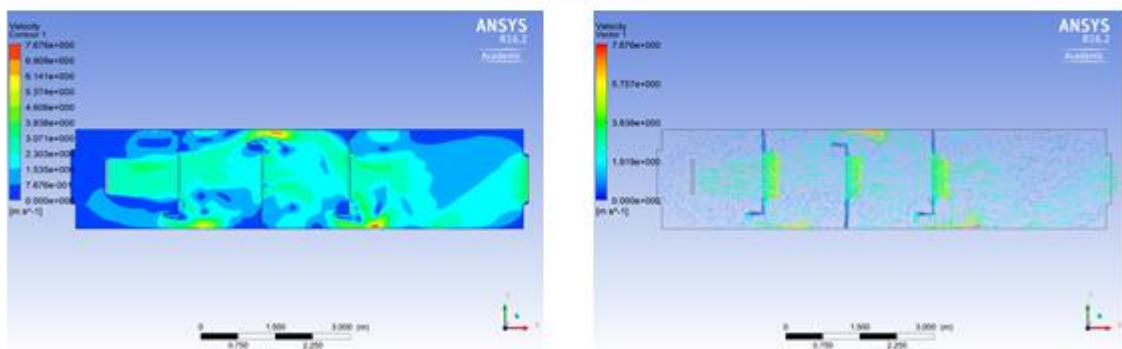
ANEXO A – Resultados das simulações 1,3 e 4.

Figura 63 – Campos de velocidade da simulação 1.

**Perfil de velocidade: Fase Líquida****Perfil de velocidade: Fase Gasosa**

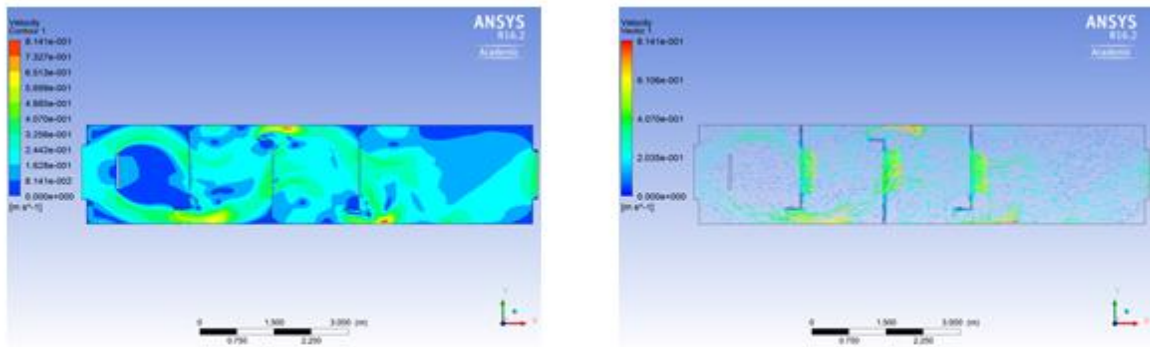
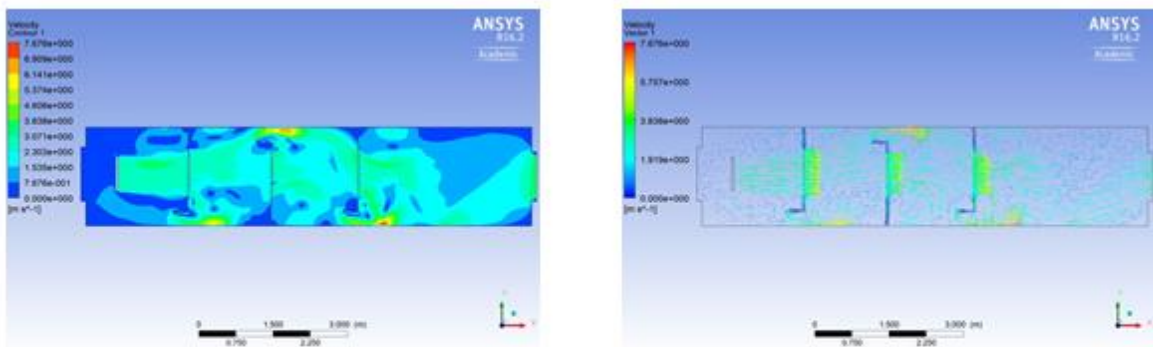
Fonte: Do autor (2016).

Figura 64 – Campos de velocidade da simulação 3.

**Perfil de velocidade: Fase Líquida****Perfil de velocidade: Fase Líquida**

Fonte: Do autor (2016).

Figure 65 – Campos de velocidade da simulação 4.

**Perfil de velocidade: Fase Líquida****Perfil de velocidade: Fase Líquida**

Fonte: Do autor (2016).