

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

**ESTUDO DA FLUIDODINÂMICA DE UM TROCADOR DE CALOR TIPO LEITO
FLUIDIZADO UTILIZADO NO PROCESSO DE CRAQUEAMENTO
CATALÍTICO**

Murilo Lucas Pereira

Trabalho de Graduação apresentado ao
Departamento de Engenharia Química
da Universidade Federal de São Carlos

Orientadora: Profa. **Gabriela Cantarelli Lopes**

São Carlos – SP

2019

BANCA EXAMINADORA

Trabalho de Graduação apresentado no dia 17 de junho de 2019 perante a seguinte banca examinadora:

Orientadora: Gabriela Cantarelli Lopes, DEQ/UFSCar

Convidado: Thiago Faggion de Pádua, DEQ/UFSCar

Professor da Disciplina: José Maria Corrêa Bueno, DEQ/UFSCar

AGRADECIMENTOS

Agradeço inicialmente a meus amigos e família por estarem sempre comigo e me darem o suporte necessário para ter força e determinação em seguir meus projetos.

Às diversas oportunidades que tive na UFSCar de aprender e me tornar alguém melhor.

À professora Gabriela por ser, muito além de uma orientadora, um exemplo de professora, cientista e profissional, exemplo este que procurarei sempre seguir.

Aos demais membros da banca, o professor José Maria e Thiago, por poderem participar desta defesa.

Finalmente agradeço a todas aquelas pessoas que vieram antes de mim e tornaram possível a sua maneira que eu pudesse ter a experiência que tive em meus anos de graduação.

Termino estes agradecimentos com uma de minhas citações favoritas que acredito representar o entusiasmo que devemos ter com aquilo que nos comprometemos e nos engajamos.

“It is not the critic who counts; not the man who points out how the strong man stumbles, or where the doer of deeds could have done them better. The credit belongs to the man who is actually in the arena, whose face is marred by dust and sweat and blood; who strives valiantly; who errs, who comes short again and again, because there is no effort without error and shortcoming; but who does actually strive to do the deeds; who knows great enthusiasms, the great devotions; who spends himself in a worthy cause; who at the best knows in the end the triumph of high achievement, and who at the worst, if he fails, at least fails while daring greatly, so that his place shall never be with those cold and timid souls who neither know victory nor defeat.” – Theodore Roosevelt.

RESUMO

O petróleo e seus derivados possuem relevância primordial no desenvolvimento das atividades humanas modernas como pode-se comprovar, por exemplo, pela sua acentuada participação na matriz energética mundial. No entanto, a natureza não renovável desta matéria prima torna imperativo o uso de técnicas e processos que maximizem a extração de seus derivados mais úteis, sendo o craqueamento catalítico uma delas. Neste, frações pesadas de hidrocarbonetos contidas no gásóleo são transformadas por meio de reações catalíticas em compostos menores e de maior valor agregado. Um dos parâmetros chave para o bom rendimento deste processo é a temperatura inicial do catalisador a qual é regulada através de trocadores de calor do tipo leito fluidizado. Neste contexto, em vista da íntima relação entre as propriedades hidrodinâmicas de um leito de partículas e a transferência de calor por ele assim obtidas, este trabalho almejou estudar através de Fluidodinâmica Computacional (CFD) o comportamento fluidodinâmico de um aparato experimental desenvolvido por YAO et al. (2015a) utilizado para medir o coeficiente de troca térmica entre um leito fluidizado e a parede dos tubos do trocador, de modo que parâmetros característicos deste leito possam ser prontamente previstos e assim usados na melhoria da operação deste equipamento. Para tal, uma malha numérica bidimensional da unidade experimental foi construída utilizando-se o software ICEM-CFD e as condições do experimento replicadas com o uso do ANSYS FLUENT v.14.5. Testando-se diferentes velocidades superficiais do gás foi possível especular a presença de um ponto ótimo que maximizasse a transferência de calor do equipamento, aumentando a fração de sólidos em contato com os tubos do trocador e diminuindo seu tempo de residência (maior movimentação de sólidos). Além disso, comparou-se os resultados da simulação com as previsões de diversas correlações encontradas na literatura, além de dados experimentais pertinentes o que permitiu avaliar características da fluidização de partículas finas, como sua agregação formando os chamados *clusters*. O uso de um diâmetro efetivo na equação de arraste foi proposto de forma a representar mais acuradamente estes agregados e descobriu-se para o caso estudado uma faixa entre 300 e 350 μm como sendo aquela mais se adequava aos dados experimentais de fração de sólidos.

ABSTRACT

Petroleum and its derivatives are of prime importance in the development of modern human activities, as evidenced, for instance, by their strong participation in the world energy matrix. However, the non-renewable nature of this raw material makes it imperative to use techniques and processes that maximize the extraction of its useful products, with catalytic cracking being one of them. In this process, heavy hydrocarbon fractions contained in atmospheric residue oil are transformed by means of catalytic reactions in smaller compounds of greater value. One of the key parameters for the good performance of this process is the initial temperature of the catalyst, which is regulated by fluidized bed heat exchangers. That considered, in view of the intimate relationship between the hydrodynamic properties of a packed bed and its heat transfer, this work aimed to study through Computational Fluid Dynamics (CFD) the fluid dynamics of an experimental apparatus developed by YAO et al. (2015a) used to measure the heat transfer coefficient between a fluidized bed and the wall of the exchanger tubes, so that characteristic parameters of the former can be readily provided and thus used in improving the equipment's operation. To do so, a two-dimensional numerical mesh of the experimental unit was constructed using ICEM-CFD software and the experiment conditions replicated using ANSYS FLUENT v.14.5. By testing different surface gas velocities, it was possible to speculate the presence of an optimum point that would maximize the heat transfer of the equipment, increasing the solids fraction in contact with the exchanger tubes and reducing their residence time (greater solids movement). Finally, the results of the simulation were compared with the predictions of several correlations found in literature, in addition to relevant experimental data, which allowed the evaluation of fluidization characteristics of fine particles, such as their aggregation, forming the so-called clusters. The use of an effective diameter in the drag coefficient equation was proposed in order to represent more accurately these aggregates and a range between 300 and 350 μm was found as the one that fitted better the solids fraction experimental data.

SUMÁRIO

BANCA EXAMINADORA.....	i
AGRADECIMENTOS.....	ii
RESUMO.....	iii
ABSTRACT.....	iv
SUMÁRIO.....	v
LISTA DE FIGURAS.....	vi
LISTA DE TABELAS.....	viii
NOMENCLATURA.....	ix
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1. Motivação.....	1
1.2. Objetivos.....	3
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	5
2.1. Craqueamento catalítico.....	5
2.2. Trocadores de calor para catalisadores.....	7
2.3. Fluidização.....	12
3. MATERIAIS E MÉTODOS.....	16
3.1. Equações de Navier-Stokes.....	16
3.2. Teoria cinética do escoamento granular.....	17
3.3. Arraste.....	18
3.4. Turbulência.....	19
3.5. Geometria simulada e malha numérica.....	21
3.6. Condições de contorno e abordagem numérica.....	24
3.7. Análise dos resultados.....	26
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	30
5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	43
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	45
APÊNDICE A.....	48

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Matriz energética mundial.....	1
Figura 2.1	Fluxograma de uma unidade de FCC.....	5
Figura 2.2	Resfriador de catalisador do tipo <i>up-flow</i> e regenerador.....	8
Figura 2.3	Esquema de um resfriador de catalisador do tipo <i>down-flow</i> (esquerda) e vista interna um destes equipamentos (direita).....	9
Figura 2.4	Curva de fluidização genérica de um leito gás-sólido.....	13
Figura 2.5	Regimes de fluidização típicos de um leito do tipo gás-sólido.....	15
Figura 3.1	Unidade experimental utilizada por YAO et al. (2015a) com detalhe do trocador de calor.....	22
Figura 3.2	Geometria do aparato experimental simulado (esquerda) e detalhe da malha gerada (direita).....	23
Figura 3.3	Distorção de uma região do espaço bidimensional por uma função f , papel do determinante $3 \times 3 \times 3$	24
Figura 3.4	Condições de contorno utilizadas na simulação.....	26
Figura 4.1	Contornos da fração volumétrica de sólidos para o leito A (média temporal).....	31
Figura 4.2	Perfis axiais da fração volumétrica de sólidos para o leito A (média temporal).....	31
Figura 4.3	Pressão do gás ao longo do leito A em 30s de escoamento.....	32
Figura 4.4	Perfis radiais da fração volumétrica de sólidos para o leito A à 0,5 m de altura (média temporal).....	33
Figura 4.5	Mapa da velocidade de sólidos do leito A (média temporal).....	33
Figura 4.6	Contornos da fração volumétrica de sólidos para o leito B (média temporal).....	34
Figura 4.7	Perfis axiais da fração volumétrica de sólidos para o leito B (média temporal).....	35
Figura 4.8	Pressão do gás ao longo do leito B em 30s de escoamento.....	35

Figura 4.9	Perfis radiais da fração volumétrica de sólidos para o leito B à 0,5 m de altura.....	36
Figura 4.10	Mapa da velocidade de sólidos do leito B (média temporal).....	36
Figura 4.11	Mapa de previsão dos regimes de fluidização.....	37
Figura 4.12	Resultados da correlação de Richardson-Zaki para a fração volumétrica de sólidos.....	39
Figura 4.13	Resultados de YAO et al. (2015a) para altura do leito obtidos na unidade experimental estudada.....	42
Figura 4.14	Perfis axiais da fração volumétrica de sólidos para o leito A à 0,4m/s e diferentes diâmetros de partícula.....	42

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Características da malha numérica construída.....	23
Tabela 3.2	Propriedades das fases simuladas.....	25
Tabela 3.3	Coefficientes da correlação de Wen-Yu e variantes para cálculo da velocidade de mínima fluidização.....	28
Tabela 4.1	Velocidades de mínima fluidização e terminais calculadas de acordo com 7 correlações	38
Tabela 4.2	Erro percentual da correlação de Richardson-Zaki com relação aos valores simulados.....	40
Tabela 4.3	Valores da queda de pressão obtidos nas simulações do leito A e leito B.....	40
Tabela 4.4	Valores da queda de pressão do leito A e leito B obtidos pelas correlações.....	40

NOMENCLATURA

Letras latinas

A	Área da seção transversal do leito	m^2
Ar	Número de Arquimedes	-
A_w	Área de troca térmica	m^2
C_1	Constante da correlação de Wen-Yu	-
C_2	Constante da Correlação de Wen-Yu	-
$C_{1\varepsilon}$	Constante do modelo k- ε	-
$C_{2\varepsilon}$	Constante do modelo k- ε	-
C_D	Coefficiente de arraste entre as fases	-
C_μ	Constante do modelo k- ε	-
D	Diâmetro do leito	m
d	Diâmetro	m
e_{ss}	Coefficiente de restituição	-
F_{empuxo}	Empuxo	N
F_{peso}	Força peso	N
G	Produção de energia cinética turbulenta	$kgm^{-1}s^{-3}$
g	Aceleração da gravidade	m^2s^{-2}
$g_{0,ss}$	Função de distribuição radial	-
h_w	Coefficiente de troca térmica	$Wm^{-2}K^{-1}$
\bar{I}	Invariantes de tensão	Pa
k	Energia cinética turbulenta	m^2s^{-2}
L	Altura do leito	m
L_0	Altura do leito com fração de vazios nula	m
m	Massa	kg
n	Índice de Richardson-Zaki	-
ΔP	Queda de pressão do leito	Pa
p	Pressão	Pa
q	Taxa de calor trocado	W
Re	Número de Reynolds	-

T_B	Temperatura do leito	K
T_W	Temperatura da parede	K
t	Tempo	s
\mathbf{u}	Vetor velocidade	ms^{-1}
u	Velocidade escalar	ms^{-1}

Letras gregas

α	Fração volumétrica	-
β	Coefficiente de transferência de quantidade de movimento entre fases	$\text{kgm}^{-3}\text{s}^{-3}$
λ_p	Viscosidade granular	$\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$
ε	Taxa de dissipação turbulenta	m^2s^{-3}
Θ_p	Temperatura granular	m^2s^{-2}
μ	Viscosidade	$\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$
μ_p	Viscosidade de cisalhamento	$\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$
μ_{turb}	Viscosidade turbulenta	$\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$
ρ	Densidade	kgm^{-3}
σ_k	Constante do modelo k- ε	-
σ_ε	Constante do modelo k- ε	-
$\bar{\tau}$	Tensor tensão	Pa
$\overline{\tau}_{\text{turb}}$	Tensor de Reynolds	Pa
φ	Esfericidade	-

Subscritos e Sobrescritos

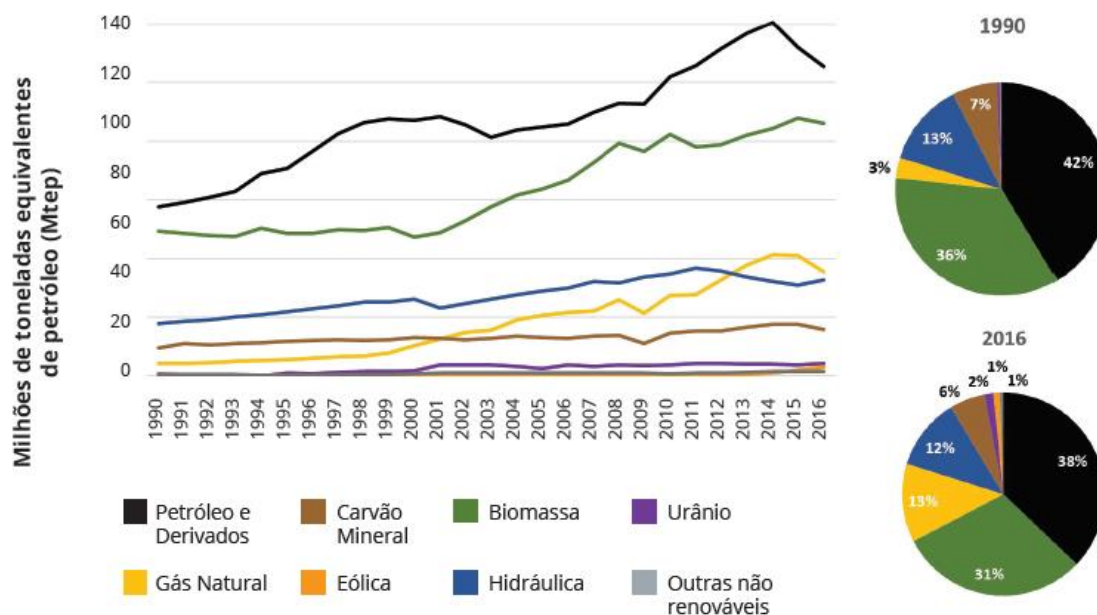
p	Fase particulada (sólida)
f	Fase fluida
m	Mistura
max	Máximo
mf	Mínima fluidização
T	Transposto
t	Terminal

1. INTRODUÇÃO

1.1. Motivação

O petróleo e seus derivados possuem relevância primordial no desenvolvimento das atividades humanas modernas estando presente em diversas indústrias como a de polímeros e também funcionando como combustível e fonte de energia tanto para a atividade industrial quando para a população em geral. A participação significativa do petróleo na matriz energética mundial, a qual é mostrada na Figura 1.1, o torna um produto de valor comercial e estratégico elevado a despeito de sua natureza não renovável. Esta, no entanto, torna imperativo o uso de técnicas e processos que maximizem a extração de produtos úteis do petróleo, tarefa que desde a primeira metade do século XX tem movido grandes esforços por parte da comunidade científica.

Figura 1.1. Matriz energética mundial



Fonte: SEEG, 2018

Um dos principais resultados das pesquisas pelo aumento da rentabilidade desta matéria prima foi a implementação de unidades de craqueamento catalítico (FCC, do inglês *Fluidized Catalitic Cracking*) junto às refinarias de petróleo. Neste processo, frações pesadas contidas no resíduo da destilação atmosférica, chamado gasóleo ou resíduo atmosférico de petróleo (RAT), são transformadas por meio de reações catalíticas em compostos menores e de maior valor agregado. Para assegurar uma elevada conversão nas reações de craqueamento vários parâmetros técnicos e operacionais são constantemente otimizados e mantidos sob controle, sendo um deles a temperatura do catalisador.

Um processo de FCC bem controlado não pode permitir que a temperatura do catalisador fique abaixo da necessidade energética das reações (a maioria delas é endotérmica) diminuindo, assim, a velocidade e a conversão das mesmas, nem muito acima desta necessidade uma vez que esta energia adicional no catalisador levaria a diminuição mais rápida de sua atividade devido a formação de coque. Desta forma é muito comum o uso de trocadores de calor, comumente resfriadores, para regulação da temperatura deste material.

Estes resfriadores de catalisador industriais se valem do escoamento multifásico, mais especificamente do escoamento gás-sólido, para a realização de sua operação. Neste fenômeno, que é característico de vários equipamentos presentes no processo FCC, como o *riser* e o regenerador de catalisador, há o escoamento simultâneo de uma fase fluida gasosa e um fase particulada sólida, o qual tem como principal objetivo intensificar os processos de transferência de calor e massa das partículas ao conferir à estas escoamento e agitação. Atualmente, o projeto e otimização deste tipo de equipamento são feitos baseados em dados obtidos em planta, protótipos ou plantas pilotos, processo este demorado e caro que em geral necessita de modelos numéricos para o tratamento dos dados dada sua complexidade.

Uma alternativa ao uso de dados colhidos *in situ* é a modelagem numérica do escoamento gás-sólido através da Fluidodinâmica Computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*). Esta e a consequente previsão deste tipo de escoamento é complexa devido à grande quantidade de variáveis envolvidas além do número e tipo de equações obtidas, em geral do tipo diferenciais parciais. Tal fato, resulta na exigência de métodos numéricos e processadores poderosos para a resolução de problemas desta natureza. Dito isso, uma vez validado o modelo matemático utilizado e a acurácia e faixa de validade das previsões realizadas, o uso de CFD se torna um aliado poderoso na otimização deste tipo

de equipamento bem como na mudança de parâmetros operacionais do ponto de vista da facilidade e segurança do processo.

Este trabalho anseia assim, em vista da íntima relação entre as propriedades hidrodinâmicas de um leito de partículas e a transferência de calor por ele assim obtidas, estudar através de Fluidodinâmica Computacional (CFD) o comportamento fluidodinâmico de um aparato experimental desenvolvido por YAO et al. (2015a) utilizado para medir o coeficiente de troca térmica entre um leito fluidizado e a parede dos tubos do trocador, de modo que parâmetros característicos deste leito possam ser facilmente previstos e assim usados na melhoria da operação deste equipamento.

A geometria de trocadores de calor possui estruturas internas complexas, com tubos aletados inseridos em seu interior, por exemplo, fator que deve ser levado em consideração ao se construir o modelo para a simulação, uma vez que simplificações podem ser necessárias para tornar viável o uso de CFD. Pensando nisso, uma malha numérica bidimensional da unidade experimental foi construída utilizando-se o software ICEM-CFD e as condições do experimento repetidas com o uso do ANSYS FLUENT v.14.5. Diferentes velocidades superficiais iniciais do gás foram testadas além de diferentes alturas iniciais de leito recheado com partículas de catalisador. Finalmente, comparou-se os resultados da simulação com as previsões de diversas correlações encontradas na literatura, além dos regimes de fluidização esperados para o leito em questão

1.2. Objetivos

O objetivo geral deste trabalho foi o estudo da fluidodinâmica de um aparato experimental do tipo trocador de calor leito fluidizado utilizado para a medição do coeficiente de troca térmica entre o leito de partículas e as paredes dos tubos internos do equipamento com vista a determinar as propriedades de escoamento do mesmo, além de obter os regimes de fluidização nele encontrados e comparar os resultados com correlações de amplo uso na literatura e dados experimentais pertinentes. Já os objetivos específicos envolveram

- Construção de malha bidimensional e uso de CFD para a simulação de um trocador de calor tipo leito fluidizado;
- Avaliação dos regimes de fluidização para diferentes condições de velocidade superficial do gás e altura inicial do leito;

- Determinação de parâmetros de escoamento do leito como fração volumétrica e velocidade dos sólidos e queda de pressão do gás;

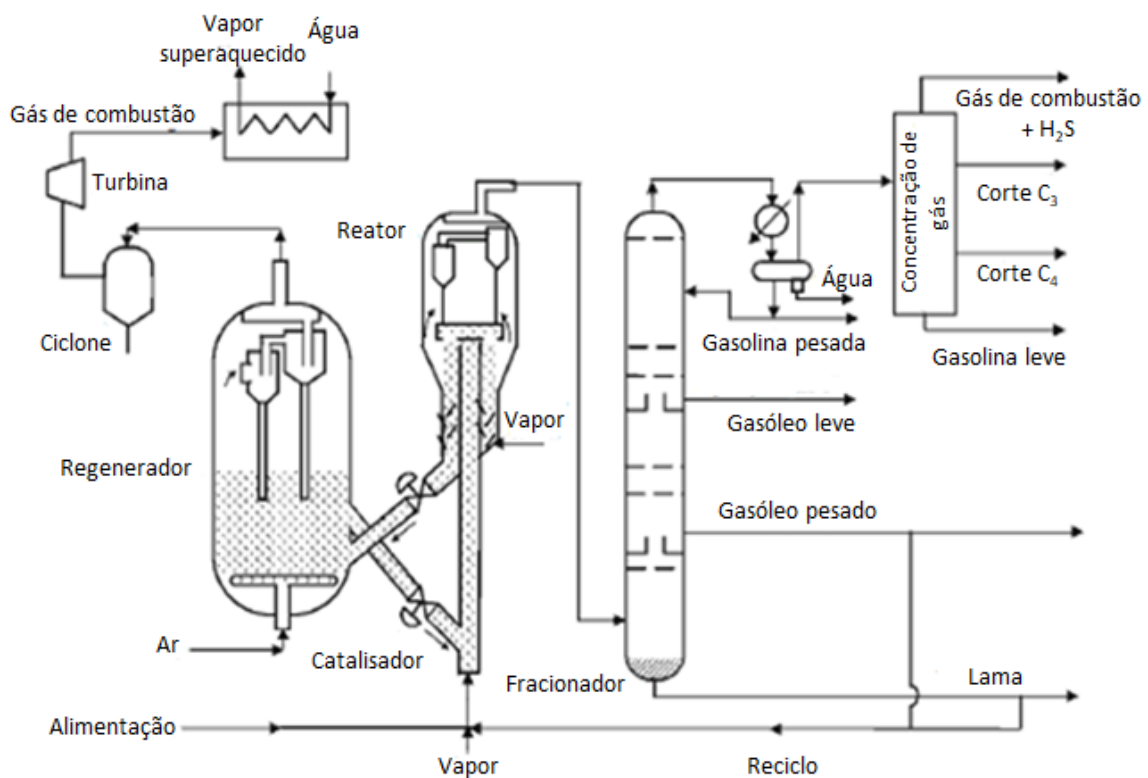
- Comparação dos resultados obtidos com correlações e gráficos da literatura bem como dados experimentais.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Craqueamento catalítico

O craqueamento catalítico do petróleo é o processo através do qual a indústria petrolífera transforma o resíduo obtido na destilação atmosférica, chamado gasóleo ou resíduo atmosférico de petróleo (RAT), o qual possui baixo valor agregado, alto peso molecular e assim alto ponto de ebulição, em produtos mais leves que podem ser utilizados como combustíveis. Neste processo moléculas longas são quebradas em moléculas menores convenientes para a gasolina, o microcatalisador é mantido em regime de fluidização sendo daí originada a sigla FCC (*Fluidized Catalitic Cracking*), mais conhecida do processo (ALZATE-HERNANDEZ, 2016). A Figura 2.1 ilustra um fluxograma típico de uma unidade de FCC a qual é descrita em mais detalhes no texto em seguida

Figura 2.1. Fluxograma de uma unidade de FCC



Fonte: FAHIM et al., 2010

- O gasóleo (carga fresca) produzido em diferentes estágios da refinaria é enviado para um tanque de pressão que providencia um fluxo de alimentação constante para as etapas seguintes. Esse tanque também separa vapores que possam estar contidos na alimentação;

- A alimentação é então aquecida até a temperatura de 260-370°C. Primeiramente aproveita-se o calor de correntes provenientes da coluna fracionadora (final do processo de craqueamento), e depois um forno para atingir a temperatura final. A corrente é então enviada para a o reator (*riser*);

- Vindo do pré-aquecedor, a alimentação entra no *riser* próximo à base, onde entra em contato com o catalisador regenerado. A razão catalisador-óleo (em massa) geralmente está na faixa 4-9, com valor típico próximo a 5,5. O calor absorvido pelo catalisador no regenerador provê a energia necessária para aquecer a alimentação até a temperatura reacional (~500°C), lembrando que as reações são endotérmicas. Os tempos de residência são bastante curtos, de 2 a 10 s. A reação ocorre na fase gasosa e começa assim que a alimentação é vaporizada. A expansão do volume dos vapores gerados é a força motriz para levar o catalisador no fluxo ascendente do *riser*. *Risers* típicos têm 0,6 a 1,8 m de diâmetro de 25 a 30 m de comprimento;

- A saída do catalisador do reator é precedida por um dispositivo de separação inercial para fazer uma primeira separação sólido-gás. A maioria das unidades FCC conta também com ciclones de 1 ou 2 estágios para separação final dos catalisadores, que pode chegar a até 99%;

- Ao sair do *riser*, na seção de retificação, injeta-se vapor para retirar os hidrocarbonetos que ficaram retidos no catalisador;

- A etapa de regeneração de catalisador tem duas funções principais: restaurar a atividade do catalisador mediante a remoção de coque e fornecer calor para a reação. O catalisador que entra no regenerador tem até 2,5% de coque em massa. Ar é alimentado para a combustão do coque e provê velocidade suficiente para manter leito fluidizado no regenerador;

- O propósito da coluna fracionadora é resfriar e recuperar produtos líquidos provenientes dos vapores do reator. A operação é semelhante à de uma coluna de destilação de óleo cru. No entanto, a base contém uma seção própria de resfriamento, onde o óleo de

fundo é retirado, resfriado e realimentado para resfriar e lavar partículas de catalisadores, com alta vazão de reciclo.

A reações químicas pertinentes a este processo são diversas, mas de forma geral olefinas são formadas por craqueamento térmico brando, provocado pelo súbito aquecimento do óleo ao entrar em contato com o catalisador quente o que é seguido pela formação de íons e quebra da dupla ligação nestas mesmas moléculas em um processo reacional em cadeia que leva a formação de olefinas menores. Também ocorrem reações como desalquilação de aromáticos, quebra de cadeias laterais, entre outras (FAHIM et al., 2010). Devido ao fato de destas reações serem endotérmicas, um dos principais parâmetros de operação deste processo é a temperatura. Temperaturas baixas reduzem a eficiências da reação catalítica enquanto temperaturas muito altas propiciam a formação desnecessária de coque reduzindo assim a atividade do catalisador e o rendimento do processo (YAO et al., 2014). Desta forma antes de retornarem ao reator, após a etapa de regeneração, é comum o uso de resfriadores de catalisador para a adequação da temperatura do mesmo, etapa esta que é feita externamente ao regenerador.

2.2. Trocadores de calor para catalisadores

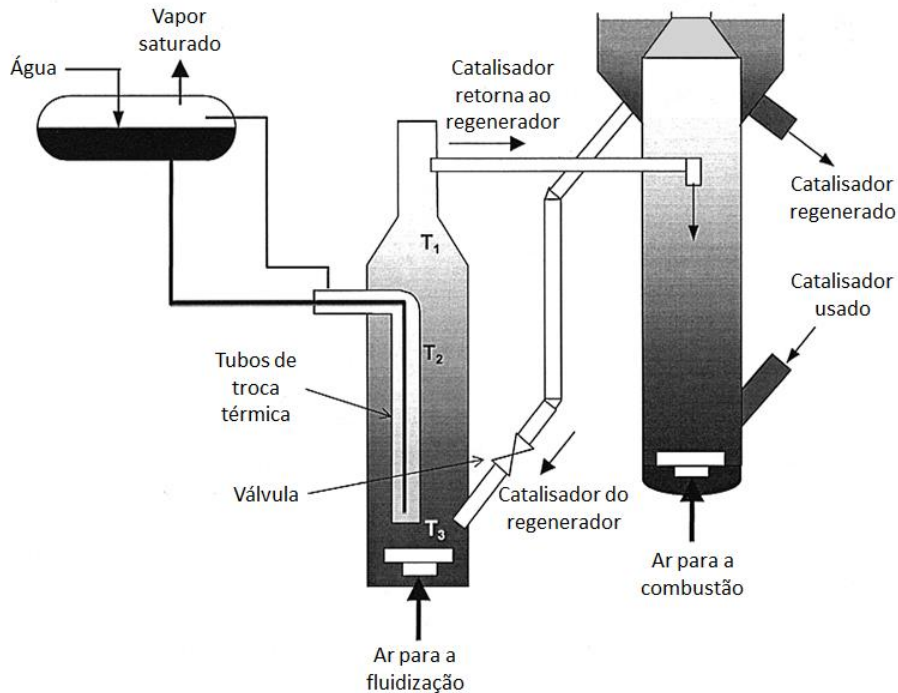
Os trocadores de calor utilizados para o resfriamento das partículas de catalisador são, como mencionado anteriormente, equipamentos internos ou externos ao regenerador e cuja principal função é remover o excesso de calor presente nos sólidos após a eliminação do coque. Resfriadores de catalisador foram desenvolvidos já nos anos 1960, mas apenas nos anos 1980 equipamentos mais estáveis e de fácil controle da taxa de remoção de calor começaram a ser usados largamente pelas refinarias de petróleo (BAI, 2000).

Os primeiros equipamentos desenvolvidos consistiam de tubos de troca térmica inseridos dentro do próprio regenerador. Devido ao baixo controle e flexibilidade da operação dada à área de troca térmica imutável além de problemas com vazamento, que levavam ao desligamento de toda uma unidade de FCC, este tipo de equipamento foi substituído pelos trocadores de calor externos ao regenerador.

A principal geometria utilizada para este equipamento é aquela de um leito fluidizado, onde em uma coluna recheada são colocadas tubulações verticais pelas quais o fluido de resfriamento, em geral a água, escoar. No lado exterior aos tubos (casco) ocorre a fluidização do catalisador que transfere calor de maneira indireta para a água presente no tubo, que pode então usar a energia adquirida em outras partes do processo em uma integração energética

(YAO et al., 2014). A Figura 2.2 mostra como esse equipamento é inserido no processo de FCC.

Figura 2.2. Resfriador de catalisador do tipo *up-flow* e regenerador



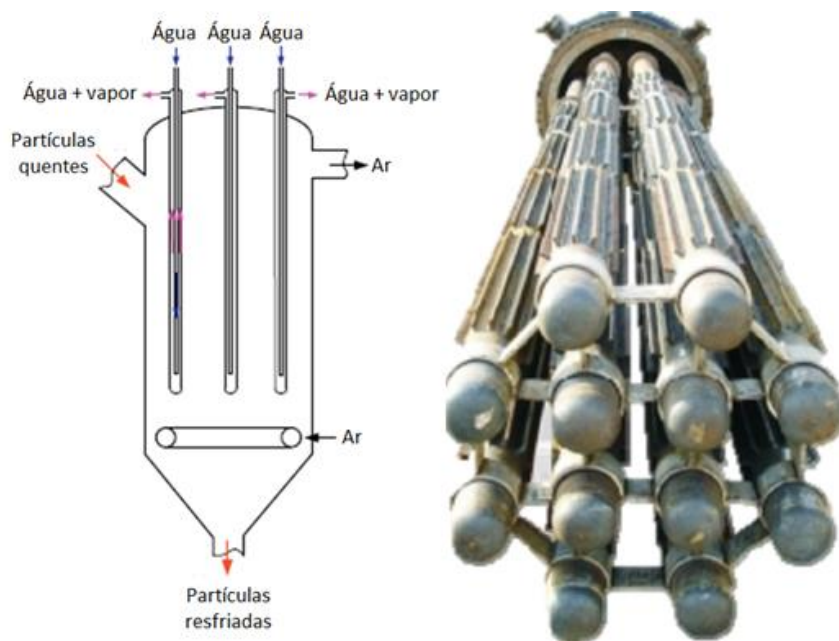
Fonte: BAI, 2000

Três são os principais tipos de modo de operação destes resfriadores, os quais estão relacionados com as posições de entrada e saída dos sólidos bem como a faixa de velocidade de gás empregada (YAO et al., 2014). Nos equipamentos do tipo *up-flow* o catalisador é alimentado na parte de baixo e retirado pela parte de cima, com as velocidades de gás utilizadas nesta operação sendo em geral altas. Já no modo *down-flow* de operação os sólidos entram pela parte de cima do resfriador e são colhidos na parte de baixo com as velocidades de gás utilizadas baixas e regimes de fluidização do tipo borbulhante ou turbulento.

Finalmente, no modo de operação *back-mixing* utiliza-se baixas velocidades de gás e há apenas uma abertura para a entrada e saída de sólidos sendo que o movimento deste se dá apenas pelo mecanismo de mistura dos sólidos. Devido a flexibilidade e segurança da

operação os resfriadores do tipo *down-flow* são os mais utilizados nas unidades de FCC. A Figura 2.3 mostra um esquema deste equipamento além de uma foto do mesmo.

Figura 2.3. Esquema de um resfriador de partículas do tipo *down-flow* (esquerda) e vista interna um destes equipamentos (direita)



Fonte: YAO et al., 2014

Como mencionado anteriormente um resfriador de catalisador consiste basicamente em um leito fluidizado sendo que suas propriedades como capacidade de troca térmica, flexibilidade da operação, etc. estão intimamente relacionadas às características hidrodinâmicas do leito e assim da mistura de sólidos. Problemas como baixa capacidade de transferência de calor, circulação instável de catalisador e erosão nos tubos de troca são comumente reportados, o que indica a necessidade de se aprofundar o conhecimento a respeito do escoamento deste equipamento e assim melhorar seu design e otimização (YAO et al. 2015a).

De forma geral a equação 2.1 é aquela que governa a troca térmica neste tipo de equipamento. A partir dos termos desta equação percebe-se que três são os principais métodos de intensificar a transferência de calor entre a parede dos tubos do trocador e o leito

de partículas: aumento da área de troca térmica, aumento da temperatura diferencial ou aumento do coeficiente de troca térmica.

$$q = h_W A_W (T_B - T_W) \quad (2.1)$$

Os efeitos hidrodinâmicos são contabilizados no coeficiente de troca térmica, h_w , o qual é composto de três partes principais: convecção de gás, convecção de sólidos e radiação. Enquanto os efeitos da radiação são desprezíveis a temperaturas abaixo de 500°C (temperatura típica de um *riser*), os efeitos da convecção da fase particulada são muito mais pronunciados que os da convecção da fase fluida, dada a maior capacidade térmica de sólidos com relação a fluídos em geral (ZHANG et al., 2017). Assim, o estudo da hidrodinâmica de resfriadores de catalisador consiste em primeira análise na avaliação do escoamento de sólidos dentro do equipamento com o foco em tornar este efetivo e estável. Como efetivo entende-se uma alta velocidade de sólidos dentro do equipamento (baixo tempo de residência) aliada a uma alta fração de partículas, como se mostrará em seguida.

Neste sentido, apresenta-se aqui alguns estudos que tentaram descrever ou melhorar a transferência de quantidade de movimento em um resfriador de calor. BAI (2000) investigou o coeficiente de troca térmica em um resfriador de catalisador industrial através de mais de 3000 conjuntos de dados colhidos na planta. Segundo este autor, um parâmetro importante é a vazão mássica de circulação de catalisador que foi favorecida neste estudo para as menores velocidades superficiais de gás e assim maiores densidades aparentes do leito. Importante mencionar que tamanho além das condições de operação deste equipamento industrial são bem diferentes das de um aparato laboratorial e, segundo o autor, as conclusões podem diferir em alguns aspectos daquelas obtidas em bancada.

YAO et al. (2014), propôs a intensificação do coeficiente de troca térmica através do aumento da mistura de sólidos no equipamento e assim a renovação de sólidos na parede dos tubos através do uso de um distribuidor duplo de ar em um aparato experimental que emulava um resfriador de catalisador industrial. Este distribuidor consistia de tubo anular próximo às paredes do leito e um prato perfurado central. Os autores obtiveram aumento do coeficiente de troca térmica, menor vazão de gás utilizada na fluidização e maior flexibilidade na operação com a configuração anular do distribuidor de gás. Para se obter altos valores do coeficiente de troca térmica em resfriadores de catalisador industriais os seguintes fatores foram julgados necessários: distribuição uniforme do gás, baixo efeito de parede, e uma

fuidização controlada. Todos estes fatores, segundo os autores, se devem à seleção apropriada do diâmetro hidráulico e da aletação dos tubos.

Em dois outros estudos publicados em pelo mesmo grupo, configurações diferentes deste equipamento bem como outras metodologias para a medição das variáveis hidrodinâmicas e de transferência de calor foram utilizadas. YAO et al. (2015a) construiu um modelo isotérmico de um trocador de calor industrial de modo a estudar mais fundamentalmente a hidrodinâmica e o mecanismo de troca térmica entre um leito de partículas e a parede dos tubos de troca. Este modelo está descrito com mais detalhes na seção 3.5, mas os autores obtiveram sucesso em medir perfis tanto radiais quanto axiais do coeficiente de troca térmica, bem como parâmetros relevantes da hidrodinâmica superficial do tubo do equipamento.

Os autores encontraram também neste trabalho um aumento do valor do coeficiente de troca térmica com o aumento da velocidade superficial do gás, a qual leva a um decréscimo do tempo de residência médio das partículas. Foram medidos coeficientes de troca térmica maiores para a altura do leito estático de 0,6 m quando comparado ao de 1,1 m, especialmente para as velocidades superficiais de gás menores.

De forma a se estudar mais a fundo a proposta de intensificação do coeficiente de troca térmica de YAO et al. (2014), YAO et al. (2015b) utilizam o mesmo modelo isotérmico anteriormente mencionado e dois esquemas de distribuição de ar diferentes, um composto apenas por um prato perfurado e outro composto de um prato perfurado central e um tubo anular. Esta mesma geometria foi simulada por YAO et al. (2016) utilizando CFD através de uma abordagem Euleriana-Euleriana do escoamento, além de um modelo de Gidaspow modificado para o arraste.

Foi necessário um diâmetro efetivo de 170 μm para que as previsões da simulação representassem mais acuradamente os dados obtidos experimentalmente. Além disso, constatou-se que a diferença de velocidade na alimentação provocada pelos dois tipos de distribuidores (prato perfurado e anel) foi a responsável por induzir uma mistura de sólidos no equipamento e assim aumentar o coeficiente de troca térmica com relação ao uso de um prato perfurado simples como distribuidor.

MONZON (2016) estudou resfriadores de catalisador através de CFD testando duas configurações de distribuição de ar diferentes além da influência dos tubos de troca térmica na fluidização do leito. Como esperado a presença dos tubos de troca térmica afetou

significativamente a movimentação dos sólidos no equipamento sendo que não foram encontradas diferenças na fluidização entre os distribuidores de ar quando não se haviam tubos dentro do equipamento. Além disso, o autor mostrou que a remoção do tubo central do equipamento, que originalmente apresentava 9 tubos de troca térmica, melhorava a distribuição de sólidos dentro do trocador tornando-a mais homogênea e indicando um melhor coeficiente de troca térmica.

O aparato experimental utilizado por YAO et al. (2015a) foi simulado ZHANG et al. (2017). Neste, foi utilizada uma abordagem Lagrangiana da fase particulada e uma malha numérica em três dimensões. Com um diâmetro de partícula de 79,3 μm os autores obtiveram resultados da hidrodinâmica próximos àqueles obtidos experimentalmente, mas com uma altura do leito expandido maior. Além disso, os valores simulados para o coeficiente de troca térmica apesar de seguirem a tendência dos previstos experimentalmente sempre tiveram valores absolutos menores, que segundo os autores se deveu à correlação para parâmetro disponível no software de simulação.

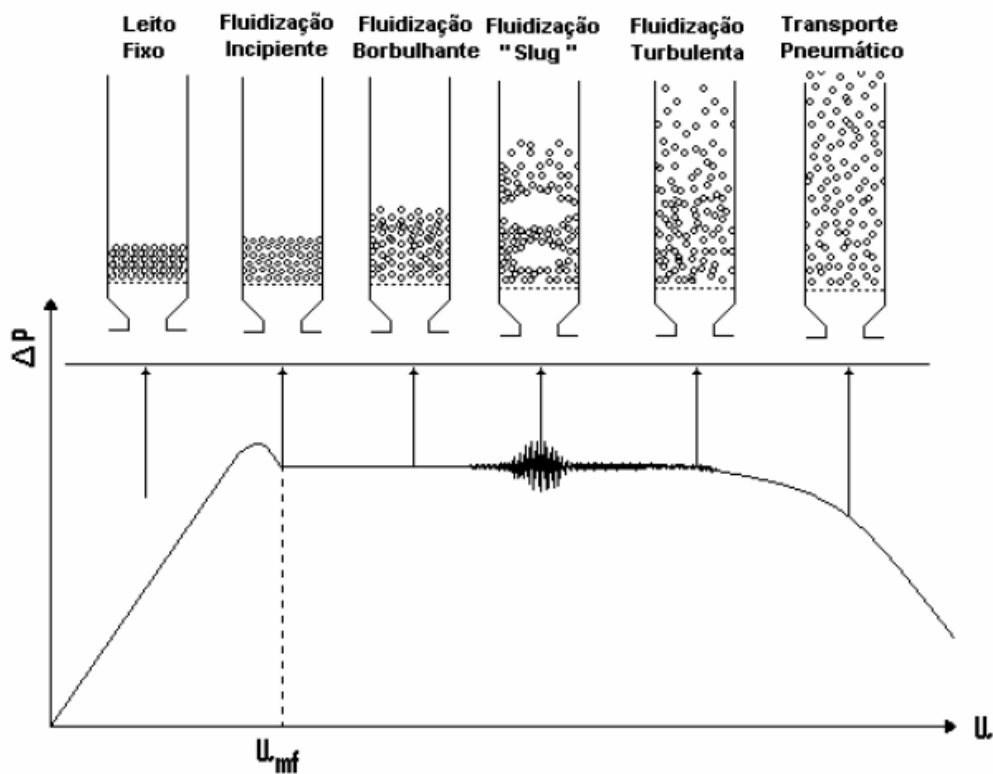
2.3. Fluidização

Um dos principais objetivos de um leito de partículas é promover o contato íntimo entre as fases envolvidas no processo (fase fluida gasosa e/ou líquida com a fase estacionária de partículas ou entre diferentes fases fluidas). O material de empacotamento pode ser: esferas, partículas irregulares, cilindros, entre outros. Em um leito fixo o fluido passa através de um leito de partículas, em baixas velocidades, apenas percolando através dos espaços vazios existentes entre as partículas estacionárias. Para esse tipo de operação, as partículas ficam “fixas” com o aumento da vazão do fluido, e há um aumento da queda de pressão do sistema até se atingir o estado de leito fluidizado (YANG, 2003).

A fluidização é o processo no qual um fluido suspende um leito de partículas sólidas escoando em sentido ascendente por este a uma velocidade tal que as partículas passam a adquirir o comportamento de um fluido (MARINI, 2008). Esta técnica é empregada por exemplo em regeneração de catalisadores, secagem e adsorção de gases. As características da fluidização dependem das partículas empregadas, em que se refere ao formato, material e distribuição. Depende também das propriedades do fluido, como viscosidade e densidade além da configuração operacional do sistema, como vazão, empacotamento e diâmetro do tubo.

Um dos conceitos mais importantes na caracterização do comportamento dos leitos fixo e fluidizado é o de mínima fluidização, em que se convencionou a transição entre os mesmos. Esse ponto (de mínima fluidização) pode ser descrito da seguinte forma: esteja um fluido escoando por um leito de partículas em sentido ascendente a baixas velocidades e as partículas continuam estacionárias; a medida que esta velocidade aumenta, a pressão do fluido diminui aumentando assim a queda de pressão pelo leito sendo que a partir de uma determinada velocidade do fluido, o balanço entre a queda de pressão do fluido vezes a área de seção transversal se iguala a força gravitacional da massa de partículas causando então seu movimento (MARINI, 2008). A esta velocidade dá-se o nome de velocidade de mínima fluidização, a qual é representada por u_{mf} em um gráfico de queda de pressão por velocidade superficial do gás na Figura 2.4.

Figura 2.4. Curva de fluidização genérica de um leito gás-sólido



Fonte: NILTZ et al., 2008

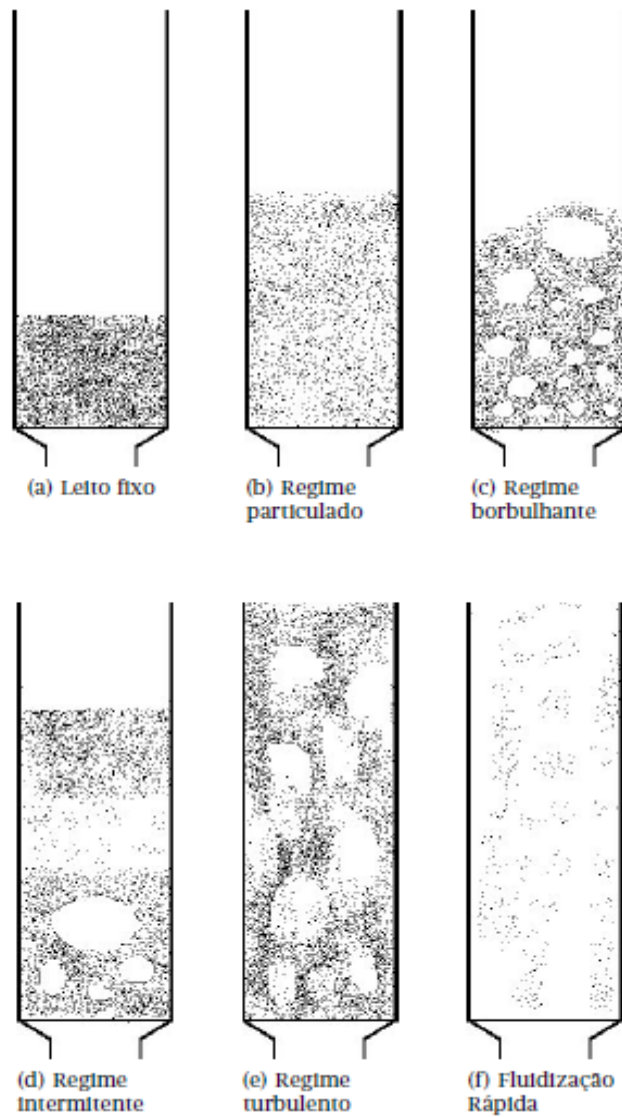
A fluidização pode ser dividida em dois tipos: homogênea (ou particulada) e heterogênea (ou agregativa). No primeiro caso, geralmente o fluido é um líquido e a

expansão do leito ocorre suave e gradativamente, apresentando assim pouca instabilidade. No segundo caso o fluido é geralmente um gás e pode ocorrer formação de bolhas e caminhos preferenciais do fluido. Os diferentes estados que um leito de partículas apresenta durante a fluidização são chamados de regimes de fluidização, os quais podem ser vistos para o caso do escoamento gás-sólido na Figura 2.5.

Na Figura 2.6, “a” e “b” representam, respectivamente, os regimes de leito fixo e fluidização particulada ou homogênea, ambos anteriormente descritos. A fluidização particulada para o caso do escoamento gás-sólido ocorre apenas em situações especiais como a de leitos de partículas finas e gases de densidade elevada ou a alta pressão. O regime de fluidização dito borbulhante (c) é obtido para velocidades acima às de mínima fluidização para a maioria dos leitos do tipo gás-sólido. Neste regime que também é chamado de fluidização agregativa ou heterogênea, há movimentação vigorosa dos sólidos além da formação de instabilidades como o borbulhamento e a canalização de gás, não há, no entanto, uma expansão do volume do leito para além daquele observado na mínima fluidização. Os regimes de fluidização descritos até agora são chamados de leitos de fase densa, uma vez que existe uma clara delimitação espacial definida pela superfície do leito.

Em leitos de altura elevada, a coalescência entre as bolhas de gás pode resultar na formação de agregados de fluido que se espalham por todo o tubo resultando em um regime chamado de intermitente (d). O comportamento da fase sólida neste tipo de fluidização dependerá do diâmetro da partícula fluidizada, com sólidos pequenos tendendo a escoar ao redor das bolhas formadas e sólidos grandes sendo empurrados ascendentemente como um pistão. Finalmente, para velocidades de gás suficientemente altas a velocidade terminal das partículas é excedida e passa-se a ter regimes de fluidização chamados de fase diluída ou fluidizado disperso. Nestes (e e f), a superfície superior do leito desaparece e o transporte de sólidos se torna apreciável, devendo-se instalar um sistema de realimentação dos mesmos caso procure-se atingir o regime permanente.

Figura 2.5. Regimes de fluidização típicos de um leito do tipo gás-sólido



Fonte: MARINI, 2008

3. MATERIAIS E MÉTODOS

A resolução do problema considerado consiste, em primeira análise, na solução conjunta das equações de Navier-Stokes, quais sejam, as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento. Devido ao problema ser de escoamento bifásico gás-sólido equações para a descrição da fase particulada bem como sua interação com a faz fluida, além de modelos para o arraste de partículas são necessários. Para tal, fases fluida e particulada foram modeladas como sendo contínuas usando-se a abordagem Euleriana-Euleriana. Finalmente, equações para a modelagem do escoamento turbulento além da metodologia numérica a ser usada para a resolução dessas equações são considerados. As equações aqui descritas, quando não mencionado o contrário, foram obtidas através do ANSYS FLUENT 12.0 - Theory Guide (2009).

3.1. Equações de Navier-Stokes

A equação da continuidade escrita tanto para a fase fluída quanto para a fase particulada é dada pelas equações 3.1 e 3.2. Nelas não são considerados a transferência de massa entre as fases nem o termo de geração, que são inexistentes no caso simulado.

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla(\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\alpha_p \rho_p)}{\partial t} + \nabla(\alpha_p \rho_p \mathbf{u}_p) = 0 \quad (3.2)$$

Já as equações de transferência de quantidade de movimento são representadas nas equações 3.3 e 3.4 para a fase gasosa e fase sólida, respectivamente.

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g)}{\partial t} + \nabla(\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = \nabla \bar{\bar{\tau}}_g + \alpha_g \rho_g \mathbf{g} - \alpha_g \nabla p_g + \beta(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_g) \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial(\alpha_p \rho_p \mathbf{u}_p)}{\partial t} + \nabla(\alpha_p \rho_p \mathbf{u}_p \mathbf{u}_p) = \nabla \bar{\bar{\tau}}_p + \alpha_p \rho_p \mathbf{g} - \alpha_p \nabla p_g - \nabla p_p + \beta(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p) \quad (3.4)$$

Onde os tensores tensão, $\bar{\bar{\tau}}_g$ e $\bar{\bar{\tau}}_p$ são dados pelas equações 3.5 e 3.6. Tais variáveis representam a distribuição das forças e tensões internas em um meio contínuo.

$$\bar{\bar{\tau}}_g = \alpha_g \mu_g (\nabla \mathbf{u}_g + \nabla \mathbf{u}_g^T) + \alpha_g \left(\lambda_g - \frac{2}{3} \mu_g \right) \nabla \mathbf{u}_g \bar{\mathbf{1}} \quad (3.5)$$

$$\bar{\tau}_p = \alpha_p \mu_p (\nabla \mathbf{u}_p + \nabla \mathbf{u}_p^T) + \alpha_p \left(\lambda_p - \frac{2}{3} \mu_p \right) \nabla \mathbf{u}_p \bar{I} \quad (3.6)$$

3.2. Teoria cinética do escoamento granular

Como pode se perceber pelas equações 3.4 e 3.6 do modelo Euleriano-Euleriano de escoamento, a fase particulada é tratada como contínua e desta forma é necessário determinar parâmetros típicos de fluídos como viscosidade e pressão para a fase em questão. A Teoria Cinética do Escoamento Granular (KTGF, do inglês *Kinetic Theory of Granular Flow*) através do cálculo da chamada temperatura granular que mede o grau de agitação das partículas devido à velocidade (em uma analogia a Teoria Cinética dos Gases) permite que sejam determinados pressão do sólido, coeficientes de viscosidade além do tensor tensão dos sólidos.

Inicialmente, como pode-se perceber no tensor tensão de sólidos dado pela equação 3.6, tanto a viscosidade de cisalhamento (*shear viscosity*, em inglês) quanto a viscosidade granular (*bulk viscosity*, em inglês) devem ser determinadas. A primeira é modelada como contendo uma parte colisional ($\mu_{p,co}$), uma parte cinética ($\mu_{p,ci}$) e uma parte friccional ($\mu_{p,fr}$), como dado pela equação 3.7.

$$\mu_p = \mu_{p,co} + \mu_{p,ci} + \mu_{p,fr} \quad (3.7)$$

Desprezando-se a componente friccional da viscosidade, que é relevante apenas em leitos de densidade elevada (fração de sólidos próxima a fração de sólidos máxima), as equações 3.8 e 3.9 descrevem, respectivamente, $\mu_{p,co}$ e $\mu_{p,ci}$.

$$\mu_{p,co} = \frac{4}{5} \alpha_p \rho_p d_p g_{0,ss} (1 + e_{ss}) \left(\frac{\Theta_p}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \alpha_p \quad (3.8)$$

$$\mu_{p,ci} = \frac{10 \rho_p d_p \sqrt{\Theta_p \pi}}{96 \alpha_p g_{0,ss} (1 + e_{ss})} \left[1 + \frac{4}{5} \alpha_p g_{0,ss} (1 + e_{ss}) \right]^2 \alpha_p \quad (3.9)$$

Já a viscosidade granular que computa a resistência das partículas à compressão e expansão é dada pela equação 3.10:

$$\lambda_p = \frac{4}{3} \alpha_p \rho_p d_p g_{0,ss} (1 + e_{ss}) \left(\frac{\Theta_p}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.10)$$

A pressão de sólidos, a qual é composta por um termo cinético (primeiro termo da soma dada na equação 3.11) e um termo colisional (segundo termo da equação 3.11), é determinada por:

$$p_p = \alpha_p \rho_p \Theta_p + 2\rho_s(1 + e_{ss})\alpha_s^2 g_{0,ss} \Theta_p \quad (3.11)$$

A função distribuição radial, $g_{0,ss}$, é um fator de correção responsável por modificar a probabilidade de colisões entre partículas quando a fase granular se torna densa. Quando apenas uma fase sólida está presente aquela é comumente modelada pela equação 3.12.

$$g_{0,ss} = \left[1 - \left(\frac{\alpha_p}{\alpha_{p,max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} \quad (3.12)$$

Finalmente utilizou-se a formulação algébrica para o cálculo da temperatura granular a qual é dada pela equação 3.13 cujos coeficientes auxiliares K_1 K_2 K_3 e K_4 são dados pelas equações 3.14 a 3.17, respectivamente.

$$\Theta_p = \left\{ \frac{-K_1 \alpha_p \nabla \mathbf{u}_p + \sqrt{K_1 \alpha_p \nabla \mathbf{u}_p + 4K_4 \alpha_p \left[K_2 (\nabla \mathbf{u}_p)^2 + 2K_3 (\nabla \mathbf{u}_p)^2 \right]}}{2K_4 \alpha_p} \right\}^2 \quad (3.13)$$

$$K_1 = 2(1 + e_{ss})\rho_p g_{0,ss} \quad (3.14)$$

$$K_2 = \frac{4d_p \rho_p (1 - e_{ss}) \alpha_p g_{0,ss}}{3\sqrt{\pi}} - \frac{2}{3} K_3 \quad (3.15)$$

$$K_3 = \frac{d_p \rho_p}{2} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{3(3 + e_{ss})} [1 + 0,4(1 - e_{ss})(3e_{ss} - 1)\alpha_p g_{0,ss}] + \frac{8\alpha_p g_{0,ss}(1 + e_{ss})}{5\sqrt{\pi}} \right\} \quad (3.16)$$

$$K_4 = \frac{12(1 - e_{ss}^2)\rho_p g_{0,ss}}{d_p \sqrt{\pi}} \quad (3.17)$$

3.3. Arraste

O modelo de arraste representa a interação entre as fases sólida e particulada no que tange a transferência de quantidade de movimento. Para o problema em questão utilizou-se o modelo de Gidaspow que combina as correlações de Wen-Yu e Ergun da seguinte forma:

- Para frações de gás maiores que 0,8 o termo de transferência de quantidade de movimento entre as fases (β) é dado pela equação 3.18 (correlação de Wen-Yu).

$$\beta = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_p \alpha_g \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p|}{d_p} \alpha_g^{-2,65} \quad (3.18)$$

Onde o coeficiente de arraste (C_D) é dado pela equação 3.19 e o número de Reynolds de partícula pela equação 3.20.

$$C_D = \frac{24}{\alpha_g \text{Re}_p} \left[1 + 0,15 (\alpha_g \text{Re}_p)^{0,687} \right] \quad (3.19)$$

$$\text{Re}_p = \frac{\rho_g \mathbf{u}_g d_p}{\mu_g} \quad (3.20)$$

- Para frações de gases menores que 0,8 o termo de transferência de quantidade de movimento entre as fase (β) é dado pela equação 3.21 (correlação de Ergun).

$$\beta = 150 \frac{\alpha_p (1 - \alpha_g) \mu_g}{\alpha_g d_p^2} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_p |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p|}{d_p} \quad (3.21)$$

3.4. Turbulência

O escoamento turbulento, que consiste em mudanças caóticas nas variáveis de escoamento, especialmente pressão e velocidade, possui diferentes abordagens do ponto de vista da modelagem. A primeira delas consiste em resolver as equações de Navier-Stokes sem nenhum outro recurso, o que exige para isso o uso de malhas de tempo e espaço altamente refinadas de modo que os menores vórtices presentes no escoamento possam ser detectados. Tal abordagem é chamada de DNS, do inglês *Direct Numerical Simulation*, sendo que o tamanho dos elementos presentes na malha espacial deve ser menor que aqueles da escala de Kolmogorov. A abordagem LES (do inglês, *Large Eddy Simulation*), funciona similarmente a simulação DNS, no entanto utiliza modelos algébricos simples para a caracterização dos pequenos vórtices presentes no escoamento, visando desta forma reduzir em partes a necessidade de refino da malha a ser simulada e conseqüentemente o custo computacional requerido (MONZON, 2016).

Ambas abordagens, DNS e LES, devido a necessidade de malhas muito refinadas, necessitam de processadores poderosos bem como um alto tempo para serem simuladas, o que para a maioria dos problemas práticos ainda é inviável. Desta forma, a descrição do

escoamento turbulento apenas com modelos dada pela abordagem RANS (do inglês, *Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations*), ao requerer menor tempo de simulação bem como custo computacional é a mais utilizada atualmente. Para a técnica RANS as variáveis instantâneas, como a velocidade, são tomadas como a soma de um valor médio temporal e um valor flutuante, sendo tal formulação posteriormente substituída nas equações de Navier-Stokes. Uma dedução detalhada do procedimento de média de Reynolds pode ser consultada em WILCOX (1993).

De forma geral, no entanto, o cerne do problema está em modelar o chamado tensor de Reynolds, termo responsável por descrever os efeitos de turbulência e que aparece nas equações de transporte após o procedimento de média anteriormente mencionado. Neste trabalho optou-se pelo uso da hipótese de Boussinesq, a qual dá origem, dentre outros, ao modelo k-ε de modelagem da turbulência. Nesta hipótese, o tensor de Reynolds é descrito como os tensores tensão laminares (equação 3.22)

$$\overline{\tau_{turb}} = \mu_{turb}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{2}{3} \mu_{turb} \nabla \mathbf{u} \bar{\mathbf{I}} \quad (3.22)$$

A viscosidade turbulenta, μ_{turb} , é então calculada de acordo com a equação 3.23, na qual k e ε representam, respectivamente, a energia cinética turbulenta e taxa de dissipação turbulenta.

$$\mu_{turb,m} = \rho_m C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.23)$$

A solução das equações diferenciais dadas por 3.24 e 3.25, que modelam o transporte das variáveis k e ε, respectivamente, resulta nos valores destas mesmas variáveis.

$$\frac{\partial(\rho_m k)}{\partial t} + \nabla(\rho_m \mathbf{u}_m k) = \nabla \left(\frac{\mu_{turb,m}}{\sigma_k} \nabla k \right) + G_{k,m} - \rho_m \varepsilon \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial(\rho_m \varepsilon)}{\partial t} + \nabla(\rho_m \mathbf{u}_m \varepsilon) = \nabla \left(\frac{\mu_{turb,m}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} G_{k,m} - C_{2\varepsilon} \rho_m \varepsilon) \quad (3.25)$$

Onde ρ_m é a densidade de mistura, \mathbf{u}_m é o vetor velocidade da mistura e $G_{k,m}$ é a produção de energia cinética turbulenta devido a forças viscosas cada um deles modelados pelas equações 3.26, 3.27 e 3.28, respectivamente.

$$\rho_m = \alpha_g \rho_g + \alpha_p \rho_p \quad (3.26)$$

$$\mathbf{u}_m = \frac{\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g + \alpha_p \rho_p \mathbf{u}_p}{\alpha_g \rho_g + \alpha_p \rho_p} \quad (3.27)$$

$$G_{k,m} = \mu_{\text{turb},m} (\nabla \mathbf{u}_m + \nabla \mathbf{u}_m^T) : \nabla \mathbf{u}_m \quad (3.28)$$

As constantes $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, C_μ , σ_k , σ_ε presentes nas equações 3.23 a 3.25 foram adotadas com os seguintes valores.

$$C_{1\varepsilon} = 1,44; C_{2\varepsilon} = 1,92; C_\mu = 0,09; \sigma_k = 1,0; \sigma_\varepsilon = 1,3$$

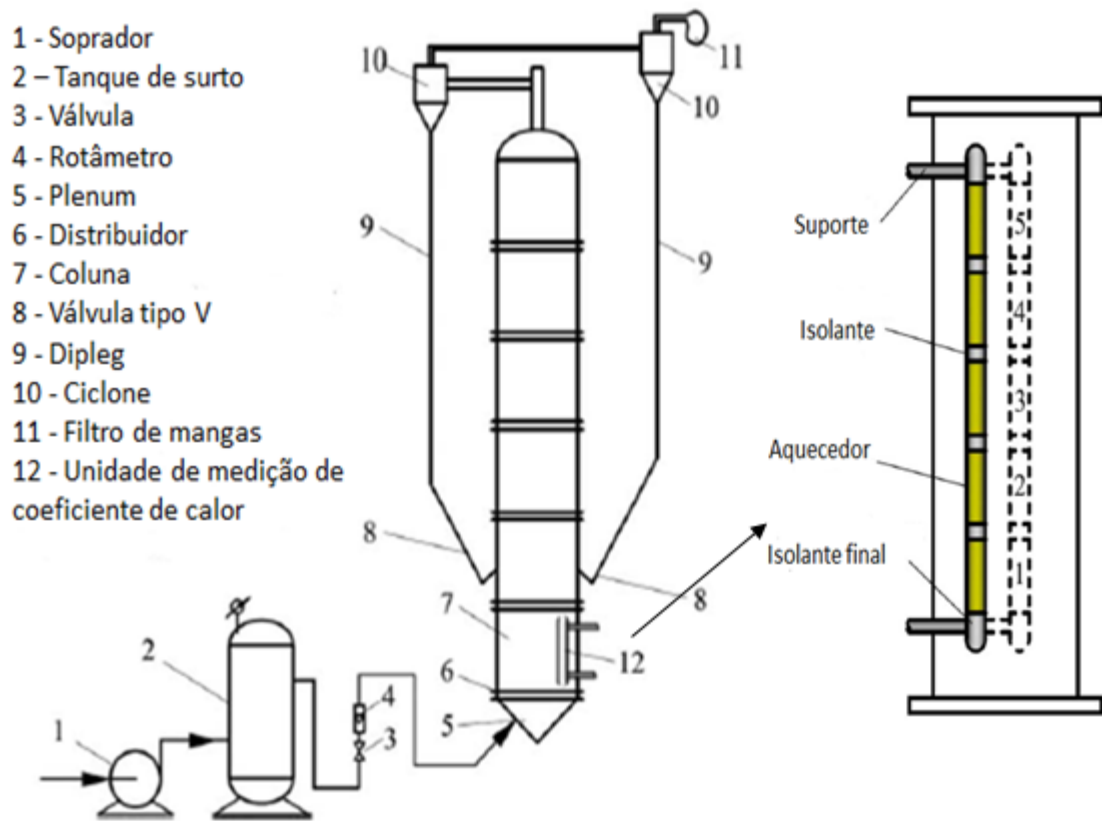
3.5 Geometria simulada e malha numérica

A Figura 3.1 mostra o aparato experimental utilizado por YAO et al. (2015a) para medir o coeficiente de troca de calor entre a parede dos tubos internos do equipamento e o leito de partículas. Neste equipamento foi utilizada uma coluna de leito fluidizado de diâmetro 0,286 m e altura total de 6 m. Ar comprimido foi fornecido como gás fluidizante sendo sua vazão regulada por um rotâmetro. Este ar foi distribuído por um distribuidor do tipo placa perfurada, com uma razão de área aberta de 0,9%. Catalisador de FCC em equilíbrio (não novos) de diâmetro médio de 69,4 μm e densidade igual a 1500 kg/m^3 foram utilizadas como partículas fluidizadas. As propriedades dos sólidos correspondiam àquelas da operação da unidade de FCC estável.

As partículas arrastadas pelo ar foram recolhidas por dois separadores ciclone em série as quais foram então devolvidas ao leito através de dois *diplegs*. Cada *dipleg* foi equipado com uma válvula tipo V para evitar a passagem de gás através deste em direção ao ciclone e garantir o fluxo de partículas constante e descendente. A unidade de medição do coeficiente de transferência de calor foi instalada no fundo do leito denso (0,09 m acima do fundo da coluna) sendo esta esquematizada também na Figura 3.1.

Os principais componentes desta unidade eram cinco tubos de cobre com diâmetro de 0,04 m e comprimento 0,12 m cada. Estes estavam conectados a uma fonte de alimentação de corrente contínua e eram responsáveis por fornecer os valores de fluxo de calor introduzido no sistema. Dois termopares tipo T foram usados para medir a temperatura da parede do tubo de calor. Para medir simultaneamente cinco coeficientes de transferência de calor em diferentes alturas, um isolamento, seção feita de plásticos de Teflon, foi instalado entre dois tubos de cobre aquecidos vizinhos para minimizar a perda de calor. O diâmetro desta seção de isolamento e o seu comprimento eram de 0,04 m e 0,025 m, respectivamente.

Figura 3.1. Unidade experimental utilizada por YAO et al. (2015a) com detalhe do trocador de calor



Fonte: modificado de YAO et al., 2015a

Para a construção da malha numérica que representasse o aparato experimental anteriormente descrito foi proposta a geometria mostrada na Figura 3.2. Nela está representada apenas metade do equipamento já que a simulação realizada foi do tipo axissimétrica, dada a simetria apresentada pelo problema. Todas as dimensões utilizadas foram aquelas indicadas por YAO et al. (2015a), a menos daquelas referentes a saída de gás e entrada da recirculação de sólidos pelo fato de não terem sido fornecidas pelos autores. Estas foram arbitradas como 0,06 m e 0,01m respectivamente, sendo que seus valores não devem afetar significativamente os resultados da simulação.

Foi construída, a partir desta geometria, através do software ICEM-CFD, uma malha bidimensional quadrilateral, cujos parâmetros numéricos e de qualidade são mostrados na Tabela 3.1 e cujo detalhe (1 m de altura) está mostrado também na Figura 3.2.

Figura 3.2. Geometria do aparato experimental simulado (esquerda) e detalhe da malha gerada (direita)

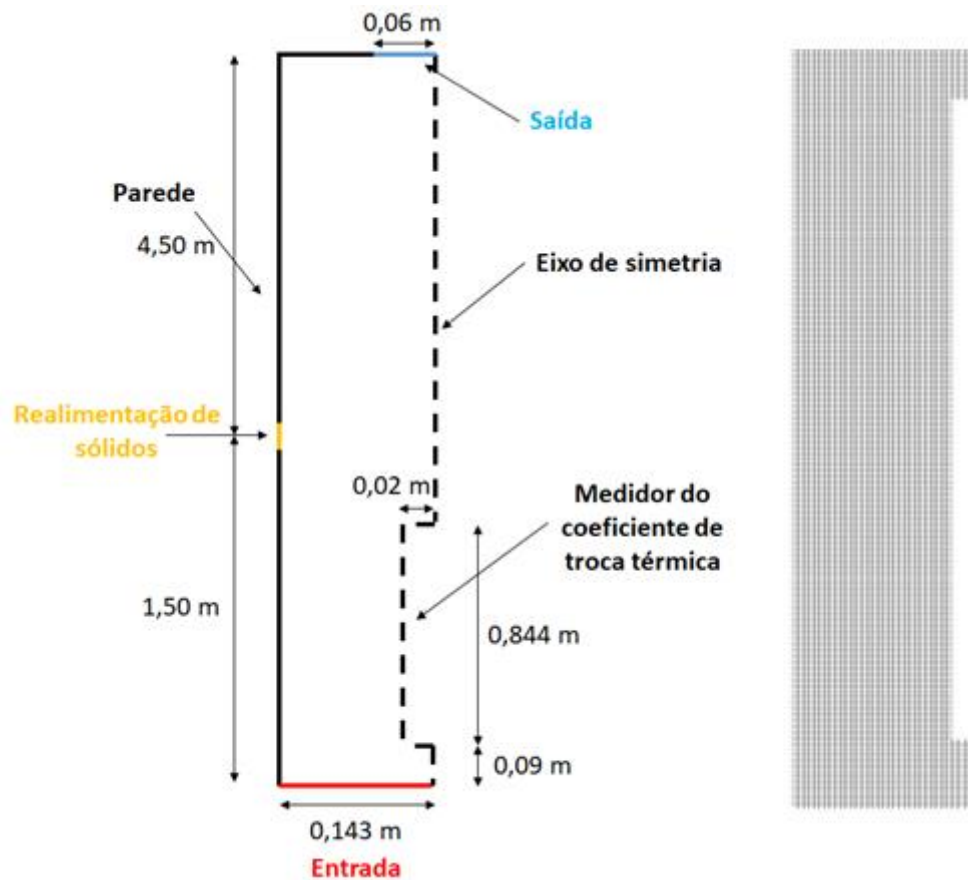


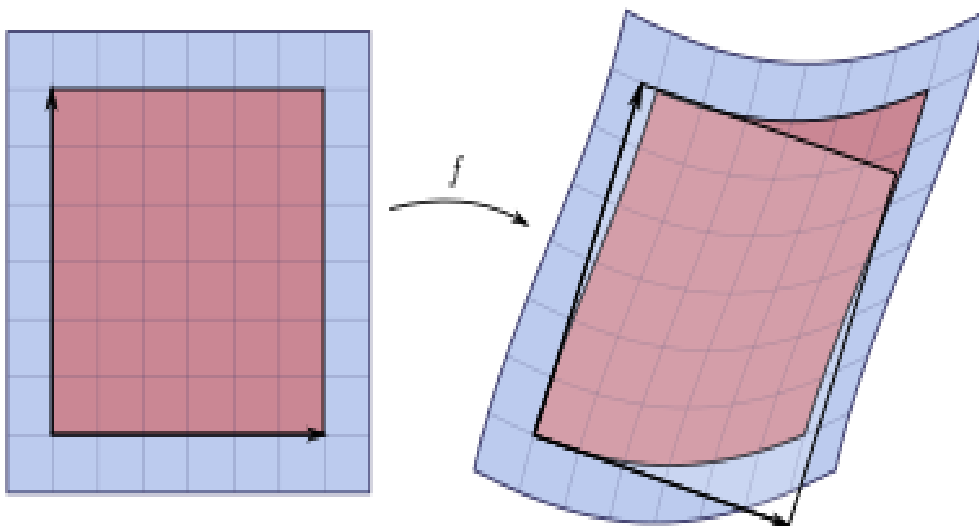
Tabela 3.1. Características da malha numérica construída

Número de elementos	53200
Número de nós	51664
Comprimento máximo	0,00731m
Comprimento mínimo	0,00571m
Razão de aspecto	1-1,29
Determinante 3x3x3	0,991-1

Na Tabela 3.1, razão de aspecto e determinante 3x3x3 são dois parâmetros que atestam a qualidade da malha. Para elementos quadrilaterais a razão de aspecto é definida como a razão do comprimento da menor aresta do elemento pelo comprimento de sua maior aresta. Quanto mais próximo de um, mais regular é o elemento, sendo que a razão de aspecto 1

significa um elemento totalmente quadrado. Os elementos da malha construída apresentam este parâmetro na faixa 1 a 1,29, sendo assim adequados. Já o determinante $3 \times 3 \times 3$ é definido como a razão do menor determinante da matriz jacobiana dividida pelo maior destes determinantes e é um parâmetro que mede a assimetria dos elementos de uma malha numérica. Quanto mais próximo de 1 este parâmetro mais regular é o elemento da malha. A Figura 3.3 mostra a distorção de uma região do espaço bidimensional por uma função f , sendo que o determinante jacobiano calculado em um ponto deste domínio fornece a razão da área paralelogramos em relação àquelas dos quadrados presentes no domínio.

Figura 3.3. Distorção de uma região do espaço bidimensional por uma função f , papel do determinante $3 \times 3 \times 3$



Fonte: WIKIPEDIA, 2019

3.6 Condições de contorno e abordagem numérica

A Tabela 3.2 mostra as propriedades do fluído, ar, e sólido, catalisador de FCC em equilíbrio, utilizados na simulação. Como diâmetro de partícula foi utilizado o diâmetro médio fornecido pelo autor, ou seja, $69,4 \mu\text{m}$.

Tabela 3.2 Propriedades das fases simuladas

Propriedade	Ar	Catalisador
Densidade (kg/m³)	1,225	1500
Viscosidade (Pa.s)	$1,789 \cdot 10^{-5}$	KTGF
Temperatura (°C)	25	25

Duas alturas de leito estático, de 0,68 m e 1,24 m foram usadas para estudar o efeito da altura do leito sendo a fração volumétrica de sólidos utilizada inicialmente foi de 0,55 resultando em uma massa inicial de catalisador no leito de 35,8 kg e 65,6 kg, respectivamente (mesmas massas iniciais utilizadas no trabalho seguido). A velocidade superficial do gás neste estudo assumiu os valores de 0,1; 0,2; 0,3 e 0,4 m/s e a pressão na saída de ar foi tida como a atmosférica (pressão manométrica igual a zero)

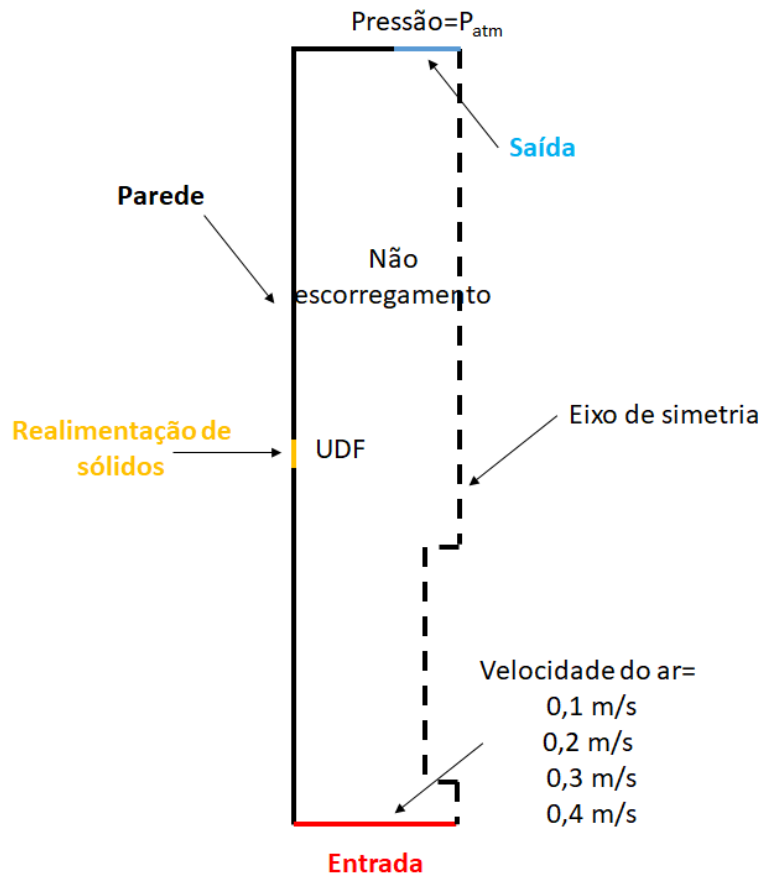
A realimentação dos sólidos arrastados, de modo a se reproduzir o papel do ciclone na unidade experimental, foi feita com o uso de uma *User Define Function* (UDF), ou seja, um código desenvolvido pelo usuário do software ANSYS FLUENT que permite a definição de condições de contorno diferentes daquelas especificadas pelo programa. O referido código encontra-se disponível no Apêndice A deste trabalho. Todas estas informações foram resumidas esquematicamente na Figura 3.4, na qual é possível ver o local de aplicação das condições de contorno.

Estabeleceu-se um erro quadrático médio de 10^{-4} para as equações resolvidas bem como um passo de tempo de 10^{-3} s com um tempo total de escoamento simulado de 30 s. A resolução do modelo matemático anteriormente exposto se deu pelo uso do método dos volumes finitos. Para o acoplamento pressão velocidade, foi usado o método SIMPLE (*Phase-Coupled SIMPLE*, como mostrado no software). Já para a formulação transiente utilizou-se um esquema de interpolação de segunda ordem implícito. O termo advectivo das equações de transporte foi calculado de acordo com uma interpolação de segunda ordem *upwind*, enquanto para os termos difusivos foi adotada diferenças centrais de segunda ordem para o cálculo.

Como será explicado na seção 4 deste texto, realizou-se simulações adicionais para o leito A e velocidade superficial do gás de 0,4 m/s de modo a se investigar a influência nos resultados da simulação da presença de *clusters* formados pelas partículas no leito

experimental. Para representar estes clusters foram realizadas simulações considerando partículas com diâmetros de 200, 250, 300 e 350 μm (além das partículas de 69,4 μm).

Figura 3.4 Condições de contorno utilizadas na simulação



3.7. Análise dos resultados

Em todas as simulações foram avaliados os resultados da fração volumétrica de sólidos tanto radial quanto axial, bem como o perfil vetorial da velocidade de sólidos na área que compreendia o equipamento de medição do coeficiente de troca de calor. Os valores destas variáveis foram aqueles obtidos com a média temporal entre 15 e 30 s de escoamento. Com relação especificamente à fração volumétrica de sólidos, o perfil axial foi tomado a 1 cm de distância da unidade de medição do coeficiente de troca térmica, enquanto o perfil radial foi composto pelos valores da curva a 0,5 m de distância da entrada de ar (aproximadamente na metade do tubo aquecedor).

Para a análise da expansão do leito e fração volumétrica de sólidos obtidas com a simulações utilizou-se a correlação de Richardson-Zaki a qual é mostrada na equação 3.29 (ALRAWI et al., 2016).

$$\frac{u}{u_t} = \alpha^n \quad (3.29)$$

Nesta equação, o índice de Richardson-Zaki (n), considerando-se os efeitos de parede, é dado pelas equações 3.30 a 3.33, onde Re_t é o número de Reynolds de partícula calculado na velocidade terminal da mesma.

$$n = 4,65 + 19,5 \left(\frac{d_p}{D} \right), \text{ para } Re_t < 0,2 \quad (3.30)$$

$$n = \left[4,35 + 17,5 \left(\frac{d_p}{D} \right) \right] Re_t^{-0,03} \text{ para } 0,2 < Re_t < 1 \quad (3.31)$$

$$n = \left[4,45 + 18 \left(\frac{d_p}{D} \right) \right] Re_t^{-0,1}, \text{ para } 1 < Re_t < 500 \quad (3.32)$$

$$n = 2,39, \text{ para } Re_t > 500 \quad (3.33)$$

Para o cálculo da velocidade terminal utilizou-se a razão entre esta e a velocidade de mínima fluidização como proposta por YANG (2003) e dada na equação 3.34. A velocidade de mínima fluidização, por sua vez, foi calculada a partir das correlações de Pavlov (equação 3.35), Wen-Yu e variantes (equação 3.36).

$$\frac{u_t}{u_{mf}} = 135,7 - 45,0(\log Ar) + 4,1(\log Ar)^2 \quad (3.34)$$

$$Re_{mf} = \frac{Ar}{1400 + 5,22\sqrt{Ar}} \quad (3.35)$$

$$Re_{mf} = \sqrt{C_1^2 + C_2 Ar} - C_1 \quad (3.36)$$

Onde Re_{mf} é o número de Reynolds de partícula calculado na velocidade de mínima fluidização e Ar é o adimensional de Arquimedes dado pela equação 3.37.

$$Ar = \frac{d_p^3 \rho_g (\rho_p - \rho_g) g}{\mu_g^2} \quad (3.37)$$

Os coeficientes C_1 e C_2 necessários aos cálculos das correlações de Wen-Yu e variantes foram listados na Tabela 3.3 (YANG, 2003).

Tabela 3.3 - Coeficientes da correlação de Wen-Yu e variantes para cálculo da velocidade de mínima fluidização

Correlação	C_1	C_2
Wen-Yu	33,70	0,0408
Richardson	25,70	0,0365
Saxena e Vogel	25,28	0,0571
Babu et al.	25,25	0,0651
Grace	27,20	0,0408
Chitester et al.	28,70	0,0494

Fonte: YANG, 2003

Três métodos diferentes foram utilizados para estimar a queda de pressão no leito na mínima fluidização e compará-la com os resultados da simulação. Como visto pela Figura 2.5 esta queda de pressão (na mínima fluidização) deve ser a mesma para todo o regime de fluidização dada uma altura inicial do leito estático. O primeiro deles foi a razão entre peso exercido pela massa de partículas do leito e área transversal do mesmo (equação 3.38).

$$\Delta P_{mf} = \frac{m_p g}{A} \quad (3.38)$$

Em seguida utilizou-se a equação gerada pelo balanço de forças nas partículas. O balanço de forças se baseia na igualdade entre as forças peso (F_p) e de empuxo (F_e) no leito, as quais podem ser descritas pelas equações 3.39 e 3.40.

$$F_{\text{peso}} = -\Delta P_{mf} \cdot A \quad (3.39)$$

$$F_{\text{empuxo}} = (\rho_p - \rho_g) \cdot A \cdot L_{mf} \cdot (1 - \alpha_{g,mf}) \cdot g \quad (3.40)$$

Igualando as duas expressões, é possível obter uma expressão, dada por 3.41, que descreve a queda de pressão no ponto de mínima fluidização.

$$\frac{\Delta P_{mf}}{L_{mf}} = (\rho_p - \rho_g) \cdot (1 - \alpha_{g,mf}) \cdot g \quad (3.41)$$

Outra possibilidade para determinação da queda de pressão é a utilização de correlações, dentre as quais a mais utilizada é a equação de Ergun (3.42), válida para leitos fixos.

$$\frac{\Delta P_{mf}}{L_{mf}} = \frac{150\mu_g u_{mf} (1 - \alpha_{g,mf})^2}{\varphi_p^2 d_p^2 \alpha_{g,mf}^3} + \frac{1,75\rho_g u_{mf}^2 (1 - \alpha_{g,mf})}{\varphi_p d_p \alpha_{g,mf}^3} \quad (3.42)$$

Nas equações 3.41 e 3.42 a porosidade na mínima fluidização foi estimada de acordo com a correlação proposta por Chen (equação 3.43) e a altura do leito na mínima fluidização calculada de acordo com a equação 3.44. Nesta L_0 corresponde à altura do leito caso este possua fração de vazios igual a zero

$$\alpha_{g,mf} = \frac{0,415}{\varphi^{0,483}} \quad (3.43)$$

$$L_{mf} = \frac{L_0}{1 - \alpha_{g,mf}} \quad (3.44)$$

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados apresentados e discutidos neste trabalho foram pensados de modo que a análise de seus valores indicasse características da fluidodinâmica do equipamento que fossem relevantes para a troca térmica que é o principal objetivo do resfriador de catalisador. Assim, por exemplo, os perfis axiais de fração de sólidos foram tomados bem próximos à região do trocador de calor (1 cm de distância), já que, como será explicado, a fração de sólidos nas imediações dos tubos de troca são fundamentais para a obtenção de um elevado coeficiente de troca térmica. Os demais resultados seguem essa mesma lógica e suas especificidades já foram apresentadas na seção 3 deste trabalho.

Inicialmente, considerando os resultados obtidos para o leito A (0,68 m de altura da cama estática), percebemos na Figura 4.1 a presença de um regime de fluidização denso para as velocidades de 0,1 e 0,2 m/s enquanto nas demais velocidades o regime de fluidização seria do tipo diluído. De modo a facilitar a visualização apenas metade da malha na direção da altura (3 m de altura) foi representada na Figura 4.1, no entanto, os perfis dados nas figuras 4.2 e 4.3, confirmam o declarado anteriormente e ampliam a perspectiva da fluidização observada para o leito estudado.

Como pode-se observar com o perfil axial de sólidos a altura do leito fluidizado pode ser definida apenas para as duas velocidades mais baixas, sendo que para as outras velocidades apesar de existir uma região de maior densidade de sólidos, há uma longa faixa diluída, o que faz com que estes dois casos não possam ser considerados um leito à rigor. Para o caso da velocidade de 0,4 m/s em especial, observou-se até o transporte de sólidos, sendo que a Figura 4.3 mostra uma leve diminuição da queda de pressão calculada no leito com relação aos demais casos indicando um início de um regime de fluidização rápida ou ainda transporte pneumático.

Ainda, vale destacar que para os casos no qual a altura do leito ultrapassa o equipamento de medição do coeficiente de troca térmica (tubo de aquecimento) há uma pequena elevação da concentração de sólidos próximo ao topo do referido equipamento (aproximadamente 0,95 m de altura), fato este que indica um pequeno acúmulo de partículas sobre esta região.

Figura 4.1 Contornos da fração volumétrica de sólidos para o leito A (média temporal)

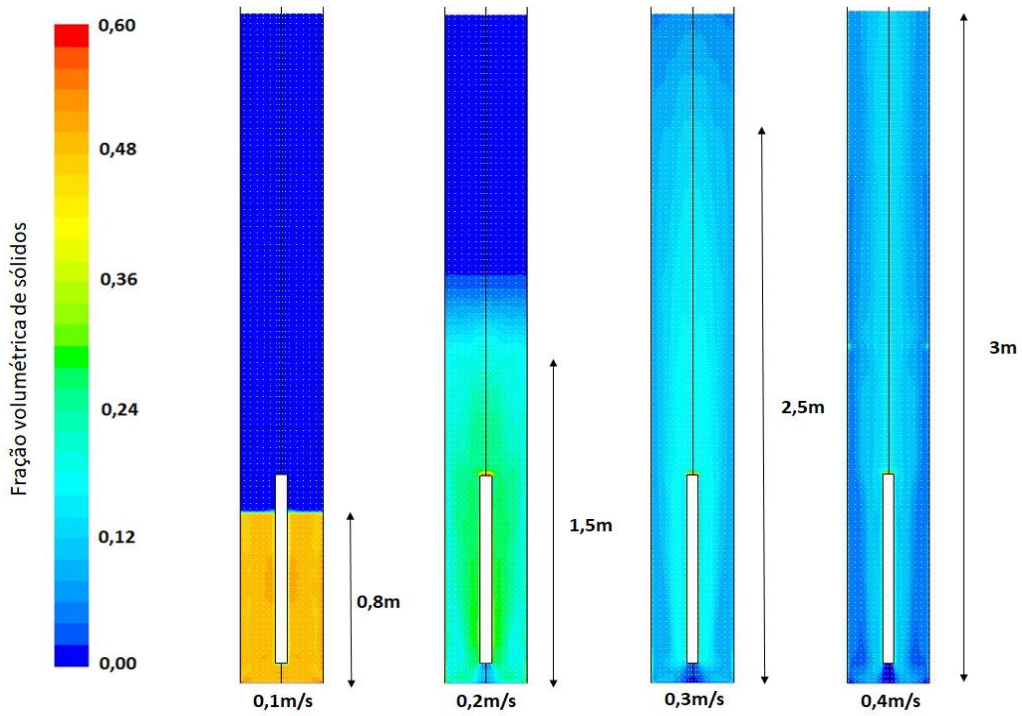


Figura 4.2 Perfis axiais da fração volumétrica de sólidos para o leito A (média temporal)

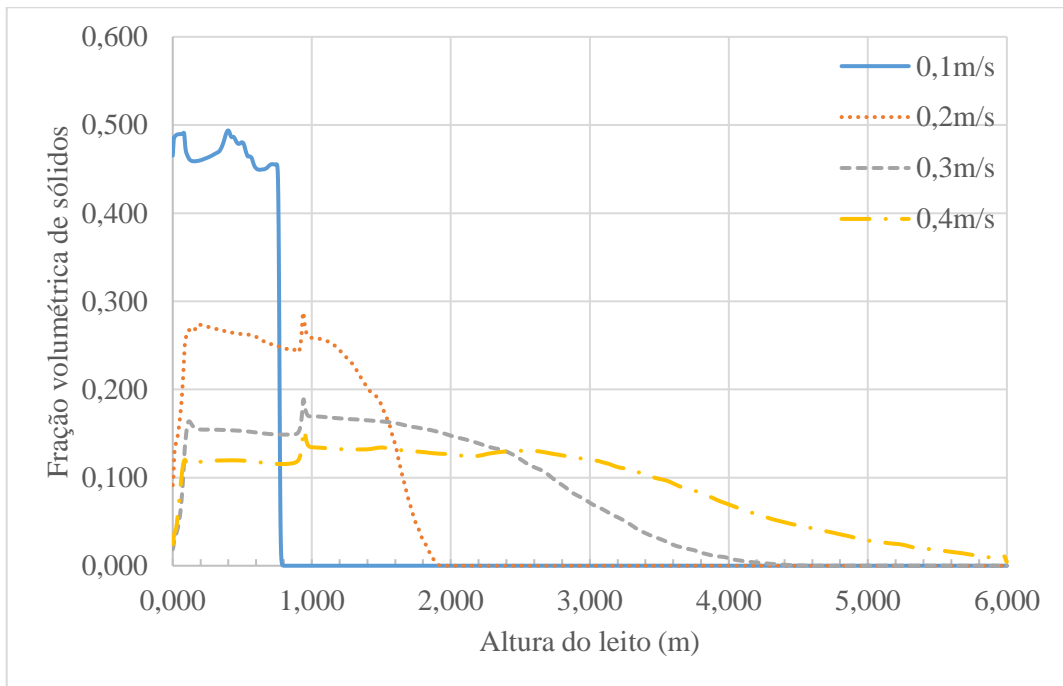
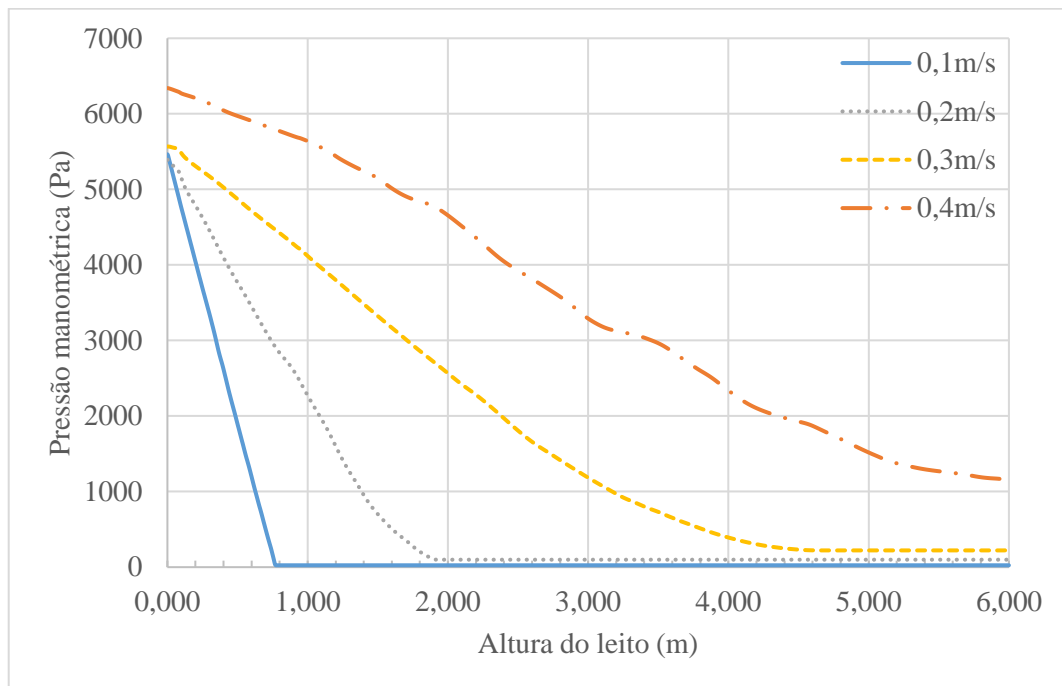


Figura 4.3 Pressão do gás ao longo do leito A em 30 s de escoamento



Já o perfil radial da fração volumétrica de sólidos, Figura 4.4, observado a 0,5 m da base do leito (aproximadamente a metade da unidade de medição do coeficiente de troca térmica), mostrou-se aproximadamente constante e próximo a média da fração volumétrica de sólidos calculada para a parte densa do leito. Uma diferença no perfil se observa entre a menor velocidade e as demais especialmente na região próxima à superfície da unidade de medição do coeficiente de troca térmica, o que pode ser explicado observando-se o mapa dos vetores velocidade de sólidos mostrados na Figura 4.5.

Para as velocidades de 0,2; 0,3 e 0,4 m/s, o escoamento dos sólidos se dá de forma descendente na região próxima ao tubo aquecedor e de forma ascendente na região próxima a parede, sendo estas partes do equipamento as de maior concentração de sólidos. Este fenômeno não é observado, no entanto, para a velocidade mais baixa, para a qual a densidade de sólidos é consideravelmente menor na região próxima ao tubo aquecedor.

O mapa da velocidade de sólidos para este caso mostra a formação de pequenas regiões de circulação de partículas pelo leito sendo que estas acabam por não promover uma mistura tão efetiva entre os sólidos como aquela das demais velocidades e pode assim acabar por diminuir o coeficiente de troca térmica, já que para este tipo de equipamento a convecção é o mecanismo de transferência de calor predominante.

Figura 4.4 Perfis radiais da fração volumétrica de sólidos para o leito A à 0,5 m de altura (média temporal)

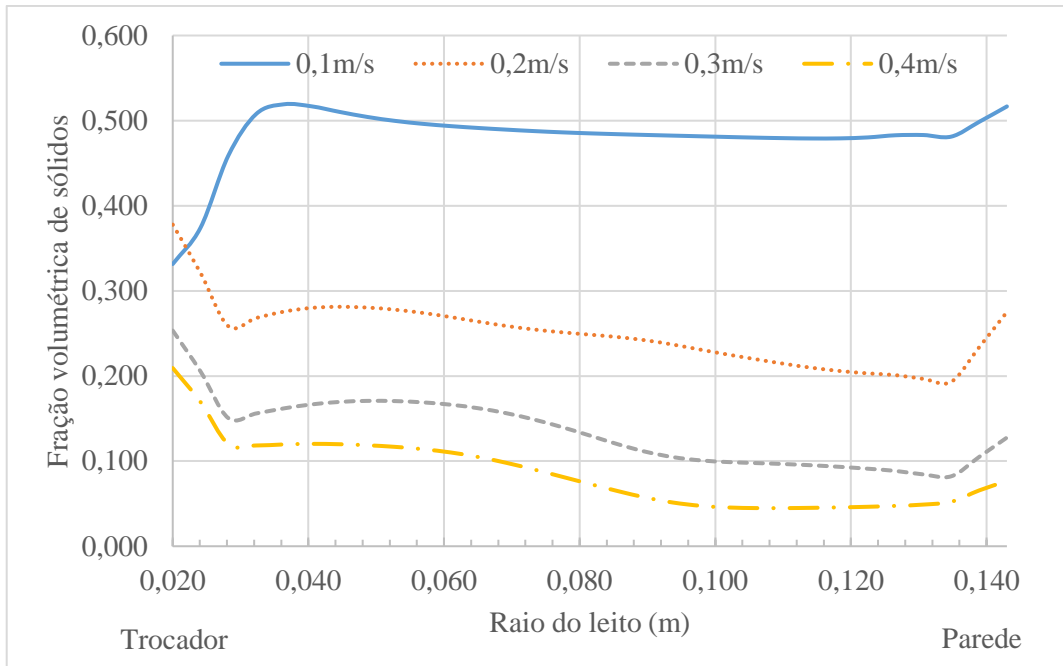
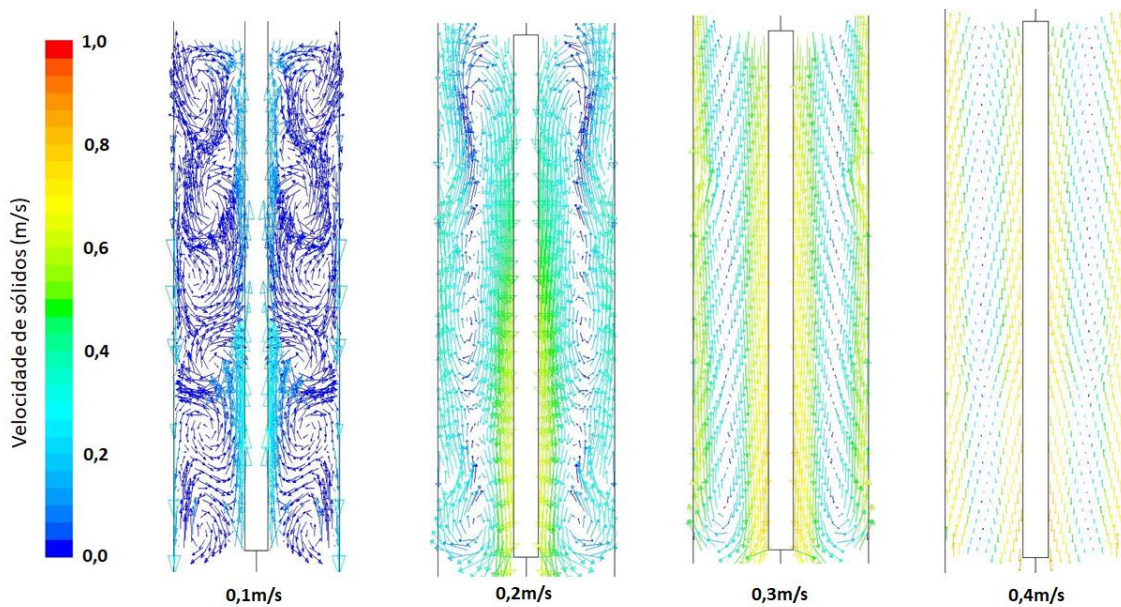


Figura 4.5 Mapa da velocidade de sólidos do leito A (média temporal)



Os perfis radiais da fração volumétrica de sólidos e o mapa dos vetores velocidade de sólidos, ajudam a entender os resultados de BAI (2000) e YAO et al. (2014). Como é possível notar, a medida que a velocidade de sólidos, e assim sua circulação, aumenta no leito, a

fração volumétrica destes diminui mostrando ser possível existir uma velocidade ótima para o gás fluidizante que maximize o coeficiente de troca térmica. Em outras palavras, deve haver um valor de velocidade superficial do gás que permita alta mistura de sólidos, mas não permita que o leito se torne muito diluído, estando em uma condição próxima à da velocidade de 0,2 m/s.

Com relação aos resultados obtidos para o leito B (1,24 m de altura do leito estático) as figuras 4.6 a 4.10 mostram as mesmas figuras que aquelas mostrados para o leito A, sendo que de forma geral as mesmas conclusões foram tomadas para esta configuração. Deve-se mencionar, no entanto, que o uso de uma maior massa de partículas inicial do leito acarretou, no cálculo da fração de partículas média na parte densa do leito maior que aquela obtida pelo leito A (em tese as frações de partículas de ambos os leitos deveriam ser iguais). Isso pode estar relacionado ao fato de uma maior massa de partículas representar uma maior força estática a ser vencida pelo gás o que pode causar uma maior compactação do leito expandido.

Figura 4.6 Contornos da fração volumétrica de sólidos para o leito B (média temporal)

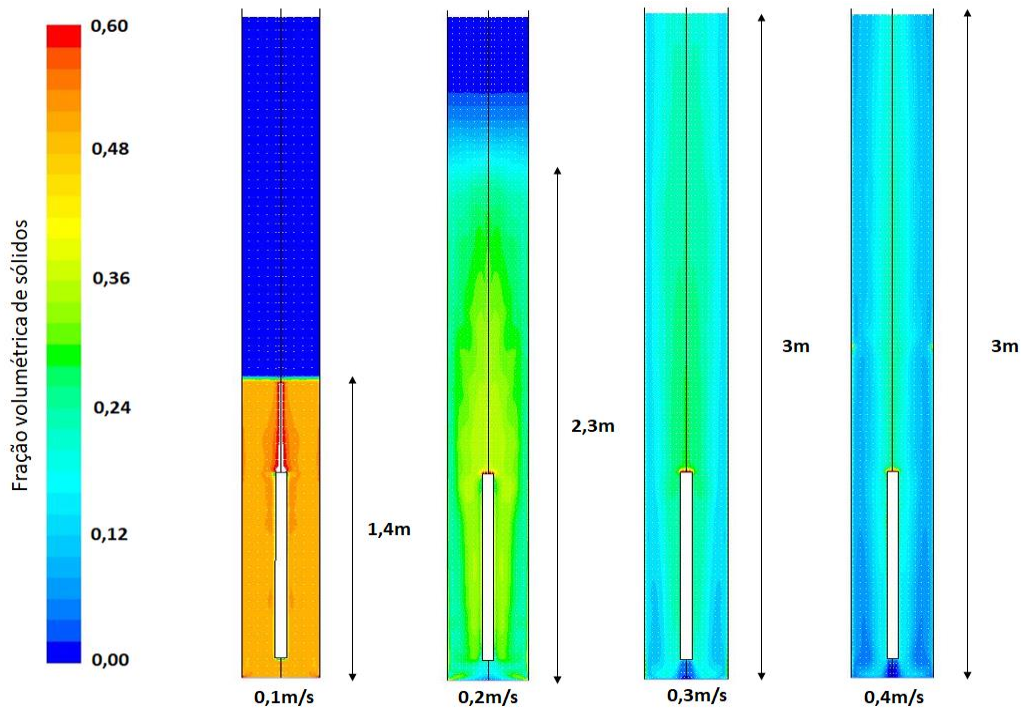


Figura 4.7 Perfis axiais da fração volumétrica de sólidos para o leito B (média temporal)

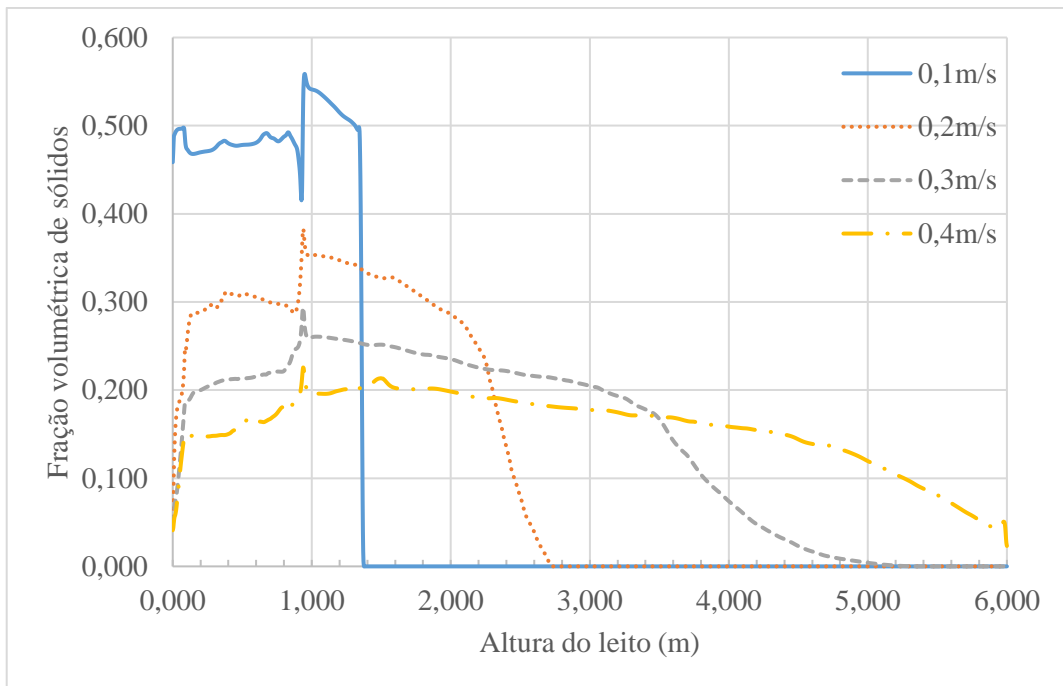


Figura 4.8 Pressão do gás ao longo do leito B em 30 s de escoamento

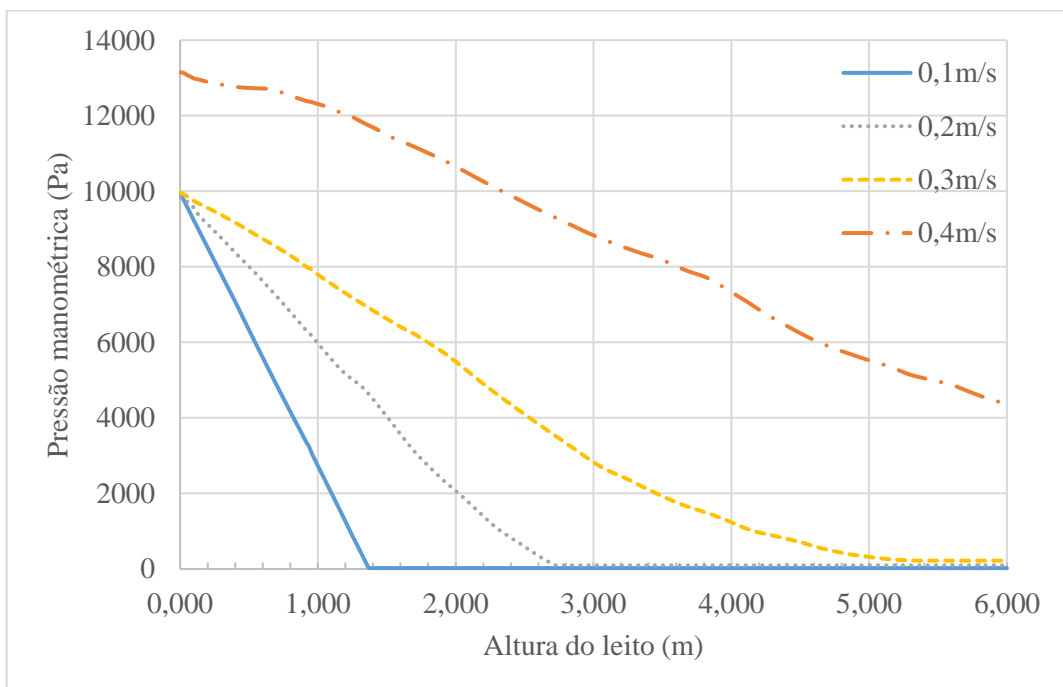


Figura 4.9 Perfis radiais da fração volumétrica de sólidos para o leito B a 0,5m de altura (média temporal)

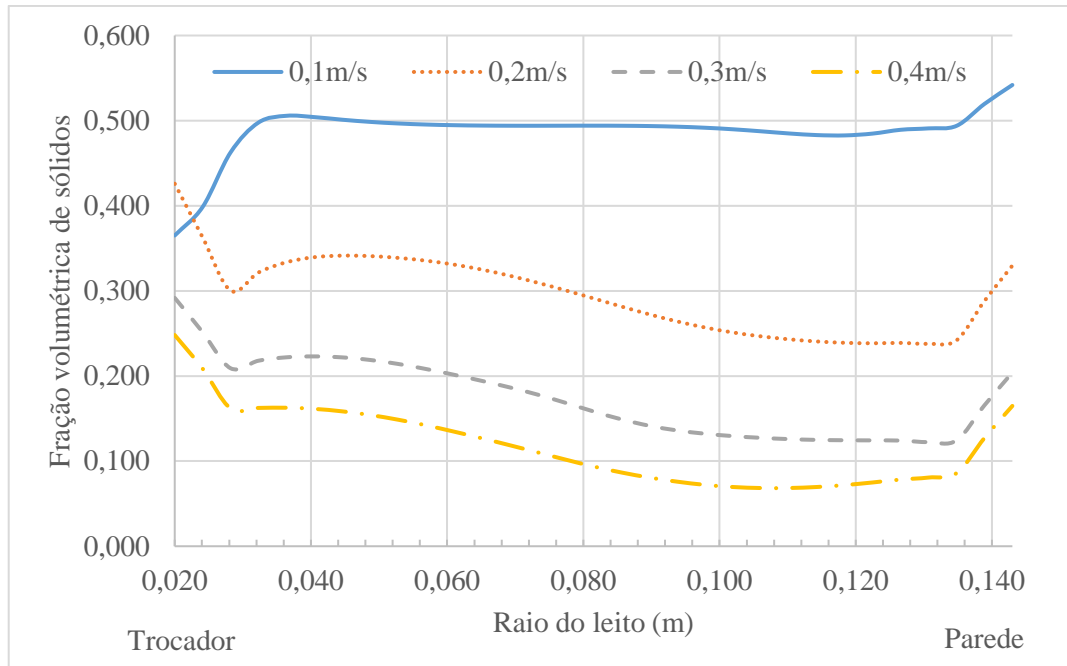
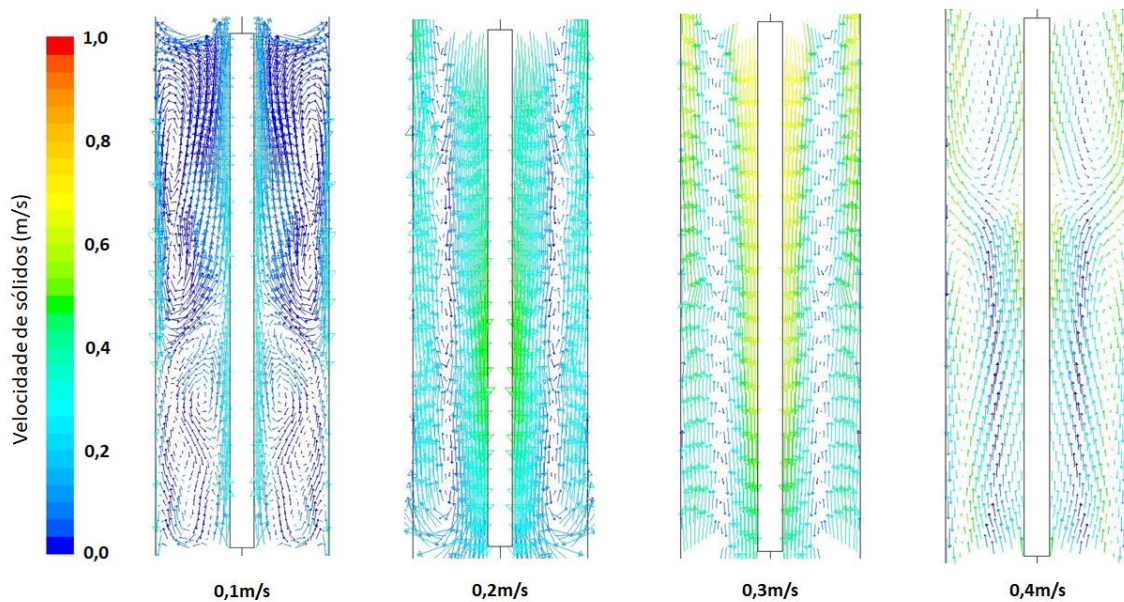


Figura 4.10 Mapa da velocidade de sólidos do leito B (média temporal)

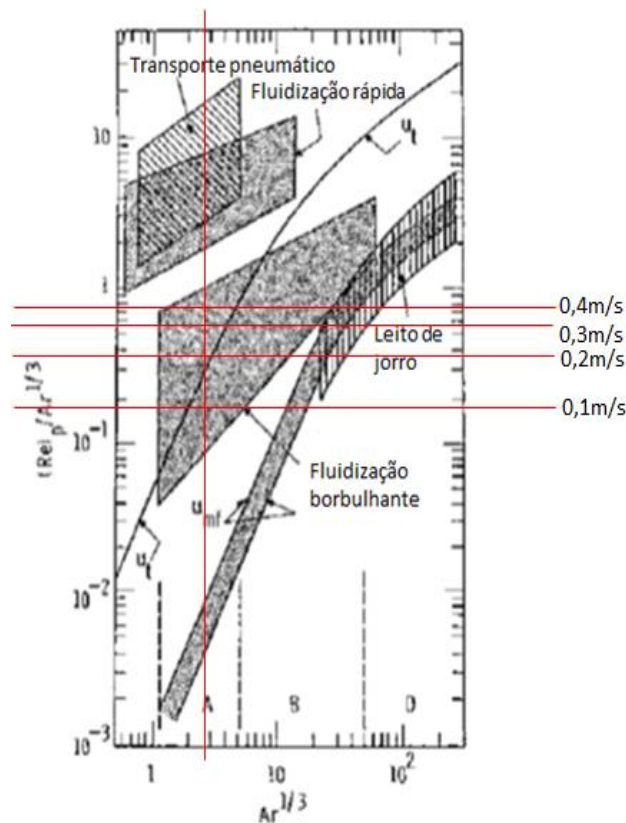


De modo a se validar as simulações realizadas comparou-se os resultados anteriormente descritos com aqueles obtidos através de correlações e gráficos da literatura, além dos resultados experimentais obtidos por YAO et. al (2015a). Observa-se na Figura

4.11, o regime de fluidização esperado para o resfriador de catalisador simulado, sendo que para a velocidade de 0,1 m/s, o leito estaria no regime de fluidização borbulhante, mas abaixo da velocidade terminal da partícula, enquanto para as velocidades de 0,2; 0,3 e 0,4 m/s a velocidade terminal da partícula já teria sido atingida, mas o leito ainda se comportaria como borbulhante. Vale lembrar que estas observações são válidas para ambos os leitos simulados (A e B), já que independem da massa de partículas inicialmente empacotadas.

Os valores obtidos nesta figura, concordam parcialmente com os contornos de fração volumétrica de sólidos mostrados nas figuras 4.1 e 4.6. Apesar de o leito fluidizado obtido com a velocidade 0,2 m/s poder ser caracterizado como de fase densa é possível perceber que a superfície do mesmo já começa a se apresentar com diluída, fato que é comprovado com a transição mais suave observada nos perfis axiais dados nas figuras 4.2 e 4.7. No entanto, a expansão do leito observada nas simulações não se enquadraria em um regime de fluidização borbulhante, no qual o leito de partículas não aumenta tanto sua altura para além daquela observada na mínima fluidização.

Figura 4.11 Mapa de previsão dos regimes de fluidização



Fonte: Modificado de YANG (2003)

Com relação à expansão do leito e fração volumétrica de sólidos utilizou-se a correlação de Richardson-Zaki como comparação. Para tal foram calculadas diferentes velocidades terminais da partícula as quais são mostradas na Tabela 4.1. A faixa dos valores calculados variou entre 0,210 e 0,466 m/s sendo que o valor de 0,210 m/s concorda com os resultados obtidos mostrados na Figura 4.11 e descritos anteriormente.

Tabela 4.1 Velocidades de mínima fluidização e terminais calculadas de acordo com 7 correlações

Correlação	C₁	C₂	Re_{mf}	u_{mf} (m/s)	u_t (m/s)
Wen Yu	33,7	0,0408	0,013	0,003	0,210
Richardson	25,7	0,0365	0,015	0,003	0,246
Saxena e Vogel	25,28	0,0571	0,024	0,005	0,391
Babu et al.	25,25	0,0651	0,027	0,005	0,446
Grace	27,2	0,0408	0,016	0,003	0,260
Chitester et al.	28,7	0,0494	0,018	0,004	0,298
Pavlov	-	-	0,015	0,003	0,243

Calculou-se a fração de sólidos esperada para os leitos simulados para os valores mínimo (0,210 m/s) e máximo (0,446 m/s) das velocidades terminais. O valor do índice de Richardson-Zaki (n) encontrado para cada uma dessas situações foi de 4,42 e 4,10, respectivamente. A Figura 4.12 compara as duas curvas calculadas pela referida correlação com os valores experimentais da fração de sólidos obtidas na simulação tanto para o leito A quanto para o leito B.

Como pode-se perceber a velocidade terminal de 0,446 m/s foi a que mais se aproximou dos resultados simulados, mas com um erro mínimo de 30% (Tabela 4.2) o que torna a correlação proposta inadequada para a representação dos dados em questão. O índice de Richardson-Zaki é muitas vezes determinado a partir de dados experimentais para a geometria usada especificamente ou muito similar (os quais não foram obtidos neste trabalho), o que poderia levar a um melhor ajuste dos resultados anteriores.

Com relação a queda de pressão, a Tabela 4.3 compara os diferentes valores obtidos com a simulação do leito A e B para diferentes velocidades, enquanto a Tabela 4.4 mostra

os valores obtidos para a queda de pressão com os três métodos diferentes utilizados. Analogamente ao feito com a correlação de Richardson-Zaki, foram utilizados os valores mínimo e máximo de velocidade de mínima fluidização calculados (0,003 e 0,005 m/s, respectivamente) para o cálculo da queda de pressão de acordo com a equação de Ergun. É importante mencionar que tanto a queda de pressão que representa o peso do leito estático quanto aquela que é calculada de acordo com o balanço de forças concordaram muito bem com os valores obtidos na simulação.

Figura 4.12 Resultados da correlação de Richardson-Zaki para a fração volumétrica de sólidos

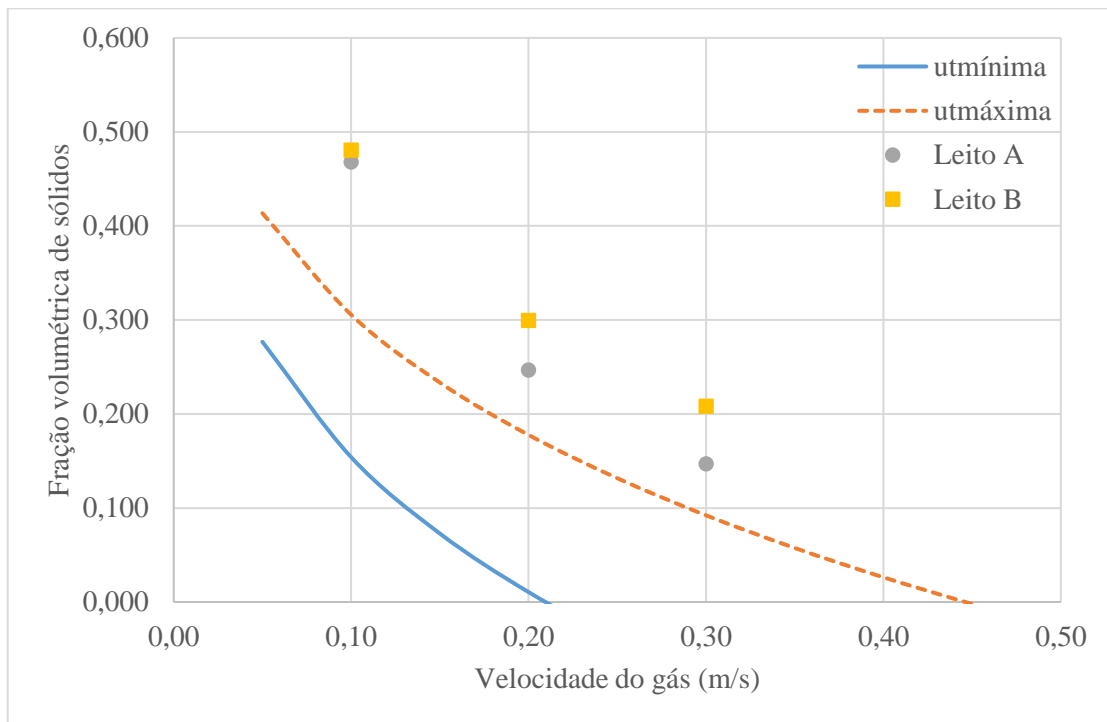


Tabela 4.2 Erro percentual da correlação de Richardson-Zaki com relação aos valores simulados

Velocidade (m/s)	Erro leito A		Erro leito B	
	u_t mínima	u_t máxima	u_t mínima	u_t máxima
0,1	67%	35%	68%	36%
0,2	96%	28%	96%	41%
0,3	-	37%	-	56%
0,4	-	77%	-	85%

Tabela 4.3 Valores da queda de pressão obtidos nas simulações do leito A e leito B

Velocidade (m/s)	Queda de pressão leito A (Pa)	Queda de pressão leito B (Pa)
0,1	5440	9917
0,2	5294	9741
0,3	5347	9745
0,4	5199	8950

Tabela 4.4 Valores da queda de pressão do leito A e leito B obtidos pelas correlações

Equação	Queda de pressão leito A (Pa)	Queda de pressão leito B (Pa)
Ergun min.	4061	7445
Ergun max.	8647	15853
Balanço	5464	10016
Peso/área	5468	10025

Finalmente, a Figura 4.13 mostra os resultados da expansão do leito obtidos por YAO et al. (2015a) na unidade experimental estudada. Como pode-se constatar a expansão máxima obtida foi de aproximadamente 0,7 m para o leito de altura estática igual a 0,6 m e 1,3 m para o leito de altura estática igual a 1,1 m, ambos os valores abaixo daqueles simulados para a menor das velocidades, 0,1 m/s, os quais foram de 0,8 e 1,4 m, respectivamente. Os valores obtidos experimentalmente, também discordam daqueles calculados pela correlação de Richardson-Zaki, a qual previu valores de fração de sólidos

menores que aquelas simuladas para as duas velocidades terminais testadas, e portanto resultariam em alturas de leito maiores que aquelas obtidas na simulação.

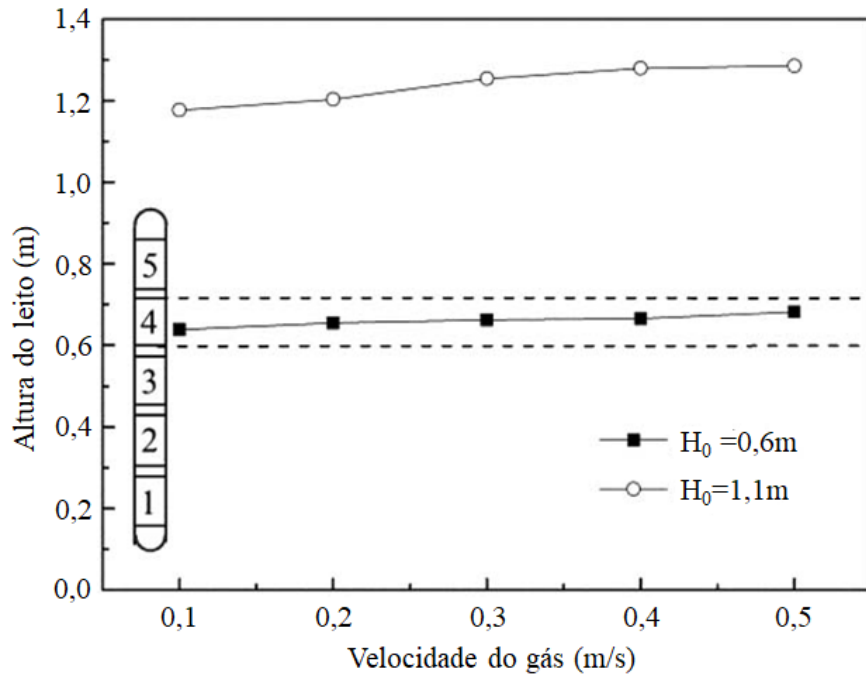
De acordo com GAO et al. (2008) poucas são as simulações de leitos borbulhantes para partículas do tipo Geldart A realizadas com sucesso, uma vez que há uma tendência em superestimar-se a altura do leito. Segundo o autor este comportamento pode ser atribuído ao fato de a maioria dos modelos não considerar forças significativas entre as partículas, forças essas que levam ao agrupamento das mesmas, resultando em um tamanho efetivo de partícula maior o que resultaria em uma diminuição das forças de arraste e assim menor expansão do leito.

Em outras palavras, em geral a velocidade superficial do gás deve ser menor que a velocidade terminal de uma única partícula, a fim de manter a fluidização estável. Para leitos fluidizados de catalisadores FCC, partículas do tipo Geldart A, a fluidização ainda é estável em velocidades de gás maiores do que a velocidade terminal de assentamento de uma única partícula. Este fenômeno pode ser atribuído às forças coesivas entre as partículas devido à atração de van der Waals, responsável pela formação de *clusters* de partículas e da consequente redução da força de arrasto.

Além do dito anteriormente GAO et al. (2008), menciona que a velocidade terminal de partículas de catalisador de FCC obtidas experimentalmente é em geral muito maior do que aquela calculada por equações de previsão. Caso o leito de partículas seja então modelado como *clusters* de partículas, os diâmetros destes aglomerados estariam na ordem 200-474 μm para partículas de diâmetro igual a 49-71 μm .

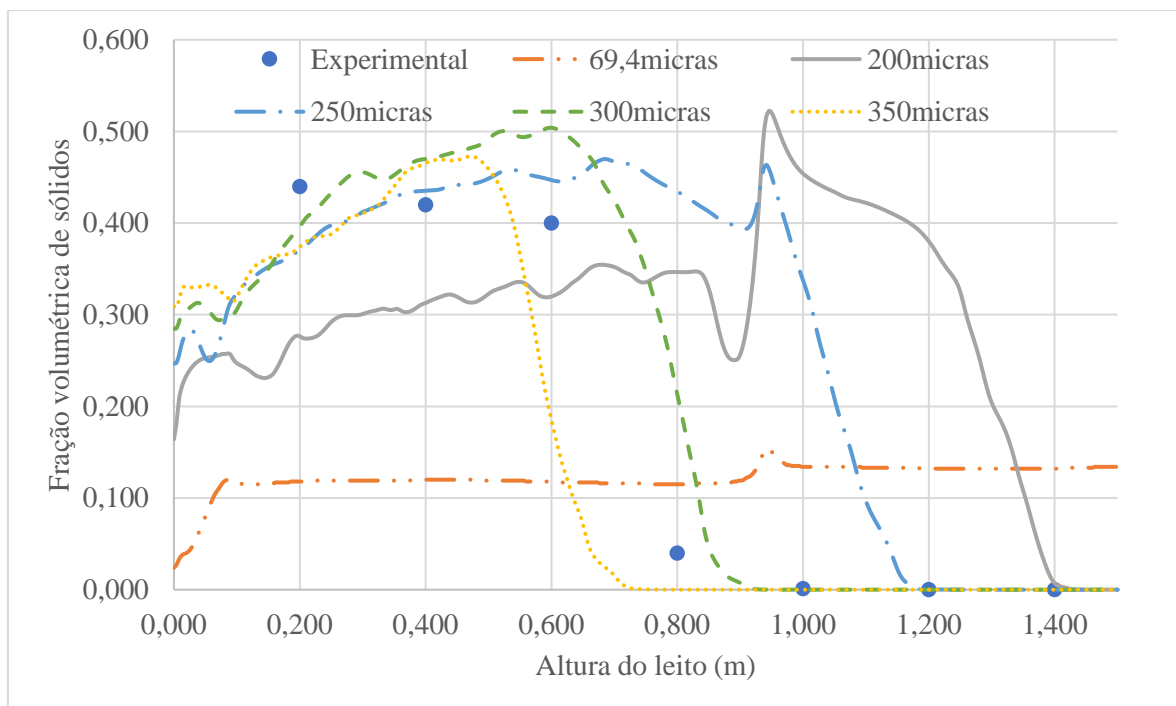
Tendo em vista isto simulou-se para o leito A com a velocidade de 0,4 m/s diferentes diâmetros de partículas de modo a se comparar com os resultados experimentais e então descobrir qual o diâmetro destes *clusters*. Os diâmetros simulados foram de 200, 250, 300 e 350 μm , e a Figura 4.14 compara os perfis da fração volumétrica de sólidos para cada um destes casos com os valores experimentais fornecidos por YAO et al. (2015a) além do já simulado diâmetro de 69,4 μm . Percebe-se que, caso a suposição de que aglomerados de partículas se comportam similarmente a partículas inteiras fosse plausível para o experimento em questão, estes teriam valores de diâmetro entre 300 e 350 μm .

Figura 4.13 Resultados de YAO et al. (2015a) para altura do leito obtidos na unidade experimental estudada



Fonte: Modificado de YAO et al. (2015a)

Figura 4.14. Perfis axiais da fração volumétrica de sólidos para o leito A à 0,4m/s e diferentes diâmetros de partícula



CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Nas simulações realizadas neste trabalho foi possível observar um leito fluidizado de fase densa para as velocidades de 0,1 e 0,2 m/s enquanto para as demais velocidades, 0,3 e 0,4 m/s, o leito simulado foi de fase diluída. Para a maior velocidade observou-se até o transporte de sólidos aliado a diminuição da queda de pressão do leito o que pode indicar a mudança do regime de escoamento de sólidos para o de fluidização rápida ou ainda transporte pneumático.

Não houve mudanças significativas nas variáveis analisadas para os dois valores de leito estático investigados, apenas uma pequena elevação na fração volumétrica de sólidos calculada para o leito de 1,24 m a qual pode estar relacionada ao maior peso exercido por uma massa de partículas maior.

Com relação ao escoamento de sólidos dentro do equipamento observou-se para as três maiores velocidades um movimento descendente das partículas na região do aquecedor e um movimento ascendente das mesmas na região da parede, sendo que as velocidades destas aumentavam de acordo com o aumento da velocidade do gás, indicando assim maior renovação dos sólidos. Sua fração volumétrica, no entanto, diminuía com o aumento da velocidade superficial de gás o que pode ser prejudicial para a mistura de sólidos e assim para o aumento do coeficiente de troca térmica.

Para a menor das velocidades do gás notou-se, oposto aos demais casos, regiões de circulação de sólidos pelo leito além de uma baixa concentração de sólidos próxima ao trocador de calor, quando comparada com o valor predominante pelo leito. Esta diferença no padrão de escoamento entre as três velocidades mais altas e a aquela mais baixa pode sugerir a existência de um ponto ótimo com relação à velocidade superficial do gás o qual maximizaria o coeficiente de troca térmica aliando efetivamente a movimentação dos sólidos dentro do equipamento e sua concentração.

Com relação às correlações e gráficos da literatura utilizados, a menos da queda de pressão, os demais testes não concordaram com os resultados da simulação. As equações para o cálculo da queda de pressão que usavam a relação peso/área do leito e o balanço entre as forças peso e empuxo foram as que mais se aproximaram dos valores simulados.

Tratando-se agora dos dados experimentais fornecidos por YAO et al. (2015a), os resultados da simulação superestimaram a expansão do leito já que no trabalho do mencionado autor a altura máxima encontrada foi de 0,7 e 1,3 m para os leitos de 0,6 e 1,1 m de leito estático respectivamente.

De acordo com discutido em outros estudos, a maioria dos modelos usados para simular partículas do tipo Geldart A não considera forças significativas entre os sólidos, forças essas que levam a formação de *clusters*, resultando em um tamanho efetivo de partícula maior o que resultaria em uma diminuição das forças de arraste e assim menor expansão do leito. Supondo que aglomerados de partículas se comportem de forma similar a partículas isoladas, mas de diâmetro maior estimou-se que os dados experimentais seriam bem representados por um modelo Euleriano-Euleriano de escoamento caso estes sólidos tivessem diâmetro médio entre 300 e 350 μm .

Em vista do aqui apresentado algumas sugestões são propostas para trabalhos futuros:

- Usar uma distribuição de diâmetros de partículas na simulação ao invés de um único diâmetro médio, já que é comum catalisadores industriais apresentarem relativa variância em seus tamanhos;
- Pesquisar e testar modelos para o escoamento de partículas finas do tipo Geldart A, em especial modelos de interação sólidos-sólido;
- Testar a influências dos modelos utilizados, especialmente ao que concerne a abordagem Euleriana e a abordagem Lagrangiana de sólidos além de sua relação com o refinamento das malhas de tempo e espaço.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] ALRAWI, R. A., AHMAD, A. ISMAIL, N. OMAR, A. K. M. Estimating the Richardson-Zaki Index n for Non-Spherical Irregular Natural Sediments in a Concentrated Suspension. **ZJPAS**, v. 28, n. 2, p. 406-411, 2016.

[2] ALZATE-HERNANDEZ, J. D. **CFD simulation of an industrial FCC regenerator**. 2016. 83 f. Tese (Mestrado em Engenharia Química) – Departamento de processos e energia, Universidade Nacional de Colombia – Sede Medellín, Medellín, 2016.

[3] Ansys, Inc. **ANSYS FLUENT 12.0 - Theory Guide**. Ansys, Inc, 2009.

[4] Ansys, Inc. **ANSYS FLUENT 12.0 - UDF Manual**. Ansys, Inc, 2009.

[5] BAI, Y. Heat transfer in the circulating fluidized bed of a commercial catalyst cooler. **Powder Technology**, v. 111, p. 83-93, 2000.

[6] FAHIM, M. A., AL-SAHHAF, T. A., ELKILANI, A. S. **Fundamentals of Petroleum Refining**. Kuwait: Elsevier. 2010. 513 p.

[7] GAO, J. et al. CFD simulation of gas solid flow in FCC strippers. **Chemical Engineering Science**. v. 63, p. 1827-1841, 2008.

[8] GELDART, D. Types of gas fluidization. **Powder Technology**, v. 7. p. 285-292, 1973.

[9] WIKIPEDIA. **Jacobian matrix and determinant**. Disponível em: <https://en.wikipedia.org/wiki/Jacobian_matrix_and_determinant> Acesso em: 21 maio. 2019.

[10] LEE, G. S., KIM, S. D. Bed Expansion Characteristics and Transition Velocity in Turbulent Fluidized Beds. **Powder Technology**, v. 62, p. 207-215, 1990.

[11] MARINI, F. **Simulação de um leito fluidizado aplicando a técnica CFD baseada na teoria cinética do escoamento granular**. 2008. 90 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

[12] MONZON, E. M. L. **Estudo da dinâmica do escoamento gás-sólido em resfriadores de catalisador de FCC usando fluidodinâmica computacional (CFD)**. 2016. 153 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Centro de Ciências Exatas e Tecnologia, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2016.

[13] NILTZ, M., GUARDANI, R. Fluidização Gás-Sólido – Fundamentos e Avanços. **Revista Brasileira de Engenharia Química**, 2008.

[14] SEEG. **Emissões dos Setores de Energia, Processos Industriais e Uso de Produtos**. Disponível em: <<http://seeg.eco.br/wp-content/uploads/2018/05/Relato%CC%81rios-SEEG-2018-Energia-Final-v1.pdf>>. Acesso em: 21 maio. 2019.

[15] WANG, J., VAN DER HOEF, M. A., KUIPERS J. A. M. Why the two-fluid model fails to predict the bed expansion characteristics of Geldart A particles in gas-fluidized beds: A tentative answer. **Chemical Engineering Science**. v. 64, p. 622-625, 2009.

[16] WILCOX, D. C. **Turbulence Modelling for CFD**. Glendale: DCW Industries, Inc. 1993. 477 p.

[17] YANG, W. C. **Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems**. Nova York: Marcel Dekker Inc. 2003. 851 p.

[18] YAO, X., SUN F., ZHANG Y., LU C. Experimental validation of a new heat transfer intensification method for FCC external catalyst coolers, **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 75, p. 19-30, 2014.

[19] YAO, X., ZHANG Y., LU C., HAN, X. Systematic Study on Heat Transfer and Surface Hydrodynamics of a Vertical Heat Tube in a Fluidized Bed of FCC Particles, **AIChE Journal**, v. 61, n.1, p. 68-83, 2015.

[20] YAO, X., ZHANG Y., LU C., HAN, X. Investigation of the Heat Transfer Intensification Mechanism for a New Fluidized Catalyst Cooler, **AIChE Journal**, v. 61, n. 8, p. 2415-2427, 2015.

[21] YAO, X., ZHANG Y., LU C., WEN, D. CFD investigation of gas-solids flow in a new fluidized catalyst cooler. **Powder Technology**, v.304, p. 108-119, 2016.

[22] ZHANG Y., WEI, Q. CPFD simulation of bed-to wall heat transfer in a gas-solids bubbling fluidized bed with an immersed vertical tube. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 116, p. 17-28, 2017.

APÊNDICE A

UDF utilizada para a definição da recirculação de sólidos como condição de contorno e feita com base em ANSYS FLUENT 12.0 – UDF Manual (2009).

```
#include "udf.h"

/* UDF para a recirculação de sólidos em um trocador de calor tipo leito fluidizado -
cálculo da vazão de sólidos arrastada e definição da corrente de recirculação*/

/*Integração da vazão mássica de sólidos que é arrastada e área total da entrada. Para isto é
necessário o código (ID=16) da região de saída, que representa uma estrutura de dados
fornecida pela Ansys Fluent que representa as informações associadas a um conjunto de
células/faces específico (thread data type). Não é necessário a passagem do ID da entrada
de sólidos, no caso 13, pois este é fornecido ao associar-se a UDF ao GUI (caso particular
da função DEFINE_PROFILE)*/

DEFINE_PROFILE(solids_recycle,thread_in,position)

{

/*Inicialização de variáveis*/

real flow_tot = 0.0;

real flux_tot = 0.0;

real flow = 0.0;

int id_out = 16;

/*Este "if" exclui o Host dos cálculos - processamento em paralelo*/

#if !RP_HOST

/*Inicialização das estruturas de dados "domain", "thread" e "face_t". O ID = 3 para a
estrutura domínio representa a fase particulada*/

Domain *d = Get_Domain(3);

Thread *thread_out = Lookup_Thread(d,id_out);
```

```

face_t face;

/*A função "f_loop" realiza operações com os dados de todas as faces de um determinado
thread. No caso está sendo calculado a vazão mássica (Kg/s) da saída (ID = 16) e a área
(m2) de entrada de sólidos (ID = 13)*/

begin_f_loop(face,thread_out)

{

flow += F_FLUX(face,thread_out);

}

end_f_loop(face,thread_out)

/*Este "if" realiza cálculos apenas nos nós de computação*/

#if RP_NODE

/*"PRF_GRSUM1" computa a soma global de uma variável real através de todos os nós de
computação*/

flow_tot = 2*M_PI*PRF_GRSUM1(flow);

flux_tot = flow_tot/0.009237;

#endif

Message("flow_tot %f (Kg/s)\n",flow_tot);

/*"F_PROFILE" atribui um valor para a variável i (o índice i é passado pelo solver ao
associar-se a UDF ao GUI) */

begin_f_loop(face,thread_in)

{

F_PROFILE(face,thread_in,position) = flux_tot;

}

end_f_loop(face,thread_in)

#endif

}

```