

Mestrado Integrado em Engenharia Química

***Estudo da distribuição do escoamento numa
coluna de adsorção de leito fixo***

Dissertação de Mestrado

de

Maria Salomé Oliveira Macedo

Desenvolvida no âmbito da unidade curricular de Dissertação

realizada em

Sysadvance - Sistemas de Engenharia S.A.



Orientador na FEUP: Professor José Miguel Loureiro

Professor Alexandre Prior Afonso

Orientador na Sysadvance: Doutor Patrick Bárcia



Departamento de Engenharia Química

Julho de 2017

*“The only way of discovering the limits of the possible is to venture a little way past them
into the impossible.”*

- Arthur C. Clarke

Agradecimentos

Ao Departamento de Engenharia Química da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, em especial ao Professor José Miguel Loureiro por todo o apoio prestado e por me ter conseguido a oportunidade de desenvolver este projeto na Sysadvance.

Ao Professor Alexandre Prior Afonso do Departamento de Mecânica da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, pela orientação, paciência, dedicação e por tudo o que me foi ensinando ao longo destes meses.

À Sysadvance, em particular ao Doutor Patrick Bárcia, por ter acreditado que seria capaz de executar este trabalho e pelas dicas sempre oportunas que me sugeriu, bem como pelo acompanhamento dado ao longo de toda a realização do meu trabalho.

A todos os funcionários e colaboradores da Sysadvance, particularmente ao Eng. José Vale Machado, pela oportunidade concedida, por me ter feito sentir bem-vinda e pela confiança depositada.

Ao Doutor Daniel Ferreira pelo acolhimento, por me ter introduzido no conceito da Sysadvance principalmente nos tempos iniciais, bem como pela disponibilidade demonstrada ao longo destes meses.

À Restante equipa de I&D da Sysadvance: o Eng. Sílvio Monteiro, a Eng. Margarida Ferreira, o Eng. Danielson Pina e em especial ao Eng. Tiago Vilas Boas, por me fazerem sentir em casa e pela rápida integração proporcionada, pela companhia e pelos ensinamentos prestados de cada dia.

Ao Diogo, meu companheiro de vida, por nunca me deixar ir abaixo e por sempre me conseguir colocar um sorriso na cara. Por todo o moralismo, força e boa disposição. Pela paciência em me ouvir e por estar sempre do meu lado ao longo de todos estes anos.

Aos meus pais, irmãs, “sogrinhos” e “cunhada”, que sempre acreditaram em mim, sempre me apoiaram e motivaram e sempre lutaram pelo melhor de mim. Apesar de os momentos não terem sido os mais fáceis estiveram sempre lá e sei que posso contar eternamente com eles. À minha prima e companheira de vida Regina, por todos os momentos confidentes, pelos desabados e por todo o apoio prestado, que nunca me deixou ir abaixo mesmo nas alturas mais difíceis. A toda a minha família pela boa disposição e porque sempre me apoiaram incondicionalmente, em especial à minha avó Teresa, que partiu cedo demais, mas que sei que está muito feliz por tudo que consegui alcançar.

Às minhas amigas “*Spice Girls*”, que sempre estiveram presentes nos bons e maus momentos e porque nunca negaram a uma palavra amiga de incentivo.

Resumo

Os processos de adsorção têm sido muito utilizados, nomeadamente os sistemas de adsorção com modulação de pressão (PSA), em que durante a etapa de adsorção há a passagem de uma mistura gasosa e, deste modo, os componentes menos seletivos ao adsorvente passam ao longo da coluna e saem pelo topo. Em contrapartida, há também a etapa de dessorção, cujo objetivo é a remoção dos componentes que ficaram retidos no adsorvente ficando a coluna preparada para uma nova adsorção, repetindo-se o processo de forma cíclica.

No decorrer dos anos, a tecnologia PSA tem-se demonstrado muito útil. De facto, há uma evidência do rápido crescimento na utilização desta tecnologia nos últimos anos. A principal razão para tal crescimento poderá estar relacionada com a vasta gama de aplicações para inúmeras misturas gasosas sendo uma tecnologia bastante versátil, estando ainda associado um baixo consumo energético quando comparada a outras tecnologias.

A Sysadvance é uma empresa que desenvolve e produz, há mais de uma década, sistemas de purificação de misturas gasosas baseados na tecnologia de PSA. Porém, à medida que o diâmetro das colunas aumenta, a distribuição do escoamento gasoso piora e assim foi necessário o seu estudo tendo-se recorrido às técnicas de dinâmica computacional de fluidos (CFD).

A técnica de CFD consiste na utilização de computadores para a resolução de problemas associados ao movimento de fluidos. O ANSYS Fluent foi a ferramenta de CFD utilizada nesta dissertação, dispondo de inúmeros modelos físicos. Porém, é importante salientar que as previsões dadas a partir das simulações nunca são totalmente confiáveis. Assim, de forma a se comprovarem os resultados obtidos a partir das simulações foram feitos testes experimentais.

Palavras-chave: adsorção com modulação de pressão, distribuição gasosa, dinâmica computacional de fluidos, ANSYS Fluent

Abstract

Adsorption processes have been widely used, specially the pressure swing adsorption systems (PSA), in which during the adsorption step a gaseous mixture passes through and the less selective components to the adsorbent pass along the column, exiting at the top. Furthermore, there is also the desorption step, whose main purpose is the removal of the components that were retained in the adsorbent, leaving the column ready for a new adsorption process, repeating the process in a cyclic way.

Over the years, PSA technology has proven to be very useful. In fact, recently there is an evidence of fast growth in the use of this technology. The main reason for such growth might be related to the wide range of applications for numerous gas mixtures being a very versatile technology, being also associated with a low energy consumption when compared to other technologies.

Sysadvance is a company that has been developing and producing gaseous purification systems based on PSA technology for over a decade. However, as the diameter of the columns increases, the distribution of the gas flow becomes worse and thus its study has been necessary resorting to computational fluid dynamics (CFD) techniques.

CFD techniques consist in the use of computers to solve problems associated with the movement of fluids. ANSYS Fluent was the CFD tool adopted in this thesis, that has numerous physical models. However, it is important to point out that the predictions given from the simulations are never totally reliable. Thus, in order to validate the results obtained from the simulations, experimental tests were performed.

Key-words: pressure swing adsorption, gaseous distribution, computational fluid dynamics, ANSYS Fluent

Declaração

Maria Salomé Oliveira Macedo declara, sob compromisso de honra, que este trabalho é original e que todas as contribuições não originais foram devidamente referenciadas com identificação da fonte.

Índice

1	Introdução.....	1
1.1	Enquadramento e Apresentação do Projeto	1
1.2	Apresentação da Empresa	3
1.3	Aplicabilidade do PSA	4
1.4	Contributos do Trabalho.....	5
1.5	Organização da Tese	6
2	Contexto e Estado da Arte	7
2.1	Resumo de patentes no desenvolvimento do PSA	7
2.2	O Ciclo de Skarstrom	10
2.3	Melhorias ao ciclo de Skarstrom	11
2.4	Utilização de CFD no estudo da distribuição do escoamento gasoso.....	12
2.5	Dinâmica computacional de fluidos	12
2.6	Revisão de métodos computacionais	14
2.7	Desenvolvimento histórico de CFD	15
3	Materiais e Métodos	16
3.1	Métodos Numéricos.....	16
3.1.1	Equações fundamentais.....	16
3.1.2	O método dos Volumes Finitos.....	18
3.1.3	Principais elementos de CFD.....	18
3.1.4	Criação da malha.....	21
3.1.5	Discretização.....	22
3.1.6	Solucionador baseado em pressão	25
3.1.7	Modelo de turbulência $k-\varepsilon$	28
3.1.8	Condições de fronteira.....	30
3.1.9	Convergência	31
3.2	Configuração do modelo e análise	32
3.3	Métodos Experimentais	33

3.4	Validação das simulações com os resultados experimentais.....	33
3.4.1	Experiências vs simulações	33
4	Resultados e Discussão.....	35
4.1	Simulações	35
4.1.1	Validação das malhas.....	35
4.1.2	DN 300	37
4.1.3	DN 800	38
4.1.4	DN 1200	40
4.2	Experiências	41
4.2.1	DN300	42
4.2.2	DN800	43
4.3	Verificação da influência do caudal no perfil de velocidades	45
4.4	Validação das simulações com os resultados experimentais.....	45
5	Conclusões	47
5.1	Objetivos Atingidos	47
5.2	Outros Trabalhos Realizados.....	48
5.3	Limitações e Trabalhos Futuros	48
5.4	Apreciação Final	48
6	Referências Bibliográficas.....	49
Anexo 1	Unidade de PSA DN1200.....	51
Anexo 2	Gráfico 3D.....	52

Índice de Figuras

<i>Figura 1 - Distribuição atual e distribuição ideal (adaptado de [4]).</i>	2
<i>Figura 2 - Distribuição anual de patentes e artigos científicos no ramo da tecnologia PSA (adaptado de [7]).</i>	4
<i>Figura 3 - Esquema de duas colunas de uma unidade de PSA e sequência de válvulas para as diferentes etapas de um ciclo (adaptado de [8]).</i>	10
<i>Figura 4 - Escoamento real e escoamento utilizando a metodologia CFD, respetivamente (retirado de [37]).</i>	13
<i>Figura 5 - Funções de inter-conectividade dos três elementos principais de uma análise de CFD (adaptado de [34]).</i>	19
<i>Figura 6 - Exemplo de uma malha estruturada e uma não estruturada, respetivamente (retirado de [39]).</i>	21
<i>Figura 7 - Volume de controlo utilizado para ilustrar a discretização de uma equação de transporte escalar (retirado de [46]).</i>	23
<i>Figura 8 - Volume de controlo unidimensional (retirado de [46]).</i>	25
<i>Figura 9 - Esquematização de cada uma das variáveis estudadas no fundo copado.</i>	32
<i>Figura 10 - Anemómetro TA300 utilizado para as medições de velocidades nos fundos copados (retirado de [51]).</i>	33
<i>Figura 11 - Perfis de velocidades obtidos para diferentes qualidades de malha para a configuração DN1200_POS75_DIAM75.</i>	35
<i>Figura 12 - Logaritmo do desvio em relação à velocidade esperada em função da qualidade ortogonal média.</i>	36
<i>Figura 13 - Perfis de velocidades obtidos nas diferentes configurações para a coluna DN300.</i>	37
<i>Figura 14 - Perfis de velocidades obtidos nas diferentes configurações para a coluna DN800.</i>	39
<i>Figura 15 - Perfis de velocidades obtidos nas diferentes configurações para a coluna DN1200.</i>	40
<i>Figura 16 - Fundo copado DN300 utilizado para a realização dos testes experimentais.</i>	42
<i>Figura 17 - Perfis de velocidades obtidos experimentalmente nas diferentes configurações para a coluna DN300.</i>	42
<i>Figura 18 - Fundo copado DN800 utilizado para a realização dos testes experimentais.</i>	43
<i>Figura 19 - Perfis de velocidades obtidos experimentalmente nas diferentes configurações para a coluna DN800.</i>	44
<i>Figura 20 - Comparação dos resultados obtidos na simulação de CFD para diferentes velocidades à entrada para a configuração DN1200_POS50_DIAM75.</i>	45
<i>Figura 21 - Comparação dos resultados obtidos na simulação de CFD com os resultados obtidos experimentalmente para a configuração DN800_POS100_DIAM100.</i>	46

Figura 22 - Comparação dos resultados obtidos na simulação de CFD com os resultados obtidos experimentalmente para a configuração DN300_POS50_DIAM100. 46

Figura 23 - Unidade de PSA com colunas DN1200 que seria utilizada para realização de testes experimentais..... 51

Figura 24 - Representação gráfica do desvio padrão das velocidades para cada configuração experimental (coluna DN800)..... 52

Índice de Tabelas

<i>Tabela 1 - Principais aplicações da tecnologia de PSA [9].</i>	5
<i>Tabela 2 - Definição das equações da família do modelo de turbulência k-ε [48].</i>	30
<i>Tabela 3 - Configurações utilizadas no estudo em causa.</i>	32
<i>Tabela 4 - Comparação entre experiências e simulações [53].</i>	34
<i>Tabela 5 - Características da utilização de CFD em contraste às experiências [53].</i>	34
<i>Tabela 6 - Características referentes a cada uma das malhas e respetivas simulações.</i>	36
<i>Tabela 7 - Desvios padrão de cada perfil de velocidades obtidos nas configurações da coluna DN300.</i>	38
<i>Tabela 8 - Desvios padrão de cada perfil de velocidades obtidos nas configurações da coluna DN800.</i>	39
<i>Tabela 9 - Desvios padrão de cada perfil de velocidades obtidos nas configurações da coluna DN1200.</i>	41
<i>Tabela 10 - Desvios padrão de cada perfil de velocidades obtidos experimentalmente para a coluna DN300.</i>	43
<i>Tabela 11 - Desvios padrão de cada perfil de velocidades obtidos experimentalmente para as posições de 25 % e 40 % para a coluna DN800.</i>	44

Notação e Glossário

\vec{A}	vetor de área superficial, m^2
\vec{A}_f	vetor de área da face f ($ A = (A_x\hat{i} + A_y\hat{j} + A_z\hat{k})$), m^2
$C1$	coluna 1
$C2$	coluna 2
$C_{\varepsilon 1}$	constante do modelo $k - \varepsilon$
$C_{\varepsilon 2}$	constante do modelo $k - \varepsilon$
C_{μ}	constante do modelo $k - \varepsilon$
$DIAM$	diâmetro do defletor, %
DN	diâmetro nominal da coluna, mm
d_p	diâmetro da partícula, m
E_{ij}	taxa de deformação linear, s^{-1}
H	entalpia, $J \cdot mol^{-1}$ ou $J \cdot kg^{-1}$
I	intensidade de turbulência, %
J_f	fluxo de massa que passa através da face f , $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
k	energia cinética turbulenta, $m^2 \cdot s^{-2}$
K_H	coeficiente de condutividade térmica, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
L	diâmetro do tubo de entrada, m
Ma	número de Mach
N_f	número de nós numa determinada face
N_{faces}	número de faces que envolvem uma célula
\vec{r}	vetor de deslocamento do centróide da célula a montante para o centróide da face, m
R	resíduos
Re	número de Reynolds
S_{\emptyset}	termo fonte de \emptyset por unidade de volume
S_{ε}	termo fonte de ε
t	tempo, s
T	temperatura, $^{\circ}C$ ou K
u	velocidade média, $m \cdot s^{-1}$
u_i	componente da velocidade média na direção x , $m \cdot s^{-1}$
u_j	componente da velocidade média na direção y , $m \cdot s^{-1}$
p	pressão parcial, kPa ou bar
POS	posição do defletor, %
\vec{v}	vetor de velocidade ($= v_x\hat{i} + v_y\hat{j} + v_z\hat{k}$), $m \cdot s^{-1}$
V	volume da célula, m^3
\vec{v}_n	valores faciais de velocidade, $m \cdot s^{-1}$
x, y, z	coordenadas cartesianas, m

Símbolos gregos

ε	taxa de dissipação energética, $m^2 \cdot s^{-3}$
ε_b	porosidade interparticular $m^3_{\text{vazio}} \cdot m^{-3}_{\text{leito}}$
ρ_f	densidade do fluido, $kg \cdot m^{-3}$
\emptyset	quantidade escalar
\emptyset_f	valor de \emptyset que passa por convecção através da face f
\emptyset_n	valor de \emptyset em cada nó
Γ	coeficiente de difusão escalar
Γ_{ϕ}	coeficiente de difusão escalar de \emptyset
μ	viscosidade dinâmica, $Pa \cdot s$
μ_T	viscosidade turbulenta, $Pa \cdot s$

μ_{eff}	viscosidade efetiva, Pa·s
ν	viscosidade cinemática, $m^2 \cdot s^{-1}$
ν_T	viscosidade cinemática turbulenta, $m^2 \cdot s^{-1}$
ν_{eff}	viscosidade cinemática efetiva, $m^2 \cdot s^{-1}$
θ	parâmetro do esquema QUICK
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	números turbulentos de Prandtl do modelo $k - \varepsilon$

Operadores

$\vec{\nabla}$	operador variável gradiente
∇^2	operador Laplaciano
$\vec{\nabla}\phi$	gradiente de ϕ $((\partial\phi/\partial x)\hat{i} + (\partial\phi/\partial y)\hat{j} + (\partial\phi/\partial z)\hat{k})$
$\vec{\nabla}\phi_f$	gradiente de ϕ na face f

Índices

\hat{i}	vetor unitário na direção ortogonal cartesiana x
\hat{j}	vetor unitário na direção ortogonal cartesiana y
\hat{k}	vetor unitário na direção ortogonal cartesiana z

Lista de Siglas

CAD	desenho assistido por computador
CAS	<i>chemical abstracts services</i>
CFD	dinâmica computacional de fluidos
ESSo	grupo de investigação de engenharia de soluções sustentáveis
FEUP	faculdade de engenharia da universidade do porto
PSA	adsorção por modulação de pressão
RNG	grupo de renormalização
VPSA	adsorção por modulação de pressão com recurso a vácuo

1 Introdução

1.1 Enquadramento e Apresentação do Projeto

Os processos de adsorção têm vindo a ser bastante utilizados na separação e purificação de gases. Recentemente, os sistemas de adsorção com modulação de pressão, em inglês *pressure swing adsorption* (PSA), têm sido desenvolvidos de forma a melhorar as operações de separação, particularmente para a produção comercial de oxigénio e/ou nitrogénio do ar. Na operação dos sistemas de PSA é usado um sistema sequencial cíclico de adsorção-dessorção-repressurização [1]. Durante a etapa de adsorção há a passagem de ar, ou outra mistura gasosa, a uma pressão elevada, em que os componentes menos fortemente adsorvidos passam ao longo da coluna e saem pelo topo. Após a operação de adsorção dá-se a despressurização de forma a baixar a pressão para a etapa que se segue, a dessorção, que tem como objetivo remover os componentes que ficaram retidos no adsorvente, estando a coluna preparada para uma nova adsorção, que terá novamente início após uma pressurização da coluna.

Inúmeros processos de PSA têm sido patenteados ao longo dos últimos cinquenta anos e muitos deles foram comercializados. Apesar de serem alcançadas, com estes processos, eficiências de separação elevadas e economias favoráveis, a principal razão para o crescimento no desenvolvimento desta tecnologia é a flexibilidade processual. Esta flexibilidade resulta da existência de muitas alternativas possíveis para o ciclo de operação, e etapas complementares, e das suas condições de operações, em conjunto com a enorme variedade de adsorventes que podem ser utilizados para se obter a separação desejada [2].

Os sistemas de PSA, de modo a utilizar completamente o adsorvente empregado, requerem escoamentos uniformes do gás ao longo do leito de adsorvente durante o ciclo de operação. Para além disso, a elevada porosidade e as quedas de pressão que se fazem sentir nas regiões de entrada e saída das colunas - mais precisamente nos fundos e topos copados - têm efeitos adversos no desempenho processual e portanto necessitam de ser mitigadas [1].

Nos sistemas de PSA, o suporte do leito adsorvente e os distribuidores do gás são caros ficando mais caros com o aumento do diâmetro da coluna. As colunas que têm implementados suportes de leito adsorvente e distribuidores do escoamento tendem a ter uma distribuição não-uniforme, que resulta numa indesejável perda de eficiência na separação [1].

Em muitos processos de adsorção a corrente de entrada é introduzida na coluna a partir de tubos de pequeno diâmetro. A corrente gasosa escoar nas tubagens a uma velocidade elevada e entra na coluna na forma de jato. De forma a obter-se uma distribuição uniforme do escoamento este jato deverá expandir-se uniformemente ao longo de toda a área de secção

transversal. Caso não seja possível obter-se um escoamento uniforme o jato propagar-se-á ao longo do eixo central do leito a uma velocidade elevada. Consequentemente, nem toda a área superficial disponível é aproveitada diminuindo o desempenho da unidade. Pior ainda, as partículas que constituem o adsorvente podem-se danificar ou sofrer fluidização localizada na parte inferior da coluna [3].

Para prevenir estes problemas associados às tubagens é normalmente utilizada uma chapa defletora que tem um diâmetro ligeiramente maior que as tubagens. Esta chapa defletora, ou defletor, pode ser constituída por aberturas, que são muito úteis na expansão e uniformização do jato proveniente das tubagens [3]. Apesar de o efeito de jato ser minimizado com a introdução destas chapas defletoras tal pode não ser suficiente para a formação de um escoamento uniforme ao longo de toda a secção transversal do leito adsorvente.

Como já referido, a eficiência de um processo de separação é significativamente afetada pelo modo como o fluido é introduzido no processo. Esta distribuição influencia diretamente a área superficial do adsorvente que está disponível para o gás. De forma a maximizar o aproveitamento da área superficial é estritamente necessário que o fluido seja uniformemente distribuído no leito, como é observado na Figura 1 [3].

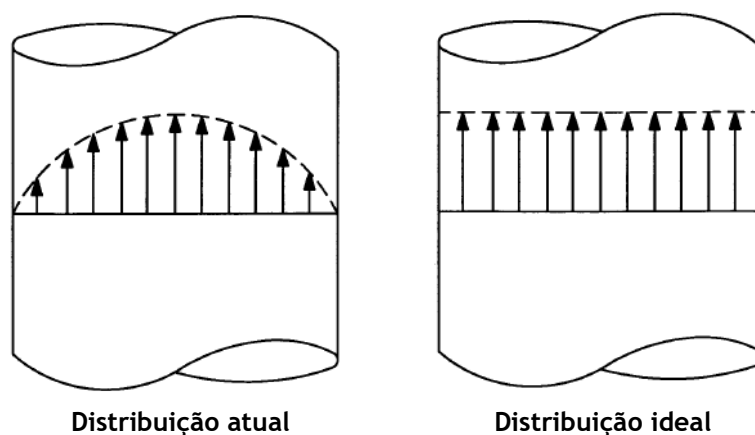


Figura 1 - Distribuição atual e distribuição ideal (adaptado de [4]).

Desta forma há uma necessidade genuína de obter uma solução que possibilite uma melhor distribuição do escoamento ao longo de toda a área transversal de processos que possuem leitos adsorventes. A uniformização da distribuição do fluido permite o aproveitamento de toda a área superficial disponível para o processo de separação, melhorando consideravelmente a pureza, recuperação e produtividade do produto desejado [3].

A Sysadvance - Sistemas de Engenharia S.A. constatou a necessidade de estudar a distribuição do escoamento gasoso nas suas colunas de PSA na medida em que pretende aumentar a competitividade dos seus equipamentos face aos já existentes no mercado. O

escoamento de fluidos através de conexões tubulares, válvulas - entre outras estruturas - pode provocar escoamentos axiais não-uniformes na direção radial ao longo do leito de adsorvente afetando diretamente a transferência de massa das partículas. Consequentemente há uma diminuição da produtividade, e como resultado desta anomalia é necessário um maior volume de leito com o intuito de se atingir a produtividade exigida e manter a competitividade processual. Contudo, a esta solução está associado um aumento de custos, para além de ser necessário ocupar um maior espaço.

Recentemente tem havido um grande interesse em relacionar modelos de engenharia com ferramentas de simulação mais rigorosas paralelamente à significativa melhoria dos recursos computacionais. As simulações proporcionam uma alternativa muito aprazível relativamente às experiências convencionais que requerem tempo e recursos [5].

Existem modelos de simulação que podem ser utilizados para descrever sistemas de PSA. Um modelo aceitável deve resolver simultaneamente equações que descrevam os balanços de massa, energia e quantidade de movimento nas colunas de adsorção para cada etapa do ciclo e que as integrem ao longo de vários ciclos até o estado estacionário cíclico ser atingido [2].

A utilização de ferramentas de dinâmica computacional de fluidos, em inglês *computational fluid dynamics* (CFD), no projeto de sistemas de PSA é fundamental para se aferir o seu desempenho com o intuito de se aumentar a competitividade processual. As ferramentas de CFD comercialmente disponíveis, tais como o ANSYS Fluent, permitem variar parâmetros para questões de análise, otimização e decisão, podendo avaliar o desempenho de diferentes métodos de dispersão de gases. Finalizadas as simulações, será feita uma validação experimental, com o intuito de se determinar a confiabilidade dos resultados obtidos nas simulações.

A utilização de CFD para estimar a distribuição do escoamento gasoso nos fundos e topos copados das colunas de PSA é um método essencial. Porém, como referido e dado ser um objetivo principal desta dissertação, será feita a validação experimental dos resultados obtidos nas simulações realizadas no ANSYS Fluent.

1.2 Apresentação da Empresa

A Sysadvance - Sistemas de Engenharia S.A. é uma empresa portuguesa, sediada na Maia e que surgiu como uma *spin-off* da FEUP. A Sysadvance é especializada na separação de gases por processos de adsorção, sendo o seu portfólio constituído por unidades de PSA e VSA para a produção de azoto e oxigénio a partir do ar atmosférico, bem como por unidades VPSA para separação e purificação de hélio, hexafluoreto de enxofre, xénon, purificação de biogás e dióxido de carbono [6].

Sendo atualmente líder no mercado ibérico na produção de unidades de PSA, a Sysadvance possui um conjunto de características, infraestruturas e conhecimento que a tornam competitiva a nível mundial e exportadora para mais de 40 países no mundo inteiro. É ainda importante salientar que é certificada pela empresa SGS nas normas ISO 9001:2015 e ISO 13485:2016, garantindo um selo de qualidade que possibilita o desenvolvimento, produção e comercialização de unidades PSA de oxigénio para fins medicinais [6].

1.3 Aplicabilidade do PSA

No decorrer dos anos tem-se demonstrado que a tecnologia PSA pode ser usada numa vasta gama de aplicações. De facto, uma pesquisa por PSA feita na base de dados da *chemical abstract services* (CAS) originou 5200 resultados que abrange patentes e artigos científicos. A Figura 2 mostra a evolução temporal anual destes resultados desde 1966 até 2010. Tal como se pode observar pela forma da curva, há uma evidência do rápido crescimento na utilização desta tecnologia, demonstrando o forte interesse que tem vindo a proporcionar [7].

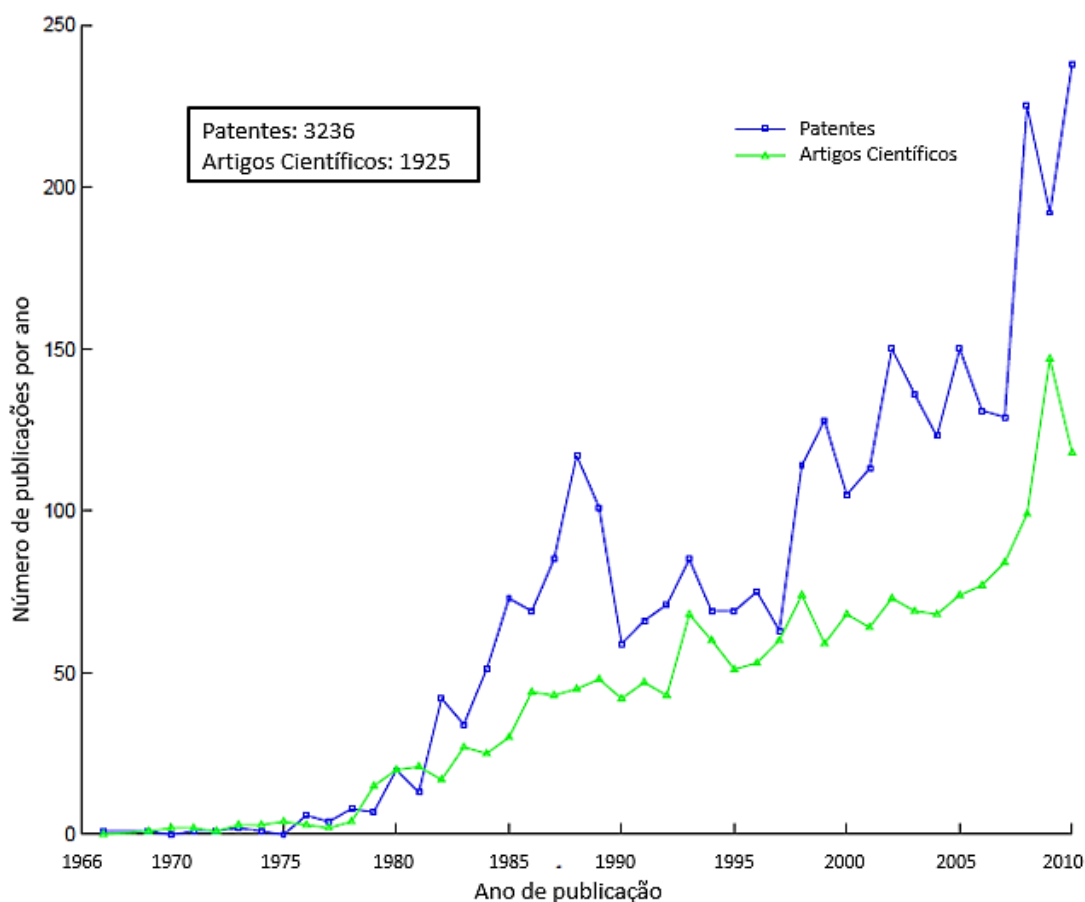


Figura 2 - Distribuição anual de patentes e artigos científicos no ramo da tecnologia PSA (adaptado de [7]).

A principal razão para tal crescimento pode estar relacionada com a vasta gama de aplicações que um sistema de PSA pode ter para inúmeras misturas gasosas sendo uma tecnologia bastante versátil. Para além disso, os sistemas de PSA estão normalmente associados a baixo consumo energético quando comparado com outras tecnologias, sendo também uma tecnologia ambientalmente segura [8].

Os sistemas de PSA têm sido desenvolvidos para variadas aplicações tais como secagem do ar, separação do ar, purificação de hidrogénio, remoção de dióxido de carbono, purificação de gases nobres - hélio, xénon e árgon, produção de biometano, entre muitas outras, tal como se pode verificar na Tabela 1.

Tabela 1 - Principais aplicações da tecnologia de PSA [9].

Secagem de gás	Secagem do ar Secagem do gás natural
Separção do ar	Produção de oxigénio ($\leq 95\%$) Produção de oxigénio com elevada pureza ($>95\%$) Produção de azoto
Recuperação de monóxido de carbono	
Recuperação e remoção de dióxido de carbono	
Recuperação e purificação de hidrogénio	
Separção de iso-parafinas e parafinas normais	
Purificação de hidrocarbonetos	
Purificação de gases nobres	Purificação de hélio Purificação de xénon Purificação de árgon
Purificação de gases fluorinados	
Purificação do gás de síntese de amoníaco	
Produção de biometano	

1.4 Contributos do Trabalho

Com o desenvolvimento do presente trabalho foi permitido à Sysadvance o possível aumento do potencial competitivo dos seus equipamentos dado o aumento da distribuição dos gases ao longo do leito compactado de adsorvente possibilitando uma diminuição da massa de adsorvente necessária para a separação desejada imposta pelo cliente.

Em suma, esta dissertação terá um contributo numa fase determinante da conceção de várias unidades industriais para a separação e purificação de um vasto leque de compostos permitindo alargar o número de soluções disponíveis para os clientes.

1.5 Organização da Tese

A dissertação aqui descrita está estruturada da seguinte forma:

- **Capítulo 1 - Introdução:** expõe a problemática que mereceu uma especial atenção, apresentando uma metodologia com vista em solucionar o problema. Refere ainda a aplicabilidade e evolução da tecnologia de separação por PSA.
- **Capítulo 2 - Contexto e Estado de Arte:** compreende os avanços tecnológicos organizados cronologicamente relativamente ao método de separação por PSA, bem como aos métodos de melhoria na distribuição gasosa no leito compactado. É ainda apresentada a importância da metodologia utilizada no estudo em causa, bem como a sua evolução histórica.
- **Capítulo 3 - Materiais e Métodos:** dividida em duas partes fundamentais, a primeira refere todas as equações envolvidas na metodologia utilizada para o estudo em causa, bem como todas as considerações feitas. A segunda expõe toda a envolvente experimental. Este capítulo engloba ainda a justificação para determinadas decisões do projeto, bem como um suporte teórico e crítico para todas as decisões tomadas.
- **Capítulo 4 - Resultados e Discussão:** apresentação de todos os resultados considerados relevantes no estudo em causa. Ainda neste capítulo são apresentadas críticas e considerações técnicas acerca dos resultados, caso existam.
- **Capítulo 5 - Conclusões:** exposição sucinta dos resultados obtidos, bem como das conclusões gerais do trabalho realizado. São ainda mencionadas limitações decorrentes ao longo do projeto, bem como outros trabalhos realizados.
- **Capítulo 6 - Referências Bibliográficas:** expõe todas as fontes bibliográficas apresentadas ao longo do conteúdo textual.

2 Contexto e Estado da Arte

2.1 Resumo de patentes no desenvolvimento do PSA

Designa-se de adsorção o fenómeno espontâneo de atração que uma molécula de uma fase fluida experiencia quando se aproxima de uma superfície de um sólido, designado de adsorvente. Estes adsorventes são sólidos porosos, contendo, preferencialmente, uma elevada área superficial por unidade de massa. Dado que diferentes moléculas apresentam interações distintas com a superfície do adsorvente, é possível separá-las. Nos processos de adsorção é utilizada normalmente uma forma esférica ou cilíndrica nos adsorventes. A corrente de entrada entra em contacto com o adsorvente que é normalmente compactado em leitos fixos. O composto menos adsorvido, também designado de composto leve, sairá da coluna mais rapidamente do que os restantes. De forma a obter-se a separação, antes que os restantes compostos saiam da coluna (compostos pesados), a alimentação deverá ser parada e o adsorvente deverá ser regenerado de forma a dessorver os compostos pesados [8].

A adsorção de equilíbrio é função das condições de operação, tais como a composição, temperatura e pressão. Assim, alterando um destes parâmetros é possível regenerar o adsorvente [8]. Quando a regeneração do adsorvente é feita por redução da pressão total do sistema o processo é designado de adsorção com modulação de pressão, em que a pressão total do sistema oscila entre pressões elevadas de alimentação e baixas pressões na regeneração [8].

Embora o mérito da invenção do PSA seja, normalmente, atribuído a Skarstrom [10] e Guérin de Montgareuil e Domine [11], é possível destacar, em anos anteriores, várias patentes que descrevem processos com algumas características muito semelhantes à dos processos apresentados pelos autores supramencionados. Em 1931, Rudolph Hasche e William Dargan patentearam um primeiro processo que se aproxima do conceito atual de PSA [12]. Uns anos mais tarde, George Perley [13] apresentou um processo de recuperação de hidrogénio por adsorção recorrendo a um conceito muito semelhante ao de PSA. Para além disso, é reconhecida a referência de Kahle que, entre os anos de 1953 e 1954, desenvolveu e patenteou um princípio capaz de remover hidrocarbonetos, vapor de água e CO₂ do ar, muito semelhante ao funcionamento do PSA clássico de Skarstrom [14].

No entanto, atendendo aos ciclos a que os PSA modernos operam, é possível verificar que existem algumas etapas que surgiram da evolução dos próprios ciclos. Anos mais tarde à invenção de Skarstrom surgiram várias patentes com aplicações que melhoram o seu ciclo [15]. A introdução de regeneração sob vácuo foi introduzida por Guerin e Montgareuil e Domine [11]. Este termo foi nomeado de adsorção com modulação de pressão com recurso a vácuo, em inglês *vacuum pressure swing adsorption* (VPSA). Embora a utilização de vácuo possa ter um impacto

no requerimento energético dos sistemas, a eficiência dos sistemas de PSA apresentou melhorias significativas. Os mesmos autores introduziram ainda o conceito de utilização de uma etapa de pressurização utilizando uma certa percentagem de gás rico no componente menos adsorvido, verificando-se uma melhoria na pureza do gás produzido.

Ainda na mesma altura surgiu um passo de equalização de pressão, desenvolvido pelo grupo de investigação de engenharia de soluções sustentáveis, em inglês *engineering sustainable solutions* (ESSo) [16-18]. Isto significa que uma certa percentagem de gás, que normalmente é perdida na etapa de despressurização, será usada para pressurizar a outra coluna, havendo menos perda de gás purificado. O resultado da etapa de equalização de pressão é uma melhoria significativa na recuperação do componente leve [19]. A introdução desta etapa num PSA constituído por duas colunas resultou numa mudança da continuidade processual.

Anos mais tarde, Fuderer [20] sugeriu uma alternativa com o intuito de remover parte dos componentes leves da coluna antes de ocorrer a etapa de despressurização, que consiste em despressurizar a coluna co-correntemente à direção de alimentação. Esta etapa torna-se muito útil na purificação de hidrogénio, sendo conhecida como a etapa de purga, uma vez que fornece gás para purgar a outra coluna.

De forma a deslocar os componentes leves para o produto final foi introduzido o conceito de reciclo de componentes pesados por Basmadjian e Pogorski [21]. Esta etapa ficou conhecida como etapa de lavagem, em inglês *rinse*. Embora esta etapa tenha sido delineada para concentrar baixas percentagens de componentes leves, foi muito implementada com outras finalidades, nomeadamente para concentração das espécies mais adsorvidas [22, 23].

De facto, o número de etapas possíveis não é muito grande. No entanto, utilizá-las do modo mais eficiente tem-se revelado uma tarefa bastante árdua. Até hoje, a questão exposta pelo Professor Ruthven, em 1992, ainda não foi completamente respondida [24]: “*É possível desenvolver um algoritmo para gerar ciclos de PSA automáticos e ajustá-los da melhor forma?*”.

De todas as melhorias que até então se haviam feito, a mais desafiadora consistia no desenvolvimento de estratégias cíclicas que melhorassem o desempenho dos indicadores de PSA - pureza, recuperação e produtividade [8].

Na tecnologia moderna dos PSA, devido ao aumento na procura de sistemas com maiores eficiências, a razão entre a altura de leito e a área frontal de leito diminuiu e os tempos de ciclo tornaram-se mais pequenos. Nos dias de hoje, os leitos são desenhados com pequenas áreas de entrada e saída de forma a minimizar os custos da unidade e aumentar a eficiência. Nestas condições é essencial ter-se uma distribuição uniforme do gás no leito dado que apenas desta forma se consegue aproveitar toda a área disponível para a separação [25].

As três principais considerações a ter no projeto de um PSA são o gradiente de pressão, o volume de leito e a purga. Os gradientes de pressão num leito podem fomentar uma distribuição não-uniforme, provocando uma saída antecipada dos componentes pesados, havendo uma diminuição da eficiência do processo de adsorção [26].

Desde então, inúmeras patentes têm sido registadas com sistemas que melhoram a distribuição gasosa em PSA. Até 1996 tinham sido implementadas quatro abordagens gerais em práticas comerciais com o objetivo de melhorar a distribuição dos gases em colunas de PSA [1].

Na primeira abordagem foi adicionada queda de pressão através de uma placa em tela *Johnson screen* seccional ao leito [27]. No entanto, esta abordagem é pouco desejável uma vez que as colunas de PSA são grandes e nas tubagens à entrada as velocidades são muito elevadas, havendo então a necessidade de se atingir quedas de pressão relativamente altas para se ter uma boa distribuição. Por ventura, tais quedas de pressão aumentam a potência necessária para operar o PSA tornando-o menos competitivo [1].

A segunda abordagem faz referência a uma chapa defletora colocada a uma certa distância do tubo de entrada. Esta chapa altera o escoamento de gás e faz com que se difunda em toda a área ao invés de entrar diretamente na forma de jato resultando numa baixa queda de pressão ao longo do leito, mas demonstrando uma distribuição relativamente fraca [1].

A terceira abordagem refere-se ao posicionamento de uma chapa paralelamente ao leito. Esta contém secções perfuradas de diferentes dimensões que forçam a que o escoamento seja geralmente uniforme [3]. Esta abordagem, tal como nas duas primeiras, emprega, na prática, reforços de sustentação para fortalecer o prato perfurado. No entanto, estes reforços estimulam zonas de escoamento elevado e desigual devido à inerente preferência do escoamento [1].

A quarta e última abordagem refere a utilização de esferas, ou cilindros, construídos em tamanhos decrescentes para suportar o leito. A dificuldade proveniente desta abordagem é que não existe nenhum mecanismo para controlar a distribuição do escoamento no leito, exceto pelo alongamento de toda esta secção resultando, por sua vez, num aumento de custos e numa maior queda de pressão [1].

Contudo, as técnicas anteriores não foram capazes de oferecer distribuições satisfatórias do escoamento gasoso. Na verdade, tais técnicas não eram responsivas às exigências da tecnologia moderna [4].

Assim, em 2007, Baksh *et al* [4] desenvolveram um sistema que utiliza um distribuidor aerodinâmico de escoamento multi-segmentado alcançado, em parte, recorrendo a várias camadas contendo esferas de diâmetros sucessivamente decrescentes que proporciona um escoamento uniforme ao longo do leito.

Mais tarde, Paul Sechrist [28] sugeriu que o processo pode incluir o posicionamento de pelo menos um espaçador que, geralmente, forma um canal tendo uma área de secção aproximadamente constante na direção de escoamento do fluido.

Em 2013, Patel *et al* [29] propuseram um sistema constituído por uma placa de suporte perfurada posicionada na extremidade inferior da coluna definindo um espaço vazio entre a placa e a extremidade inferior. Posteriormente, este espaço vazio foi preenchido com um material com uma porosidade total inferior a 25 % de forma a definir um canal para o escoamento a partir da entrada da extremidade inferior.

Por ventura, estas últimas abordagens, apesar de proporcionarem distribuições mais uniformes, apresentam custos insustentáveis. Assim, a Sysadvance decidiu fazer uso da segunda, terceira e quarta abordagens para melhorar a distribuição do escoamento. Porém, foi estudada a melhor configuração da chapa de modo a obter-se a melhor distribuição, recorrendo-se às técnicas de CFD. A simulação com recurso a estas técnicas é apropriada para ser usada quando o desempenho do processo é ditado pela dinâmica de fluidos. Estas técnicas têm sido ultimamente propostas como uma ferramenta confiável para a modelação e simulação da hidrodinâmica e de fenómenos de transferência de massa e calor na otimização de processos [5].

2.2 O Ciclo de Skarstrom

O ciclo de Skarstrom [10] rege o modo de operação de duas colunas adsorventes através da implementação de um ciclo de 4 etapas: pressurização, adsorção, despressurização e regeneração (Figura 3).

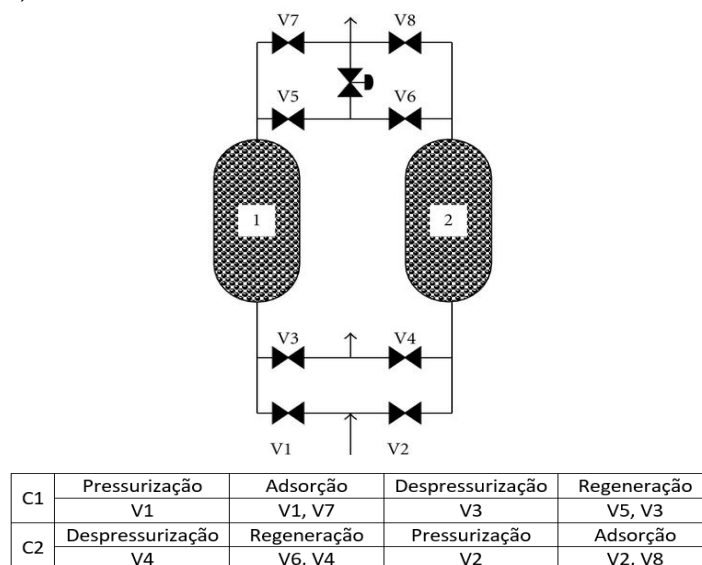


Figura 3 - Esquema de duas colunas de uma unidade de PSA e sequência de válvulas para as diferentes etapas de um ciclo (adaptado de [8]).

Na primeira etapa do processo ocorre a pressurização na coluna 1 (C1), em que a corrente a ser alimentada entra pela base a uma pressão superior à pressão atmosférica. Simultaneamente, a coluna 2 (C2) está na etapa de despressurização a uma pressão relativamente inferior, permitindo assim uma melhor regeneração, em que a corrente gasosa sai pela base da mesma [8].

Posteriormente dá-se início à segunda etapa do processo. A C1 entra na fase de produção e a C2 na fase de purga. Deste modo, durante a fase de produção, a corrente gasosa a ser tratada é alimentada pela base da coluna, obtendo-se como resultado uma corrente já tratada no topo. Durante esta etapa, como referido anteriormente, os componentes com maior afinidade (compostos pesados) ficam retidos no adsorvente. Em contrapartida, os componentes leves, que têm uma menor tendência a serem adsorvidos, são arrastados ao longo da coluna e saem pelo topo da C1. Uma fração desta corrente de saída é alimentada à C2 pelo topo da mesma, forçando a frente de concentração dos compostos retidos a recuar para a base da coluna, regenerando assim a coluna [8].

Quando o adsorvente na C1 está saturado a alimentação direciona-se para a C2. De forma a libertar os componentes pesados na C1, a direção do escoamento inverte-se e a pressão total da coluna reduz-se, libertando-se a corrente para a atmosfera (abertura da válvula V3). Posto isto, o processo entra em fase cíclica, ainda que de forma simétrica. Assim, na 3ª etapa é pressurizada a C2, que previamente havia sido regenerada, contrariamente à C1, que será despressurizada, sucedendo à fase de produção. Na última etapa, a C1 será purgada a baixa pressão, com uma parte proveniente do topo da C2, que se encontra a produzir uma corrente rica no composto pretendido [8].

É importante salientar que quanto maior a quantidade de produto utilizado para purgar a C2 maior a pureza final do produto dado que estão a ser eliminados, com maior eficácia, os componentes pesados que representam impurezas no produto final. No entanto, o aumento da purga afeta diretamente a recuperação do sistema, uma vez que ao limpar a C2 com produto existe um desaproveitamento da corrente final. Assim, é muito importante que haja um compromisso entre recuperação e pureza [14].

2.3 Melhorias ao ciclo de Skarstrom

Em 1963, Norton Berlin propôs um ciclo que acreditava que aumentasse o desempenho do ciclo de Skarstrom defendendo que na etapa de despressurização, além de se perder parte dos componentes leves, é ainda perdida energia mecânica, sendo prejudicial no processo global. Assim, Berlin sugeriu que, entre as etapas de adsorção/regeneração e pressurização/despressurização haja um passo que iguale a pressão de ambas as colunas, sendo

esta etapa designada de equalização de pressão. Deste modo, parte da pressão da C1 é utilizada para pressurizar a C2, quando se encontrar a uma pressão mais alta, e vice-versa [16].

Assim, pelo esquema da Figura 2, após terminado o passo de adsorção na C1, que está a uma pressão mais alta, a C2 acaba a etapa de regeneração e encontra-se a uma pressão mais baixa. Neste momento as válvulas V5 e V6 abrem simultaneamente proporcionando um circuito entre as colunas. Isto significa que parte do gás, que normalmente é perdido na etapa de despressurização, será utilizado para pressurizar a outra coluna havendo uma menor perda do gás purificado, verificando-se uma melhoria na recuperação do produto desejado. O tempo da equalização de pressão é normalmente curto de forma a não perturbar em demasia o equilíbrio dos leitos, garantindo apenas a igualdade aproximada das pressões.

Para além disso, na década de 1980 foi proposta uma melhoria por Russel [30]. A corrente de saída é armazenada num tanque de produto, ou tanque de retro-enchimento, após a etapa de produção. Porém, há uma parte deste volume que é alimentada à coluna que será pressurizada de seguida. Esta corrente é introduzida em contra-corrente no topo da coluna a pressurizar e, apesar de ser idêntico ao que se passa durante a equalização de pressão, tem como principal objetivo assegurar a pureza do produto final [31]. A quantidade de produto retro-alimentada à coluna é adsorvida em primeiro lugar e retarda a adsorção da mistura que será alimentada de seguida.

2.4 Utilização de CFD no estudo da distribuição do escoamento gasoso

A técnica de CFD é uma ferramenta muito útil para visualizar a distribuição do escoamento gasoso uma vez que as simulações apresentam baixos custos, no caso de se utilizar uma licença académica, e são rápidas quando comparadas com trabalhos experimentais, podendo ainda medir várias variáveis ao mesmo tempo. Em suma, as aplicações de CFD em simulações envolvendo processos de adsorção têm aumentado significativamente, bem como em processos químicos, como uma alternativa às técnicas convencionais.

2.5 Dinâmica computacional de fluidos

A dinâmica computacional de fluidos, tal como o nome sugere, consiste na utilização de computadores para resolução de problemas associados ao movimento de fluidos. A técnica de CFD é uma vertente de mecânica de fluidos que prevê o escoamento de fluidos, transporte de massa, transferência de calor, reações químicas, entre outros, através da resolução de equações matemáticas. A metodologia de CFD tem-se tornado cada vez mais apreciada na modelação de colunas de PSA dado ser possível prever o escoamento ao longo do leito de

adsorvente. O programa utilizado na Sysadvance foi o ANSYS Fluent, que dispõe de inúmeros modelos físicos, incluindo modelos de gás ideal e real, parâmetros físicos, modelo de sistema de rotação, combustão, transferência de calor e condições fronteira específicas de escoamento interno e externo. Esta é a ferramenta mais poderosa de CFD permitindo fornecer resultados rápidos e precisos [32, 33].

CFD resolve numericamente as equações de Navier-Stokes através de balanços às espécies envolvidas. A forma diferencial destes balanços é resolvida em cada volume de controlo pelo método de volumes de controlo. Estes volumes de controlo são pequenos volumes que envolvem o escoamento e o somatório destes forma a geometria completa em estudo. O número e tamanho destes volumes de controlo afetam diretamente a precisão dos resultados. Assim, após definidas as condições fronteira, as equações de Navier-Stokes são resolvidas numericamente [34]. Em todos os casos, a solução obtida depende essencialmente da escolha de um modelo geométrico adequado, da qualidade da malha e ainda da seleção de um modelo de turbulência [35].

São inúmeras as vantagens conhecidas com a utilização de ferramentas de CFD dado que as tecnologias computacionais estão-se a tornar cada vez mais acessíveis ao longo dos anos. Para além disso, oferecem informações mais detalhadas sobre o escoamento estudado, com fácil acesso aos resultados de saída. Permitem ainda a rápida mudança de parâmetros a estudar, podendo simular escoamentos com detalhe realístico da geometria em estudo. Há ainda a eventualidade de estudo de fenómenos de risco, tais como explosões e vazamentos de fluidos radioativos [36].

No entanto, é importante salientar que as previsões dadas a partir das simulações CFD nunca são 100 % confiáveis uma vez que os dados de entrada, em muitos casos, são simplificados, sendo alguns na realidade difíceis de prever. Para além disso, a precisão dos resultados está dependente da capacidade da computação disponível [36]. Caso a simulação seja boa, os resultados deverão ser compatíveis com os resultados experimentais (Figura 4).

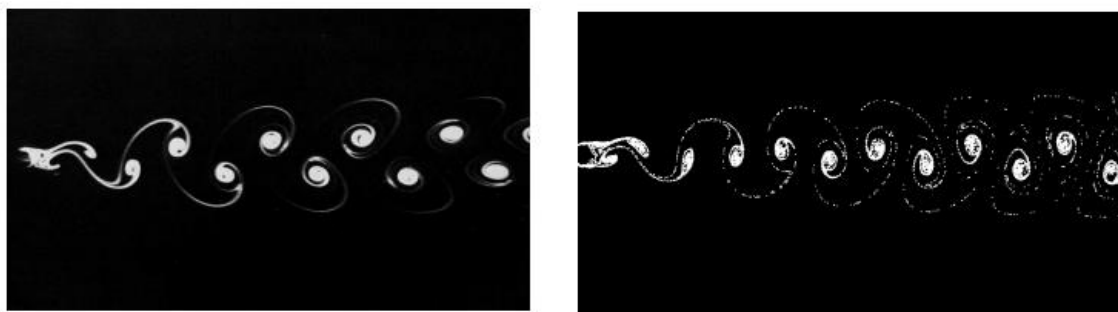


Figura 4 - Escoamento real e escoamento utilizando a metodologia CFD, respetivamente (retirado de [37]).

A dinâmica computacional de fluidos baseia-se em três fundamentos principais:

- 1) Conservação de massa;
- 2) Conservação da quantidade de movimento;
- 3) Conservação de energia.

Estes princípios fundamentais podem ser expressos através de equações matemáticas, que tanto podem estar na forma de equações integrais ou equações diferenciais de derivadas parciais. Através da utilização de CFD é possível substituir os integrais e derivadas parciais nestas equações na forma algébrica discreta que são resolvidas de modo a obterem-se valores para o campo de escoamento com pontos discretos no tempo e/ou espaço. Como é óbvio, o instrumento que permite o crescimento prático de CFD é a elevada capacidade de computação. As soluções de CFD geralmente requerem a manipulação repetitiva de milhares, ou até milhões, de números, algo que seria humanamente impossível sem a ajuda de um computador [38].

2.6 Revisão de métodos computacionais

A técnica mais realista e extensivamente utilizada para analisar o escoamento de um fluido ao longo de uma geometria complexa é o uso de CFD para resolução de um conjunto de equações. A técnica de CFD pode ser dividida em duas abordagens básicas: abordagens contínuas (Elementos Finitos e Volumes Finitos) e o método de Lattice-Boltzman [39].

O método de Lattice-Boltzmann resolve as equações de Navier-Stokes assumindo distribuição de Boltzmann para descrever o movimento de partículas fictícias individuais acopladas a um modelo de colisão para um gás diluído. Num gás, as moléculas movem-se como partículas livres exceto quando colidem com outras partículas. Este método utiliza certas partes das equações de Boltzmann acoplado a um modelo de colisão que descreve o movimento e colisão de partículas.

Os métodos dos volumes finitos resolvem as equações de Navier-Stokes integrando as equações ao longo de um número finito de elementos ou volumes que constituem a malha. Estas equações são não-lineares e apresentam variáveis que nas equações de diferenças finitas são substituídas pelas propriedades do fluido, sendo resolvidas através de um método iterativo. Uma vez obtida a solução, as propriedades do fluido podem ser mostradas em cada célula ou elemento individual para análise [39].

As técnicas de CFD estão muito bem definidas e são um método preciso para representar o comportamento do fluido. A principal limitação está em definir a geometria computacional adequada para o domínio do escoamento em que o fluido pode ser analisado. De forma a se resolverem as equações utilizadas, o domínio do escoamento tem de ser discretizado em

pequenos volumes ou elementos. Este processo designa-se de geração da malha. Caso não seja criada uma malha adequada, surgirão instabilidades quando as equações estiverem a ser resolvidas [39].

2.7 Desenvolvimento histórico de CFD

Entre os séculos XVII e XIX, engenheiros e matemáticos começaram a descrever matematicamente o movimento dos fluidos. Daniel Bernoulli derivou a tão famosa equação de Bernoulli, em 1738, e Leonhard Euler propôs as equações de Euler que descrevem a conservação do momento para o escoamento de fluidos invíscidos e a conservação de massa. No entanto, Claude Navier e o irlandês George Stokes foram os dois grandes contribuidores para o campo de CFD quando introduziram nas equações de Euler o transporte viscoso, resultando nas famosas equações de Navier-Stokes [34].

Foi na década de 1960 que foram desenvolvidos os primeiros métodos CFD com o intuito de resolver equações lineares e com interface bidimensional. Ao longo dos anos, com o aumento da potência dos computadores, viabilizou-se o desenvolvimento de métodos tridimensionais e posteriormente, na década de 1970, a resolução de equações de comportamento não linear. Devido à evolução da informática e com o desenvolvimento de novos programas, CFD é hoje disseminado em diversas áreas, nomeadamente na refrigeração de reatores nucleares e na aerodinâmica e aerotermodinâmica de veículos aeroespaciais [36].

3 Materiais e Métodos

3.1 Métodos Numéricos

3.1.1 Equações fundamentais

As equações fundamentais da dinâmica dos fluidos são as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, como referido na secção anterior. Estas equações são os princípios fundamentais em que as técnicas de CFD se sustentam.

A equação de conservação de massa, eq. (1), define que a massa não pode ser gerada nem destruída. A equação de conservação da quantidade de movimento, eq. (2), estabelece que a mudança da quantidade de movimento é igual à soma das forças numa partícula de fluido sendo descrita pela 2ª lei de Newton. Já a equação da conservação de energia, eq. (3), define que a mudança de energia é equivalente ao resultado da adição de calor e trabalho exercidos sobre uma partícula de fluido, regendo-se pela 1ª lei da termodinâmica. Se o movimento de um fluido for apenas afetado por fenómenos em escala macroscópica e os efeitos moleculares forem desprezados então é considerado como um movimento contínuo. Assim, um elemento fluido representa uma média de um número suficientemente elevado de moléculas num ponto do espaço e tempo [38].

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_f \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = -\frac{1}{\rho_f} \vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \left(\frac{\mu}{\rho_f} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \quad (2)$$

$$\rho_f \left(\frac{\partial H}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} H \right) - \vec{\nabla} \cdot (K_H \vec{\nabla} T) + p \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad (3)$$

Nestas equações são definidos os seguintes operadores:

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \quad (4)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (5)$$

que representam o operador vetorial gradiente e o operador Laplaciano, respetivamente.

Embora o gás utilizado neste estudo, ar, seja compressível, as velocidades de escoamento presentes nas colunas de adsorção são relativamente baixas e assim os efeitos de compressibilidade são pouco prováveis de apresentar uma contribuição no comportamento do fluido. Cengel e Cimbala [40] sugeriram que os efeitos de compressibilidade podem ser

desprezados caso o número de Mach (Ma), um número adimensional, seja $Ma < 0,3$ (a cerca de 100 m/s no ar) e se a variação da densidade, $\Delta\rho$, for inferior a 5 %. O número de Mach define-se como a razão entre a velocidade de um gás e a velocidade do som à temperatura do escoamento [41]. Os números de Mach descritos neste projeto são todos inferiores a $Ma < 0,009$ e, deste modo, os efeitos compressíveis são desprezáveis podendo-se adotar metodologias para fluidos incompressíveis.

Assim, para fluido incompressível com coeficiente de condutividade térmica constante, as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia podem simplificar-se [34]:

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho_f \vec{v}) = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = -\frac{1}{\rho_f} \vec{\nabla} p + \frac{\mu}{\rho_f} \nabla^2 \vec{v} \quad (7)$$

$$\rho_f \left(\frac{\partial H}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} H \right) - K_H (\nabla^2 T) + p \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad (8)$$

O meio poroso é simulado através da adição de um termo às equações de Navier-Stokes. A equação de Navier-Stokes modificada (equação de Cauchy) é descrita por [42]:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = -\frac{1}{\rho_f} \vec{\nabla} p + \frac{\mu}{\rho_f} \nabla^2 \vec{v} + \frac{\vec{F}}{\rho_f} \quad (9)$$

No meio poroso, para além das usuais componentes do termo fonte, serão consideradas mudanças devido à sorção do gás. Deste modo foi introduzido um termo adicional na equação da quantidade de movimento que é dado por [42]:

$$\vec{F} = -\left(\mu \frac{\vec{v}}{\alpha} + C_2 \rho_f |\vec{v}| \vec{v} + S_m \vec{v} \right) \quad (10)$$

Porém, o ANSYS Fluent utiliza apenas os coeficientes α e C_2 , que são provenientes das relações desenvolvidas por Ergun para escoamento em leitos porosos, sendo dados por [42]:

$$\alpha = \frac{d_p^2 \varepsilon_b^3}{150(1-\varepsilon_b)^2} \quad (11)$$

$$C_2 = \frac{1,75(1-\varepsilon_b)}{d_p \varepsilon_b^3} \quad (12)$$

Cada termo da equação e a sua combinação determina o procedimento numérico apropriado.

3.1.2 O método dos Volumes Finitos

O método dos volumes finitos foi desenvolvido pelos investigadores McDonald e McCormack para a solução de equações de Euler bidimensionais dependentes do tempo e mais tarde foi estendida para escoamentos tridimensionais por Inouye e Rizzi [43].

As equações de Navier-Stokes são as principais equações utilizadas no método dos volumes finitos. Estas formam um conjunto de equações não-lineares de derivadas parciais, que são as equações que governam o comportamento de um fluido newtoniano que tanto pode ser um gás como um líquido [39].

Em geometrias complexas, tais como o escoamento através de leitos porosos, as equações tridimensionais de Navier-Stokes não têm uma solução exata (como na maioria dos casos). No entanto, existem formulações para modelar a permeabilidade de meios porosos deduzidas a partir das equações de Navier-Stokes, como referido anteriormente, assumindo-se este meio como sendo homogéneo.

Muitos programas de CFD, tais como o ANSYS Fluent, têm incorporado um solucionador para meios porosos que pode ser integrado numa geometria para simular o efeito do meio poroso. Estes solucionadores não calculam o fluxo micro-estrutural, mas sim o efeito que este meio poroso tem sobre o fluxo externo e definem este meio poroso como sendo um leito com propriedades homogéneas. Para além disso, baseiam-se em coeficientes empíricos tais como parâmetros da Lei de Darcy e equação de Ergun para determinar a queda de pressão provocada pelo meio poroso. Embora limitada, a sua utilização está principalmente focada no efeito de um meio poroso no domínio do escoamento [39].

O ANSYS Fluent determina a solução através da integração das equações do escoamento ao longo de todo o domínio. As propriedades não conhecidas do escoamento são substituídas por aproximações diferenciais finitas que são aproximadas iterativamente segundo um procedimento adequado. O ANSYS Fluent permite ao utilizador usar um código com uma variedade enorme de problemas associados ao escoamento do fluido e à transferência de calor, entre outros. O processo que gera uma solução é descrito resumidamente em três etapas: o pré-processador, o solucionador e o pós-processador [39]. Este método oferece uma grande flexibilidade para lidar com geometrias complexas [34].

3.1.3 Principais elementos de CFD

Em todos os códigos de programas de CFD existem três elementos principais [44]:

- Pré-processador, que é utilizado para introduzir os parâmetros de escoamento e as condições de fronteira do modelo pretendido;
- O solucionador, que é utilizado para resolver as equações do escoamento;

- Pós-processador, que é utilizado para manipular a informação e mostrar os resultados graficamente de forma a facilitar a leitura.

A função de cada um destes três elementos está mais detalhada na Figura 5.

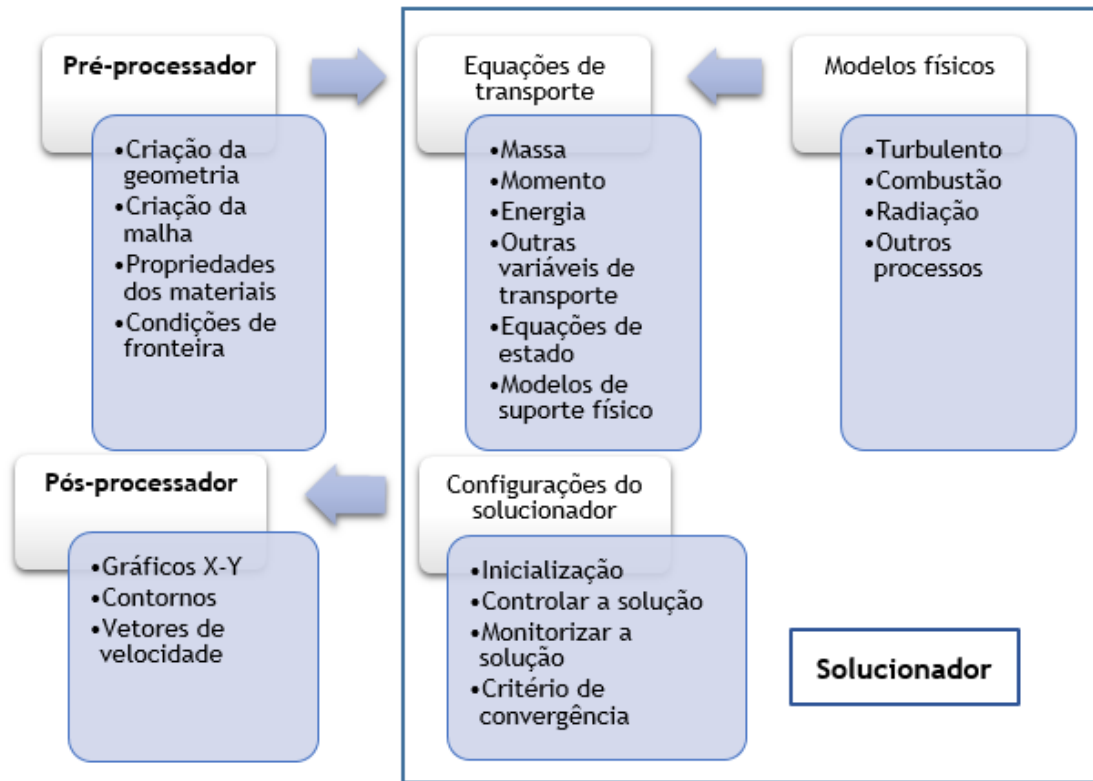


Figura 5 - Funções de inter-conectividade dos três elementos principais de uma análise de CFD (adaptado de [34]).

3.1.3.1 Pré-processador

Todas as tarefas que são feitas antes do processo de solução numérica designam-se de pré-processamento [34]. O primeiro passo na etapa de pré-processamento consiste na definição de uma geometria adequada na qual o problema de escoamento do fluido deve ser avaliado. A definição da geometria pode ser conseguida através da replicação de uma geometria conhecida através do desenho assistido por computador, em inglês *computer aided design* (CAD), no caso de a geometria ser simples. Uma vez criada a geometria pode-se elaborar a malha. Uma malha pode ser descrita como um volume que foi discretizado numa série de volumes ou elementos de menores dimensões. Este processo pode ser simples se as geometrias forem simples. Porém, é mais desafiador quando há um aumento do nível de complexidade da geometria. Uma vez criada a malha definem-se as propriedades do fluido tais como a densidade e viscosidade. As condições de fronteira são aplicadas às faces das células na forma de um fluxo adjacente a uma entrada/saída ou parede tais como temperatura, pressão, perfil de velocidades, entre outros.

Esta é talvez a fase mais crucial já que a determinação de uma resposta realística é altamente dependente da qualidade da malha [39].

3.1.3.2 Solucionador

Quando a malha está completa e todas as outras complicações tiverem sido resolvidas é possível dar-se início à verdadeira parte computacional de CFD em que todas as equações de Navier-Stokes são resolvidas. Nesta etapa, a geometria pode ser importada para o solucionador e a simulação é iniciada. Uma série de etapas devem ser executadas. Inicialmente, as condições de fronteira do sistema precisam de ser definidas, bem como os parâmetros de iteração do processo. Já definidas as condições de fronteira, a simulação pode ser iniciada. Finalmente, a obtenção dos resultados desejados designa-se de pós-processamento no qual o conjunto de dados desejados é retirado dos resultados da simulação [34].

3.1.3.3 Pós-processador

O pós-processamento consiste na visualização dos resultados gerados pela análise de CFD. No caso de a simulação convergir, o último conjunto de resultados é classificado como sendo a solução final. Este conjunto de resultados tem um registo de todos os elementos no modelo, tal como a temperatura, densidades, pressões, velocidades, entre outros. Há várias maneiras de exibir os resultados, logo é importante selecionar a representação dos resultados convenientemente para a comparação desejada. Algumas das opções de visualização disponíveis são os gráficos de contorno e de vetores de velocidade. Os gráficos de contorno disponibilizam um gráfico num conjunto definido de volumes de controlo que pode ser um plano ou um volume de contornos de outra variável. Por exemplo, um plano pode ser definido como um plano de coordenada x constante (plano y - z). É então possível fazer um gráfico de contorno demonstrando os contornos de temperatura apenas neste plano. No mesmo plano pode ainda ser feito um gráfico de contorno de velocidades mostrando as velocidades absolutas do fluido no plano definido. Há ainda outras variáveis que podem ser utilizadas em gráficos de contorno, tais como os componentes turbulentos e a pressão local. Os gráficos de velocidade vetorial fornecem uma visão sobre os padrões de escoamento na geometria geral ou detalhada em locais específicos. A densidade e a ampliação dos vetores de velocidade no campo especificado podem ser alteradas manualmente para se obter uma imagem mais idealizada [34].

Para além destes métodos de visualização dos resultados quantitativos, é ainda possível exportar os resultados numéricos de variadas formas. Um dos métodos para exportar os resultados numéricos consiste numa função bidimensional de duas variáveis. Esta função é muito útil quando duas variáveis precisam de ser comparadas [34].

3.1.4 Criação da malha

A malha é constituída por muitas células que apresentam variadas formas e tamanhos. Geralmente estas células são tetraédricas ou cúbicas, embora ultimamente se tenham utilizado outras formas. Estas malhas podem ser classificadas como sendo estruturadas ou não estruturadas (Figura 6) [39].

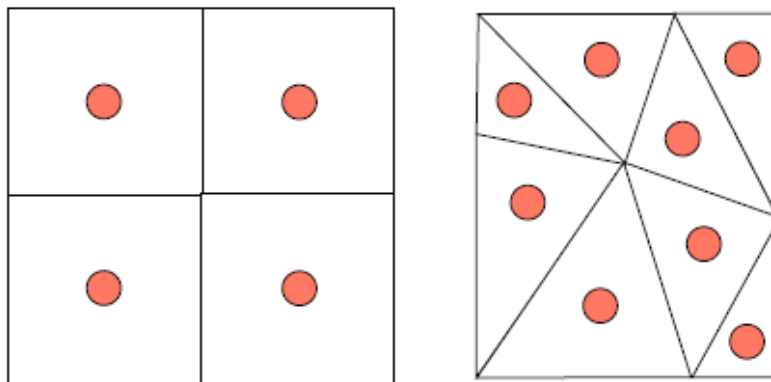


Figura 6 - Exemplo de uma malha estruturada e uma não estruturada, respetivamente (retirado de [39]).

Uma das mais problemáticas e demoradas etapas numa simulação de CFD é a criação da malha que consiste essencialmente na discretização do domínio computacional [45]. A malha estabelece a precisão da simulação e deverá ser selecionada com um detalhe suficiente para descrever o processo com precisão e com um grau de refinamento que permita a conversão para a solução num espaço de tempo aceitável.

Para diferentes tipos de geometria a criação da malha apresenta diferentes obstáculos. No caso da geometria de uma coluna PSA é impossível a criação de uma malha estruturada devido à elevada complexidade. Assim, o principal objetivo baseou-se na eliminação de quaisquer pormenores que não fossem relevantes para o estudo e que afetassem diretamente a qualidade da malha.

O ANSYS Fluent suporta tanto malhas estruturadas como não-estruturadas e não há diferenças na precisão dos resultados entre ambos os tipos de malhas. No entanto, as estruturadas têm a vantagem de o código correr mais rápido [39]. Existem ainda estruturas híbridas em que a malha é constituída por zonas estruturadas e não estruturadas. Uma malha pode ainda ser categorizada como sendo grosseira ou fina. Uma malha grosseira contém uma densidade celular relativamente baixa por unidade de volume (com células grandes), enquanto que uma malha fina contém um domínio de escoamento com maior densidade de células pequenas [39].

A malha, que estabelece a precisão da simulação, deve ser elaborada com detalhes suficientes para descrever com precisão os processos de simulação e que permita uma solução dentro de um período de tempo aceitável. Em suma, a malha determina a criação de uma simulação aceitável.

3.1.5 Discretização

A discretização consiste na transformação de uma distribuição contínua em unidades individuais. O programa ANSYS Fluent permite a escolha do esquema de discretização para o termo convencional de cada equação governante. A discretização das equações governantes pode ser feita considerando a equação de conservação não estacionária do transporte de uma quantidade escalar, ϕ . Isto é demonstrado através da seguinte equação escrita na forma integral para um determinado volume de controlo V [46]:

$$\int_V \frac{\partial \rho_f \phi}{\partial t} dV + \oint \rho_f \phi \vec{v} \cdot d\vec{A} = \oint \Gamma_\phi \vec{\nabla}_\phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_\phi dV \quad (13)$$

Em que ρ_f é a densidade do fluido, \vec{v} é o vetor de velocidade, \vec{A} é o vetor de área superficial, Γ_ϕ é o coeficiente de difusão de ϕ , $\vec{\nabla}_\phi$ é o gradiente de ϕ e S_ϕ é a fonte de ϕ por unidade de volume.

A Equação (13) é aplicada a cada volume de controlo, ou célula, no domínio computacional. A célula bidimensional (Figura 7) é um exemplo de um volume de controlo. A discretização da Equação (13) numa determinada célula é dada por [46]:

$$\frac{\partial \rho_f \phi}{\partial t} V + \sum_f^{N_{faces}} \rho_f \vec{v}_f \phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^{N_{faces}} \Gamma_\phi \vec{\nabla}_{\phi_f} \cdot \vec{A}_f + S_\phi V \quad (14)$$

Em que N_{faces} é o número de faces que envolvem uma célula, ϕ_f é o valor de ϕ que passa por convecção através da face f , $\rho_f \vec{v}_f \cdot \vec{A}_f$ é o fluxo de massa que passa através da face f , \vec{A}_f é o vetor de área da face f e V é o volume da célula.

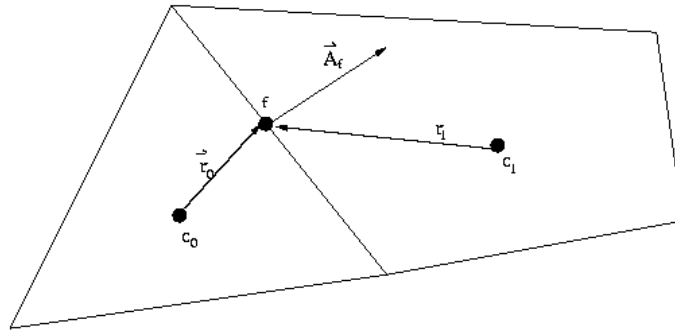


Figura 7 - Volume de controlo utilizado para ilustrar a discretização de uma equação de transporte escalar (retirado de [46]).

3.1.5.1 Discretização espacial

De forma a contruirem-se valores escalares em cada face de célula é necessário uma discretização espacial. Para além disso, a discretização espacial é necessária para calcular as derivadas de velocidade e os termos de difusão. O gradiente de uma determinada variável é utilizado para discretizar o termo de convecção e de difusão nas equações de conservação do escoamento [47].

No ANSYS Fluent estão disponíveis três diferentes esquemas de discretização do gradiente: Green-Gauss Cell-based, Green-Gauss Node-based e Least Squares Cell-based. Neste projeto foi utilizado o Green-Gauss Node-based que calcula o gradiente de um escalar no centro de uma determinada célula, c_0 , de acordo com a seguinte equação discreta:

$$(\vec{\nabla}\phi)_{c0} = \frac{1}{v} \sum_f \bar{\phi}_f \vec{A}_f \quad (15)$$

Em que o somatório é sobre todas as faces que envolvem a célula sendo o seu valor no centróide de face de célula. Para a equação baseada nos nós é calculado da seguinte forma:

$$\bar{\phi}_f = \frac{1}{N_f} \sum_n^{N_f} \bar{\phi}_n \quad (16)$$

Onde N_f é o número de nós numa determinada face.

O valor em cada nó, $\bar{\phi}_n$, é calculado a partir da média ponderada dos valores nas células em torno dos nós. O gradiente baseado em nó é conhecido por ser mais preciso do que o gradiente baseado em células, particularmente em malhas desestruturadas irregulares [47]. Porém, é computacionalmente mais sobrecarregado do que o gradiente baseado em células.

3.1.5.1.1 Esquema numérico para os termos convectivos

Normalmente o ANSYS Fluent armazena os valores de cada escalar nos centros de cada célula (c_0 e c_1 na Figura 7). No entanto, os valores de ϕ_f em cada face são necessários para os termos convencionais na Equação (14) e devem ser interpolados através dos valores centrais de cada célula. Isto é conseguido utilizando um esquema a montante. O ANSYS Fluent permite a escolha de diferentes esquemas a montante: esquema de primeira ordem, esquema de segunda ordem, lei de potência e QUICK.

- **Esquema de primeira ordem a montante**

Quando é desejada uma precisão de primeira ordem, as quantidades nas faces de cada célula são determinadas assumindo que os valores de qualquer variável no centro de célula representam um valor médio e que se mantêm ao longo de toda a célula. Assim, o valor de ϕ_f de cada face é definido como sendo igual ao valor central de ϕ na célula a montante [46].

A desvantagem deste esquema numérico é que o transporte a montante é sobrestimado dando origem a uma difusão numérica. No entanto, se o escoamento estiver alinhado com a malha, a difusão numérica diminui [47].

- **Esquema de segunda ordem a montante**

Quando é desejada uma precisão de segunda ordem, as quantidades de cada face de célula são calculadas utilizando uma abordagem de reconstrução linear multidimensional. Com esta abordagem são obtidas precisões elevadas através da utilização da expansão da série de Taylor. Assim, o valor de ϕ_f de cada face é calculado através da equação [46]:

$$\phi_f = \phi + \vec{\nabla}_\phi \cdot \vec{r} \quad (17)$$

Em que ϕ é o valor escalar centrado de cada célula, $\vec{\nabla}_\phi$ é o seu gradiente na célula a montante e \vec{r} é o vetor de deslocamento do centróide da célula a montante para o centróide da face. A principal desvantagem deste esquema é que não é limitado e, portanto, não é tão estável e robusto como o esquema de primeira ordem a montante.

- **Esquema QUICK**

O esquema QUICK é muito utilizado em malhas quadrilaterais e hexaédricas para calcular um valor de ordem superior da variável convectiva ϕ_f em cada face. Para uma face (Figura 8), se o escoamento ocorrer da esquerda para a direita vem que:

$$\phi_f = \theta \left[\frac{S_d}{S_c+S_d} \phi_P + \frac{S_d}{S_c+S_d} \phi_E \right] + (1 - \theta) \left[\frac{S_u+2S_c}{S_u+S_c} \phi_P - \frac{S_c}{S_u+S_c} \phi_w \right] \quad (18)$$

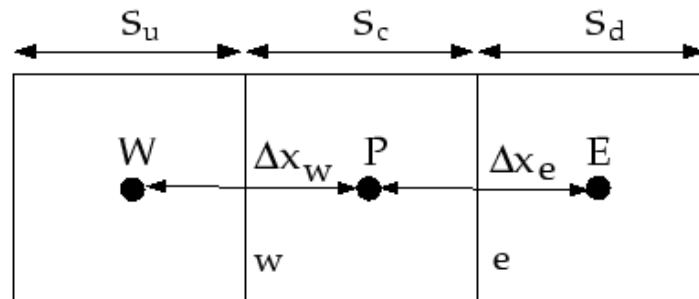


Figura 8 - Volume de controlo unidimensional (retirado de [46]).

Em que para $\theta = 1$ resulta numa interpolação de segunda ordem, enquanto que para $\theta = 0$ resulta num esquema de segunda ordem a montante. O esquema QUICK tradicional é obtido normalmente para $\theta = 1/8$. Este esquema é tipicamente mais preciso em malhas estruturadas alinhadas a montante. No entanto, o ANSYS Fluent permite também a sua utilização em malhas não-estruturadas ou híbridas. Em muitos casos o esquema de discretização de segunda ordem a montante é utilizado em faces de células não-hexaédricas [46].

3.1.6 Solucionador baseado em pressão

O solucionador baseado em pressão utiliza um algoritmo pertencente a uma classe geral de métodos chamada de método de projeção. Neste método, a restrição de conservação de massa (continuidade) do campo de velocidades é conseguida resolvendo uma equação de pressão (ou correção de pressão). A equação de pressão é derivada da continuidade e das equações de quantidade de movimento de tal modo que o campo de velocidades, corrigido pela pressão, satisfaz a continuidade. Dado que as equações governantes são não-lineares e acopladas uma à outra, o processo de solução envolve iterações em que o conjunto inteiro de equações governantes é resolvido repetidamente até à convergência da solução [46].

As práticas relacionadas com a discretização das equações de quantidade de movimento e da continuidade são facilmente descritas considerando-se as equações de continuidade e quantidade de movimento de estado estacionário na forma integral (Equação (1) e (2)) [46].

3.1.6.1 Discretização da equação de quantidade de movimento

O esquema de discretização descrito na secção anterior para equações de transporte escalar é também utilizado na discretização das equações de quantidade de movimento.

Exemplificando, a equação da conservação de quantidade de movimento na direção x pode ser obtida definindo $\phi = u$ [46]:

$$a_p u = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb} + \sum \rho_f A \cdot \hat{i} + S \quad (19)$$

3.1.6.2 Discretização da equação de continuidade

A Equação (6) é integrada ao longo de um volume de controlo (Figura 7) obtendo-se a seguinte equação discreta [46]:

$$\sum_f^{N_{faces}} J_f A_f = 0 \quad (20)$$

Em que J_f é o fluxo de massa através da face f , ρv_n .

De modo a prosseguir, é necessário relacionar os valores faciais de velocidade, \vec{v}_n , com os valores de velocidade armazenados nos centros de cada célula. O valor de velocidade de cada face não é calculado linearmente. Em vez disso, é efetuada uma média ponderada da quantidade de movimento utilizando fatores baseados no coeficiente a_p da Equação (19). Assim, utilizando este procedimento, o fluxo de massa numa determinada face é descrito por [46]:

$$J_f = \rho_f \frac{a_{p,c0} u_{n,c0} + a_{p,c1} u_{n,c1}}{a_{p,c0} + a_{p,c1}} + d_f ((p_{c0} + (\vec{\nabla} p)_{c0} \cdot \vec{r}_0) - (p_{c1} + (\vec{\nabla} p)_{c1} \cdot \vec{r}_1)) = \hat{j}_F + d_f (p_{c0} - p_{c1}) \quad (21)$$

Em que p_{c0} , p_{c1} e $u_{n,c0}$, $u_{n,c1}$ são as pressões e velocidades, respetivamente, ao longo de duas células em ambos os lados de cada face, e J_f contém a influência da velocidade nestas células (Figura 7). O termo d_f é função de \bar{a}_p , média do coeficiente a_p na equação de quantidade de movimento das células em cada lado da face f [46].

3.1.6.3 Acoplamento de velocidade-pressão

Os solucionadores baseados em pressão permitem a resolução de problemas de escoamento tanto de um modo agregado como acoplado. O ANSYS Fluent dispõe vários algoritmos de acoplamento de velocidade-pressão, nomeadamente o SIMPLE, SIMPLEC, PISO e o Coupled [46].

O algoritmo SIMPLE é o algoritmo padrão, no entanto é possível melhorar muitos problemas utilizando o algoritmo SIMPLEC. Para escoamentos que envolvem turbulência e/ou modelos físicos adicionais, por vezes o algoritmo SIMPLEC melhora a convergência [46].

▪ **Algoritmo SIMPLE**

O algoritmo SIMPLE utiliza a relação entre as correções de velocidade e pressão estabelecendo a conservação de massa para obter o campo de pressão. Se a equação de quantidade de movimento for resolvida com um pressuposto campo de pressão p^* , o fluxo em cada face da célula, J_f^* , obtido da Equação (21), não satisfaz a equação da continuidade [46]:

$$J_f^* = \hat{J}_f^* + d_f(p_{c0}^* - p_{c1}^*) \quad (22)$$

Consequentemente, a correção J'_f foi adicionada ao fluxo facial J_f^* do seguinte modo:

$$J_f = J_f^* + J'_f \quad (23)$$

O algoritmo SIMPLE postula que o J'_f seja descrito por:

$$J'_f = d_f(p'_{c0} - p'_{c1}) \quad (24)$$

Em que p' é a correção de pressão de cada célula.

O algoritmo SIMPLE substitui a equação de correção de fluxo (Equações 23 e 24) ao longo das equações discretas da continuidade (Equação (20)) de forma a obter-se a equação discreta para a correção de pressão p' na célula [46]:

$$a_p p' = \sum_{nb} a_{nb} p'_{nb} + b \quad (25)$$

Em que o termo fonte b é o fluxo de massa na célula computacional:

$$b = \sum_f^{N_{faces}} J_f^* A_f \quad (26)$$

Quando obtida a solução, a pressão numa determinada célula e o fluxo facial são corrigidos quando o termo fonte b for o fluxo de massa na célula computacional [46]:

$$p = p^* + \alpha_p p' \quad (27)$$

$$J_f = J_f^* + d_f(p'_{c0} - p'_{c1}) \quad (28)$$

Onde α_p é o fator de sub-relaxamento de pressão. O fluxo facial J_f corrigido satisfaz a equação discreta de continuidade identicamente durante cada iteração.

- **Algoritmo SIMPLEC**

O procedimento do algoritmo SIMPLEC é idêntico ao do SIMPLE. A única diferença baseia-se na expressão utilizada para a correção do fluxo de face, J'_f . Tal como no SIMPLE, a equação de correção pode ser descrita por [46]:

$$J_f = J_f^* + d_f(p'_{c0} - p'_{c1}) \quad (29)$$

No entanto, o coeficiente d_f é redefinido como sendo uma função de $\overline{(a_p - \sum_{nb} a_{nb})}$. A utilização desta correção tem demonstrado uma aceleração na convergência em problemas em que o acoplamento de pressão-velocidade é o principal problema na obtenção de uma solução.

- **Correção de assimetria**

Para malhas com um certo grau de assimetria, a relação entre a correção do fluxo de massa na face da célula e a diferença na correção de pressão nas células adjacentes é muito grosseira. Assim, de modo a corrigir este efeito, recorre-se à correção de assimetria, que diminui significativamente a dificuldade de convergência associada a malhas com um nível elevado de distorção. A correção de assimetria do algoritmo SIMPLEC permite ao ANSYS Fluent obter uma solução de uma malha altamente assimétrica com o mesmo número de iterações exigidas para uma malha mais ortogonal [46].

3.1.7 Modelo de turbulência $k-\varepsilon$

O modelo de $k-\varepsilon$ é um dos modelos de turbulência mais comum, embora não apresente um bom desempenho em casos onde existam grandes gradientes de pressão [48]. Este é um modelo de duas equações, ou seja, inclui duas equações de transporte extra para representar as propriedades turbulentas do escoamento. Isto permite a um modelo de duas equações explicar os efeitos como convecção e difusão de energia turbulenta.

O modelo de turbulência é um procedimento computacional para calcular a viscosidade turbulenta, μ_T , que consiste numa medida local do nível da turbulência e não numa propriedade física do fluido, variando de ponto para ponto e de escoamento para escoamento [49]. Os termos u'_i e u'_j podem ser definidos com base na componente de velocidade em tempo médio [48].

De forma a envolver o efeito do modelo de turbulência nos resultados previstos existem três modelos. Os modelos foram selecionados a partir da família do modelo $k-\varepsilon$ de duas equações, tal como o padrão, o grupo de renormalização, em inglês *renormalization group*

(RNG), e o realizável. O modelo de duas equações de $k-\varepsilon$ consiste numa equação para a energia turbulenta cinética, k , e outra equação para a taxa de dissipação energética, ε , descrito pelas seguintes equações bidimensionais [48]:

$$\frac{\partial(\rho_f k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_f u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho_f \frac{v_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \rho_f (P_k - \varepsilon) \quad (30)$$

$$\frac{\partial(\rho_f \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_f u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho_f \frac{v_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + S_\varepsilon \quad (31)$$

$$\mu_T = \rho_f C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (32)$$

Onde:

$$v_{eff} = \frac{\mu_{eff}}{\rho_f} \quad (33)$$

$$P_k = \nu_T \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (34)$$

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_T \quad (35)$$

O modelo padrão de $k-\varepsilon$ é um modelo semi-empírico baseado nas equações de transporte para a energia cinética turbulenta e a sua taxa de dissipação. À medida que os pontos fortes e fracos do modelo $k-\varepsilon$ foram ficando conhecidos foram introduzidos modelos que melhoraram o seu desempenho, nomeadamente o modelo RNG e o realizável [48].

No modelo RNG $k-\varepsilon$, o efeito da turbulência em pequena-escala é representado por meios de uma função de força aleatória nas equações de Navier-Stokes. O procedimento do modelo RNG remove sistematicamente pequenas escalas de movimento das equações governantes expressando os seus efeitos em termos de escala elevada de movimento e viscosidade modificada [48]. O modelo realizável de $k-\varepsilon$ foi desenvolvido recentemente e contém uma nova formulação para a viscosidade turbulenta e uma nova equação de transporte para a taxa de dissipação. Ambos os modelos RNG e realizável demonstram melhorias substanciais quando comparados ao modelo padrão, em que as características de fluxo incluem a forte racionalização de curvatura, vórtices e rotação [48].

Tal como se verifica nas equações (30) e (31), as relações são equivalentes às equações de transporte gerais com adição do termo S_ε , definido para cada um dos modelos. A Tabela 2 mostra as relações para o termo S_ε para os diferentes modelos de $k-\varepsilon$ [48].

Tabela 2 - Definição das equações da família do modelo de turbulência $k-\varepsilon$ [48].

Modelo	S_ε	Parâmetros
Padrão	$\rho_f \left(C_{\varepsilon 1, P} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2, P} \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon \right)$	$C_{\mu, P} = 0,09; C_{\varepsilon 1, P} = 1,44; C_{\varepsilon 2, P} = 1,92;$ $\sigma_{k, P} = 1; \sigma_{\varepsilon, P} = 1,314$
RNG	$\rho_f \left(C_{\varepsilon 1, RNG} \frac{\varepsilon}{k} P_k - \alpha \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon - C_{\varepsilon 2, RNG} \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon \right)$	$\alpha = C_\mu \eta^3 \frac{1-\eta/\eta_0}{1+\beta\eta^3}; C_{\mu, RNG} = 0,0845;$ $C_{\varepsilon 1, RNG} = 1,42; C_{\varepsilon 2, RNG} = 1,68;$ $\sigma_{k, RNG} = \sigma_{\varepsilon, RNG} = 0,719; \eta_0 = 4,8;$ $\beta = 0,012; \eta = E \frac{k}{\varepsilon}; E^2 = 2E_{ij}E_{ij};$ $E_{ij} = 0,5 \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$
Realizável	$\rho_f \left(C_{\varepsilon 1, Re} E \varepsilon - C_{\varepsilon 2, Re} \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} \right)$	$C_{\varepsilon 1, Re} = \max \left[0,43; \frac{\eta}{\eta+5} \right]; C_{\mu, Re} = 0,09;$ $C_{\varepsilon 2, Re} = 1,9; \sigma_{k, Re} = 1; \sigma_{\varepsilon, Re} = 1,2;$ $\eta = E \frac{k}{\varepsilon}; E^2 = 2E_{ij}E_{ij};$ $E_{ij} = 0,5 \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$

3.1.8 Condições de fronteira

A definição das condições de entrada e saída apresentam uma grande influência nos resultados da simulação e devem ser devidamente escolhidos. Para o modelo realizável de $k-\varepsilon$, a energia turbulenta cinética e a taxa de dissipação energética necessitam de especificações de entrada. Estas quantidades podem ser especificadas em termos de intensidade turbulenta e razão de viscosidade turbulenta (ou escala de comprimento turbulento). A intensidade turbulenta num tubo com um número de Reynolds elevado é descrito por [47]:

$$I = 0,16Re^{-1/8} \quad (36)$$

Em que Re é o número de Reynolds.

A escala de comprimento turbulento porém é descrito por:

$$l = 0,07L \quad (37)$$

Onde L é o diâmetro do tubo de entrada.

3.1.9 Convergência

Uma característica importante a ter em consideração ao realizar simulações de CFD é saber quando a solução correta é obtida, ou seja, quando a solução convergiu e a simulação de CFD pode ser terminada. Uma vez que a solução exata do problema é desconhecida, não é possível a comparação numérica com o valor exato. O ANSYS Fluent utiliza resíduos definidos pelo usuário para parar a iteração, que consiste na medição do erro absoluto. Os resíduos são expressos por [50]:

$$R = \sum_{todas\ as\ células} |\alpha_P \phi_P - \alpha_W \phi_W - \alpha_E \phi_E| \quad (38)$$

Aqui α corresponde à equação de transporte que é resolvida, ϕ é o valor do nó e o índice indica em que nó foram retirados os valores. A Equação (38) representa os resíduos quando o é utilizado um esquema diferencial centrar como esquema de discretização. O cálculo residual é individual para os diferentes esquemas. No ANSYS Fluent, os resíduos são normalizados pelo maior erro durante as primeiras cinco iterações. Os resíduos escalares são descritos por [50]:

$$R^\phi = \frac{R}{\sum_{todas\ as\ células} |\alpha_P \phi_P|} \quad (39)$$

O valor padrão que os resíduos têm de alcançar para uma solução ser considerada convergida é geralmente 10^{-3} . Porém, os resíduos não são suficientes para assegurar a convergência. Para garantir que a solução é precisa, os resíduos devem ser complementados com outras medidas de convergência. Durante a simulação é monitorizada a velocidade média do escoamento para cada iteração. Caso a iteração seja estacionária e a velocidade não flutue, então a simulação assume uma solução estável e pode ser assumida como convergida [47].

3.1.9.1 Melhoria da convergência

Em projetos que envolvam CFD o tempo disponível é frequentemente o fator limitante. Porém, felizmente existem métodos que aumentam a velocidade de convergência. Habitualmente as iterações começam com um esquema robusto, por exemplo de primeira ordem a montante, e mais tarde é mudado para um esquema de ordem superior. Este procedimento é realizado para iniciar os cálculos e para se obter uma boa estimativa dos resíduos. Assim, o esquema de discretização de ordem superior, que geralmente é mais exigente a nível computacional, terá então uma solução para iniciar a convergência [47].

3.2 Configuração do modelo e análise

Todos os modelos foram desenvolvidos pelo ANSYS Workbench 16.2 e simulados utilizando o ANSYS Fluent Academic 16.2. O fluido foi configurado para ser incompressível, newtoniano e num regime de escoamento turbulento. A corrente gasosa utilizada foi ar nas condições padrão. Foi utilizada a aproximação de meio poroso na simulação do escoamento gasoso no leito uma vez que o adsorvente pode ser tratado como um meio poroso. Porém, é importante salientar que não foi considerada a existência do fenómeno de adsorção no leito compactado uma vez que tornaria as simulações mais demoradas, não sendo um fenómeno importante para o estudo em causa. Neste estudo foram feitas as seguintes considerações:

- Processo isotérmico;
- Aplicação da lei dos gases perfeitos;
- Porosidade constante e uniforme.

É ainda importante referir que inicialmente a ideia era incorporar no interior de cada coluna uma chapa com diferentes padrões de perfuração que tem como finalidade a melhor distribuição gasosa. Contudo, não foi possível a adição da chapa uma vez que o número de células total era de cerca de 1500000 e o ANSYS Fluent Academic está limitado a 512000 células. Assim, as simulações foram realizadas apenas com o defletor a diferentes posições e com diferentes diâmetros, tal como representado na Tabela 3, tendo-se feito simulações com todas as configurações possíveis, ou seja, 27 configurações. A posição e o diâmetro do defletor estão em percentagem relativa. A Figura 9 mostra o que representa cada uma das variáveis.

Tabela 3 - Configurações utilizadas no estudo em causa.

Diâmetro coluna, DN (mm)	Posição, POS (%)	Diâmetro defletor, DIAM (%)
1200 / 800 / 300	100 / 75 / 50	120 / 100 / 75

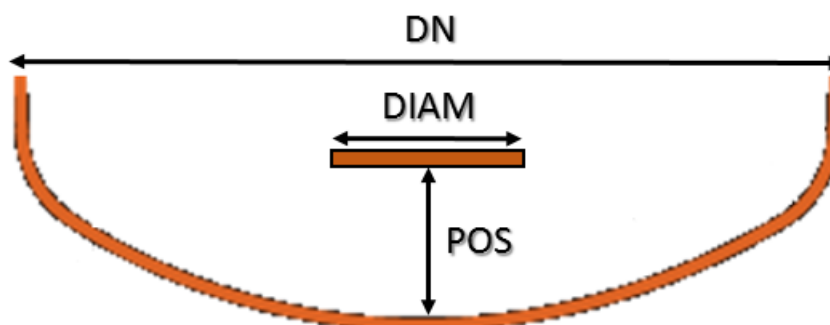


Figura 9 - Esquematização de cada uma das variáveis estudadas no fundo copado.

3.3 Métodos Experimentais

De forma a validar os resultados obtidos a partir das simulações realizadas com o ANSYS Fluent recorreu-se a métodos experimentais com o intuito de se medirem as velocidades em várias cotas radiais nos fundos copados. Para tal utilizou-se um Anemómetro TA300, tal como representado na Figura 10.



Figura 10 - Anemómetro TA300 utilizado para as medições de velocidades nos fundos copados (retirado de [51]).

3.4 Validação das simulações com os resultados experimentais

Neste estudo recorreu-se às técnicas de CFD para determinar a distribuição dos gases numa coluna de PSA para diferentes posições e diâmetros do defletor. Uma das grandes questões na utilização de CFD reside no facto de determinar se as simulações realizadas podem ser consideradas, ou não, uma alternativa às experiências convencionais [52]. Posto isto, foi necessário verificar os resultados obtidos através das simulações de CFD com os resultados obtidos experimentalmente. Porém, é importante salientar que os resultados poderão não ser totalmente concordantes devido à limitação do número de células imposta pela versão académica do ANSYS Fluent, que não permitiu melhorar a qualidade de cada célula que constitui a malha.

3.4.1 Experiências vs simulações

O recurso a CFD permite uma visão sobre os perfis do escoamento que são de difícil ou impossível execução, ou até mesmo caros, utilizando técnicas tradicionais experimentais (Tabela 4).

Tabela 4 - Comparação entre experiências e simulações [53].

Experiências	Simulações
Descrição quantitativa do escoamento utilizando medições: <ul style="list-style-type: none"> • Uma quantidade de cada vez • Limitado a um número de pontos e instantes • Para um modelo de escala laboratorial • Para uma gama limitada de problemas e condições operacionais Fontes de erro: medição, perturbações no escoamento, construção do equipamento	Predição quantitativa do escoamento utilizando CFD: <ul style="list-style-type: none"> • Para todas as quantidades desejadas • Com elevada resolução no tempo e espaço • Para o domínio atual do escoamento • Para qualquer problema virtual e condições de operação realísticas Fontes de erro: modelagem, discretização, implementação, iteração

As técnicas de CFD não substituem as medições experimentais, no entanto, a quantidade de experiências e custos inerentes podem ser reduzidos significativamente. Na Tabela 5 destacam-se as características da utilização de CFD em contraste às experiências.

Tabela 5 - Características da utilização de CFD em contraste às experiências [53].

Experimental	Simulações
Lento	Rápido
Sequencial	Paralelo
Única finalidade	Várias finalidades

É ainda importante referir que a confiabilidade nas simulações obtidas por CFD é superior em escoamentos laminares comparativamente a escoamentos turbulentos. Para além disso é ainda superior para escoamentos monofásicos e para sistemas inertes [53].

4 Resultados e Discussão

4.1 Simulações

Como mencionado na secção 3.2, foram realizadas as simulações no ANSYS Fluent com o defletor a diferentes alturas e com diferentes diâmetros, tal como descrito na Tabela 3, para colunas com diâmetros de 300, 800 e 1200 mm. Todos os modelos utilizados e descritos na secção anterior foram selecionados de forma minuciosa para que pudessem descrever da melhor forma o escoamento.

É ainda importante salientar que a velocidade à entrada de cada coluna foi projetada de modo a que a velocidade no leito não fosse superior a 0,2 m/s, velocidade a partir da qual há o risco de ocorrência de fluidez, algo indesejável num sistema de PSA.

4.1.1 Validação das malhas

Dada a existência de problemas relacionados com a limitação do número de células devido à utilização da versão académica do ANSYS Fluent foi necessário determinar até que ponto o número de células máximo permitido e neste projeto utilizado teria, ou não, resultado em simulações confiáveis. Deste modo, foi feita uma validação das malhas, tendo-se feito simulações, para uma determinada configuração, para diferentes qualidades da malha, e obtiveram-se os resultados reportados na Figura 11. A Q1 refere-se à qualidade da malha utilizada nas simulações. A Q2 corresponde a uma qualidade de malha inferior à Q1, e sucessivamente.

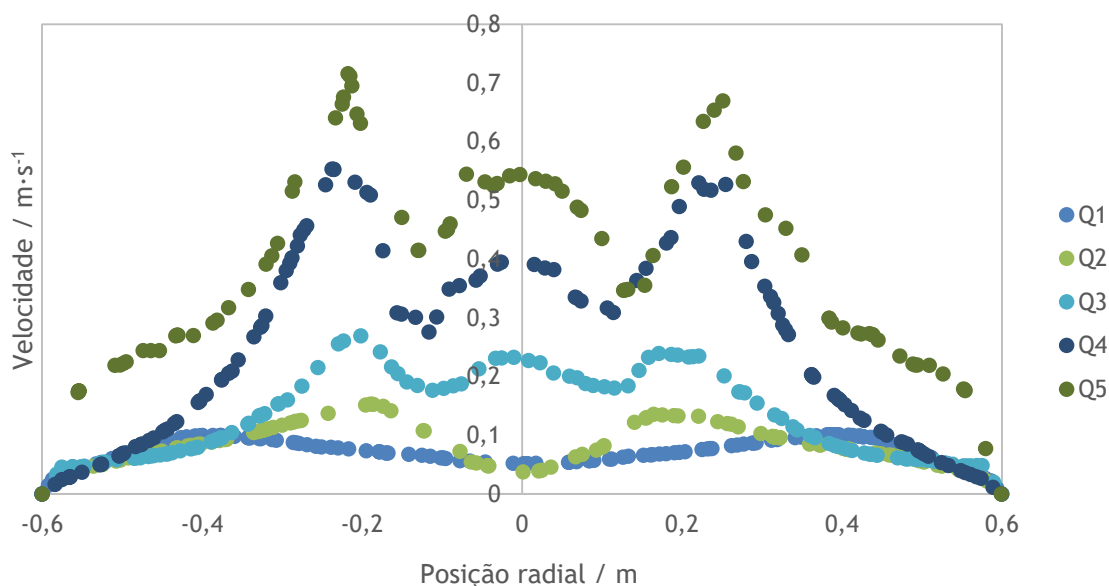


Figura 11 - Perfis de velocidades obtidos para diferentes qualidades de malha para a configuração DN1200_POS75_DIAM75.

Porém, de forma a validar os resultados fez-se a média dos valores obtidos e comparou-se com a velocidade esperada, de 0,0733 m/s, tendo-se determinado também o desvio padrão. A Tabela 6 resume todas as características referentes a cada uma das malhas e respetivas simulações. A qualidade ortogonal caracteriza-se como sendo um parâmetro de avaliação da qualidade de uma malha, variando de 0 a 1, em que 0 é inaceitável e 1 excelente.

Tabela 6 - Características referentes a cada uma das malhas e respetivas simulações.

	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5
Número de células	502066	433490	312642	285469	52258
Qualidade ortogonal média	0,896	0,893	0,888	0,878	0,865
Velocidade média (m/s)	0,0743	0,0801	0,1227	0,2276	0,3752
Desvio em relação à velocidade esperada (%)	1,36	9,20	67,26	210,31	411,60
Desvio padrão (m/s)	0,0232	0,0328	0,0713	0,1640	0,1713

Como se pode observar na Figura 11, há uma tendência para o aumento da irregularidade dos pontos à medida que a qualidade da malha diminui. Verifica-se ainda que, o desvio da velocidade média relativamente à esperada para a malha Q1 é de apenas 1,36 %, sendo um valor baixo comparativamente ao desvio de 411,60 % da Q5. Para além disso, verifica-se também um aumento do desvio padrão dos valores à medida que a qualidade ortogonal média diminui. Contudo, é importante salientar que as medições foram feitas para duas variáveis constantes, y e z, o que justifica o desvio da velocidade média em relação à esperada, não significando o não cumprimento da conservação da massa, dada pela Equação (1). Deste modo, pode-se considerar que os resultados obtidos apresentam um desvio baixo, bem como um desvio padrão reduzido, podendo-se concluir que os resultados obtidos são bons. A Figura 12 mostra ainda a relação gráfica entre o logaritmo do desvio em relação à velocidade esperada e a qualidade ortogonal média para as diferentes qualidades da malha.

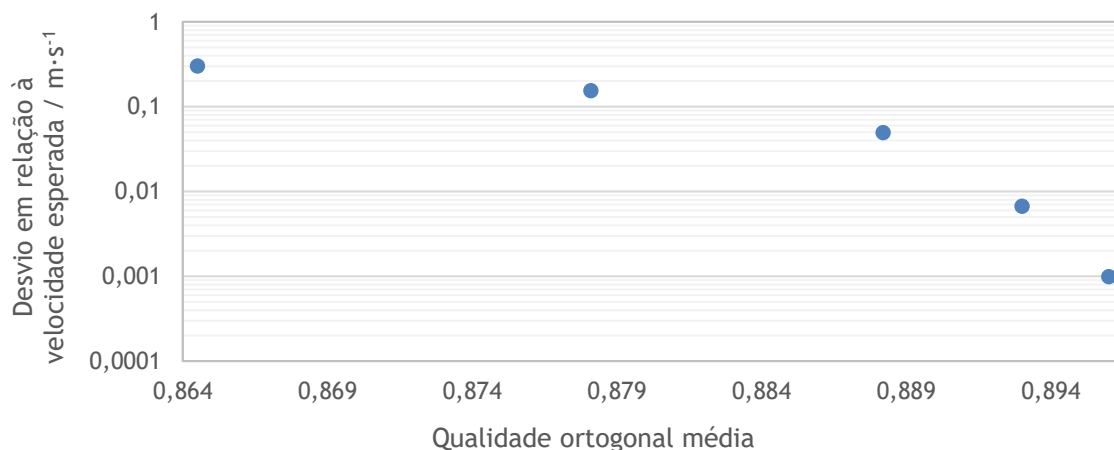


Figura 12 - Logaritmo do desvio em relação à velocidade esperada em função da qualidade ortogonal média.

Pela análise da Figura 12 pode-se verificar que a curva tende para um limite, ou seja, a partir de uma certa qualidade ortogonal média deixa de haver um desvio relativamente à velocidade média, querendo dizer que a precisão dos resultados é boa. Contudo, não foi possível verificar qual o desvio em relação à velocidade esperada para uma qualidade ortogonal média superior dado que a qualidade das malhas utilizadas nas simulações estava já ditada pelo número máximo de células que se podia utilizar na versão académica do ANSYS Fluent. Apesar de os resultados obtidos terem sido considerados confiáveis, pode-se concluir que caso não houvesse limitação quanto ao número de células e quanto ao tempo computacional, os resultados poderiam ser mais precisos.

4.1.2 DN 300

Os perfis de velocidade obtidos nas diferentes configurações para a coluna de diâmetro 300 mm estão representados na Figura 13. Os perfis de velocidade foram medidos numa secção anterior à do leito poroso, a 191 % (percentagem relativa).

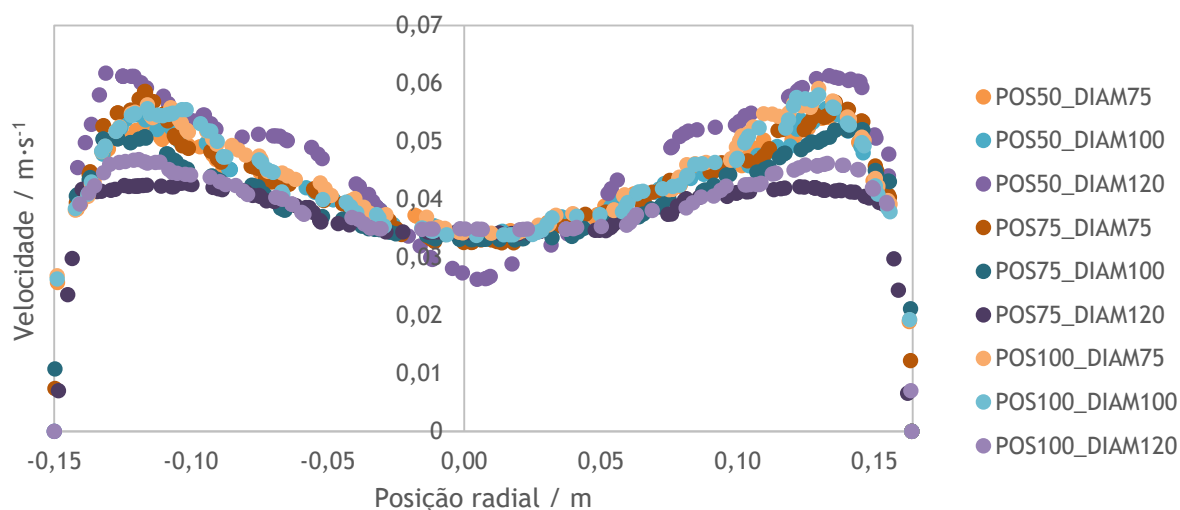


Figura 13 - Perfis de velocidades obtidos nas diferentes configurações para a coluna DN300.

Pela análise da Figura 13 pode-se concluir que as configurações que apresentam um perfil de velocidades mais uniforme são a POS75_DIAM120 e POS100_DIAM120. Por outro lado, a que apresenta uma pior distribuição é a configuração POS50_DIAM120. Todavia, para ter uma análise mais concreta de como varia a distribuição do perfil de velocidades com o diâmetro e posição do defletor foi calculado o desvio padrão para cada perfil obtido. Deste modo, a configuração que apresentar um perfil mais uniforme será a que apresenta um desvio padrão mais baixo. Na Tabela 7 evidenciam-se os desvios padrão referentes a cada um dos perfis de velocidade obtidos.

Tabela 7 - Desvios padrão de cada perfil de velocidades obtidos nas configurações da coluna DN300.

Configuração	Desvio padrão (m/s) ($\times 10^{-3}$)
POS75_DIAM120	7,89
POS100_DIAM120	7,97
POS50_DIAM100	9,20
POS50_DIAM75	9,25
POS75_DIAM100	9,27
POS100_DIAM75	10,2
POS100_DIAM100	10,3
POS75_DIAM75	11,2
POS50_DIAM120	12,7

Tal como se pode verificar pela análise da Tabela 7, as configurações que apresentam uma melhor distribuição são de facto a POS75_DIAM120 e a POS100_DIAM120, dado que são as que apresentam um menor desvio padrão, sendo que a que apresenta uma pior distribuição é a POS50_DIAM120, validando as conclusões retiradas pela análise da Figura 13. Porém as configurações POS50_DIAM100, POS50_DIAM75 e POS75_DIAM100 apresentam também bons resultados. Assim, pode-se concluir que para a coluna DN300, para se poder obter um perfil o mais uniforme possível, não se deve posicionar um defletor de grandes dimensões perto da entrada do gás, nem na parte central um defletor de pequenas dimensões.

Por outro lado, a perda de carga do fluido é maior nos casos em que o defletor se situa mais próximo da entrada. Assim, caso se coloque o defletor perto da entrada é necessário ter atenção que, apesar de melhorar a distribuição do escoamento, pode aumentar a perda de carga.

4.1.3 DN 800

Seguidamente, na Figura 14 apresentam-se os perfis de velocidade obtidos nas diferentes configurações para a coluna de diâmetro 800 mm. Os perfis de velocidade foram medidos numa secção anterior à do leito poroso, a 195 % (percentagem relativa).

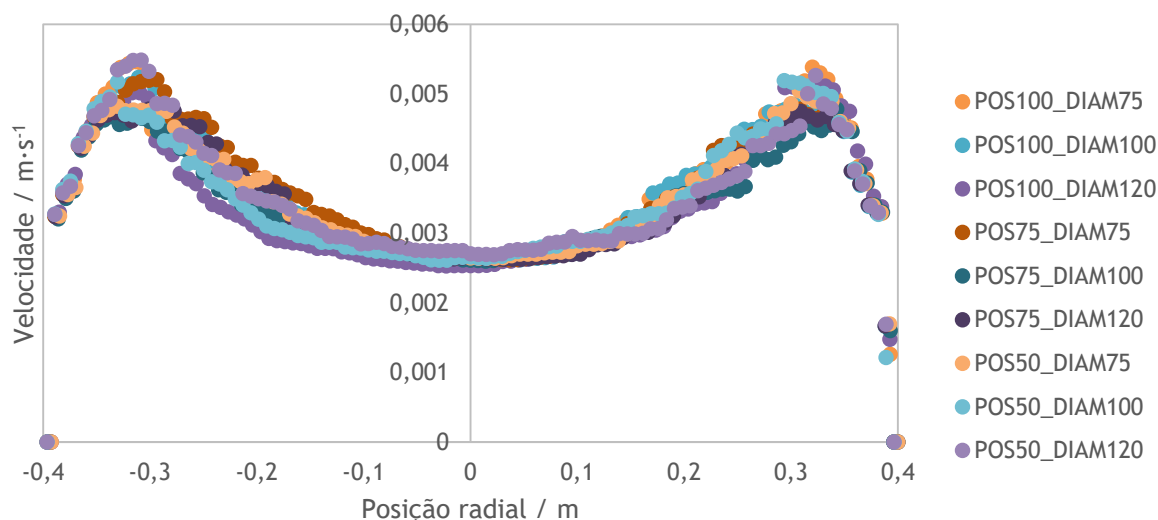


Figura 14 - Perfis de velocidades obtidos nas diferentes configurações para a coluna DN800.

Analisando a Figura 14 não se consegue ter uma boa percepção sobre quais as configurações que apresentam uma melhor ou pior distribuição. Assim, foi calculado também o desvio padrão para cada perfil. A Tabela 8 apresenta os desvios padrão referentes a cada um dos perfis de velocidade obtidos.

Tabela 8 - Desvios padrão de cada perfil de velocidades obtidos nas configurações da coluna DN800.

Configuração	Desvio padrão (m/s) ($\times 10^{-4}$)
POS75_DIAM100	8,37
POS75_DIAM120	9,36
POS50_DIAM75	9,37
POS50_DIAM120	9,56
POS50_DIAM100	9,64
POS75_DIAM75	9,70
POS100_DIAM100	9,78
POS100_DIAM120	9,80
POS100_DIAM75	10,3

Fazendo uma análise à Tabela 8 verifica-se que a configuração que apresenta uma melhor distribuição do perfil de velocidades é a POS75_DIAM100, sendo que a que apresenta uma pior distribuição é a POS100_DIAM75. Contudo, não se verifica uma grande discrepância entre cada um dos resultados obtidos, não sendo possível determinar qual a relação entre o perfil de velocidades e a posição e diâmetro do defletor. Verifica-se apenas que, para a coluna

DN800, posicionar o defletor o mais acima não será uma boa escolha. Todavia, é necessário ter uma especial atenção na medida em que o posicionamento do defletor perto da entrada pode ter consequências na perda de carga do fluido. De forma a se conseguir ter uma melhor percepção de como varia o perfil de velocidades com a posição e diâmetro do defletor, a solução passaria por variar mais a posição do defletor.

4.1.4 DN 1200

Por último, os perfis de velocidade obtidos nas diferentes configurações para a coluna de diâmetro 1200 mm apresentam-se na Figura 15. Os perfis de velocidade foram medidos numa secção anterior à do leito poroso, a 193 % (percentagem relativa).

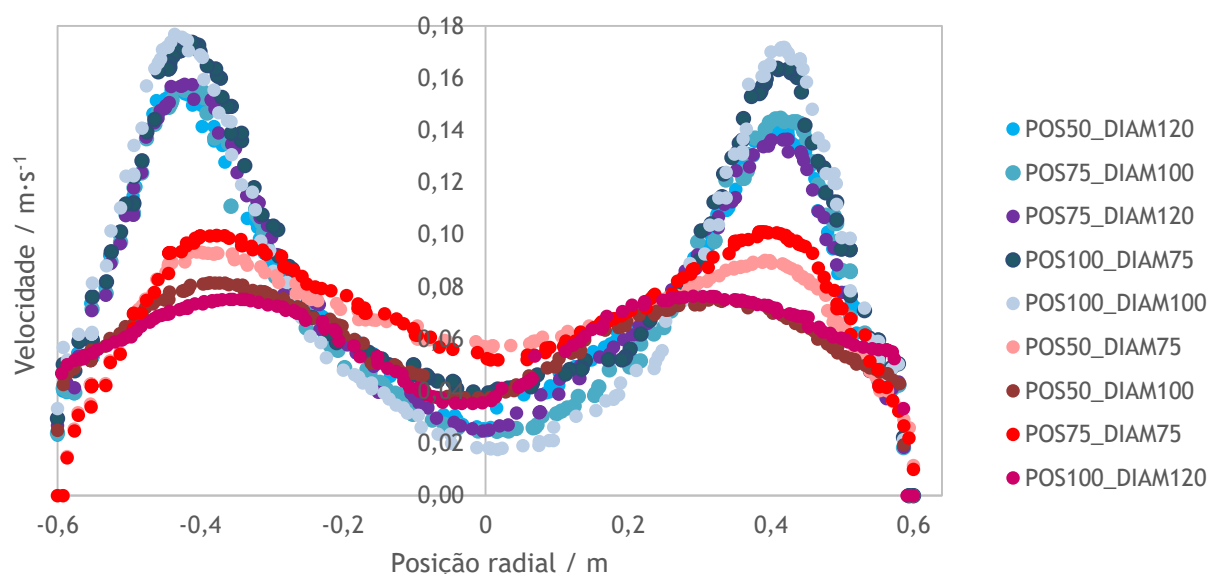


Figura 15 - Perfis de velocidades obtidos nas diferentes configurações para a coluna DN1200.

Fazendo uma análise à Figura 15 é possível verificar-se uma enorme discrepância entre certos perfis de velocidade. Ou seja, posicionar o defletor o mais próximo à entrada do gás e com diâmetro mais pequeno e intermédio, ou posicioná-lo o mais distante e com o diâmetro maior, é possível obter-se um perfil mais uniforme. Pelo contrário, posicioná-lo o mais próximo à entrada e com diâmetro superior, ou o mais distante e com diâmetro inferior, leva a que o perfil de velocidades apresente uma maior variação. Para se ter uma análise mais precisa calculou-se também o desvio padrão para cada perfil obtido. A Tabela 9 apresenta esses desvios padrão referentes a cada um dos perfis de velocidade.

Tabela 9 - Desvios padrão de cada perfil de velocidades obtidos nas configurações da coluna DN1200.

Configuração	Desvio padrão (m/s) ($\times 10^{-2}$)
POS100_DIAM120	1,44
POS50_DIAM100	1,53
POS50_DIAM75	1,98
POS75_DIAM75	2,32
POS50_DIAM120	4,10
POS75_DIAM120	4,25
POS75_DIAM100	4,54
POS100_DIAM75	4,80
POS100_DIAM100	5,45

Analisando a Tabela 9 verifica-se que as configurações que apresentam uma melhor distribuição do perfil de velocidades são de facto a POS100_DIAM120 e a POS50_DIAM100. Contrariamente, as que apresentam uma pior distribuição são a POS100_DIAM100 e a POS100_DIAM75. Conclui-se assim que, de modo a obter-se a melhor distribuição do perfil de velocidades, é recomendado posicionar-se o defletor o mais junto à entrada do gás com diâmetro intermédio ou mais baixo, ou o mais afastado possível com o diâmetro superior, como já foi dito anteriormente. Antagonicamente, não se deve posicionar o defletor o mais junto à entrada com o diâmetro maior, bem como posicioná-lo o mais afastado com diâmetro inferior. Contudo, e como já referido, o posicionamento do defletor perto da entrada do gás pode trazer consequências na perda de carga do fluido. Assim, é importante que haja um compromisso entre a distribuição do escoamento e a perda de carga.

4.2 Experiências

Como mencionado várias vezes ao longo desta dissertação, de modo a validar os resultados obtidos nas simulações realizadas no ANSYS Fluent, fizeram-se testes experimentais de medição de perfis de velocidade em fundos copados de diâmetros de 300 e 800 mm para diferentes posições e diâmetros do defletor, estando estes definidos em percentagem relativa. As medições foram feitas com o anemómetro descrito na secção 3.3, que apresenta uma precisão de $\pm 5\%$ do valor medido [51]. É importante referir que, inicialmente, o objetivo era de se medirem também os perfis de velocidade no fundo copado de diâmetro 1200 mm. Contudo, a unidade chegou tarde e não houve tempo para que tais medições pudessem ter sido

feitas. Na Figura 23 (Anexo 1) pode-se verificar a grandiosidade da unidade que atualmente está a ser produzida na Sysadvance, realçando a importância da realização deste estudo.

4.2.1 DN300

A Figura 16 mostra o fundo copado DN300 utilizado para realizar os testes experimentais de medição dos perfis de velocidade.



Figura 16 - Fundo copado DN300 utilizado para a realização dos testes experimentais.

Na Figura 17 apresentam-se os perfis de velocidade obtidos nas diferentes configurações para a coluna de diâmetro 300 mm. É importante referir que, de modo a complementar os resultados obtidos nas simulações, fez-se variar mais a posição do defletor.

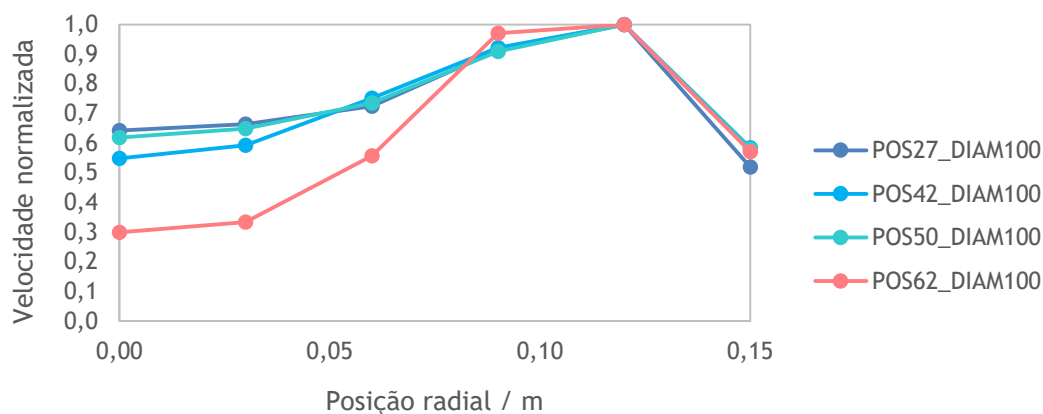


Figura 17 - Perfis de velocidades obtidos experimentalmente nas diferentes configurações para a coluna DN300.

Pela análise da Figura 17 pode-se verificar que, para o mesmo diâmetro do defletor, o que apresenta uma pior distribuição do perfil de velocidades é a posição mais acima. Em contraposição, um posicionamento mais abaixo demonstra perfis de velocidades praticamente sobrepostos. Contudo, apenas pela análise da figura é difícil de concluir qual a configuração que apresenta uma melhor distribuição. Deste modo, foram calculados os desvios padrão para cada perfil obtido (Tabela 10).

Tabela 10 - Desvios padrão de cada perfil de velocidades obtidos experimentalmente para a coluna DN300.

Configuração	Desvio padrão (m/s) ($\times 10^{-2}$)
POS50_DIAM100	2,02
POS42_DIAM100	2,16
POS27_DIAM100	2,29
POS62_DIAM100	4,50

Através da Tabela 10 pode-se verificar que a configuração que apresenta uma melhor distribuição, ou seja, um menor desvio padrão é a POS50_DIAM100. Contudo, não se verifica uma discrepância significativa entre esta configuração e as duas imediatamente seguintes. Pode-se então concluir que é indiferente o posicionamento do defletor entre a posição 27 % e 50 %. Porém, mais uma vez, é preciso ter cuidado com a perda de carga no fluido que se pode fazer sentir quando se coloca o defletor muito próximo da entrada.

4.2.2 DN800

A Figura 18 mostra o fundo copado DN800 utilizado para realizar os testes experimentais de medição dos perfis de velocidade.



Figura 18 - Fundo copado DN800 utilizado para a realização dos testes experimentais.

Os perfis de velocidade obtidos nas diferentes configurações para a coluna de diâmetro 800 mm estão representados na Figura 19. Como os resultados obtidos nas simulações não foram muito conclusivos fez-se variar mais a posição e diâmetro do defletor de modo a complementarem-se todos os resultados obtidos.

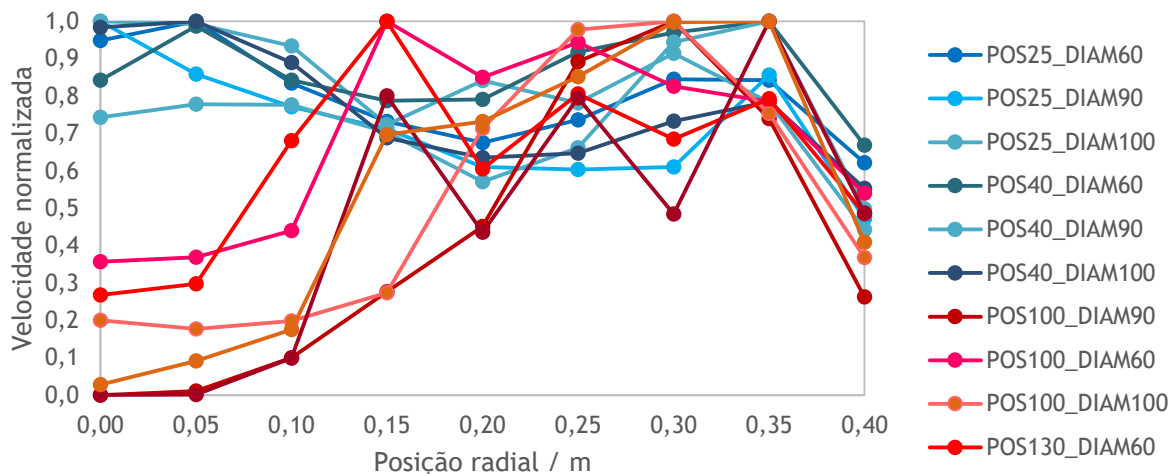


Figura 19 - Perfis de velocidades obtidos experimentalmente nas diferentes configurações para a coluna DN800.

Como se pode verificar, pela análise da Figura 19, há uma evidência imediata na diferença dos perfis de velocidade relativamente à posição do defletor. De facto, a distribuição das velocidades é muito pior na posição de 100 % e 130 %. Esta diferença é ditada maioritariamente pela zona mais central, como era de se esperar, dado que quanto mais acima estiver posicionado o defletor, menos uniformemente se consegue distribuir o fluido. Porém, é difícil concluir apenas pela análise da Figura 19 quais os perfis que apresentam melhor distribuição. Assim, de forma a ter uma análise mais concreta e precisa, foram calculados os desvios padrão para cada perfil obtido (Tabela 11) e fez-se a representação de um gráfico 3D (Anexo 2).

Tabela 11 - Desvios padrão de cada perfil de velocidades obtidos experimentalmente para as posições de 25 % e 40 % para a coluna DN800.

Configuração	Desvio padrão (m/s) ($\times 10^{-3}$)
POS40_DIAM60	9,02
POS25_DIAM60	10,9
POS40_DIAM90	13,4
POS40_DIAM100	14,7
POS25_DIAM90	16,1
POS25_DIAM100	16,3

Analisando a Tabela 11 pode-se verificar que as configurações que apresentam uma distribuição mais uniforme são a POS25_DIAM60, POS40_DIAM60 e a POS40_DIAM90. Em suma, para se obter uma melhor distribuição do perfil de velocidades idealmente utiliza-se um

defletor com um diâmetro pequeno posicionado próximo da entrada do gás tal como se pode verificar na Figura 24 (Anexo 2), tendo atenção na medida em que o posicionamento próximo da entrada poderá suscitar perdas de carga.

4.3 Verificação da influência do caudal no perfil de velocidades

Uma vez que o anemómetro utilizado para medir as velocidades nos fundos copados apresenta uma faixa restrita de medição, o qual tem uma precisão inferior para valores baixos de velocidade, foi necessário aumentar o caudal de entrada relativamente ao utilizado nas simulações. Assim, de modo a verificar qual a influência do caudal no perfil de velocidades obtido fez-se variar a velocidade à entrada para uma determinada configuração utilizando o ANSYS Fluent. Os resultados obtidos estão representados na Figura 20.

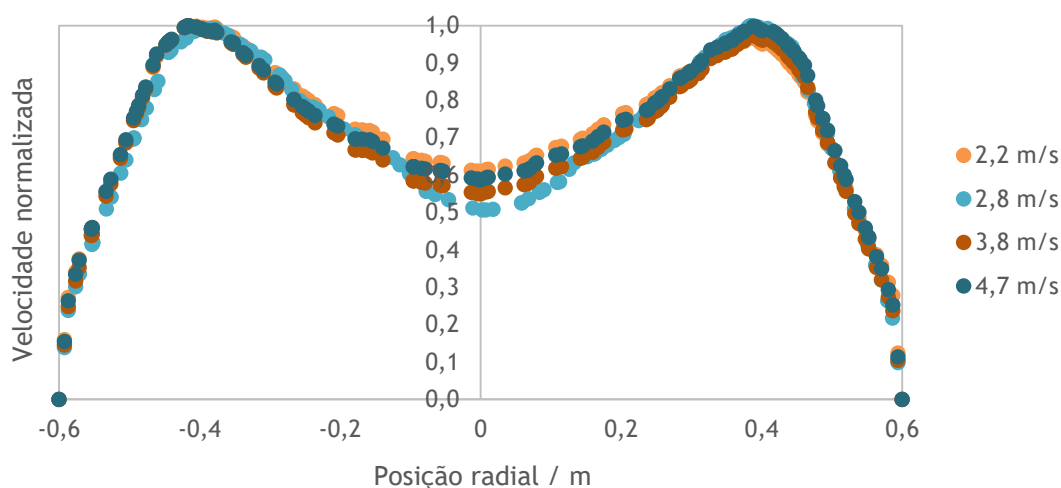


Figura 20 - Comparação dos resultados obtidos na simulação de CFD para diferentes velocidades à entrada para a configuração DN1200_POS50_DIAM75.

Como se pode verificar pela análise da Figura 20, para a gama de caudais estudados, a variação da velocidade à entrada não afeta significativamente o perfil de velocidades obtido. Assim, é possível a comparação entre os resultados obtidos nas simulações e os resultados obtidos experimentalmente (desde que normalizados) ainda que as velocidades à entrada sejam diferentes, pois a diferença de velocidades está dentro da gama de caudais estudados.

4.4 Validação das simulações com os resultados experimentais

Como já foi dito, neste projeto recorreu-se às técnicas de CFD para a determinação da distribuição gasosa numa coluna de PSA. Porém, uma das grandes dúvidas consiste em determinar se as simulações realizadas podem ser consideradas, ou não, uma alternativa às experiências convencionais dado que muitas vezes, com a utilização de CFD, os dados de

entrada são simplificados, além de que a precisão dos resultados está inteiramente dependente da capacidade de computação disponível. Por outro lado, como supracitado, houve a limitação do número de células imposta pelo ANSYS Fluent Academic. Assim, de modo a verificar se os resultados podem substituir as medições experimentais fez-se uma comparação entre os resultados obtidos nas simulações e os resultados obtidos experimentalmente (Figuras 21 e 22). É importante salientar que as comparações foram feitas para a mesma geometria e configuração, ou seja, para a mesma posição e diâmetro do defletor, para além de que o perfil de velocidades foi medido na mesma cota, a 191 % na coluna DN300 e 180 % na coluna DN800.

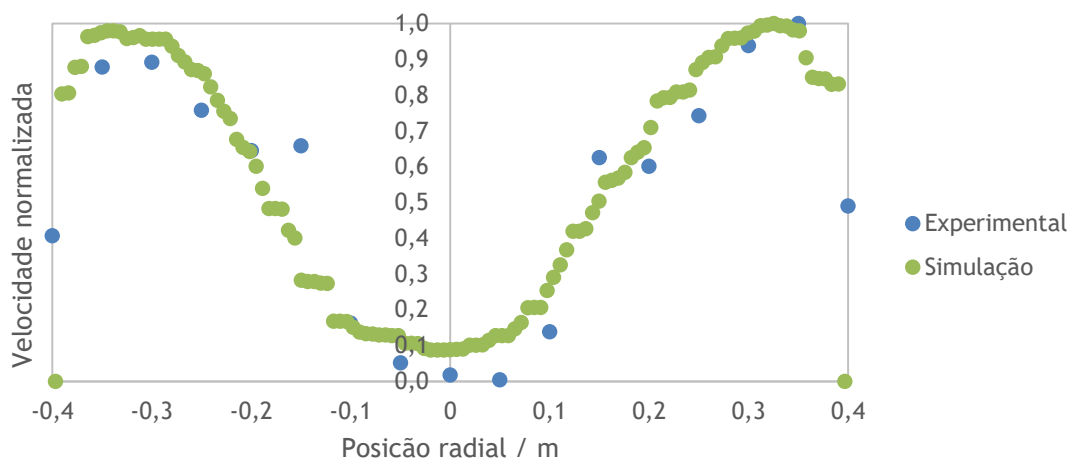


Figura 21 - Comparação dos resultados obtidos na simulação de CFD com os resultados obtidos experimentalmente para a configuração DN800_POS100_DIAM100.

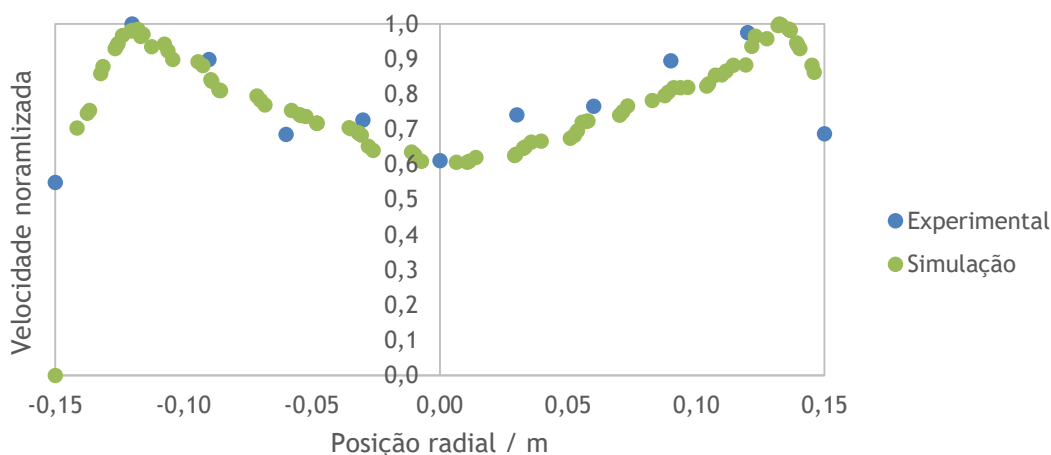


Figura 22 - Comparação dos resultados obtidos na simulação de CFD com os resultados obtidos experimentalmente para a configuração DN300_POS50_DIAM100.

Como se pode verificar pela análise das figuras anteriores, os resultados obtidos através das simulações de CFD são compatíveis com os resultados obtidos experimentalmente, o que indica que os resultados obtidos no ANSYS Fluent são bons e confiáveis. Porém, é importante salientar que a precisão dos resultados numéricos pode não ser suficiente uma vez que a qualidade das malhas poderia ser superior caso não houvesse limitação do número de células.

5 Conclusões

A tecnologia PSA tem-se demonstrado bastante útil, tendo-se verificado um rápido crescimento na utilização desta tecnologia nos últimos anos. O principal motivo para tal facto pode estar relacionado com a versatilidade desta tecnologia, bem como pelo facto de lhe estar associado um baixo consumo energético.

Contudo, à medida que o diâmetro das colunas aumenta, a distribuição do escoamento gasoso piora. Deste modo, inúmeras patentes têm sido registadas com sistemas que melhoram a distribuição gasosa em PSA, sendo que até 1996 tinham sido implementadas quatro abordagens gerais sobre como melhorar esta distribuição.

A técnica de CFD foi a utilizada neste projeto, mais precisamente a ferramenta ANSYS Fluent. Todavia, de modo a validarem-se os resultados obtidos nas simulações, foram executados testes experimentais.

O ANSYS Fluent demonstrou ser uma ferramenta muito útil no estudo de casos como este dado que os resultados experimentais validaram os resultados obtidos nas simulações. Não obstante, a versão utilizada desta ferramenta foi uma versão académica que apresenta uma limitação relativamente ao número de células de que pode ser composta uma malha. Deste modo, os resultados obtidos poderiam ter sido mais precisos e confiáveis caso se pudesse aumentar a qualidade média ortogonal de cada célula.

5.1 Objetivos Atingidos

No início da dissertação foram estabelecidos os principais objetivos:

- Levantamento do estado da arte em mecanismos de distribuição radial do escoamento gasoso;
- Simulação computacional do escoamento e distribuição de gases em colunas de leito fixo;
- Análise de sensibilidade e seleção de mecanismos de distribuição radial mais eficientes;
- Montagem de uma unidade experimental para medição da distribuição radial;
- Validação experimental dos resultados obtidos através da simulação computacional.

Todos os objetivos propostos foram atingidos no decorrer deste trabalho.

5.2 Outros Trabalhos Realizados

A autora realizou também testes experimentais de medição de velocidades num fundo copado de uma coluna de VSA que regressou à Sysadvance para reparação de um problema no motor da bomba de vácuo. Estas medições tinham como objetivo a melhoria da performance da máquina em virtude da melhoria da distribuição gasosa no fundo copado. Deste modo, foram testados vários diâmetros do defletor e foram medidos os perfis de velocidade com o anemómetro TA300. O defletor que proporcionou melhor uniformização do perfil foi o adotado e incorporado na coluna.

5.3 Limitações e Trabalhos Futuros

A autora trabalhou com a versão académica do ANSYS Fluent que, como mencionado várias vezes ao longo deste projeto, apresenta um problema limitante relativamente ao número de células de que pode ser composta cada malha. Assim, a autora considera que caso não houvesse este óbice, a qualidade e confiabilidade dos resultados obtidos poderia ser superior. A autora considera ainda que caso a Sysadvance pretenda a melhoria destes resultados, ou a realização de novos estudos relacionados, as melhores opções seriam a utilização de uma versão não académica do ANSYS Fluent ou a utilização de programas alternativos, como o OpenFOAM.

5.4 Apreciação Final

No decorrer deste trabalho a autora pôde contactar com uma realidade bastante distinta da realidade académica, tendo-lhe proporcionado um crescimento enorme, tanto a nível pessoal como profissional. A autora trabalhou com o ANSYS Workbench para a elaboração das malhas, com que nunca tinha contactado nem nunca tinha tido alguma formação para tal e, portanto, a autora reconhece que teve algumas dificuldades nesta secção. Para além disso, a autora trabalhou também com o ANSYS Fluent para a realização das simulações, sendo que apenas tinha tido contacto com este programa numa unidade curricular para a realização de um trabalho com uma malha bidimensional. Deste modo, a autora reconhece também algumas dificuldades nesta secção, dado que foi necessário determinar quais os modelos e parâmetros que melhor se adequavam a este projeto.

Para além de todas as dificuldades encontradas no decorrer deste projeto, a autora considera o trabalho desenvolvido bastante enriquecedor e desafiante, sendo também bastante engrandecedor o facto de poder ter estado seis meses integrada em ambiente empresarial na Sysadvance e poder ter contribuído para a melhoria da performance das suas máquinas.

6 Referências Bibliográficas

1. Nowobilski, J.J., Gottzmann, C.F., Notaro, F. Adsorption Flow Distribution. U.S. Patent 5,538,544, 1996.
2. Waldron, W.E., Sircar, S. Parametric Study of a Pressure Swing Adsorption Process. *Springer Science+Business Media*. 2000, 6, 179-188.
3. Nowobilski, J.J., Park, O. Perforated Plate Fluid Distributor and its Associated Fixed Bed Vessel. U.S. Patent 5,298,226 1994.
4. Baksh, M.S.A., Neu, B.T., Zadeh, D.H. Flow Distributor for PSA Vessel. U.S. Patente 7,166,151, 2007.
5. Nouh, S.A., Lau, K.K., Shariff, A.M. Modeling and Simulation of Fixed Bed Adsorption Column using Integrated CFD Approach. *Journal of Applied Sciences*. 2010, 10, 3229-3235.
6. Sysadvance - Sistemas de Engenharia S.A. , <http://www.sysadvance.com> (accessed fevereiro 2017).
7. Khajuria, H. Model-based Design, Operation and Control of Pressure Swing Adsorption Systems. Ph.D. Thesis, Imperial College London, London, United Kingdom, 2011.
8. Grande, C.A. Advances in Pressure Swing Adsorption for Gas Separation. *ISRN Chemical Engineering*. 2012, 2012, 1-13.
9. Ferreira, D. High-Purity Oxygen Production by VPSA. Ph.D. Thesis, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Porto, Portugal, 2016.
10. Skarstrom, C.W. Method and Apparatus for Fractionating Gaseous Mixtures by Adsorption. U.S. Patent 2944627 A, 1960.
11. Domine, D., Montgareuil, P.G.D. Process for Separating a Binary Gaseous Mixture by Adsorption. U.S. Patent 3155468 A, 1964.
12. Hasche, R.L., Dargan, W.H. Separation of Gases. U.S. Patent 1794377A, 1931.
13. A., P.G. Method of Making Commercial Hydrogen. U.S. Patent 1,896,916, 1933.
14. Ruthven, D.M., Farooq, S., Knaebel, K.S. *Pressure Swing Adsorption*; VCH Publishers: 1994.
15. Sircar, S. Pressure Swing Adsorption. *Industrial Engineering Chemistry Research*. 2002, 41, 1389-1392.
16. Berlin, N.H. Method for Providing An Oxygen-Enriched Environment. U.S. Patent 3,280,536, 1966.
17. Marsh, W.D., Pramuk, F.S., Hoke, R.C., Skarstrom, C.W. Pressure Equalization Depressurising in Heatless Adsorption. U.S. Patent 3,142,547, 1964.
18. Stark, T.M. Gas Separation by Adsorption Process. U.S. Patent 3,252,268, 1966.
19. Warmuzinski, K. Effect of Pressure Equalization on Power Requirements in PSA Systems. *Chemical Engineering Science*. 2002, 57, 1475-1478.
20. Fuderer, A. Pressure Swing Adsorption With Intermediate Product Recovery. U.S. Patent 4,512,780, 1985.
21. Basmadjian, D., Pogorski, A.L. Process for The Separation of Gases by Adsorption. U.S. Patent 3,279,153, 1966.
22. Ramachandran, R., Dao, L.H., Brooks, B. Method of Producing Unsaturated Hydrocarbons and Separating The Same From Saturated Hydrocarbons. U.S. Patent 5,365,011, 1994.
23. Na, B.K., Lee, H., Koo, K.K., Song, H.K. Effect of Rinse and Recycle Methods on The Pressure Swing Adsorption Process to Recover CO₂ from Power Plant Flue Gas Using Activated Carbon. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. 2002, 41, 5498-5503.
24. Ruthven, D.M. Report of PSA Discussion. *Studies in Surface Science and Catalysis*. 1993, 80, 787-793.
25. Celik, C.E., Smolarek, J. Radial Bed Flow Distributor for Radial Pressure Adsorber Vessel. U.S. Patent 7,128,775, 2006.
26. White, D.H., Barkley, P.G. The Design of Pressure Swing Adsorption Systems. *Chemical Engineering Process*. 1989, 25-33.
27. Richardson, D.R. How to Design Fluid Flow Distributors. *Chemical Engineering Journal*. 1961, 68, 83-86.
28. Sechrist, P.A. Vessel, System and Process for Minimizing Unequal Flow Distribution. U.S. Patent 8,052,777 B2, 2011.
29. Patel, K.M., Russell, B.P., Sechrist, P.A., Vetter, M.J., Chen, H., Chen, P. Adsorption Vessels Having Reduced Void Volumes and Uniforme Flow Distribution. U.S. Patent 20130152795 A1, 2013.

30. K., R.G. Apparatus and Method for Fractionating Air and Other Gaseous Mixtures. U.S. Patent 4,349,357, 1982.
31. Liow, J.L., Kenney, C.N. The Backfill Cycle of The Pressure Swing Adsorption Process. *AlchE Journal*. **1990**, 36, 53-65.
32. Deglon, D.A., Meyer, C.J. CFD Modeling of Stirred Tanks: Numerical Considerations. *Scientific Research*. **2006**, 19, 1059-1068.
33. Al-abidi, A.A., Mat, S.B., Sopian, K., Sulaiman, M.Y., Mohammed, A.T. CFD Applications for Latent Heat Thermal Energy Storage: A Review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. **2013**, 20, 353-363.
34. White, J. CFD Simulation of Silica Gel and Water Adsorbent Beds Used in Adsorption Cooling Systems. Ph.D. Thesis, The University of Birmingham, Birmingham, United Kingdom, 2012.
35. Jafari, A., Zamankhan, P., Mousavi, S.M., Pietarinen, K. Modelling and CFD Simulation of Flow Behaviour and Dispersivity Through Randomly Packed Bed Reactors. *Chemical Engineering Journal*. **2008**, 144, 476-482.
36. Queiroz, N. Tutorial Ansys Workbench 11.0 - Simulação com CFD de escoamento de fluxo ao redor de um edifício de 10 andares. *Report*, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2008.
37. Technische Universität Dortmund - Lecture 1: Introduction to Computational Fluid Dynamics, <http://www.mathematik.uni-dortmund.de> (accessed abril 2017).
38. John D. Anderson, J. *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications* Washington DC, EUA, 1995.
39. Baker, M.J. CFD Simulation of Flow Through Packed Beds Using The Finite Volume Technique. Ph.D. Thesis, University of Exeter, Exeter, England 2011.
40. Cengel, Y.A., Cimbala, J.M. *Fluid Mechanics - Fundamentals and Applications*; McGraw-Hill Education - Europe: London, United States, 2006.
41. Campos, J. *Escoamento de Fluidos Compressíveis*; Apointamentos de Operações de Transferência: Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, 2015.
42. Zheng, X., Liu, Y., Liu, W. Two-Dimensional Modeling of the Transport Phenomena In the Adsorber During Pressure Swing Adsorption Process. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. **2010**, 49, 11814-11824.
43. Tu, J., Yeoh, G., Liu, C. *Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach*; Elsevier: Butterworth-Heinemann, 2012.
44. N., S., V., J. Turbulence Modelling for Wall-bounded Particle-laden Flow with Separation. **2007**, 34, 331-338.
45. Jiyuan Tu, G.H.Y., Liu, C. *Computational Fluid Dynamics A Practical Approach*. *Butterworth Heinemann Publication*. **2008**,
46. ANSYS Fluent - Software Fluent, <https://www.sharcnet.ca/Software/Fluent6/html/ug/node997.htm#face-flux> (accessed abril 2017).
47. Johansson, K. Numerical Simulation of Fuel Filling with Volume of Fluid. Master's Thesis, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden, 2011.
48. Rahimi, M., Mohseni, M. CFD Modeling of The Effect of Absorbent Size on Absorption Performance of a Packed Bed Column. *Korean Journal of Chemical Engineering*. **2007**, 25, 395-401.
49. Ferziger, J.H., Peric, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics* Springer: Berlin Heidelberg, 2002.
50. Andersson, B., Andersson, R., Håkansson, L., Mortensen, M., Sudiyo, R., Wachem, B.v. *Computational Fluid Dynamics for Engineers*; Cambridge University Press: Gothenburg, Sweden, 2011.
51. TROTEC - At Work: Anemómetro TA300 a Fio Quente inclus. Certificado de Calibração, <https://www.trotec24.pt/medidores/fluxo-de-ar/anemometro/anemometro-ta300-a-fio-quente-inclus-certificado-de-calibracao.html> (accessed abril 2017).
52. Calis, H.P.A., Nijenhuis, J., Paikert, B.C., Dautzenberg, F.M., Bleek, C.M.v.d. CFD Modelling and Experimental Validation of Pressure Drop and Flow Profile in a Novel Structured Catalytic Reactor Packing. *Chemical Engineering Science*. **2001**, 56, 1713-1720.
53. Wesseling, P. *Principles of Computational Fluid Dynamics*; Springer: 2001.

Anexo 1 Unidade de PSA DN1200

Neste anexo é apresentada uma imagem da unidade de PSA que atualmente está a ser produzida na Sysadvance com colunas de diâmetro 1200 mm em que os fundos copados seriam utilizados para realização de testes experimentais.



Figura 23 - Unidade de PSA com colunas DN1200 que seria utilizada para realização de testes experimentais.

Anexo 2 Gráfico 3D

Neste anexo é apresentada uma imagem tridimensional dos resultados experimentais obtidos na coluna de diâmetro 800 mm.

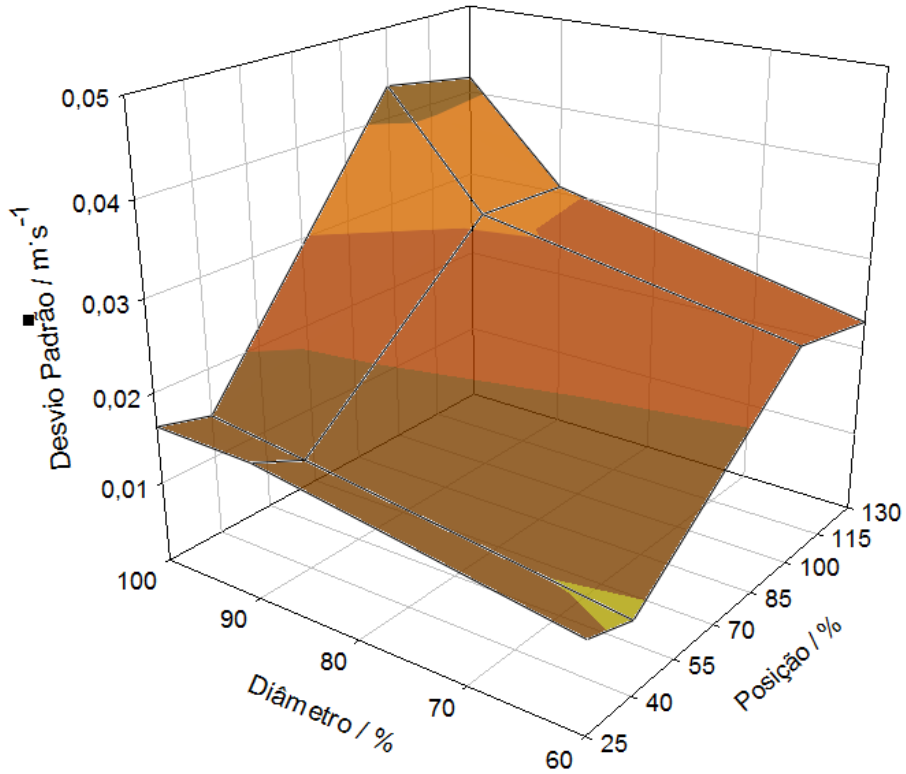


Figura 24 - Representação gráfica do desvio padrão das velocidades para cada configuração experimental (coluna DN800).