

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CAMPUS SÃO CARLOS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

EDGAR MANUEL LUCAR MONZÓN

**ESTUDO DA DINÂMICA DO ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO EM  
RESFRIADORES DE CATALISADOR DE FCC USANDO  
FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**São Carlos**  
2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CAMPUS SÃO CARLOS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

EDGAR MANUEL LUCAR MONZÓN

**ESTUDO DA DINÂMICA DO ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO EM  
RESFRIADORES DE CATALISADOR DE FCC USANDO  
FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)**

Dissertação ou tese apresentada ao  
Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia Química, para obtenção  
do título de mestre em Engenharia  
Química da Universidade Federal  
de São Carlos (UFSCar)

Orientação: Profa. Dra. Gabriela  
Cantarelli Lopes

São Carlos  
2015

## FOLHA DE APROVAÇÃO

EDGAR MANUEL LUCAR MONZÓN

Aos 26/01/2017, às 08:30, realizou-se na Universidade Federal de São Carlos, nas formas e termos do Regimento Interno do Programa de Pós Graduação em Engenharia Química, a Defesa de Dissertação de Mestrado sob o título: Estudo da dinâmica do escoamento gás-sólido em resfriadores de catalisador de FCC usando Fluidodinâmica Computacional (CFD), apresentada pelo candidato Edgar Manuel Lucar Monzón. Ao final dos trabalhos, a banca examinadora reuniu-se em sessão reservada para o julgamento, tendo os membros chegado ao seguinte resultado: APROVADO

ESTUDO DE ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO EM RESFRIADORES DE CATALISADOR DE FCC USANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD).

Dissertação ou tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação, para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química. Área de concentração Controle Ambiental. Universidade Federal de São Carlos. São Carlos, 26 de janeiro de 2017.

---

Profa. Dra. Gabriela Cantarelli Lopes  
**UFSCar**

---

Prof. Dr. Maximilian Joachim Hodapp  
**UNIFEI**

---

Prof. Dr. Rodrigo Béttega  
**UFSCar**

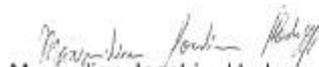
---

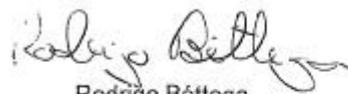
Prof. Dr. Thiago Faggion de Pádua  
**UFSCar**

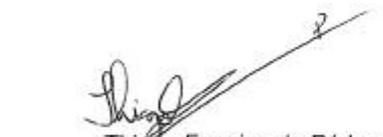
MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE EDGAR MANUEL LUCAR MONZÓN APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 26 DE JANEIRO DE 2017.

BANCA EXAMINADORA:

  
Gabriela Cantarelli Lopes  
Orientadora, UFSCar

  
Maximilian Joachim Hodapp  
UNIFEI

  
Rodrigo Béttega  
UFSCar

  
Thiago Faggion de Pádua  
UFSCar

## **AGRADECIMENTOS**

Este trabalho de dissertação de mestrado realizado na Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), é resultado de um grande esforço apoiado na importante contribuição de muitas pessoas, mediante ânimos e me acompanhando em aqueles momentos difíceis e em outros de vitória e felicidade. Este trabalho permitiu aproveitar a competência e a experiência dessas pessoas que desejo agradecer em esta seção, as quais enriqueceram minhas capacidades.

Agradecer primeiro a Deus pelas bênçãos e oportunidades que colocou na minha vida.

Agradecer aos meus pais, Manuel Lucar Roque e Maria Monzón Gallardo, pela luta, pela confiança, pelo carinho e amor incondicional, já que, graças a eles eu não teria chegado a esta etapa da minha vida com sucesso.

A meu irmão Cristhian e à minha irmã Marycielo, pelas orações e pelas palavras de conforto e por toda uma vida de cumplicidade.

A minha namorada, Maria Eugênia Baldassari e à família dela, pela paciência e pelo amor incondicional.

Aos meus amigos e colegas, com quem compartilhei horas de aulas e estudo nas salas e corredores desta universidade. Pelas muitas histórias e pelos momentos inesquecíveis desta maravilhosa experiência.

Agradecer às pessoas que me apoiaram durante a minha estada aqui no Brasil. Ao Pr. Jarbas e sua família, Marcão e tantos outros amigos que tornaram mais fácil de encarar os sentimentos de saudades por estar em outro país.

A meus professores, Dr. Gabriela Cantarelli Lopes e Dr. Thiago F. Pádua, pela orientação e disponibilidade, pelos conhecimentos adquiridos e pelas muitas importantes contribuições para o trabalho. Foram eles que, com certeza, fizeram parte importante dessa longa caminhada.

A CAPES, pela ajuda financeira mediante a bolsa concedida durante o mestrado.

## **RESUMO**

O craqueamento catalítico fluidizado é um processo amplamente utilizado no campo do refino de petróleo. Na unidade de craqueamento, frações pesadas são transformadas em outras mais leves e com maior valor de mercado (gasolina, diesel, naftas). Após o craqueamento, o catalisador é regenerado e retorna ao reator. A temperatura do catalisador é um parâmetro que possui forte influência sobre o processo. O resfriamento de catalisador é feito em unidades externas a fim de controlar a temperatura de entrada do catalisador no reator. O funcionamento deste sistema ainda foi pouco explorado e o objetivo deste trabalho foi o de simular o escoamento gás-sólido em geometrias características de colunas para resfriamento de catalisador com diferentes condições de operação, assim tentando contribuir com o conhecimento sobre este processo. Técnicas de Fluidodinâmica Computacional foram usadas para a simulação de diferentes geometrias com o programa comercial FLUENT do pacote ANSYS v14.5. As distribuições fração volumétrica dos sólidos e de velocidades do gás e fase particulada foram analisados como parâmetros de interesse hidrodinâmico. Os resultados foram comparados em termos de escoamento gás-sólido em diferentes geometrias e mostraram uma explicação hidrodinâmica diferente da atualmente utilizada pelos autores para justificar a intensificação de troca térmica em este tipo de equipamentos. Em suma, maior contato sólido-parede seria o principal responsável pela transferência eficiente de calor.

Palavras-Chaves: LEITO FLUIDIZADO. CRAQUEAMENTO CATALÍTICO FLUIDIZADO. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL. RESFRIADORES DE CATALISADOR.

## **ABSTRACT**

The fluid catalytic cracking (FCC) is an important process in oil industry, since it converts heavier fractions in lighter ones, which are more valuable. The catalyst particles (typically in the range of 60 to 80  $\mu\text{m}$ ) are deactivated during the reacting process and need to be regenerated before returning to the reactor. Temperature is a key factor that promotes coke formation and deactivation inside the reactor. As a consequence, it is necessary to cool down the solid catalyst particles before returning them to the reactor. The cooling system is usually outside the regenerator in a specific designed heat exchanger, that uses water as cold fluid. The catalyst cooler was not much studied before and many contributions can be made for improvements and intensification. The goal of this work was to contribute with this topic, using Computational Fluid Dynamics (CFD) to evaluate the gas-solid flow behavior in characteristic geometries of the catalyst cooler. Commercial package Fluent by ANSYS v14.5 was used during simulation and Eulerian model was applied for the solid phase. The volume fraction phase for the solid phase, solid and gas velocities were evaluated and described. The results were compared in terms of gas-solids flow in different geometries and showed a hydrodynamic explanation different from that currently used by the authors to justify the intensification of thermal exchange in this type of equipment. In short, longer solid-wall contact time will be primarily responsible for efficient heat transfer.

Key words: FLUIDIZED BED. FLUID CATALYTIC CRACKING. COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS. CATALYST COOLER.

## FIGURAS

FIGURA 1 - Regimes da Fluidização. A) Representação dos Regimes de Fluidização. B) Mapa dos Regimes de Fluidização gás-sólido.....	6
FIGURA 2 – Variação da porosidade com a esfericidade das partículas .....	7
FIGURA 3 - Perfil axial da porosidade do leito .....	8
FIGURA 4 – Movimento das partículas em relação ao diâmetro e comprimento do leito em um regime borbulhante.....	11
FIGURA 5 – Flutuação de pressão com a velocidade de gás injetado, numa transição de regime borbulhante a turbulento .....	13
FIGURA 6 - Queda de pressão em função da velocidade superficial do gás em um leito fluidizado.....	18
FIGURA 7 - Classificação de Geldart para as partículas em condições de temperatura ambiente. Faixa de valores para partículas tipo Geldart (A), tipo Geldart (B), tipo Geldart (C) e partículas tipo Geldart (D). .....	20
FIGURA 8 – Fluxograma típico em um processo de FCC .....	21
FIGURA 9 - Componentes principais de um leito fluidizado nos resfriadores de catalisador.....	23
FIGURA 10 - Esquema de Resfriador de catalisador de tipo down-flow .....	24
FIGURA 11 - Configurações geométricas dos resfriadores de calor considerados nas simulações, segundo os trabalhos de Yao et al., 2014b. A) Esquemático dos resfriadores de catalisador. B) Feixe de nove tubos de troca térmica concêntricos. C) Feixe de oito tubos concêntricos.....	26
FIGURA 12 - Abordagem de modelagem em escoamentos turbulentos .....	31
FIGURA 13 – Distribuidores de ar consideradas na simulação. A) Geometrias testadas por Yao et. al (2015) B) Geometrias testadas por Yao et. al (2014, b). .....	46
FIGURA 14 - Detalhes das geometrias sem realimentação (caso 1). A) Com distribuidor em anel. B) Sem distribuidor em anel.....	48
FIGURA 15 - Detalhes das geometrias sem realimentação (caso 2). A) Com distribuidor em anel. B) Sem distribuidor em anel.....	49
FIGURA 16 – Resfriador de catalisador industrial com tubos de troca térmica. A) Resfriador de catalisador industrial típico. B) Resfriador de catalisador tradicional. C) Tubos de troca térmica com aletas. ....	50
FIGURA 17 – Detalhe da geometrias simulada (caso 3.1) .....	52

FIGURA 18 - Detalhes das geometrias simuladas. A) Caso 3.2. B) Caso 3.3. ....	53
FIGURA 19 – Linha de monitoramento de máxima expansão do leito (Caso 1.2) .....	54
FIGURA 20 - Função definida pelo usuário para o monitoramento da realimentação dos sólidos .....	56
FIGURA 21 – Divisões das arestas: largura e altura (malhas intermediárias). A) Caso 1. B) Caso 2. C) Caso 3. ....	59
FIGURA 22 – Superfícies ou Linhas de monitoramento para avaliar a média de velocidade axial de sólidos e fração volumétrica de sólidos. A) Malha Intermediária do caso 2.1. B) Malha Intermediária do caso 3.1 .....	66
FIGURA 23 – Localização das superfícies de monitoramento para avaliar a média de fração volumétrica de sólidos e o desvio padrão. A) Comparativo global. B) Comparativo na parede exterior. C) Comparativo na parede interior.....	68
FIGURA 24 - Teste de malhas (caso 1.2). A:Campos de fração volumétrica. B: Pressão total em kPa para cada Refinamento da malha caso 1.1. C: Pressão total em kPa para cada Refinamento da malha caso 1.2. ....	70
FIGURA 25 - Fração de volume da fase sólida medida ao longo do tempo em uma linha que atua como eixo no interior da coluna (caso sem distribuidor em anel) .....	71
FIGURA 26 - Campo de fração de sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no resfriador de catalisador com distribuidor em anel. ....	72
FIGURA 27 - Campo de fração de sólidos ao longo do tempo do escoamento gás-sólido no fundo do resfriador de catalisador com distribuidor em anel. ....	73
FIGURA 28 - Campo de fração de sólidos ao longo do tempo no escoamento gás-sólido para o resfriador de catalisador sem distribuidor em anel.....	74
FIGURA 29 – Teste de Malhas após atingir o estado quase estacionário. A) Campo médio de fração volumétrica de sólidos em cada uma das três malhas (caso 2.1). B) Pressão total em Kpa para cada refinamento da malha.....	76
FIGURA 30 - Teste de Malhas após atingir o estado quase estacionário. A) Campo médio de fração volumétrica de sólidos em cada uma das três malhas (caso 2.1). B) Pressão total em Kpa para cada refinamento da malha.....	77
FIGURA 31 - Fração de volume da fase sólida medida ao longo do tempo em uma linha de monitoramento no interior da coluna (caso 2.1). A) Malha grossa. B) Malha intermediária. C) Malha refinada .....	78

FIGURA 32 - Velocidade axial dos sólidos no campo médio transiente após a estabilização para o escoamento gás-sólido no caso 2.1, em diferentes alturas e a diferentes distancias do centro do tubo .....	79
FIGURA 33 - Fração volumétrica dos sólidos no campo médio após a estabilização para o escoamento gás-sólido no caso 2.1, em diferentes alturas e a diferentes distancias do centro do tubo.....	80
FIGURA 34 - Saída e realimentação dos sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 2.1 .....	81
FIGURA 35 - Fração de volume da fase sólida medida ao longo do tempo em uma linha de monitoramento no interior da coluna (caso 2.2).....	82
FIGURA 36 – velocidade axial dos sólidos no campo médio após a estabilização para o escoamento gás-sólido no caso 2.2, em diferentes alturas e a diferentes distancias do centro do tubo.....	83
FIGURA 37 - Fração volumétrica dos sólidos no campo médio após a estabilização para o escoamento gás-sólido no caso 2.2, em diferentes alturas e a diferentes distancias do centro do tubo.....	84
FIGURA 38 - Saída e realimentação dos sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 2.2.....	85
FIGURA 39 - Comparativo dos campos médios da fração volumétrica local dos sólidos dos casos 2.1 e 2.2 em diferentes alturas .....	86
FIGURA 40 - Comparativo dos campos médios de velocidade axial dos sólidos dos casos 2.1 e 2.2 em diferentes alturas .....	87
FIGURA 41 – Teste de malhas. A) Caso 3.1. B) Caso 3.2. C) Caso 3.3.....	89
FIGURA 42 - Fração de volume da fase sólida medida ao longo do tempo em uma linha que atua como eixo no interior da coluna (caso 3.1).....	90
FIGURA 43 - Fração volumétrica dos sólidos no campo médio no caso 3.1. A) Avaliação qualitativa de concentração de sólidos B) Avaliação quantitativa de concentração de sólidos em diferentes alturas do comprimento e diferentes distâncias do centro .....	92
FIGURA 44 - Velocidade axial dos sólidos no campo médio no caso 3.1. A) Avaliação qualitativa de velocidade axial dos sólidos B) Avaliação quantitativa de velocidade axial dos sólidos diferentes alturas do comprimento e diferentes distancias do centro.....	93
FIGURA 45 - Saída e realimentação dos sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 3.1 .....	94
FIGURA 46 - Fração volumétrica de sólidos para o caso 3.2. ....	95

FIGURA 47 - Fração volumétrica dos sólidos no campo médio no caso 3.2. A) Avaliação qualitativa de concentração de sólidos B) Avaliação quantitativa de concentração de sólidos em diferentes alturas do comprimento e diferentes distancias do centro .....	96
FIGURA 48 - Velocidade axial sólidos no campo médio no caso 3.2. A) Avaliação qualitativa de velocidade axial dos sólidos B) Avaliação quantitativa de velocidade axial dos sólidos em diferentes alturas do comprimento e diferentes distancias do centro ...	98
FIGURA 49 - Saída e realimentação dos sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 3.2.....	99
FIGURA 50 – Média Fração volumétrica de sólidos na área (caso 3.3).....	100
FIGURA 51 - Fração volumétrica dos sólidos no campo médio no caso 4.3.3. A) Avaliação qualitativa de concentração de sólidos B) Avaliação quantitativa de concentração de sólidos em diferentes alturas do comprimento e diferentes distancias do centro .....	101
FIGURA 52 - Velocidade axial sólidos no campo médio no caso 3.3. A) Avaliação qualitativa de velocidade axial dos sólidos B) Avaliação quantitativa de velocidade axial dos sólidos em diferentes alturas do comprimento e diferentes distancias do centro .	102
FIGURA 53 - Saída e realimentação dos sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 3.3.....	103
FIGURA 54 - Comparativo dos campos médios da fração volumétrica local dos sólidos dos casos 3.1, 3.2 e 3.3, em diferentes alturas.....	104
FIGURA 55 - Comparativo dos campos médios de velocidade axial dos sólidos dos casos 3.1, 3.2 e 3.3, em diferentes alturas .....	106
FIGURA 56 - Comparativo da média transiente e Desvio Padrão global dos sólidos no estado estabilizado, para os casos 3.1, 3.2 e 3.3. ....	108
FIGURA 57 - Comparativo da média transiente e Desvio Padrão na região exterior, dos sólidos no estado estabilizado, para os casos 3.1, 3.2 e 3.3.....	110
FIGURA 58 - Comparativo da média transiente e Desvio Padrão na região interna, dos sólidos no estado estabilizado, para os casos 3.1, 3.2 e 3.3.....	111
FIGURA 59 - Gasto computacional para os casos 1.1 e 1.2 .....	121
FIGURA 60 - Gasto computacional para os casos 2.1 e 2.2 .....	122
FIGURA 61- A) Malhas com nós centrados nos elementos. B) Malha com nós centrados nos vértices. ....	128
FIGURA 62 – Malhas bidimensionais de volumes finitos. A) Formulação centrada nas células. B) Formulação centrada nos vértices. ....	130

## TABELAS

TABELA 1 – Correlações matemáticas para o início e finalização da transição a regime turbulento.....	14
TABELA 2 – $(C_D \times Rep^2) \times Rep$ .....	15
TABELA 3 – Resumo dos estudos relacionados com Resfriadores de catalisador industrial.....	27
TABELA 4 - Tempos considerados para cada caso (s) na simulação .....	40
TABELA 5 - Critério de convergência no setup do processo .....	40
TABELA 6 - Propriedades de ar e do catalisador usadas na simulação.....	45
TABELA 7 - Resumo de características de unidades de resfriamento para os casos 1 e 2 .....	45
TABELA 8 - Resumo de características de unidades de resfriamento para o caso 3....	46
TABELA 9 - Resumo dos casos considerados nas simulações .....	53
TABELA 10 - Velocidades de Fluidização para cada caso .....	55
TABELA 11 - Número de células para cada uma das malhas testadas. Casos 1.1 e 1.2. ....	57
TABELA 12 - Número de células para cada uma das malhas testadas. Casos 2.1 e 2.2. ....	58
TABELA 13 - Número de células para cada uma das malhas testadas. Casos 3.1 e 3.2 e 3.3.....	58
TABELA 14 - Detalhes de divisões das arestas (largura e altura) e Razões de crescimento (axial e radial) .....	60
TABELA 15 – Métodos de Resolução.....	62
TABELA 16 – Parâmetros de qualidade utilizados nas malhas, para todos os casos ...	63
TABELA 17 - Gasto computacional para o caso 3.....	122

## NOMENCLATURA

### Letras Latinas

$A$	Área superficial	$[m^2]$
$Ar$	Número de Arquimedes	
$C_D$	Coefficiente de arraste	
$d_p$	Diâmetro da partícula	$[m]$
$e$	Coefficiente de restituição de sólidos	
$g$	Aceleração da gravidade	$[m.s^{-2}]$
$g_0$	Função de distribuição radial	
$G_k$	Energia cinética turbulenta	$[m^2s^{-2}]$
$\bar{I}$	Tensor unitário	
$k$	Energia cinética turbulenta	$[m^2s^{-2}]$
$\dot{m}_s$	Vazão mássica dos sólidos	$[kg.s^{-1}]$
$P_s$	Pressão dos sólidos	$[Pa]$
$Pr$	Número de Prandtl	
$Re$	Número de Reynolds	
$Re_{mf}$	Número de Reynolds na mínima fluidização	
$Re_p$	Número de Reynolds da partícula.	
$u_0$	Velocidade superficial do gás	$[m.s^{-1}]$
$u^+$	Velocidade adimensional próximo à parede	
$u_{mf}$	Velocidade mínima da fluidização	$[m.s^{-1}]$
$v_t$	Velocidade terminal da partícula	$[m.s^{-1}]$

$v_{tr}$	Velocidade de transporte das partículas	[m.s <sup>-1</sup> ]
$y^+$	Distancia adimensional próxima à parede	

#### Letras gregas

$\alpha$	Fração volumétrica de sólidos	
$\alpha_{s,max}$	Fração volumétrica máxima de sólidos	
$\beta$	Transferência de quantidade de movimento entre as fases	[kg.m <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\varepsilon$	Porosidade do leito	
$\varepsilon_{mf}$	Porosidade do leito na fluidização mínima	
$\epsilon$	Dissipação turbulenta	[m <sup>2</sup> .s <sup>-3</sup> ]
$\theta$	Energia pseudo-térmica	[J]
$\phi_s$	Esfericidade das partículas sólidas	
$\mu_g$	Viscosidade dinâmica do gás	[kg.m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\rho$	Densidade da partícula ou densidade <i>bulk</i> da partícula	[kg.m <sup>-3</sup> ]
$\rho_g$	Massa específica do gás	[kg.m <sup>-3</sup> ]
$\rho_s$	Densidade dos sólidos	[kg.m <sup>-3</sup> ]
$\bar{\tau}$	Tensor de viscosidade	[Pa.]
$\omega$	Frequência turbulenta	[s <sup>-1</sup> ]

#### Subscritos

$g$ : Fase gasosa

$p$ : Fase particulada

# SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	1
<b>1.1. Objetivos</b> .....	4
1.1.1. Objetivos gerais .....	4
1.1.2. Objetivos específicos .....	4
<b>1.2. Estrutura do trabalho</b> .....	4
<b>2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	5
<b>2.1. Fluidização</b> .....	5
2.1.1. Regimes de Fluidização .....	5
2.1.2. Parâmetros que influenciam a fluidização .....	17
2.1.3. Pressão no leito .....	18
2.1.4. Classificação das partículas .....	19
<b>2.2. Craqueamento Catalítico Fluidizado</b> .....	21
<b>2.3. Resfriadores de catalisador industrial</b> .....	22
<b>2.4. Estudos sobre resfriadores de catalisador industrial</b> .....	24
<b>2.5. Modelagem do escoamento gás-sólido</b> .....	28
2.5.1. Teoria Cinética do Escoamento Granular (KTGF) .....	29
2.5.2. Turbulência .....	31
2.5.3. Tratamentos de parede .....	33
2.5.4. Forças de arraste .....	35
<b>3. METODOLOGIA</b> .....	37
<b>3.1. Esquema de simulações computacionais</b> .....	38
<b>3.2. Modelagem matemática</b> .....	40
3.2.1. Equações de continuidade .....	40
3.2.2. Equações de quantidade de movimento .....	41
3.2.3. Equações da Teoria Cinética Granular do Escoamento (KTGF) .....	41
3.2.4. Equações para modelagem do arraste .....	43
3.2.5. Equações para a modelagem do efeito da Turbulência .....	43
<b>3.3. Sistema simulado</b> .....	44
3.3.1. Propriedades das fases .....	44
3.3.2. Configuração geométrica do resfriador simulado .....	45
3.3.3. Definição do sistema simulado .....	47

3.3.4.	Condições operacionais e condições de contorno usadas nas simulações	53
3.3.5.	Esquema da Função Definida pelo Usuário .....	55
<b>3.4.</b>	<b>Malhas numéricas empregadas</b> .....	<b>57</b>
3.4.1.	Número de células empregadas para cada teste de malha .....	57
3.4.2.	Refinamento da malha. ....	58
<b>3.5.</b>	<b>Esquemas de interpolação para resolução do equacionamento nos casos simulados.</b> .....	<b>61</b>
<b>3.6.</b>	<b>Parâmetros de qualidade na malha</b> .....	<b>62</b>
3.6.1.	Determinante 3 x 3 x 3. ....	62
3.6.2.	Razão de aspecto ( <i>Aspect Ratio</i> ) .....	63
<b>3.7.</b>	<b>Análise e tratamento posterior do comportamento dos sólidos no estado quase estacionário.</b> .....	<b>65</b>
3.7.1.	Média de velocidade axial e fração de sólidos. ....	65
3.7.2.	Média de fração de sólidos na área das paredes dos tubos e desvio padrão. ....	67
<b>4.</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b> .....	<b>69</b>
<b>4.1.</b>	<b>Caso 1: Resultados das simulações de geometria de resfriador de catalisador de FCC sem realimentação de sólidos</b> .....	<b>69</b>
4.1.1.	Teste de malhas .....	69
4.1.2.	Apresentação e análise de resultados (malha intermediária).....	70
	Caso 1.1: Resfriador de catalisador com distribuidor central e distribuidor em anel e comentários gerais.....	71
	Caso 1.2: Resfriador de catalisador com distribuidor pleno, sem distribuidor em anel e comentários gerais .....	73
<b>4.2.</b>	<b>Caso 2: Resultados das simulações de geometrias de Resfriador de catalisador de FCC com realimentação de sólidos</b> .....	<b>75</b>
4.2.1.	Teste de malhas e análise da expansão do leito e da UDF .....	75
4.2.2.	Resultados e análise das simulações para a malha intermediária.....	77
	Caso 2.1: Resfriador de catalisador com distribuidor de prato perfurado central, distribuidor em anel e realimentação de sólidos .....	77
	Caso 2.2: Resfriador de catalisador com distribuidor pleno, sem distribuidor em anel e realimentação de sólidos. Comentários gerais. ....	81
4.2.3.	Comparação entre os casos 2.1 e 2.2 .....	85
<b>4.3.</b>	<b>Caso 3: Resultados das simulações de geometria de resfriador de catalisador de FCC com tubos internos e realimentação de sólidos.</b> .....	<b>88</b>
4.3.1.	Teste de malhas .....	88

4.3.2.	Caso 3.1: Resfriador de catalisador com nove tubos de troca térmica, distribuidor em anel e realimentação de sólidos. ....	89
4.3.3.	Caso 3.2: Resfriador de catalisador com oito tubos de troca térmica, distribuidor em dupla (prato perfurado central e anelar) e realimentação de sólidos. ....	94
4.3.4.	Caso 3.3: Resfriador de catalisador com oito tubos de troca térmica, distribuidor de prato perfurado central e realimentação.....	99
4.3.5.	Comparação entre os casos 3.1, 3.2 e 3.3 .....	103
4.3.6.	Avaliação do comportamento dos sólidos nas paredes para troca térmica para os casos 3.1, 3.2, e 3.3. ....	106
<b>5.</b>	<b>CONCLUSÕES</b> .....	<b>113</b>
<b>6.</b>	<b>SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS</b> .....	<b>115</b>
<b>7.</b>	<b>REFERÊNCIAS</b> .....	<b>116</b>
	<b>APÊNDICE - A</b> .....	<b>121</b>
	<b>ANEXO - A</b> .....	<b>123</b>
	<b>ANEXO - B</b> .....	<b>127</b>
	<b>ANEXO - C</b> .....	<b>135</b>

## 1. INTRODUÇÃO

O aumento do consumo de petróleo no mundo teve como consequência a busca pela indústria por novas formas de maximizar a produção de fontes de energia a partir dos seus derivados. Para o ano 2015, o informe mensal proposto pela Organização de Países Exportadores do Petróleo mostra que houve um acréscimo de 1,38% na demanda mundial do petróleo entre os anos 2014 e 2015 (92,7 milhões de barris por dia) e estima-se que, para o ano 2016, o consumo diário atingirá os 94,07 milhões de barris por dia (OPEP, 2015).

Um exemplo claro da necessidade dos produtos derivados do petróleo é o consumo de combustível que precisa a indústria dos veículos. Produtos como diesel e gasolina se tornaram uma importante fonte de energia para o transporte de pessoas e bens, sendo a gasolina o produto mais usado.

Segundo os dados estatísticos fornecidos pela Agência Nacional do Petróleo (ANP, 2012), o Brasil totalizou um consumo de 39,6 bilhões em litros em 2012, ante os 35,4 bilhões de 2011, representando um aumento de 7%. Portanto a situação sugere um desafio de maximizar a produção de gasolina para a provisão de todos os mercados que a consomem.

Existem vários processos que podem ser aplicados no Refinamento do Petróleo, entre os quais podem-se citar: Destilação Simples, Destilação Vácuo, Redução de Viscosidade, etc. No entanto, as frações pesadas que não podem ser processadas são enviadas para o Craqueamento Catalítico Fluidizado (FCC, do inglês *Fluid Catalytic Cracking*), onde são convertidas em frações mais leves de maior valor agregado.

O FCC consiste em uma série de processos complexos nos quais são desenvolvidas inúmeras reações catalíticas (em sua maioria endotérmicas) promovidas pela superfície ativa das partículas do catalisador, num reator em leito circulante junto com as frações de petróleo.

Um dos fatores mais importantes para este processo é o rendimento da reação proporcionada pelos sítios ativos do catalisador, os quais depois das reações catalíticas ficam preenchidos pelo coque por causa das reações de craqueamento. A regeneração de catalisador é feita numa outra unidade onde o coque é queimado, sendo este último um processo exotérmico.

No reator de leito fluidizado circulante, a temperatura de catalisador é um parâmetro muito importante a ser controlado: temperaturas baixas podem diminuir a eficiência da reação catalítica e temperaturas altas ocasionam a formação mais acentuada do coque afetando a atividade do catalisador. Em consequência, a unidade de craqueamento perderia produto com maior valor de mercado, o que supõe uma punição no preço da gasolina e uma queda das economias nas refinarias.

Atualmente, o resfriamento é feito em unidades externas ao regenerados, chamados de resfriadores de catalisador. Mediante trocadores de calor (usando água como fluido de resfriamento e ar como fluido de arraste) o catalisador é resfriado pelo contato das partículas fluidizadas com as paredes dos tubos de troca térmica. A importância da unidade de resfriamento mencionada e a escassez de trabalhos nessa linha motivaram o desenvolvimento dessa dissertação. Dependendo do tipo de resfriador e das condições de operação, o escoamento nos resfriadores de catalisador pode remeter tanto à configuração de um leito fluidizado, como aos escoamentos sob maior velocidade superficial do gás, envolvendo a fluidização rápida ou regime de fluidização turbulenta.

Nos processos industriais, é comum observar escoamentos multifásicos, entre os quais podem-se citar os escoamentos gás-sólido, como o que ocorre no Craqueamento Catalítico Fluidizado ou combustão de coque nas refinarias, transporte pneumático ou torrefação de sulfetos nas mineradoras.

Devido à importância dos escoamentos gás-sólidos e inúmeros processos industriais, é essencial o conhecimento da fluidodinâmica em um leito fluidizado, já que permite a otimização do processo existente e a compreensão de suas limitações (SANTOS, 2011). Porém, apesar de anos de aplicações destes fenômenos na indústria, as pesquisas realizadas mostram que a complexidade dos escoamentos gás-sólido é de natureza dinâmica de difícil previsão.

Sendo assim, o aprimoramento nos rendimentos dos leitos fluidizados requer conhecimento sobre a natureza dos escoamentos multifásicos. Mas, a alta complexidade destes escoamentos na fluidização pode ser um grande problema para descrever o comportamento desses sistemas. Assim, resulta a difícil modelagem do fenômeno, a qual implica várias equações de balanço diferenciais parciais não lineares. Além disso, muitas vezes estes equacionamentos precisam de correlações empíricas desenvolvidas no laboratório, com condições controladas para o fechamento do problema. Por tudo isto,

inúmeros esforços significativos têm sido investidos no desenvolvimento de modelos numéricos para estudar a fluidodinâmica dos escoamentos multifásicos.

Apesar de este tipo de escoamento ser amplamente usado pelos resfriadores de catalisador na indústria de refino, estes equipamentos têm sido estudados mediante dados experimentais e planta piloto, sem métodos analíticos e de modelagem que permitam a caracterização e previsão das variáveis de processo e do comportamento de escoamento gás-sólido no sistema. Ensaios experimentais requerem grandes investimentos e, pela alta complexidade, é importante aliá-los ao emprego de modelos matemáticos para a previsão do comportamento do escoamento gás-sólido (BARBOSA, 2012). Efetivamente, foram estas razões que estimularam o desenvolvimento de pesquisas de simulação numérica usando Fluidodinâmica Computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*) para o escoamento gás-sólido em vários processos, como o leito circulante (reator de Craqueamento Catalítico), leitos de jorro e fluidizado.

Em suma, para otimizar os resfriadores industriais é necessário entender o comportamento do escoamento de gás e de material particulado em conjunto, além de seus efeitos sobre as propriedades de transferência de calor de um resfriador de catalisador externo. Num contexto global, são poucos os trabalhos com estudos destes equipamentos.

Neste trabalho, propõe-se um estudo para a determinação da fluidodinâmica gás-sólido num resfriador de catalisador industrial, simulando um sistema de tipo leito fluidizado circulante por meio de uma modelagem numérica. Por conseguinte, foi aplicado o Método dos Volumes Finitos por meio do programa computacional ANSYS FLUENT v14.5, para prever parâmetros fluidodinâmicos de escoamento de interesse, como os campos de velocidade axial dos sólidos e distribuição de concentração após o sistema atingir um estado estável.

Diferentes configurações bidimensionais foram simuladas e os resultados, avaliados de acordo com a dinâmica de escoamento. Além disso, condições de contorno baseadas nas informações experimentais reportadas na literatura (YAO et al., 2014; YAO et al., 2015) foram impostas ao modelo computacional e foram avaliadas em termos de escoamento, considerando a realimentação de sólidos para manter o seu inventário contínuo. As malhas numéricas foram geradas no programa computacional ICEM CFD v14.5, seguindo os parâmetros de qualidade para a boa construção da malha. O

escoamento gás-sólido foi simulado nas configurações geométricas distintas para avaliar suas características.

Este trabalho será um ponto de partida para estudos posteriores referidos a estes equipamentos, nos quais pretendem-se incluir a transferência de calor e realizar simulações tridimensionais com condições de contorno similares ao do trabalho dessa dissertação.

## **1.1. Objetivos**

### **1.1.1. Objetivos gerais**

Neste trabalho, o principal objetivo foi estudar o comportamento do escoamento gás-sólido dentro de um resfriador de catalisador de FCC utilizando a Fluidodinâmica Computacional como ferramenta, visando a buscar condições operacionais que melhorem a transferência de calor neste equipamento.

### **1.1.2. Objetivos específicos**

Dentro dos objetivos específicos deste trabalho, se destacaram os seguintes:

- simular o escoamento gás-sólido em geometrias características dos resfriadores de catalisador encontradas na literatura;
- obter os campos de velocidade de gás e velocidade axial e de fração volumétrica dos sólidos nessas geometrias;
- analisar o comportamento do escoamento gás-sólido obtido e comparar os resultados para as diferentes geometrias.

## **1.2. Estrutura do trabalho**

No capítulo 2 deste trabalho é apresentada uma fundamentação teórica sobre o tema desta dissertação enfatizando principalmente os aspectos relacionados ao processo da fluidização e a operação no leito fluidizado circulante, além disso, é revisada também a caracterização das partículas. São apresentadas as equações de conservação da massa e de quantidade de movimento, e equações de fechamento para a resolução do problema. A teoria cinética do escoamento granular e o modelo de turbulência usados também são descritos brevemente.

No capítulo 3 do trabalho é apresentada a metodologia que foi empregada para o estudo numérico proposto, onde também destacam-se a geração da malha e as condições de contorno utilizadas.

No capítulo 4 são apresentados os resultados e a discussão de cada uma das geometrias consideradas para a simulação. Por fim, no capítulo 5 são apresentadas as conclusões do trabalho.

## **2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

Este capítulo apresenta uma revisão da literatura sobre os fundamentos teóricos de interesse que são envolvidos neste estudo, tais como: características dos regimes de fluidização, características dos leitos fluidizados circulantes, características e propriedades das partículas (sólidos) e as variáveis analisadas (queda de pressão, campos de velocidades de sólidos e do gás e concentração de sólidos ao longo do tempo). A revisão da fluidização torna-se importante no contexto desta dissertação, já que, resfriadores de catalisador podem operar em diversos regimes de fluidização e com diferentes níveis de aeração.

Posteriormente são descritos os tipos de resfriadores de catalisador existentes na indústria e também é apresentada a revisão bibliográfica dos trabalhos de pesquisa encontrados na literatura científica e técnica, de maneira sucinta. Finalmente, são revisados os princípios teóricos dos fenômenos envolvidos no escoamento gás-sólido.

### **2.1. Fluidização**

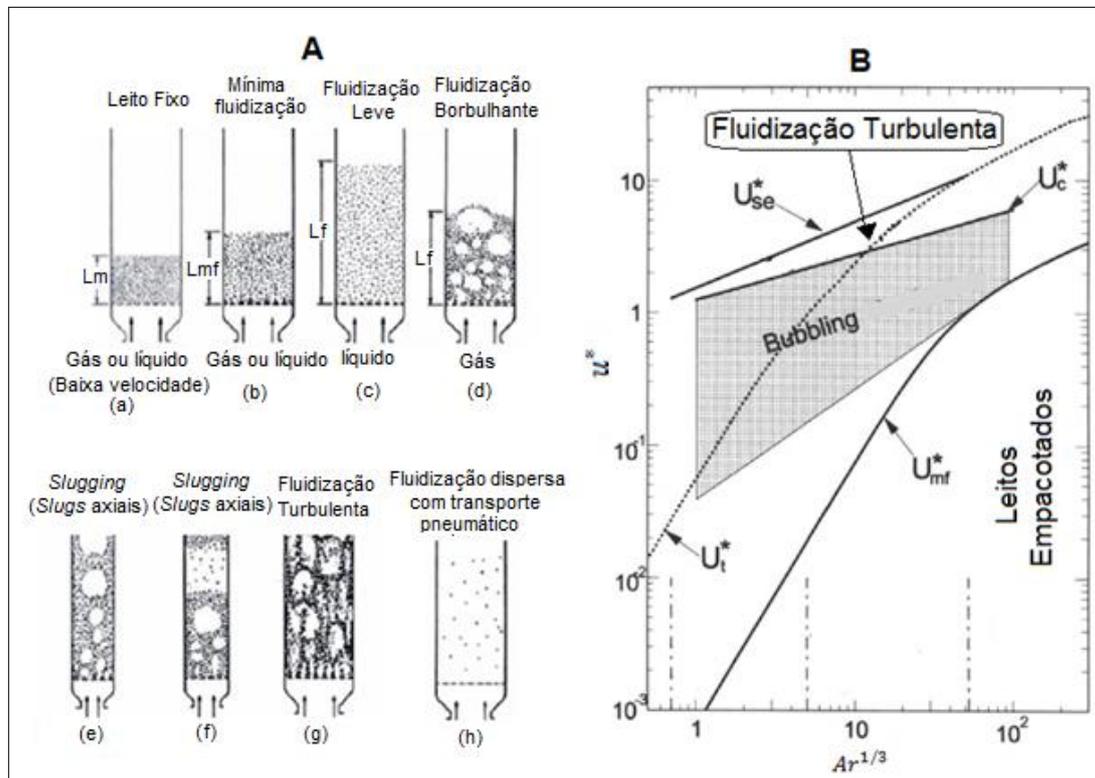
A fluidização é definida como um processo no qual um leito de partículas sólidas é suspenso pela ação de um gás ou líquido que atravessa em sentido ascendente, fazendo com que este adquira um comportamento semelhante ao de um fluido (BARREIRA MORENO, 2007).

#### **2.1.1. Regimes de Fluidização**

A velocidade superficial com que o gás atravessa o sistema é um parâmetro importante que define o comportamento de um leito num processo de fluidização. Dependendo da velocidade de gás injetada do gás, podem-se observar diferentes graus de influência sobre a fase sólida à medida que a velocidade de gás aumenta. Isso é mostrado na Figura 1, a qual apresenta a classificação mostrada por Grace e colaboradores (1997) dos regimes de fluidização numa coluna em um leito de partículas sólidas inicialmente

em repouso e submetida à passagem de um fluido injetado através de um distribuidor (ALMEIDA, 2015).

FIGURA 1 - Regimes da Fluidização. A) Representação dos Regimes de Fluidização. B) Mapa dos Regimes de Fluidização gás-sólido.



Fonte: MODIFICADO (GRACE et al., 1997).

### Leito Fixo

Quando o ar passa ascendentemente através de um leito de partículas com velocidades baixas, passando simplesmente pelos interstícios entre as partículas sem movimentar o leito, o sistema é denominado de leito fixo. Esta condição é mostrada na Figura 1a. Neste ponto, a velocidade superficial do gás é menor que a velocidade mínima de fluidização (GRACE et al., 1997).

Com o incremento da velocidade, atinge-se uma condição onde as partículas são suspensas pelo fluido e assim aumentam os interstícios entre elas. Neste ponto, haverá aproximadamente um equilíbrio entre a força de arrasto exercida pelo fluido e o peso das partículas.

### Regime de fluidização mínima

O regime de fluidização mínima é caracterizada quando uma corrente de gás é injetada sobre um leito a uma velocidade tal que a fluidização desse leito começa a ser

patente. Desta maneira, uma diminuição mínima na velocidade do gás injetado provocaria um estado no qual o leito não estaria fluidizado e se encontraria no estado de fluidização incipiente. E diminuindo-a ainda mais, o estado de leito expandido passaria a ser um estado de leito fixo (LOPEZ, 2009).

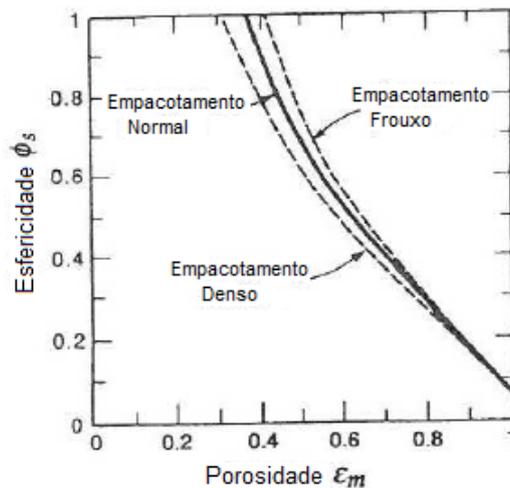
Assim, a velocidade do gás injetado deverá ser a suficiente como para que as partículas fiquem suspensas e flutuem na corrente do gás que atravessa o leito (Figura 1b).

Neste regime onde as partículas deixam de comportar-se como um conjunto sólido com uma porosidade característica e apresentam características próprias de um fluido. Nesse sentido, o aumento da porosidade é evidente (LOPEZ, 2009).

A porosidade do leito é importante para a caracterização de leitos fixos e móveis. Essa grandeza é definida como a razão entre o volume vazio em relação ao volume total do leito (ALMEIDA, 2015).

A pressão necessária para conseguir a fluidização do leito é função da esfericidade das partículas e a porosidade do leito. Assim, podemos observar que, na Figura 2, a esfericidade e a porosidade estão relacionadas de forma indireta.

FIGURA 2 – Variação da porosidade com a esfericidade das partículas



Fonte: MODIFICADO (LÓPEZ, 2009).

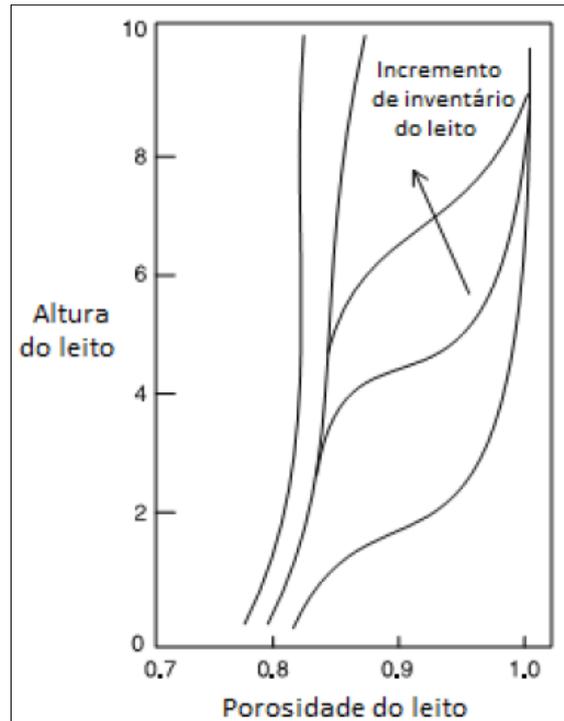
Há uma variação da porosidade que experimenta o leito quando passa ao estado de mínima fluidização, pois a distância entre as partículas aumenta, portanto, a porosidade também aumentará (LOPEZ, 2009).

A porosidade global num leito pode ser calculada de forma geral pela equação 1:

$$\varepsilon = \frac{\text{volume de vazios}}{\text{volume total}} = 1 - \frac{\text{volume de sólido}}{\text{volume do leito}} \quad (1)$$

Nos leitos fluidizados, a queda de pressão entre dois pontos da coluna depende da velocidade superficial de gás e do inventário dos sólidos. Isto ocasiona variações na porosidade do leito e nas regiões densa e diluída no interior da coluna (GELDART, 1986), como pode ser visto na Figura 3.

FIGURA 3 - Perfil axial da porosidade do leito



Fonte: ADAPTADO (BASU, 2006; ALMEIDA, 2015).

A porosidade do leito tem uma grande influência nas perdas de carga e é afetada pelo diâmetro, pela geometria e as características da partícula, e pelo diâmetro da coluna onde está depositada (YAO et al., 2014).

#### Velocidade mínima de fluidização

Durante a fluidização, o leito se expande lentamente mantendo ainda as partículas com contato intermitente, a porosidade aumenta e a queda de pressão aumenta mais lentamente. Vale a pena destacar que a expansão do leito em fluidização livre de bolhas, uma correlação matemática para calcular a velocidade mínima de fluidização é apresentada, baseado nos trabalhos de Wen e Yu (1996) (Equação 2).

$$Re_{p,mf} = \sqrt{27,2^2 + 0,0408Ar} - 27,2 \quad (2)$$

Onde,

$$Ar = \frac{\rho_g(\rho_s - \rho_g)dp^3 g}{\mu_g^2} \quad (3)$$

$$u_{mf} = \frac{Re_{p,mf}\mu_g}{\rho_g dp} \quad (4)$$

em que  $Re_{p,mf}$  é o número de Reynolds da partícula na velocidade mínima da fluidização,  $Ar$  é o número de Arquimedes,  $\rho$  é a massa específica,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica,  $dp$  é o diâmetro da partícula e  $g$  é a aceleração da gravidade. Os subscritos mf, p e g referem-se, respectivamente, à condição mínima de fluidização, à fase sólida e à fase gasosa.

Há inúmeros estudos experimentais para prever a velocidade mínima de fluidização, e também a dependência que existe com vários fatores, tais como a esfericidade, o diâmetro da partícula, densidade do fluido, viscosidade entre outros; a qual pode ser calculada mediante a Equação 5, que é uma correlação matemática baseada na equação de Ergun (1952) (Equação 6):

$$\frac{dp^3 \rho(\rho_p - \rho_g)g}{\mu_g^2} = 150 \frac{(1 - \varepsilon_{mf})}{\phi_s dp^3} \left( \frac{dp \rho_g u_{mf}}{\mu_g} \right) + \frac{1.75}{\phi_s \varepsilon_{mf}^3} \left( \frac{dp \rho_g u_{mf}}{\mu_g} \right)^2 \quad (5)$$

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1 - \varepsilon)^2 \mu_g}{\phi_s^2 \varepsilon^3 dp^2} u + 1.75 \frac{(1 - \varepsilon) \rho_g}{\phi_s \varepsilon^3 dp} u^2 \quad (6)$$

Onde  $\varepsilon_{mf}$  e  $u_{mf}$  são a porosidade e a velocidade na fluidização mínima, respectivamente;  $\phi_s$  é a esfericidade do sólido,  $dp$  é o diâmetro da partícula e  $\mu_g$  é a viscosidade do gás.

O primeiro termo à direita da igualdade das Equações 5 e 6 significa as perdas viscosas e o segundo termo significa as perdas pela energia cinética (HERNANDEZ, 2009).

Para o regime laminar o termo final das Equações 5 e 6 pode ser negligenciado, já que para o regime turbulento o primeiro termo é insignificante em relação ao segundo termo (ALMEIDA, 2015). Sendo assim, a equação de Ergun pode ser simplificada:

$$u_{mf} = \frac{(\phi_s dp)^2 (\rho_s - \rho_g) g \varepsilon_{mf}^3}{150 \mu_g (1 - \varepsilon_{mf})} \quad \text{para } Re_{p,mf} < 20 \quad (7)$$

$$u_{mf} = \left[ \frac{(\phi_s dp)(\rho_s - \rho_g) g \varepsilon_{mf}^3}{1.75 \rho_g} \right]^{1/2} \quad \text{para } Re_{p,mf} > 100 \quad (8)$$

em que  $\phi_s$  é a esfericidade da fase particulada,  $\varepsilon_{mf}$  é a porosidade do leito na condição mínima de fluidização.

Simplificando o número de Reynolds para os valores extremos, pode-se obter as equações apresentadas por Kunii e Levenspiel (1980) para calcular as velocidades mínimas de fluidização.

$$u_{mf} = \frac{(dp)^2(\rho_s - \rho_g)g}{1650 \mu} \quad \text{para } Re_{p,mf} = \left(\frac{dp \rho_g u_{mf}}{\mu}\right) < 20 \quad (9)$$

$$u_{mf} = \frac{(dp)^2(\rho_s - \rho_g)g}{24.5 \rho_g} \quad \text{para } Re_{p,mf} > 1000 \quad (10)$$

Também pode-se utilizar a Equação 11 (WANG, 2003):

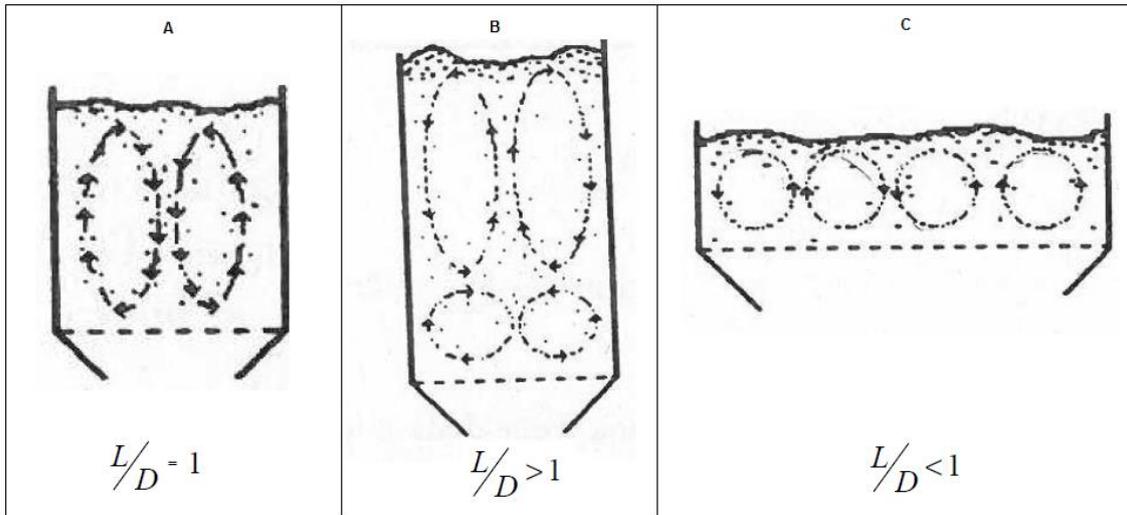
$$u_{mf} = \frac{\mu}{dp \rho_g} \left\{ [28,7^3 + 0.0494 \left( \frac{dp^3 \rho (\rho_s - \rho_g) g}{\mu^2} \right)^{\frac{1}{2}} - 28,7] \right\} \quad (11)$$

### **Regime de fluidização borbulhante**

O regime de fluidização borbulhante está presente nos leitos fluidizados com velocidades de gás acima da velocidade mínima de fluidização. A representação deste tipo de regime é mostrada na Figura 1d.

Neste regime aparecem bolhas que se deslocam até a superfície livre do leito, crescendo em seu percurso devido à coalescência entre as bolhas, arrastando as partículas que caem novamente sobre o leito. Neste regime pode existir transporte, mas não é significativo, portanto não é necessária a recuperação de partículas arrastadas pelas bolhas. Este movimento das partículas é cíclico, e será controlada em grande parte pela geometria dos injetores proporcionadores de gás e da geometria do leito (LOPEZ, 2009). Na Figura 4 se mostra a morfologia de movimento das partículas em relação ao diâmetro e comprimento do leito, em um leito borbulhante:

FIGURA 4 – Movimento das partículas em relação ao diâmetro e comprimento do leito em um regime borbulhante



Fonte: ADAPTADO (LOPEZ, 2009).

Como foi exposto anteriormente, o movimento das partículas mostradas na Figura 4 pode ser alterada mediante o emprego e combinações dos injetores proporcionadores de gás que são utilizados. O uso de injetores podem causar a aparição de canalizações do ar.

Cabe ressaltar que este tipo de regime não aparece em todos os leitos, devido às diferentes geometrias de partículas que podem ser utilizadas em um leito fluidizado.

Inúmeras pesquisas forma propostas para descrever a morfologia das bolhas formadas e seu comportamento de forma quantitativa. O modelo mais aceito foi proposto pelos pesquisadores Tooney e Jhonstone (GELDART e ABRAHAMSEN, 1978; GRACE et al., 1980), cuja correlação matemática aparece na Equação 12:

$$d_b = 0.65 \left[ \frac{\pi}{4} D^2 (u_0 - u_{mf}) \right]^{0.6} \quad (12)$$

Velocidade com que as partículas ascendem:

$$u_b = 0.711 \sqrt{g d_b} \quad (13)$$

Fração volumétrica dos sólidos:

$$\delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b - u_{mf}} \quad (14)$$

Porosidade do leito:

$$\varepsilon_f = \varepsilon_b \delta + (1 - \delta) \varepsilon_p \text{ onde } \varepsilon_b = 1 \quad (15)$$

Altura do leito:

$$H = H_{mf} \left( \frac{1 - \varepsilon_{mf}}{1 - \varepsilon_f} \right) \quad (16)$$

### ***Slugging***

Este regime é caracterizado pela coalescência das bolhas até que estas ocupam toda a seção do leito em uma altura determinada (Figuras 1e e 1f). Desta maneira, é produzido o levantamento de um conjunto de partículas de forma periódica e sem controle determinado (LOPEZ, 2009).

Aparecem grande variações na pressão do leito que, muitas vezes, são indesejadas. Um método para evitar este efeito é mediante o uso de placas ou pratos perfurados para a injeção de gás, de tal maneira que impeça a formação de bolhas. Outro método seria a mistura de partículas com outras de tamanho pequeno que não favoreçam o *slugging*.

Para controlar este fenômeno, é preciso conhecer a velocidade mínima na qual este regime aparece, o que é possível mediante uma correlação matemática que depende do diâmetro, descrita pela Equação 17:

$$u_s = u_{mf} + 0.07 \sqrt{gD} \quad (17)$$

Como a velocidade do gás através do leito aumenta, há uma mudança no aspecto da fluidização. No início da fluidização, se distinguem duas regiões bem definidas: uma região densa correspondente ao leito fixo de partículas e uma região “vazia”. A medida que a velocidade superficial aumenta ao longo do tempo, a interface vai desaparecendo e a região densa irá diluindo (YAO et al., 2014).

Na transição do leito borbulhante até um leito turbulento, os espaços vazios de gás já não são em forma de bolhas, em vez disso têm formas alongadas. O topo do leito torna-se bem menos definido devido ao aumento do arrasto de partículas. Quando as velocidades de gás são mais elevadas, as partículas são arrastadas para fora do leito, mas continua a existir densidade elevada de material particulado no fundo do equipamento. Neste tipo de equipamento, é necessário alimentar material particulado durante a operação, para manter o inventário de sólido. Este tipo de fluidização é chamado de fluidização rápida ou *fast fluidization*, e é o regime comumente utilizado nos reatores catalíticos na unidade de craqueamento de petróleo. Neste caso, o equipamento recebe o

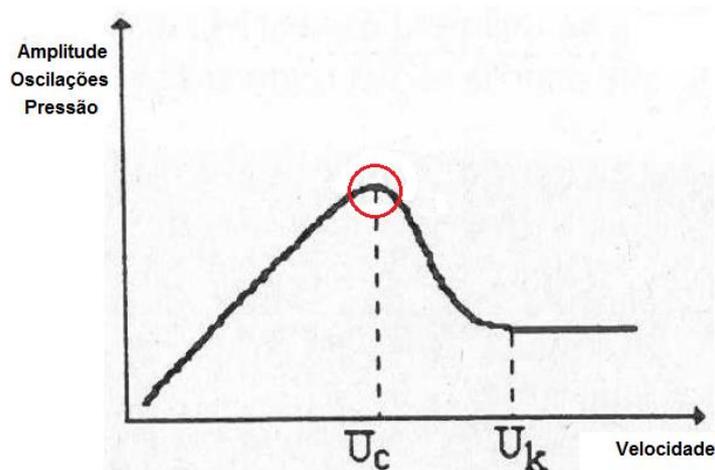
nome de leito fluidizado circulante (CFB, *Circulating Fluidized Bed*) e o trecho ascendente (*riser*) é onde ocorre a maior parte das reações de craqueamento.

### Regime turbulento

Quando num regime borbulhante aumenta a velocidade superficial do gás injetado, aparecem bolhas de grande tamanho na região superior e se estende ao resto do leito em medida que a velocidade do gás se acrescenta, unindo-se as bolhas na região inferior do leito. Nessa transição, pode se observar também a aparição de flutuações na pressão, definindo-se, portanto, duas velocidades características: a velocidade máxima de flutuação de pressão e a velocidade de estabilização do regime.

A velocidade de flutuação máxima se manifesta quando aparece um aumento de pressão no leito neste tipo de regime. Normalmente, a oscilação faz que a pressão aumente em 20-25% além da pressão num regime turbulento. A velocidade de estabilização do regime aparece quando a pressão diminui depois da variação e o regime turbulento estabiliza totalmente. As duas velocidades são influenciadas pelas condições de operação e tamanho das partículas. A Figura 5 apresenta a transição entre o regime borbulhante e turbulento.

FIGURA 5 – Flutuação de pressão com a velocidade de gás injetado, numa transição de regime borbulhante a turbulento



Fonte: ADAPTADO (LOPEZ, 2009).

Onde  $U_c$  é a velocidade de flutuação máxima quando aparece um aumento de pressão, e  $U_k$  é a velocidade de estabilização do regime.

Correlações matemáticas para o início e finalização da transição a regime turbulento estão apresentadas na Tabela 1 (Lopez, 1997).

TABELA 1 – Correlações matemáticas para o início e finalização da transição a regime turbulento

Início da transição		Finalização da transição		
Autor	Correlação	Autor	Correlação	Número de Arquimedes
<b>Horio</b>	$Re=0,936 Ar^{0,472}$	<b>Horio</b>	$Re_k=1,41 Ar^{0,56}$	$Ar < 10\ 000$
			$Re_k=1,46 Ar^{0,472}$	$Ar > 10\ 000$
<b>Lee e Kim</b>	$Re=0,700 Ar^{0,485}$	<b>Bi e Fan</b>	$Re_k=0,601 Ar^{0,695}$	$Ar < 125$
			$Re_k=2,28 Ar^{0,419}$	$Ar > 125$
<b>Tsukada</b>	$Re=0,891 Ar^{0,435}$	<b>Tsukada</b>	$Re_k=1,31 Ar^{0,450}$	

Fonte: MODIFICADO (LOPEZ, 2009).

Uma vez que o regime borbulhante é estabilizado, no caso de um aumento de velocidade de gás injetado no leito, mudará para um regime de fluidização turbulenta (no caso em que as condições do leito o permitam). Neste regime a quantidade de bolhas que aparecem é maior do que o regime borbulhante.

Cabe destacar que a velocidade de gás injetado é maior que a velocidade terminal das partículas (velocidade na qual aparece o transporte das partículas).

Este tipo de regime se caracteriza pela superfície livre entre as partículas e aparição de um maior número de bolhas de grande tamanho. Aparecem também aglomerados de partículas que normalmente são ejetados para fora do leito, caindo no leito de novo quase em sua totalidade, fazendo que a aparência do regime turbulento seja de forma diferenciável.

Quando a velocidade do fluido é suficientemente alta, a velocidade terminal dos sólidos é excedida e o movimento das partículas torna-se mais instável, caótico e com possibilidade de formar redemoinhos. A superfície superior do leito torna-se indefinida. Assim, aparece o regime de leito fluidizado turbulento, que é mostrado na Figura 2g (GRACE et al., 1997; ALMEIDA, 2015).

A velocidade terminal depende da densidade do fluido, densidade da partícula, gravidade e coeficiente de arrasto. Uma maneira de encontrar o valor da velocidade terminal, previamente achando o coeficiente de arrasto, é mediante o cálculo pela Equação 18:

$$u_t = \sqrt{\frac{4 g d_p (\rho_s - \rho) g}{3 C_D \rho}} \quad (18)$$

Quando o coeficiente de arrasto  $C_D$  não pode ser calculado diretamente com as características da partícula utilizada (geralmente partículas não esféricas), se aplica um equacionamento um pouco mais complexo para a velocidade terminal (Equação 19). Portanto, é necessário encontrar os valores de velocidade terminal adimensional e o diâmetro da partícula adimensional ( $u_t^*$  e  $dp^*$ ) mediante as Equações 20 e 21, respectivamente.

$$u_t = u_t^* \sqrt[3]{\frac{\mu(\rho_s - \rho)}{\rho^2}} \quad (19)$$

$$u_t^* = \left[ \frac{18}{(dp^*)^2} + \frac{2.335 - 1.744\phi}{(dp^*)^{0.5}} \right]^{-1} \quad (20)$$

$$dp^* = dp \sqrt[3]{\frac{\rho(\rho_s - \rho)g}{\mu^2}} = Ar^{1/3} = \sqrt[3]{\left(\frac{3 C_D Re^2}{4}\right)} \quad (21)$$

Massarani (MASSARANI, 1994) apresenta uma correlação matemática para calcular o coeficiente de arrasto, pela Equação 22:

$$C_D Re p^2 = \frac{4 g dp^3 \rho_g (\rho_s - \rho_g)}{3 \mu_g^2} \quad (22)$$

A Tabela 2 mostra o valor de  $\log(C_D Re p^2)$  correlacionado matematicamente com a esfericidade da partícula e com o número de Reynolds.

TABELA 2 –  $(C_D \times Re p^2) \times Re p$

$\log Re_p$	$\log(C_D Re p^2)$				
	$\phi_s = 1$	$\phi_s = 0,9$	$\phi_s = 0,8$	$\phi_s = 0,7$	$\phi_s = 0,6$
-2,000	-0,620	-0,604	-0,583	-0,559	-0,530
-1,523	-0,155	-0,126	-0,106	-0,082	-0,053
-1,301	0,079	0,097	0,117	0,140	0,167
-1,000	0,380	0,407	0,431	0,465	0,494
-0,523	0,857	0,879	0,908	0,937	0,967
-0,301	1,093	1,117	1,146	1,176	1,204
0,000	1,423	1,447	1,477	1,502	1,525
0,477	1,971	1,996	2,025	2,053	2,079
0,699	2,238	2,274	2,301	2,338	2,371
1,000	2,613	2,635	2,703	2,740	2,771
1,477	3,255	3,316	3,369	3,425	3,476
1,699	3,574	3,616	3,677	3,762	3,804
2,000	4,029	4,079	4,173	4,290	4,431
2,477	4,767	4,841	4,975	5,155	5,369
2,699	5,140	5,262	5,407	5,580	5,775
3,000	5,663	5,898	6,076	6,279	6,377
3,477	6,556	6,917	7,104	7,230	7,330
3,699	6,984	7,362	7,548	7,679	7,775
4,000	7,607	7,963	8,149	8,276	8,377

Fonte: MASSARANI (MODIFICADO, 1984 P.107).

Conhecendo as propriedades da fase gasosa e as características das partículas, e com auxílio da Tabela 2, pode-se determinar a velocidade terminal das partículas, mediante as Equações 23, 24 e 25:

$$u_t = K_1 \frac{g (\rho_s - \rho_g) dp^2}{18\mu_g} \text{ para } Re_p < 0,1 \quad (23)$$

$$u_t = \frac{4g (\rho_s - \rho_g) dp}{3 K_2 \rho_g} \text{ para } Re_p > 103 \quad (24)$$

$$u_t = \frac{Re_p \mu_g}{d_p \rho_g} \text{ para } Re_p > 103 \quad (25)$$

Onde:

$$K_1 = 0,843 \log \frac{\phi}{0,065} \quad (26)$$

$$K_2 = 5,31 - 4,88\phi_s \quad (27)$$

### **Regime de fluidização rápida**

Este regime é localizado entre os regimes de fluidização e o transporte pneumático. Caso a velocidade de gás injetado seja maior do que a velocidade crítica ou terminal das partículas, mas não aparece transporte devido à coalescência destas em aglomerados pesados, no regime de fluidização rápida as partículas são arrastadas para fora do leito de forma individual ou em aglomerados, deixando um vazio que precisa ser repostado com um maior aporte de partículas ou com a realimentação.

O regime de fluidização rápida é um estado de transição entre os regimes de fluidização e os regimes de transporte pneumático. Sendo assim, o regime de fluidização rápida pelo aumento de material particulado em regime turbulento, provoca aumento de choques entre as partículas. Esses choques entre as partículas podem produzir a formação de novas partículas, de menor ou maior tamanho (aglomerados). Aquelas de maior tamanho, devido ao seu peso, sedimentarão na base do leito. No entanto, as partículas de menor tamanho serão arrastadas para fora do leito deixando uma região de baixa pressão que favorecerá novos choques entre as partículas, características que diferenciam o regime de fluidização rápida do turbulento.

Devido a estes fenômenos, aparecem distribuições radiais e axiais de densidade e tamanho de partículas. Assim, nas regiões laterais do recipiente haverá uma maior

densidade, uma vez que as partículas descerão por essa região após a realimentação. Na região superior haverá uma densidade menor, já que as partículas de menor tamanho aparecem como consequência dos choques. Este tipo de regime é próprio e característico de um leito fluidizado circulante, nas quais se utiliza um circuito de recuperação de material (LOPEZ, 2009).

### **Transporte Pneumático**

Com o incremento da velocidade depois do regime turbulento, os sólidos continuam sendo arrastados para fora da coluna, mas a região densa ao fundo do equipamento desaparece. Este estado é conhecido como o transporte pneumático, mostrado na Figura 2h.

#### **2.1.2. Parâmetros que influenciam a fluidização**

Nesta seção são revisadas as principais características que influenciam o comportamento e funcionamento dos leitos em regimes fluidizados.

### **Porosidade do leito e esfericidade**

A porosidade e a esfericidade estão diretamente relacionadas. O estudo da porosidade do leito fixo é importante porque é uma variável que influencia na velocidade mínima de fluidização e na expansão do leito antes deste ser fluidizado.

Outro parâmetro determinante nos leitos é a distribuição de tamanhos e a esfericidade do leito. Emprego de partículas de tamanhos diferentes implica um estudo estatístico das distribuições de tamanho nas partículas.

Na maioria dos casos reais, infelizmente não pode se encontrar uma partículas totalmente esférica. Portanto, uma maneira de medir a partícula é mediante o cálculo numérico aproximado da esfericidade, expressão matemática que é mostrada mediante a Equação 28:

$$\phi = \left( \frac{\text{área da esfera}}{\text{área da partícula}} \right)_{\text{volume}} \quad (28)$$

### **Diâmetro médio da partícula**

As partículas a fluidizar nunca serão iguais, porém, muitos dos parâmetros dependem do diâmetro médio das partículas. Para conhecer o diâmetro médio da partícula, é necessário conhecer a distribuição desta variável, o qual é possível mediante

análise de uma amostra. O diâmetro médio da partícula pode ser calculado mediante a Equação 29.

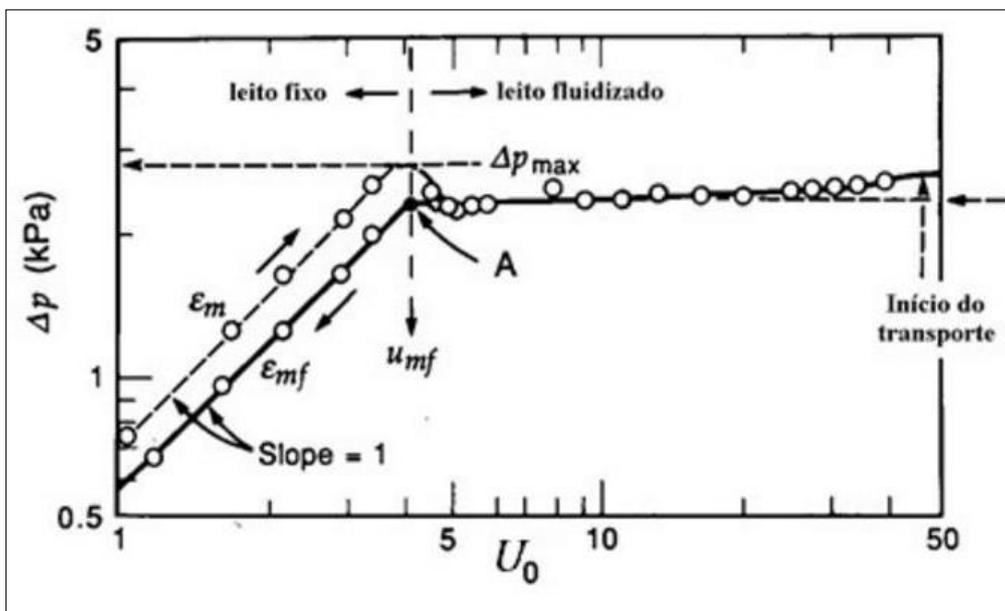
$$dm_i = \frac{1}{\sum \frac{x_i}{ds_i}} \quad (29)$$

em que  $x_i$  é a frequência relativa e  $ds_i$  é o diâmetro de cada partícula.

### 2.1.3. Pressão no leito

Para o caso de leitos fluidizados de partículas uniformes existem inúmeros estudos sobre o comportamento e parâmetros característicos. Um diagrama básico para os estudos é o Diagrama Pressão-Velocidade, conhecido como Diagrama de fluidização mínima, como o apresentado na Figura 6.

FIGURA 6 - Queda de pressão em função da velocidade superficial do gás em um leito fluidizado.



Fonte: ADAPTADO DE KUNII E LEVENSPIEL (1991, P.71)

A resistência que oferecem as partículas de um leito à passagem de um gás pelos interstícios ao longo da coluna vertical ascendente, resulta em uma queda de pressão.

A Figura 6 apresenta a queda de pressão em função da velocidade superficial do gás (KUNII e LEVENSPIEL, 1991), curva que caracteriza os sistemas particulados e leitos fluidizados.

Durante o regime de leito fixo, as partículas encontram-se no fundo da coluna. A velocidade superficial do gás é incrementada até atingir uma pressão máxima ( $\Delta P_{\max}$ ). Neste ponto, a velocidade superficial de gás alcança o valor da velocidade mínima de fluidização. O aumento da velocidade superficial de gás aumenta, conseqüentemente, a porosidade do leito. Portanto, a queda de pressão fica reduzida até um valor correspondente ao peso das partículas. Depois de ultrapassar a velocidade mínima da fluidização, o leito adota um regime borbulhante até atingir o início de regime de transporte pneumático (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

A velocidade de transporte de partículas, necessária para garantir o estabelecimento de regime de fluidização rápida pode ser calculada mediante a Equação 30 (BASU, 2006; ALMEIDA, 2015):

$$u_{tr} = 1,45 \frac{\mu_g}{(\rho_g d_p)} Ar^{0,484} \quad (30)$$

Onde  $u_{tr}$  é a velocidade de transporte de partículas e  $Ar$  é o número de Arquimedes.

Quando a velocidade superficial de gás atinge um valor maior à velocidade de transporte de partículas, tem-se o regime de fluidização pneumático.

#### **2.1.4. Classificação das partículas**

A caracterização das partículas é extremamente importante no estudo do processo de fluidização. Nesse sentido, uma classificação foi proposta por Geldart (1973), baseado nas características morfológicas das partículas e condições de fluidização ambiente, agrupando-as em quatro divisões (GELDART, 1973). O grupo A seria composto de partículas de diâmetros superiores a 20  $\mu\text{m}$  e inferiores a 100  $\mu\text{m}$  e que possuem densidade baixa ( $\rho_p < 1400 \text{ kg/m}^3$ ). Para este tipo de partículas, inicialmente, ocorre a fluidização livre de bolhas, com considerável expansão do leito antes que comece a borbulhar. No regime de fluidização com bolhas, as bolhas se levantam mais rapidamente que o resto do fluido, portanto, elas explodem e colidem frequentemente através do leito. O tamanho máximo das bolhas é menor do que 10 cm e elas proporcionam forte fluidização dos sólidos (HERNANDEZ, 2009).

No grupo B, as partículas têm diâmetro médio entre 40  $\mu\text{m}$  a 500  $\mu\text{m}$  e densidade de partícula ( $\rho_p$ ) que varia na faixa de 1400-4000  $\text{kg/m}^3$ , mais densas que as do grupo A.

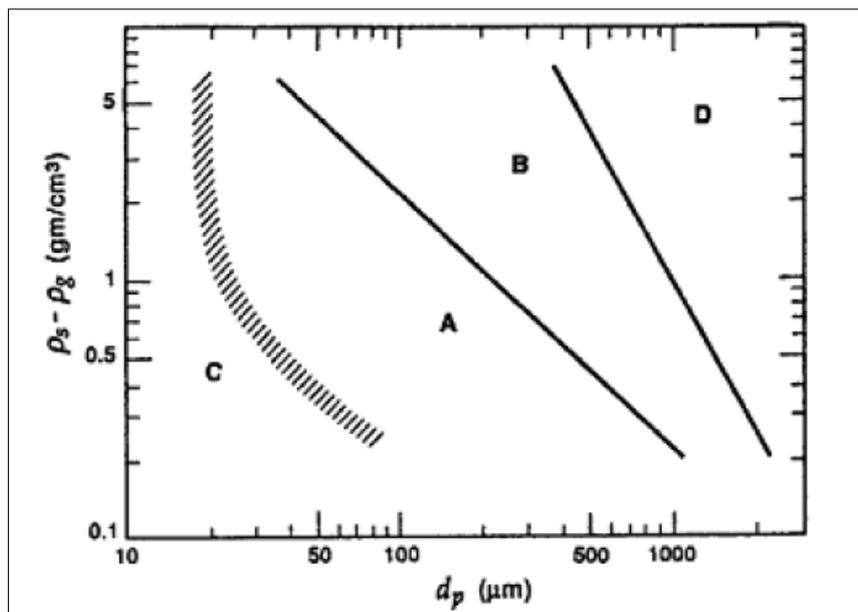
Este tipo de partículas fluidiza vigorosamente com presença de bolhas. As bolhas começam a aparecer no momento em que a velocidade do gás excede a velocidade mínima da fluidização. As bolhas aumentam seu tamanho ao longo do leito, mas são independentes do tamanho das partículas (HERNANDEZ, 2009).

Partículas de diâmetros inferiores a 30  $\mu\text{m}$  e densidade baixa pertencem ao grupo C. As partículas deste grupo são difíceis de fluidizar, uma vez que as forças inter-partículas tem uma influência maior do que as forças gravitacionais. Para velocidades baixas de gás, ocorre uma canalização do fluido, de forma que sua distribuição não é uniforme (HOWARD, 1989).

No grupo D estão as partículas superiores a 600  $\mu\text{m}$ , ou densidade superior à de outros grupos. Para ocorrer a fluidização dessas partículas precisa-se de uma alta velocidade de gás. Há formação de bolhas grandes, canais preferenciais e é possível obter configuração de leito para a formação de regime de fluidização característico de leitos de jorro. As bolhas coalescem rapidamente, no entanto, sobem mais lentamente que o gás (HOWARD, 1989; ALMEIDA, 2015).

Um diagrama geral para a classificação dos regimes de fluidização está apresentado na Figura 7 (KUNII e LEVENSPIEL, 1980).

FIGURA 7 - Classificação de Geldart para as partículas em condições de temperatura ambiente. Faixa de valores para partículas tipo Geldart (A), tipo Geldart (B), tipo Geldart (C) e partículas tipo Geldart (D).



Fonte: MODIFICADO, KUNII E LEVENSPIEL, 1980.

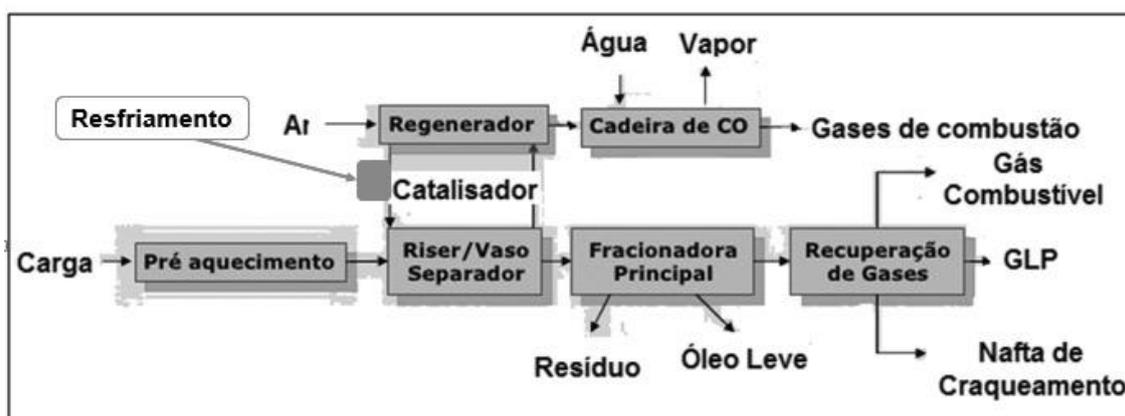
## 2.2. Craqueamento Catalítico Fluidizado

O Craqueamento Catalítico fluidizado é um processo utilizado para romper as moléculas de hidrocarbonetos pesados, dando lugar a moléculas de frações mais leves, com menor tamanho. Este processo produz uma escala de gasolina e gasóleos, um resíduo pesado que será usado na formulação dos asfaltos e, finalmente, o coque que será usado como uma fonte de energia para o próprio processo. Devido a provisão desses produtos, as unidades de FCC são importantes na produção das refinarias (LLUCH U., 2008).

Do ponto de vista químico, se produzem três tipos de reações: craqueamento térmico (gerado por efeito da temperatura e tempo da reação), o craqueamento catalítico (conjunto de reações catalíticas favorecida pela superfície ativada do catalisador) e transferência do hidrogênio.

A Figura 8 mostra um fluxograma típico de um processo de Craqueamento Catalítico Fluidizado desenvolvido nas Refinarias.

FIGURA 8 – Fluxograma típico em um processo de FCC



Fonte: PROGRAMA DE FORMAÇÃO DE OPERADORES DE PETRÓLEO E GÁS-PETROBRAS (MODIFICADO)

O processo é feito num conjunto formado por uma tubulação-reator em trecho ascendente nomeado de *Riser*. A unidade é alimentada com as frações pesadas provenientes da destilação, as quais vão reagindo dentro do *Riser* até alcançar uma conversão ótima. Após o craqueamento, os produtos da reação são separados do catalisador mediante um sistema de ciclones.

Devido às reações catalíticas no *Riser*, o catalisador fica parcialmente desativado pelo coque depositado nas superfícies ativas. Este entra no regenerador onde o coque será

queimado e removido das superfícies ativas do catalisador mediante injeção de oxigênio (ar) e combustão (reações exotérmicas).

A temperatura é um parâmetro de grande influência sobre o processo de craqueamento, uma vez que temperaturas baixas reduzem a eficiência de reação catalítica. No entanto, altas temperaturas ocasionam a formação de mais coque e conseqüentemente a redução da atividade do catalisador. Portanto, antes de retornar ao *Riser*, o catalisador passa por um processo de ajuste de temperatura, que costuma ser feito em unidades externas ao regenerador. O equipamento usado para este fim é denominado resfriador de catalisador. Assim, depois do regenerador para remoção do coque, e após passarem pela unidade de resfriamento, os sólidos são alimentados novamente no *Riser*. Após o craqueamento, os produtos da reação continuam até a coluna de fracionamento (LLUCH U., 2008).

### **2.3. Resfriadores de catalisador industrial**

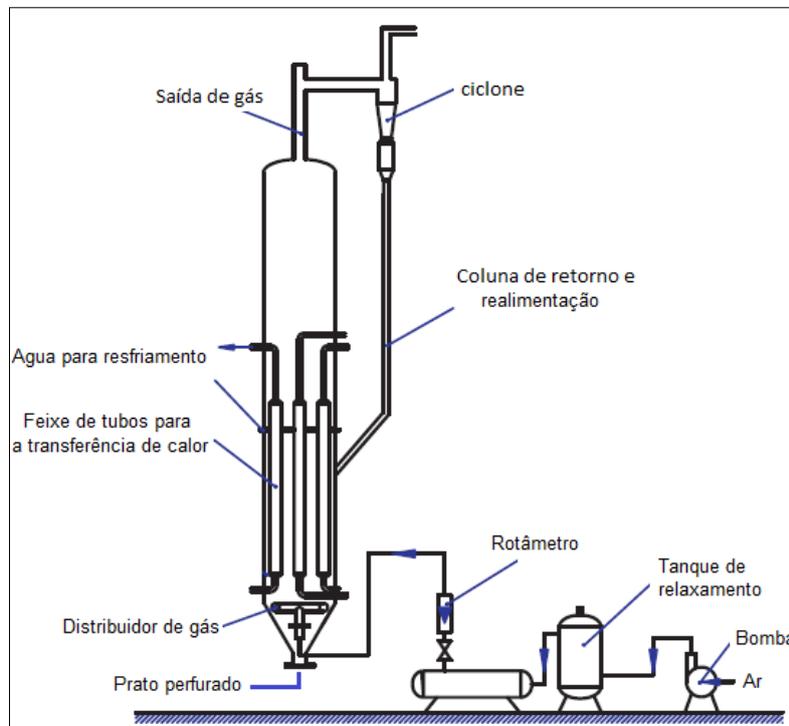
Os resfriadores de catalisador são equipamentos usados para remover o excesso de calor gerado nas partículas do sólido depois de passar pela reação no *Riser*.

Nas Refinarias de petróleo, os resfriadores de catalisador são equipamentos chave em unidades de craqueamento catalítico. O resfriamento é feito usualmente em um trocador de calor de geometria própria para a operação com sólidos, sendo um equipamento externo ao regenerador. O equipamento mais comum para troca térmica é uma coluna, onde são inseridas tubulações verticais. Na região interna à coluna ocorre a fluidização do material sólido (catalisador). Água escoia pelo sistema de tubulação interno, por onde se realiza o resfriamento do conteúdo fluidizado através de transferência indireta de calor. A Figura 9 apresenta um desenho esquemático de aparato experimental para o estudo do resfriador de catalisador industrial (YAO et al., 2014 b).

Os resfriadores de catalisador industrial que são encontrados na indústria são de três tipos: *down-flow*, *up-flow* e *backmixing*. Nos resfriadores de catalisador do tipo *down-flow*, as partículas ingressam pelo topo do resfriador e o abandonam pelos fundos, após o resfriamento. Operam com velocidades baixas em um regime borbulhante ou turbulento. Nos resfriadores de catalisador do tipo *up-flow*, as partículas de catalisador ingressam pelo fundo do resfriador e são fluidizadas, abandonando o resfriador pelo topo. Estes operam com altas velocidades superficiais de gás e apresentam um regime de fluidização rápida. Já os resfriadores de catalisador do tipo *backmixing* são operados com velocidades

baixas e as partículas ingressam e abandonam o resfriador mediante um mecanismo de mistura de sólidos.

FIGURA 9 - Componentes principais de um leito fluidizado nos resfriadores de catalisador

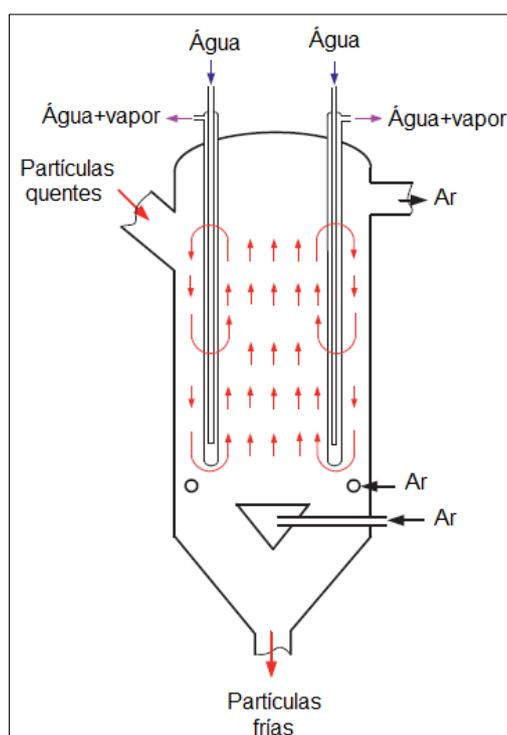


Fonte: MODIFICADO (YAO et al., 2014 b)

Devido à flexibilidade de operação, os resfriadores de tipo *down-flow* são preferidos na maioria das unidades de FCC. Na Figura 10 é mostrada uma ilustração esquemática deste tipo de resfriador, em que os sólidos são removidos da parte inferior do equipamento durante operação industrial.

O esquema do escoamento nos resfriadores tipo *down-flow* é apresentado na Figura 10, onde os sólidos são mantidos em circulação simulando a planta piloto estudada por YAO et al., 2014b (Figura 9). Assim, ocorre a separação do sólido por um sistema de ciclones depois que a mistura sai pela base do resfriador. O sólido é retornado para manter o inventário de sólidos.

FIGURA 10 - Esquema de Resfriador de catalizador de tipo *down-flow*



Fonte: MODIFICADO (YAO et al., 2014)

#### 2.4. Estudos sobre resfriadores de catalisador industrial

Devido à sua importância, os resfriadores de catalisador têm sido estudados com o propósito de intensificar a transferência de calor mediante incremento do coeficiente de troca entre o leito e as paredes de troca térmica. Sendo assim, nos estudos consultados, novas geometrias de resfriadores foram propostas. As configurações foram avaliadas testando diferentes condições de operação experimentais. Os resultados reportados mostram uma relação entre os coeficientes de troca térmica, a forma da partícula, a temperatura do sistema de trocadores, a velocidade superficial de ar e a geometria considerada do sistema.

BAI (2000), por exemplo, apresentou um trabalho sobre uma investigação de comportamentos de transferência de calor em uma unidade de resfriamento a partir de 3000 dados experimentais. Além disso, ele fez um gráfico de regimes hidrodinâmicos e discutiu determinadas condições de operação. Uma equação de correlação para a transferência de calor entre as paredes e o leito foi obtida neste estudo com bastante exatidão.

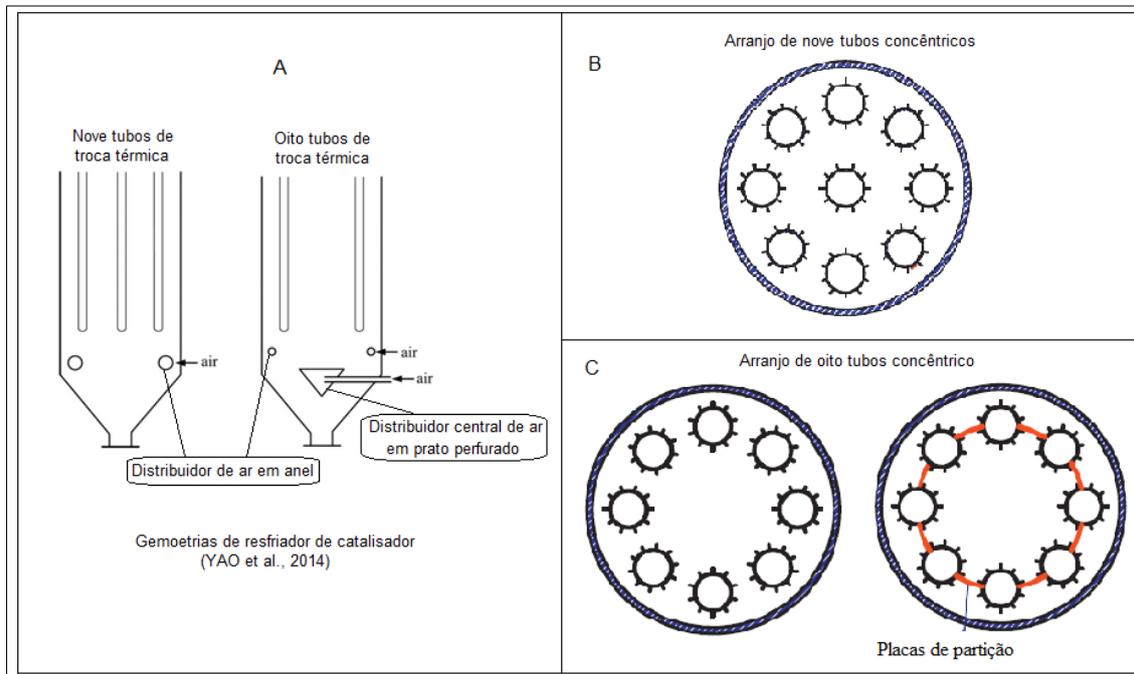
Vários trabalhos experimentais recentes (YAO et al., 2014 a, YAO et al., 2014 b; YAO et al., 2015) foram realizados em torno de uma proposta de distribuição de alimentação dupla na base da coluna para intensificação da troca térmica no resfriador (YAO et al., 2014 b). A proposta consistia em dividir a distribuição de ar no resfriador *down-flow* em um distribuidor central em forma de prato perfurado e outro em forma de anel, localizado pouco acima do primeiro e por onde o gás era inserido através de furos. O distribuidor em forma de prato perfurado era responsável pela maior parte da vazão de alimentação no sistema. O objetivo era aumentar a renovação de sólidos em contato com os tubos na parte central, ampliando o coeficiente de troca térmica.

YAO et al. (2014, a) fizeram um estudo experimental no qual propuseram uma forma de aumentar o coeficiente de troca térmica em unidades de resfriamento de catalisador. O objetivo principal do seu trabalho foi testar o método de medição mediante um tubo para fornecimento de calor e utilizar fibra ótica para medir concentração de sólidos próxima ao tubo.

Em outro estudo, YAO et al. (2014, b) propuseram uma forma de aumentar o coeficiente de troca térmica, mediante a distribuição de ar dupla, anteriormente mencionada. O trabalho obteve dados experimentais com o novo sistema de resfriador de catalisador (dupla distribuição), que tem inserido no seu interior um feixe com oito tubos distribuídos em torno do eixo central do equipamento para troca térmica no sistema. A Figura 11c apresenta um desenho esquemático do arranjo de tubos concêntricos do resfriador proposto. Também foi testado o mesmo sistema, mas com feixe que possuía paredes de partição unindo cada tubo (Figura 11c).

Com propósitos de comparação, YAO et al. (2014, b) também obtiveram resultados experimentais para um sistema de resfriamento industrial comum que consistia de um feixe de nove tubos (um central com mais oito em volta) e somente um distribuidor em anel. O distribuidor em anel consistia somente de uma tubulação curva em torno do eixo central do sistema e com perfurações por onde era inserido o ar para fluidização. Uma representação do resfriador convencional se encontra na Figura 9, e a Figura 11b apresenta o arranjo de tubos do sistema convencional. A Figura 11a apresenta o desenho esquemático do resfriador convencional (somente distribuidor em anel) e do resfriador proposto (dupla distribuição, prato central e distribuidor em anel).

FIGURA 11 - Configurações geométricas dos resfriadores de calor considerados nas simulações, segundo os trabalhos de Yao et al., 2014b. A) Esquemático dos resfriadores de catalisador. B) Feixe de nove tubos de troca térmica concêntricos. C) Feixe de oito tubos concêntricos.



Fonte: MODIFICADO (YAO et al., 2014b)

Os resultados mostraram que uma distribuição de gás uniforme, um bom estado de fluidização e a frequência de renovação de sólidos são necessárias para obter alta transferência de calor leito-parede de tubo de troca térmica.

YAO et al. (2015) novamente tomaram como base o estudo e a geometria testada no trabalho de YAO et al. (2014, a), onde empregaram um sistema experimental diferente para investigar o mecanismo de transferência de calor. A hidrodinâmica do sistema e o coeficiente de transferência de calor foram medidos mediante um tubo e uma sonda de fibra ótica. Neste estudo, foram feitas variações na geometria, as quais inspiraram as simulações desenvolvidas nesta dissertação. Os resultados mostraram, mediante incremento de coeficiente de troca térmica, que a transferência de calor foi intensificada para a geometria proposta, devido ao aumento da frequência de renovação de sólidos.

A Tabela 3 apresenta um resumo dos estudos sobre resfriadores de catalisador industrial que serviram como base para a realização deste trabalho.

TABELA 3 – Resumo dos estudos relacionados com Resfriadores de catalisador industrial

Grupo de pesquisa		Estudo	Aporte
Pesquisadores	Ano		
BAI	2000	Investigação de comportamentos de transferência de calor em uma unidade de resfriamento a partir de 3000 dado experimentais	- Gráfico de regimes hidrodinâmicos e determinadas condições de operação. - Uma equação de correlação para a transferência de calor entre as paredes e o leito
YAO et al.	2014	Estudo experimental no qual propuseram uma forma de aumentar o coeficiente de troca térmica em unidades de resfriamento de catalisador	Testar um método de medição mediante um tubo para fornecimento de calor e utilizar fibra ótica para medir concentração de sólidos próxima ao tubo
YAO et al.	2014	Distribuição de alimentação dupla para intensificação de troca térmica no resfriador. Incorporação de feixe de tubos	Aumentar a renovação de sólidos em contato com os tubos, ampliando o valor de coeficiente de troca térmica.
YAO et al.	2015	Baseado nas geometrias dos trabalhos de 2014, a	Transferência de calor intensificada mediante aumento de frequência de renovação de sólidos

Fonte: AUTOR (2016).

Analogamente aos leitos circulantes descritos por Basu (2006), o sistema de YAO et al. (2014, b) consistia em um leito de regime que varia na faixa de fluidização rápida à turbulenta. O sistema utilizado por YAO et al. (2014), para estudar o resfriador era composto por uma coluna vertical ascendente com um leito de partículas de catalisador no interior, um sistema de separação composto por ciclones, um tubo vertical para a descida dos sólidos após a separação e um sistema de entrada de realimentação de sólidos para manter o inventário, conforme esquematiza a Figura 9. Um feixe de tubos para a transferência de calor foram inseridos no interior da coluna. Assim, o trabalho de YAO et al. (2014) realiza o estudo da configuração tipo *down-flow*, apesar dos sólidos serem mantidos em recirculação, ao invés de removidos pelo fundo, como seria na operação industrial.

O gás injetado pelo fundo da coluna e pelo distribuidor de gás proporciona alta turbulência, transportando as partículas para fora da coluna uma vez que a velocidade superficial consiga vencer o valor da velocidade mínima de fluidização e depois a velocidade terminal.

Conforme mencionado e descrito para cada tipo de resfriador, a operação em regime de escoamento gás-sólido turbulento e de fluidização rápida é comum em

resfriadores de catalisador para unidades de craqueamento catalítico. Nestes casos, é comum que estudos em escala piloto (como de YAO et al., 2014b) façam a recirculação contínua de material particulado, enquanto a operação industrial trabalha em regime contínuo, inserindo material para resfriamento e retirando sólidos resfriados durante a operação.

## **2.5. Modelagem do escoamento gás-sólido**

Conforme foi destacado, o próprio escoamento multifásico é de difícil previsão e modelagem. Aliado à essa característica, os resfriadores de catalisador possuem geometrias características que devem tornar os padrões de escoamento gás-sólido ainda mais complexos. Pensando nisso, a aplicação de CFD foi proposta como uma alternativa para analisar o escoamento das fases em geometrias características e propostas na literatura científica para resfriadores de unidades de craqueamento catalítico de petróleo.

As duas formas de modelar a fase particulada em escoamentos multifásicos são a Euleriana e a Lagrangiana. A modelagem matemática Euleriana de duas fases, também conhecida como modelo de Dois Fluidos, foi aplicada neste trabalho.

O modelo de Dois Fluidos usa a descrição Euleriana para as duas fases em escoamento, tanto para a fase fluida como a particulada e, conseqüentemente, ambas são consideradas como fases contínuas. Este modelo é considerado adequado para a simulação dos escoamentos gás-sólidos em diversos casos, descrevendo as fases como contínuas e interpenetrantes.

A abordagem Euleriana-Euleriana é utilizada amplamente em simulações de escoamento bifásico (gás-sólido, líquido-sólido ou gás-líquido), como por exemplo, em casos de escoamento multifásico em que estão envolvidas bolhas ou partículas de catalisador (SANTOS, 2011).

O modelo considera que o material particulado assume o comportamento de fluido ao ser tratado como uma fase contínua. Portanto, negligencia a representação do modelo de cada partícula individualmente. A fase particulada é considerada contínua e as equações fundamentais de massa e quantidade de movimento são aplicadas para ambas fases.

Na abordagem Euleriana-Lagrangiana basicamente aplica-se a segunda lei de Newton a cada partícula individual do escoamento, enquanto a fase contínua é descrita a partir das equações conservativas do meio contínuo.

Nos problemas do escoamento gás-sólido em engenharia normalmente estão envolvidas grandes quantidades de partículas. Deste modo, simular o escoamento através do balanço de forças em cada uma delas resulta em grande capacidade computacional requerida (ROTAVA, 2008). É assim que a solução mediante o modelo Euleriano-Euleriano torna-se uma alternativa viável para diversos tipos de escoamento.

Nas fases contínuas é comum a aplicação de simulação do tipo RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*) ou DNS/LES (*Direct Numerical Simulation/Large-Eddy Simulations*) (SANTOS, 2011). Sendo a abordagem RANS mais comum até os dias de hoje, por representar bem as características da turbulência em uma gama grande de problemas e ainda assim ponderar custos computacionais mais reduzidos. Mais detalhes sobre essas abordagens são apresentados na seção 2.5.2 deste trabalho.

### **2.5.1. Teoria Cinética do Escoamento Granular (KTGF).**

Os modelos Eulerianos requerem equações de fechamento adicionais para descrever a reologia da fase particulada.

Uma alternativa bastante aceita na modelagem de leitos fluidizados envolve a Teoria Cinética do Escoamento Granular (KTGF, do inglês *Kinetic Theory of Granular Flow*). A KTGF é uma extensão da teoria cinética dos gases, onde a temperatura é substituída por uma temperatura granular que representa a energia pseudo-térmica das partículas (MARINI, 2008; ALMEIDA, 2015). As outras propriedades da fase sólida são funções desta temperatura granular, fornecendo equações de fechamento que consideram a dissipação de energia resultante das partículas por meio do coeficiente de restituição (MARINI, 2008). A vantagem desta abordagem é a rapidez na resolução de problemas envolvendo grandes domínios e quantidades de partículas (ALMEIDA, 2015).

As flutuações que ocorrem na fase dispersa são modeladas mediante a Teoria Cinética de Escoamento Granular para colisões inelásticas entre as partículas (SINCLAIR e JACKSON, 1989; GIDASPOW, 1994). A equação de transporte de energia flutuante na fase dispersa, chamado de Temperatura Granular, é calculada mediante a Equação 31 (BENYAHIA et al., 2000; GOLDSCHMIDT et al., 2004; HUILLIN et al., 2003):

$$\frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \theta) + \frac{3}{2} \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \theta \vec{v}_s) = [\vec{S}_s : \nabla \vec{v}_s - \nabla \cdot (k_\theta \nabla \theta) - \gamma_\theta + \phi_{gs}] \quad (31)$$

Onde  $\vec{S}_s$  é o tensor tensão,  $\alpha_s$  é a fração volumétrica dos sólidos no leito,  $k_\theta$  é a condutividade granular da energia flutuante,  $\phi_{gs}$  é a transferência de energia granular a fase gasosa,  $\gamma_\theta$  é a energia de dissipação granular e  $\theta$  é a temperatura granular.

A temperatura granular pode ser estimada através da resolução da equação de energia cinética flutuante para as partículas. A viscosidade dos sólidos e a pressão são calculados como uma função de uma temperatura granular. Na equação 31, o primeiro termo no lado direito é a geração de energia através de um tensor sólido. O segundo termo descreve o fluxo difusivo de energia granular. A energia de dissipação de colisão  $\gamma_\theta$  representa a taxa de energia de dissipação dentro da fase sólida devido às colisões. O tensor tensão na fase sólida é calculado conhecendo a pressão de sólidos ( $P_s$ ), viscosidade *bulk* de sólido  $\mu_s$  e a viscosidade de cisalhamento na fase sólida  $\lambda_s$ , com a Equação 32:

$$\vec{S}_s = (-P_s + \lambda_s \nabla \cdot \vec{v}_s) \mathbf{I} + \mu_s \{ [\nabla \vec{v}_s + (\nabla \vec{v}_s)^T] - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}_s) \mathbf{I} \} \quad (32)$$

A energia de dissipação de colisão na fase sólida  $\gamma_\theta$  e a condutividade granular da energia flutuante  $k_\theta$  são calculadas com a Equações 33 e 34:

$$\gamma_\theta = 3(1 - e^2) g_0 \rho_s \alpha_s^2 \theta \left( \frac{4}{d_s} \sqrt{\frac{4}{\pi} - \nabla \cdot \vec{v}_s} \right) \quad (33)$$

$$k_\theta = \frac{150 \rho_s d_s \sqrt{\pi \theta}}{384(1+e)g_0} \left[ 1 + \frac{6}{5} (1+e) g_0 \alpha_s \right]^2 + 2 \alpha_s^2 \rho_s d_s g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} \quad (34)$$

As propriedades da fase sólida tais como pressão de sólidos ( $P_s$ ), viscosidade *bulk* de sólido  $\mu_s$  e a viscosidade de cisalhamento na fase sólida  $\lambda_s$  podem ser expressados como uma função da temperatura granular mediante as Equações 35, 36 e 37:

$$P_s = \alpha_s \rho_s \theta [1 + 2g_0 \alpha_s (1+e)] \quad (35)$$

$$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s \rho_s d_s g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{\varepsilon_s d_s \rho_s \sqrt{\theta_s \pi}}{6(3-e)} \left[ 1 + \frac{2}{5} (1+e)(3-e) \varepsilon_s g_0 \right] + \frac{P_s \sin w}{2\sqrt{I_{2D}}} \quad (36)$$

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \alpha_s^2 \rho_s d_s g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} \quad (37)$$

Onde  $g_0$  é a função de distribuição radial.

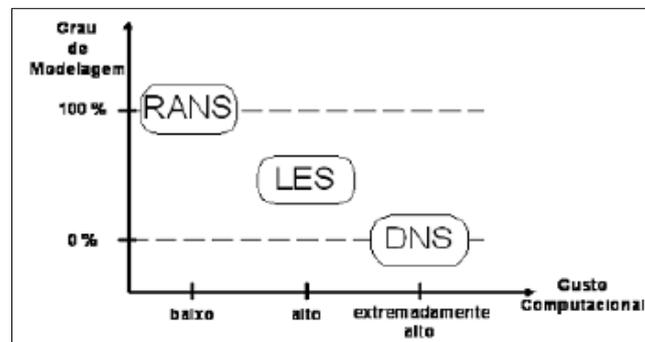
### 2.5.2. Turbulência.

A maioria dos escoamentos estudados em engenharia são fluxos turbulentos e cada um requer um tratamento diferente e independente. Um escoamento turbulento é caracterizado pela alta instabilidade. Escoamentos turbulentos ocorrem quando as partículas de um fluido não se movimentam ao longo de trajetórias bem definidas, descrevendo trajetórias irregulares com um movimento aleatório e caótico, produzindo uma transferência de quantidade de movimento entre as regiões de massa gasosa e a massa particulada (FERZIGER e PÉRIC, 2002) e flutuando rapidamente nas três dimensões espaciais.

A modelagem e a análise da turbulência num escoamento multifásico é mais complexa do que um escoamento monofásico, pois as fases não se misturam uniformemente no escoamento multifásico e a interação entre elas acarreta em efeitos marcantes nas propriedades do escoamento (ALMEIDA, 2015).

Para a resolução numérica de escoamentos turbulentos as estratégias de modelagem podem ser divididas conforme apresenta a Figura 12.

FIGURA 12 - Abordagem de modelagem em escoamentos turbulentos



Fonte: MODIFICADO (HODAPP, 2009)

A modelagem *DNS* (*Direct Numerical Simulation*) resolve todas as escalas de tempo e do escoamento, resolvendo completamente as equações de Navier-Stokes. A modelagem é direta, mas requer malhas muito refinadas, com grandes custos computacionais (FERZIGER e PÉRIC, 2002).

A modelagem *LES* (*Large Eddy Simulation*) resolve grandes escalas mediante o modelo DNS, necessitando também de malhas refinadas. No entanto, a influência das escalas dissipativas é modelada e resolvida mediante sub-malhas, portanto o custo computacional é reduzido (FERZIGER e PERIC, 2002; ALMEIDA, 2015).

A modelagem *RANS* (*Reynolds Average Navier-Stokes*) modifica as Equações de Navier-Stokes aplicando técnicas estatísticas, introduzindo termos médios para representar as variações dos elementos no escoamento turbulento, obtendo-se equações válidas do escoamento. Neste processo são geradas variáveis adicionais, como as tensões de Reynolds ou as tensões turbulentas. As equações de fechamento no problema definem o tipo de modelo de turbulência. Os modelos mais usados são os modelos de Tensões de Reynolds (*Reynolds Stresses*) e o modelo de Viscosidade Turbulenta (*Eddy Viscosity*) (HODAPP, 2009; ALMEIDA, 2015).

Nos modelos de Tensões de Reynolds, as componentes de tensão e as taxas de dissipação são representadas por equações de transporte e resolvidas para cada uma das componentes de tensor, o qual é adequado para escoamentos complexos (ALMEIDA, 2015). Os modelos de Viscosidade Turbulenta são mais simples e mais utilizados em CFD. Estes modelos consideram a turbulência como vórtices pequenos continuamente formados e dissipados. Os modelos principais de Turbulência são o modelo de zero equação, o modelo de uma equação e o modelo de duas equações (HODAPP, 2009; ALMEIDA, 2015).

O modelo de zero equação não tem equações de transporte e a viscosidade pode ser calculada mediante uma relação algébrica (BARBOSA, 2012; ALMEIDA, 2015). Para calcular a viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ) não se precisa de nenhuma equação adicional. O equacionamento do modelo de zero equação está baseado no comprimento característico de Prandtl, que estabelece uma relação algébrica entre  $\mu_t$  e o gradiente de velocidade mediante a Equação 38 (CAPOTE et al., 2008):

$$\mu_t = \bar{\rho} l_{min}^2 \left| \frac{dv}{dy} \right| \quad (38)$$

sendo  $l_{min}$  o comprimento característico. Existem outros modelos mais complexos, como o modelo de Baldwin-Lomax e o modelo de Cebeci-Smith (CAPOTE et al., 2008).

O modelo de uma equação utiliza a energia cinética para o cálculo da viscosidade turbulenta, gerando uma equação de transporte (HODAPP, 2009; ALMEIDA, 2015). Para calcular a viscosidade turbulenta é incorporada uma dependência de  $\mu_t$  com a energia cinética  $k$  ao sistema de equações governantes (CAPOTE et al., 2008), mostrada na Equação 39.

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu l_{pk} \sqrt{k} \quad (39)$$

Onde  $C_\mu$  é uma constante e  $l_{pk}$  é uma longitude característica calculada a partir da geometria do fluxo e as linhas de corrente descritas.

Nos modelos das duas equações, tanto a velocidade como a escala do comprimento são modeladas mediante equações de transporte. Os modelos mais utilizados são o  $k - \epsilon$  e  $k - w$ , os quais usam equações de transporte para modelagem da energia cinética turbulenta e da dissipação turbulenta.

O modelo  $k - \epsilon$  utiliza a equação de transporte para calcular a dissipação turbulenta. Este modelo incorpora duas equações de balanço em derivadas parciais que relacionam a energia cinética do fluido turbulento  $k$  e a velocidade de dissipação  $\epsilon$  no sistema de equações de fluido. Conhecendo-se esses dois valores, se calcula a viscosidade turbulenta com a Equação 40 (CAPOTE et al., 2008).

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (40)$$

Já o modelo  $k - w$  utiliza a equação de transporte para calcular a frequência de turbulência (BARBOSA, 2012; ALMEIDA, 2015). Este modelo também emprega duas equações que interagem para o cálculo da viscosidade turbulenta (energia cinética turbulenta do fluido  $k$  e a dissipação específica  $w$ ) (Equação 41).

$$\mu_t = \bar{\rho} \frac{k}{w} \quad (41)$$

### 2.5.3. Tratamentos de parede

Os escoamentos turbulentos são afetados pela presença das paredes. O modelado de escoamento perto das paredes pode influenciar fortemente nas soluções numéricas, sabendo que as paredes podem ser a origem principal dos vórtices relacionados à turbulência. Uma predição exata do escoamento em regiões perto das paredes determina o sucesso da modelagem em escoamentos turbulentos limitados por paredes (BLANCO, 2010).

Inúmeros experimentos mostram que a região perto da parede pode ser dividida em três camadas. Na camada interior mais próxima às paredes é chamada de *sub camada viscosa*, onde o escoamento é quase laminar a viscosidade molecular tem um papel importante na transferência de quantidade de momento, calor e massa. Na camada mais

externa e afastada das paredes é nomeada de *camada turbulenta*, onde a turbulência é dominante. Finalmente, na sub camada que está no meio das duas anteriores descritas, os efeitos da viscosidade molecular e a turbulência são igualmente importantes (FLUENT, 2001; BLANCO, 2010).

Há duas aproximações para modelar o escoamento nas regiões próximas às paredes: *Wall Function Treatment* e *Near Wall Treatment*, ambos tratamentos disponibilizados no programa computacional ANSYS FLUENT v14.5.

### Wall Function Treatment

Na região interna, que é afetada pela viscosidade, usam-se equações semi-empíricas, chamadas de funções de parede (BLANCO, 2010).

A aproximação supõe uma diminuição do esforço computacional, sobretudo quando se tem elevados valores de número de Reynolds. O uso de Funções de Parede é muito popular pois fornece resultados confiáveis e economiza o tempo computacional. O Fluent disponibiliza dois tipos de tratamentos *Wall Functions* (BLANCO, 2010):

#### Standard Wall Functions

As funções de parede padrão são baseadas nas propostas de Launder-Spalding. São muito utilizadas em escoamentos industriais e são a opção que incorpora o programa computacional ANSYS FLUENT v14.5 por padrão.

As leis de parede baseiam-se nos parâmetros adimensionais  $y^*$  e  $y^+$ , ainda que estas magnitudes são aproximadamente iguais na camada limite turbulenta em equilíbrio (BLANCO, 2010). A lei da parede para a velocidade é calculada pela Equações 42 e 43.

$$U^* = \frac{1}{K} \ln(Ey^*) \quad (42)$$

$$U^* = \frac{U_p C_\mu^{1/4} k_p^{1/2}}{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (43)$$

Onde  $k$  é a constante de Von Karman ( $k = 0.41$ ), que é uma constante empírica,  $U_p$  é a velocidade meia do fluxo no ponto P,  $k_p$  é a energia cinética turbulenta no ponto P,  $y_p$  é a distância desde o ponto P até a parede. O parâmetro adimensional  $y^*$  é definido pela Equação 44.

$$y^* = \frac{\rho y_p C_\mu^{1/4} k_p^{1/2}}{\mu} \quad (44)$$

Geralmente a lei logarítmica é aceita na faixa de  $y^* > 30-60$ . No entanto, no programa computacional ANSYS FLUENT v14.5 a lei logarítmica é empregada quando  $y^* > 11,225$  (FLUENT, 2001; BLANCO, 2010).

#### Non Equilibrium Wall Functions

A Função de Parede de Não Equilíbrio acrescenta efeitos de gradiente de pressão às Funções *Standard*. Ela emprega o conceito de duas camadas para o cálculo de quantidade de energia cinética turbulenta nas células adjacentes à parede.

Este tipo de função é recomendada para escoamentos complexos onde os fluxos e a turbulência estejam fortemente submetidas a gradientes de pressão, uma vez que pode-se obter uma boa predição de coeficiente de fricção e transferência de calor.

#### **Near Wall Treatment**

Neste tratamento, os modelos de turbulência são modificados para resolver equacionamentos em regiões afetadas pela viscosidade, incluindo a sub camada viscosa. É recomendado o seu uso quando o número de Reynolds é baixo. Também é utilizado quando há fortes gradientes de pressão (BLANCO, 2010).

Um modelo de tratamento perto da parede é o modelo *Enhanced Wall Treatment*, que mistura um modelo de duas camadas e uma função de parede. É eficaz quando tem-se baixos valores de número de Reynolds, ainda que consomem maiores recursos computacionais (malhas muito finas são requeridas).

#### **2.5.4. Forças de arraste**

As forças de arraste aparecem quando um objeto submerso num fluido que está submetido a uma força exercida pelo fluido em na direção sinalizada pela velocidade do fluido.

As forças de arraste são causadas por dois efeitos:

- pelo arraste por atrito na superfície (*Skin Friction Drag*) o qual é devido ao efeito da viscosidade, pela tensão de cisalhamento, na direção do fluido.

- o outro efeito é chamado de arraste devido ao perfil ou forma (*form or profile drag*), que é causado por uma diferença de pressão devido ao escoamento do fluido ao redor do objeto. Este efeito é proporcional à forma do objeto.

A dinâmica de cada uma das partículas em movimento no fluido é governada pela segunda lei de Newton:

$$m_p \frac{du_p}{dt} = \sum \vec{F} \quad (45)$$

O somatório das forças na equação englobam todos os mecanismos que atuam sobre a partícula, tais como as forças de arraste provocadas pela diferença de velocidades entre as fases, empuxo, gradiente de pressão no fluido, gradiente de temperatura, efeito da massa, resultante da aceleração relativa entre as fases, entre outros.

No entanto, as forças de arraste são demasiadamente grandes com respeito as forças interfaciais devido à grande diferença de massas específicas entre as fases (ALMEIDA, 2015; LUNA, 2013).

O coeficiente de arraste pode ser calculado em função do número de Reynolds, como é mostrado na Equação 46:

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \text{ para } Re_p < 1 \quad (46)$$

$$C_D = \frac{18,5}{Re_p^{3/5}} \text{ para } 1 > Re_p > 10^3 \quad (47)$$

$$C_D = 0,44 \text{ para } Re_p > 10^3 \quad (48)$$

No entanto, são inúmeras partículas que atuam, interagem e influenciam as forças de arraste e, conforme já foi discutido, o tratamento de partículas individuais torna-se muitas vezes impraticável em sistemas da engenharia. Assim, várias correlações foram desenvolvidas para quantificar a energia transmitida entre a fase gás e a fase sólida em modelos Eulerianos, entre elas, temos os modelos de Gidaspow (1994), de Symbal-O'Brien (1989), de Wen e Yu (1966), e de Huillin Gidaspow (2003), entre outros.

As forças de arraste constituem as principais forças de aceleração que atuam nas partículas. Assim, a escolha do modelo de arraste tem uma forte influência na simulação do comportamento do leito fluidizado.

#### **Modelo de Gidaspow et al. (1994)**

O modelo de arraste de Gidaspow combina a Equação de Ergun (1952) para escoamentos densos expressa pela Equação 49, e o modelo de Wen e Yu (1966) para escoamentos diluídos expressa pela Equação 50.

Quando  $\alpha_s \geq 0,2$ ,

$$\beta_{Ergun} = 150 \frac{\alpha_s \mu_g (1 - \alpha_g)}{\alpha_s d_s^2} + \frac{1,75 \rho_s \alpha_s |u_p - u_g|}{d_s} \quad (49)$$

Quando  $\alpha_s < 0,2$ ,

$$\beta_{Wen-Yu} = \frac{3}{4} C_D \frac{|u_p - u_g| \alpha_p \rho_g}{d_p} \alpha_p^{-2,65} \quad (50)$$

O coeficiente de arrasto pode ser calculado mediante as Equações 51 e 52, dependendo do número de Reynolds.

$$C_D = \frac{24}{\alpha_p Re} [1 + 0,15 (\alpha_p Re)^{0,687}] \quad \text{para } Re > 1000 \quad (51)$$

$$C_D = \frac{0,44}{\alpha_p^{2,65}} \quad \text{para } Re < 1000 \quad (52)$$

### Modelo de Symbal-O Brien (1989)

Este modelo está baseado principalmente no cálculo da velocidade terminal das partículas no leito fluidizado, portanto, a estimação de  $\beta$  é dada pela Equação 53:

$$\beta_{SymbalOBrien} = \frac{3}{4} C_D \frac{|u_p - u_g| \alpha_p \rho_g \alpha_s}{4 v_t^2 d_s} \left( \frac{Re_s}{v_t} \right) \quad (53)$$

Onde  $C_D$  é representada pela equação 54:

$$C_D = \left( 0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{\frac{Re_s}{v_t}}} \right)^2 \quad (54)$$

### Modelo de Huillin Gidaspow (2003)

O modelo de Huillin Gidaspow também é uma combinação dos modelos de Wen e Yu (1966) e a Equação de Ergun (1952), correlacionadas pela Equação 69. É um modelo aplicado quando a fração volumétrica de sólidos é menor que 0,2, o que significa que se encaixa bem na modelagem de leitos fluidizados turbulentos e rápidos. O equacionamento será detalhado na seção 3.3 deste trabalho.

## 3. METODOLOGIA

Os procedimentos para a realização do trabalho estão descritos no presente capítulo. Aqui são apresentados os modelos computacionais utilizados para a simulação do escoamento bifásico, as geometrias consideradas, o domínio computacional, as

condições iniciais e as condições de contorno estabelecidas para a resolução dos casos de interesse.

### **3.1. Esquema de simulações computacionais.**

Equações fundamentais foram usadas para a caracterização do sistema de escoamento gás-sólido, entre as quais temos as equações de balanço de massa, quantidade de momento e equações de fechamento.

Estas equações, somadas às equações para caracterizar a turbulência, foram acopladas às equações de fechamento e resolvidas numericamente usando o Método de Volumes Finitos mediante o programa computacional comercial ANSYS FLUENT v14.5. Neste método, o domínio é dividido em um número finito de volumes de controle, que é conhecido como malha computacional. O próximo passo constitui a entrada dos dados físicos, a definição dos modelos computacionais que serão empregados e as condições de contorno.

As malhas foram criadas no programa computacional ANSYS ICEM v14.5. Os parâmetros de qualidade foram verificados indicando determinantes acima de 0,80. Esse critério de qualidade representa a deformação dos elementos na malha fornecido pelo cálculo de Jacobiano por cada hexaedro e normalizando o elemento da matriz. O valor de 1 representa um perfeito hexaedro cúbico ou quadrado (ANSYS ICEM, 2012).

As fases sólida e particulada foram modeladas usando o Modelo de Dois Fluidos (Euleriano-Euleriano). O ar foi considerado como a fase primária e as partículas de catalisador foram consideradas como a fase secundária, chamada de fase granular. As fases se presumem incompressíveis e as equações de continuidade e quantidade de movimento foram empregadas para simular o movimento.

Modelos de fechamento foram utilizados a fim de prever os efeitos de turbulência, a pressão de sólidos e a interação entre as fases. O modelo  $k - \epsilon$  foi aplicado para prever a turbulência na fase gasosa. A transferência de *momentum* entre as fases foi modelada usando o modelo de arraste Huillin Gidaspow. Flutuações na velocidade da partícula foram modeladas utilizando a Teoria Cinética Granular (KGTF). A formulação algébrica foi aplicada para estimar esta quantidade, em que se assume que a geração e a dissipação de temperatura granular estão em equilíbrio.

Sabendo que as paredes podem ser a origem principal dos vórtices relacionados à turbulência, os modelos de escoamento perto das paredes pode influenciar fortemente nas soluções numéricas. Uma predição exata do escoamento em regiões perto das paredes determina o sucesso da modelagem em escoamentos turbulentos limitados por paredes (BLANCO, 2010). Há duas aproximações para modelar o escoamento nas regiões próximas às paredes: *Wall Function Treatment* e *Near Wall Treatment*, ambos tratamentos disponibilizados no programa computacional ANSYS FLUENT v14.5. O programa computacional ANSYS FLUENT v14.5 disponibiliza quatro funções de parede para a modelagem do escoamento turbulento: Funções de Parede Padrão (*Standar Wall Functions*), Funções de Paredes Escaláveis (*Scalable Wall Functions*), Funções de Parede Não Equilíbrio (*Non-Equilibrium Wall Functions*) e Funções de Paredes Aproximadas (*Enhanced Wall Functions*). O presente trabalho usou a modelagem mais simples, denominada funções de paredes padrão.

As características de material particulado e do gás fluidizante, as condições de contorno, propriedades do leito e as condições operacionais simuladas foram as mesmas empregadas nos trabalhos de YAO et al. (2014) e YAO et al. (2015). Estas são descritas com maior detalhe na seção 3.3.

Após a definição do problema, se utilizou o solucionador *solver* do pacote computacional para aplicação do Método de Volumes Finitos (MVF), apresentado com maior detalhes no Apêndice deste trabalho. Foram configurados os ajustes do *Solver* como os parâmetros de discretização espacial e temporal, os critérios de convergência, o passo de tempo e o tempo de simulação. A etapa de pós processamento foi feita com ajuda do programa computacional CFD-POST 14.5, onde foram analisados os comportamentos dos casos no decorrer do avanço da simulação. Mediante o auxílio do CFD-POST 14.5, puderam ser avaliados perfis e campos de variáveis de respostas (das variáveis de interesse a serem analisados).

As simulações foram separadas em três grupos, de acordo com a geometria simulada e as condições de operação (Caso 1, Caso 2 e Caso 3). Estes casos estão detalhados na seção 3.3 deste trabalho. A Tabela 4 apresenta um resumo dos tempos de simulação considerados para cada caso. Simulações transientes foram rodadas em períodos de tempo que variaram na faixa de 20 a 35 segundos de tempo simulado.

TABELA 4 - Tempos considerados para cada caso (s) na simulação

Caso simulado	Tempo total de simulação (s)	Tempo de média transiente (s)
Primeiro grupo (Caso 1)	20	Não foi considerado
Segundo grupo (Caso 2)	35	Depois dos 25 segundos
Terceiro grupo (Caso 3)	35	Depois dos 15 segundos

Fonte: AUTOR (2016).

A Tabela 5 mostra um resumo dos critérios de convergência no setup do processo. Foi usado um passo de tempo de  $1 \times 10^{-3}$  segundos. O critério de convergência no decorrer do tempo foi que os RMS residuais das iterações, fossem menores que  $10^{-4}$ .

TABELA 5 - Critério de convergência no setup do processo

Setup do processo	Critério de convergência/valor
Critério de convergência	Tipo absoluto ( $0,001$ ou $10^{-4}$ )
Tamanho do passo de tempo (s)	$0,001$ para os casos 1 e 2 $0,001$ para os casos 3
Número de passos de tempo	$25\ 000$ para o <i>startup</i> e $10\ 000$ para a estabilização (casos 1 e 2) $15\ 000$ para o <i>startup</i> e $20\ 000$ para a estabilização (casos 1 e 2)
Fração volumétrica inicial no leito estático	$0,63$

Fonte: AUTOR (2016).

### 3.2. Modelagem matemática.

As equações governantes para a fase gasosa e particulada são descritas nesta seção.

#### 3.2.1. Equações de continuidade

*Fase gasosa:*

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g u_g) = 0 \quad (55)$$

*Fase particulada:*

$$\frac{\partial(\alpha_p \rho_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p u_s) = 0 \quad (56)$$

Onde  $\alpha$  é a fração volumétrica da fase.

### 3.2.2. Equações de quantidade de movimento.

No caso do Modelo de Dois Fluidos, as equações para o transporte de quantidade de movimento das fases gasosa e particulada são apresentadas a seguir.

*Fase gasosa:*

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g u_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g u_g u_g) = \nabla \cdot [\alpha_g \mu_g (\nabla u_g + (\nabla u_g)^T)] + \alpha_g \rho_g g - \alpha_g \nabla p + \beta(u_p - u_g) \quad (57)$$

*Fase particulada:*

$$\frac{\partial(\alpha_p \rho_p u_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p u_p u_p) = \nabla \cdot [\alpha_p \mu_p (\nabla u_p + (\nabla u_p)^T)] + \alpha_p \rho_p g - \alpha_p \nabla p_s + \beta(u_1 - u_p) \quad (58)$$

em que  $\alpha$  é a fração volumétrica na fase,  $\beta$  é o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases,  $p_s$  é a pressão de sólidos, usada para considerar as flutuações na velocidade decorrentes dos choque entre as partículas (ALMEIDA, 2015). Como a fase particulada é considerada contínua, propriedades características de fluidos, como viscosidade e pressão, que aparecem na Equação 58, foram modeladas mediante uso de correlações da KGTF.

### 3.2.3. Equações da Teoria Cinética Granular do Escoamento (KTGF).

Como já foi explicado antes, o tratamento da fase sólida como um meio contínuo permite atribuir uma temperatura granular (uma analogia à Teoria dos Gases) que mede o grau de agitação das partículas relacionadas com às flutuações de velocidades. Mediante a Temperatura Granular se determina a pressão dos sólidos, valores de coeficiente de viscosidade e o valor do Tensor tensão dos sólidos (ALMEIDA, 2015).

O tensor tensão de sólidos é expresso pela Equação 59.

$$\bar{\tau}_k = \alpha_k \mu_k \left[ \bar{\nabla} \bar{v}_k + (\bar{\nabla} \bar{v}_k)^T \right] + \alpha_k \left( \Lambda k - \frac{2}{3} \mu_k (\bar{\nabla} \bar{v}_k) \right) \mathbf{I} \quad (59)$$

Onde  $\bar{\tau}_k$  é o tensor viscoso,  $\Lambda$  é a viscosidade volumétrica e  $\mathbf{I}$  é o tensor unitário. O subscrito  $k$  se refere a cada uma das fases.

Para a fase sólida, tem-se os seguintes parâmetros pela KTGF.

$$P_p = \alpha_p \rho_p \theta_p + 2\rho_p (1 + e_{ss}) \alpha_p^2 g_{0,ss} \theta_p \quad (60)$$

$$g_{0,ss} = \left[ 1 - \left( \frac{\alpha_p}{\alpha_{p,max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} \quad (61)$$

$$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \left( \frac{\theta}{\pi} \right)^{1/2} \quad (62)$$

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \alpha^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \left( \frac{\theta}{\pi} \right)^{1/2} \quad (63)$$

Onde  $g_{0,ss}$  é uma função de distribuição radial,  $e$  é o coeficiente de restituição de particulado,  $\alpha_{p,max}$  é a fração volumétrica máxima para a fase granular e  $\theta$  representa a energia pseudo-térmica.

A fração volumétrica máxima se refere ao máximo espaço possível de ser ocupado pela fase dispersa. Então, se a fase dispersa é um gás ou um líquido, a fração volumétrica será 1 toda vez que o volume é ocupado pelo fluido inteiramente. No caso das partículas esféricas com o mesmo diâmetro, a fração volumétrica máxima é 0,74. No caso de partículas esféricas com o mesmo diâmetro, o valor de fração volumétrica máxima da fase granular pode se encontrar na faixa de 0,54 a 0,74. O valor adotado para a inicialização do leito neste trabalho foi 0,63 (HODAPP, 2009).

A energia pseudo-térmica para fins de economizar custo computacional foi aplicada em sua forma simplificada, considerando que esta é gerada por efeitos viscosos e dissipada por colisões inelásticas entre as partículas (SYAMLAL et al., 1993; ALMEIDA, 2015). A Equação 64 mostra uma equação de equilíbrio entre a energia gerada e a dissipação de energia, sem considerar os efeitos de transporte. Esta forma algébrica está disponibilizada para se usar no programa computacional ANSYS FLUENT v14.5.

$$\theta_p = \left\{ \frac{-k_1 \alpha_p \nabla \cdot u_p + \sqrt{(k_1 \alpha_p \alpha_p)^2 + 4k_4 \alpha_p [k_2 (\nabla \cdot u_p)^2 + 2k_3 (\nabla \cdot u_p)^2]}}{2\alpha_p k_4} \right\}^2 \quad (64)$$

Onde

$$K_1 = 2(1 + e_{ss}) \rho_p g_{0,ss} \quad (65)$$

$$K_2 = \frac{4d_p\rho_s(1-e_{ss})\alpha_p g_{0,ss}}{3\sqrt{\pi}} - \frac{2}{3}K_3 \quad (66)$$

$$K_3 = \frac{d_p\rho_p}{2} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{3(3-e_{ss})} [1 + 0,4(1 - e_{ss})(3e_{ss} - 1)\alpha_p g_{0,ss}] + \frac{8\alpha_p g_{0,ss}(1+e_{ss})}{5\sqrt{\pi}} \right\} \quad (67)$$

$$K_4 = \frac{12(1-e_{ss}^2)\alpha_p g_{0,ss}}{d_p\sqrt{\pi}} \quad (68)$$

### 3.2.4. Equações para modelagem do arraste.

A transferência de quantidade de movimento entre as fases  $\beta$  que aparece nas Equações 57 e 58 pode ser modelada mediante o modelo de arraste.

O modelo de Huillin Gidaspow (2003) foi utilizado para modelar as forças de arraste neste trabalho. Sendo uma combinação do Modelo de Wen e Yu (1966) e da Equação de Ergun (1952), este modelo é correlacionado pela Equação 69 aplicada a uma fração volumétrica de sólidos menor que 0,62.

$$\beta = \psi\beta_{Ergun} + (1 - \psi)\beta_{wen-Yu} \quad (69)$$

Onde:

$$\psi = 0,5 + \frac{\tan^{-1}[262,5(\alpha_p - 0,2)]}{\pi} \quad (70)$$

### 3.2.5. Equações para a modelagem do efeito da Turbulência.

Neste trabalho, o modelo de turbulência usado foi o modelo  $k - \epsilon$ . Como pode se observar na Equação 71, a turbulência é introduzida como um incremento na viscosidade molecular da fase gasosa. Sendo assim, a viscosidade efetiva se compõe como a soma da viscosidade laminar e a viscosidade turbulenta. No modelo  $k - \epsilon$ , a viscosidade turbulenta é definida matematicamente pela Equação 72.

$$\mu = \mu_{lam} + \mu_{turb} \quad (71)$$

$$\mu_{turb} = C_\mu \rho_1 \frac{k^2}{\epsilon} \quad (72)$$

Os valores de  $k$  e  $\epsilon$  são obtidos mediante equações de transporte para energia cinética turbulenta e a dissipação turbulenta (Equações 73 e 74).

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g k u_1) = \nabla \cdot \left[ \alpha_g \left( \mu_{lam} + \frac{\mu_{turb}}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + \alpha_g G_k + \alpha_g \rho_g \epsilon \quad (73)$$

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \varepsilon u_g) = \nabla \cdot \left[ \alpha_g \left( \mu_{lam} + \frac{\mu_{turb}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\alpha_g \varepsilon}{k} (G_k C_{\varepsilon,1} P^K - C_{\varepsilon,2} \rho_g \varepsilon) \quad (74)$$

Para obter os valores de  $k$  e  $\varepsilon$  é necessário resolver as equações de energia de dissipação turbulenta e a taxa de dissipação turbulenta.

Onde  $\alpha_g$ ,  $\sigma_\varepsilon$ ,  $C_{\varepsilon,1}$  e  $C_{\varepsilon,2}$  são constantes, e  $G_k$  é a energia cinética turbulenta devido ao gradiente de velocidade.

$$G_k = \mu_{turb} \nabla u_g [\nabla u_g + (\nabla u_g)^T] \quad (75)$$

### 3.3. Sistema simulado

Geometria bidimensional axissimétrica foi aplicada para representar as condições de contorno usadas nesta etapa do estudo. As geometrias foram baseadas nas unidades experimentais apresentadas nos estudos de YAO et al. (2014; 2015). Estas são apresentadas com mais detalhes na Seção 3.3.2 deste trabalho. A resposta das simulações foram analisadas em duas etapas: na partida do processo e na estabilização do processo.

#### 3.3.1. Propriedades das fases

As simulações tiveram como condição inicial um leito estático com 0,63 de fração volumétrica de sólidos, que era fluidizado pela entrada de ar em estado transiente até as partículas serem ejetados do domínio computacional.

Partículas de catalisador de FCC com um diâmetro de 69,4  $\mu\text{m}$  e densidade de 1500  $\text{kg/m}^3$  foram usadas como leito de partículas. Segundo a classificação de Geldart, as partículas caracterizadas são de tipo Geldart A.

A Tabela 6 apresenta as propriedades usadas na simulação para cada uma das fases.

TABELA 6 - Propriedades de ar e do catalisador usadas na simulação

Propriedades	Fase 1: Ar	Fase 2: Catalisador
Densidade (kg/m <sup>3</sup> )	1,225	1500
Viscosidade (kg/m.s) x 10 <sup>-5</sup>	1,7	KTGF
Temperatura experimental do ar (°C)	25	---
Diâmetro de partícula (µm)	---	69,4
Tipo de partícula	---	Geldart A

Fonte: AUTOR (2016).

### 3.3.2. Configuração geométrica do resfriador simulado

As simulações foram divididas, neste trabalho, em três grupos (caso 1, caso 2 e caso 3). Nos casos 1 e 2, os resfriadores de catalisador simulados foram baseados nos trabalhos de YAO et. al (2015). Já no caso 3, para a criação das geometrias baseou-se no estudo de YAO et. al (2014, b). Mais detalhes dos casos simulados são apresentados na Seção 3.3.3. As Tabela 7 e 8 mostram as características das unidades de resfriamento experimentais para cada caso.

TABELA 7 - Resumo de características de unidades de resfriamento para os casos 1 e 2

Parâmetros de unidade estrutural	Valor
Diâmetro interior da coluna (m)	0,286
Altura da coluna (m)	6,0
Altura do leito fixo	1,1
Tipo de distribuidores de gás	Prato perfurado central. Prato perfurado pleno. Distribuidor em anel.
Altura de distribuidor em anel para gás (m)	0,119
Velocidade superficial do ar (m/s)	0,4
Número de ciclones	2
Conexões entre ciclones	Em série

Fonte: YAO et. al (2015), MODIFICADO.

TABELA 8 - Resumo de características de unidades de resfriamento para o caso 3

Parâmetros de unidade estrutural	Valor
Diâmetro interior da coluna (m)	0,476
Altura da coluna (m)	3,0
Altura do leito fixo	1,45
Tipo de distribuidores de gás	Prato perfurado central. Prato perfurado pleno. Distribuidor em anel.
Altura de distribuidor em anel para gás (m)	0,1 embaixo dos tubos de troca térmica
Velocidade superficial do ar (m/s)	0,4
Número de ciclones	2
Conexões entre ciclones	Em série

Fonte: YAO et. al (2014, b), MODIFICADO.

Os distribuidores de ar são dispositivos que fazem parte dos resfriadores de catalisador industrial. A função deles é o fornecimento do ar para fluidização.

Os distribuidores são parte da configuração geométrica dos resfriadores simulados neste trabalho. A Figura 13 apresenta os distribuidores encontrados na literatura e simulados nesta dissertação. Entre os principais distribuidores têm-se os distribuidores de ar de tipo pleno (distribuidor com um diâmetro exterior igual ao diâmetro interior do resfriador) e a distribuição dupla, composta principalmente de um distribuidor central de prato perfurado e um distribuidor de ar em anel. Também há o distribuidor convencional (YAO et al., 2014, b) que é constituído somente de um alimentador de ar em anel (tubulação em anel e perfurada). Os diferentes tipos de distribuidores usados em cada caso de simulação são apresentados na Tabela 9.

FIGURA 13 – Distribuidores de ar consideradas na simulação. A) Geometrias testadas por Yao et. al (2015) B) Geometrias testadas por Yao et. al (2014, b).



Fonte: YAO et al. (2015); YAO et al. (2014, b) MODIFICADOS.

### 3.3.3. Definição do sistema simulado

As simulações tiveram como base principalmente os trabalhos de YAO et al. (2014b) e YAO et al. (2015), nos quais se destacaram três modos de distribuição de ar para fluidização no interior do resfriador: distribuidor em anel, distribuidor em prato e anel (ou dupla distribuição), e distribuidor em pleno (plano e comum, ao fundo do leito).

Foram simulados casos com e sem realimentação de sólidos. Além disso, foram simulados casos sem e com tubos de troca térmica inseridos dentro do domínio computacional. Ressalta-se, no entanto, que não foi simulada a transferência de calor entre as fases; apenas verificou-se como a presença dos tubos afetaria a fluidodinâmica do sistema e discutiu-se como os padrões de escoamento afetariam a troca térmica.

As seções a seguir descrevem os casos simulados, enquanto a Tabela 9 traz um sumário de todas as simulações e as principais características de cada uma delas.

#### Primeiro grupo de simulações (Caso 1)

Neste caso, as geometrias foram baseadas no trabalho de YAO et al. (2015). Como uma simplificação e em primeira abordagem, o sistema de realimentação não foi considerado dentro do domínio da simulação. O propósito dessas simulações era avaliar a partida do sistema, discutir tanto a fluidodinâmica obtida como a representação do regime de escoamento que seria obtido, visualizando-se de fato que as partículas seriam arrastadas para fora do sistema.

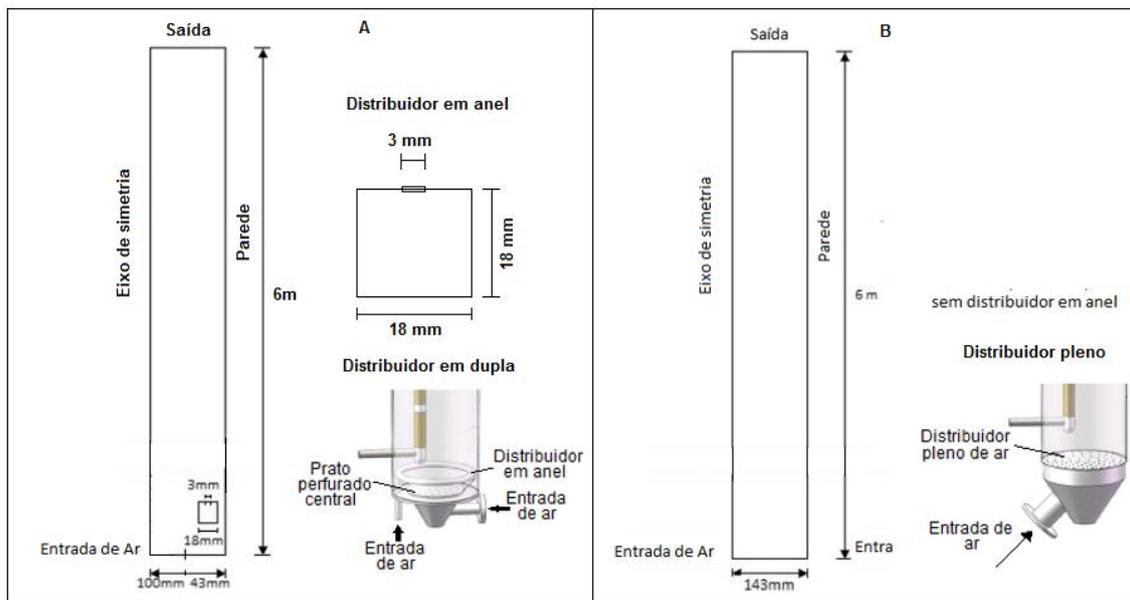
Na primeira configuração avaliada (caso 1.1 apresentada na Tabela 9), foi utilizada alimentação de ar dupla, em que um distribuidor em prato perfurado em uma região central provê a maioria de gás de fluidização. O distribuidor em anel foi instalado próximo às paredes, ligeiramente acima do distribuidor central, que provê o fluxo minoritário de gás.

Na segunda geometria (caso 1.2 apresentada na Tabela 9), o gás entra pelo fundo do resfriador e arrasta as partículas que estão no seu interior. A alimentação de gás foi feita em toda a área superficial do fundo (pleno).

Detalhes sobre o domínio da simulação em ambas configurações são mostradas na Figura 14. O resfriador de catalisador tinha 286 mm de diâmetro e 6 m de altura. Nestes casos foi usada uma altura de leito de partículas de 1,1 m (ver as seções 3.3.1 e 3.3.2 deste trabalho).

O equipamento usado nas pesquisas de YAO et al. (2015) continha um tubo vertical composto de cinco seções de aquecimento, seis seções de isolamento e dois tubos de suporte, que permitem a medição dos coeficientes de transferência de calor em diferentes alturas axiais. Além disso, em suas experiências, as partículas eram arrastadas para fora na parte superior do resfriador de catalisador, onde eram recolhidas por dois separadores (ciclones) em série e, em seguida, retornadas ao leito mediante um tubo de retorno para manter o inventário de partículas.

FIGURA 14 - Detalhes das geometrias sem realimentação (caso 1). A) Com distribuidor em anel. B) Sem distribuidor em anel.



Fonte: MODIFICADO (YAO et. al, 2015).

### Segundo grupo de simulações (Caso 2)

Este grupo de simulações foi baseado também nos trabalhos de YAO et al. (2015), simulando-se as mesmas geometrias que o primeiro caso. No entanto, foi acrescentada a realimentação de sólidos mediante uma função definida pelo usuário (UDF, do inglês *User Defined Function*) para cada caso analisado.

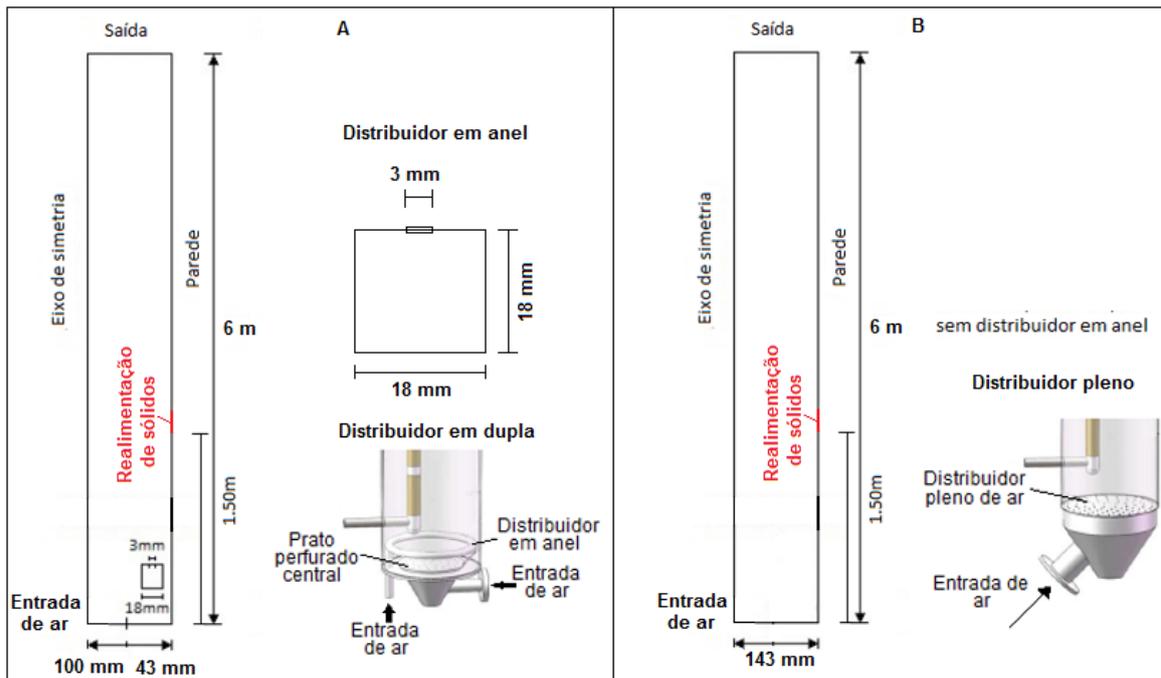
Também foram simulados dois casos dentro deste grupo: um resfriador de catalisador com distribuidor duplo (prato perfurado central e distribuidor em anel, caso 2.1), e um distribuidor com alimentação em toda região inferior (pleno, caso 2.2).

No caso 2.1, o distribuidor central fornece a maior quantidade de ar e um distribuidor anular fornece a menor quantidade de ar. O distribuidor em anel está localizado próximo às paredes, em cima do distribuidor central.

No caso 2.2, o gás é injetado pelo fundo do resfriador e arrasta as partículas para o topo do resfriador.

Detalhes destas geometrias são mostrados na Figura 15. Nestes casos, o resfriador de catalisador também teve um diâmetro de 286 mm e 6 m de altura.

FIGURA 15 - Detalhes das geometrias sem realimentação (caso 2). A) Com distribuidor em anel. B) Sem distribuidor em anel.



Fonte: MODIFICADO (YAO et. al, 2015).

Para esta simulação foi considerada a realimentação de partículas (UDF apresentada na Seção 3.3.5). No aparato experimental (YAO et al., 2015), as partículas arrastadas para o topo do resfriador eram coletadas por um sistema de separação (dois ciclones em série) e retornadas mediante um duto de realimentação para manter constante o inventário de sólidos. O duto de realimentação dos sólidos foi localizado (na simulação e construção da malha) 1,5 m acima do distribuidor central ou pleno, de acordo com o caso a tratar.

O propósito dessa simulação foi avaliar a implementação da UDF para realimentação de sólidos e analisar a fluidodinâmica obtida ainda sem incluir barreiras internas ao sistema para representar as tubulações de troca de calor.

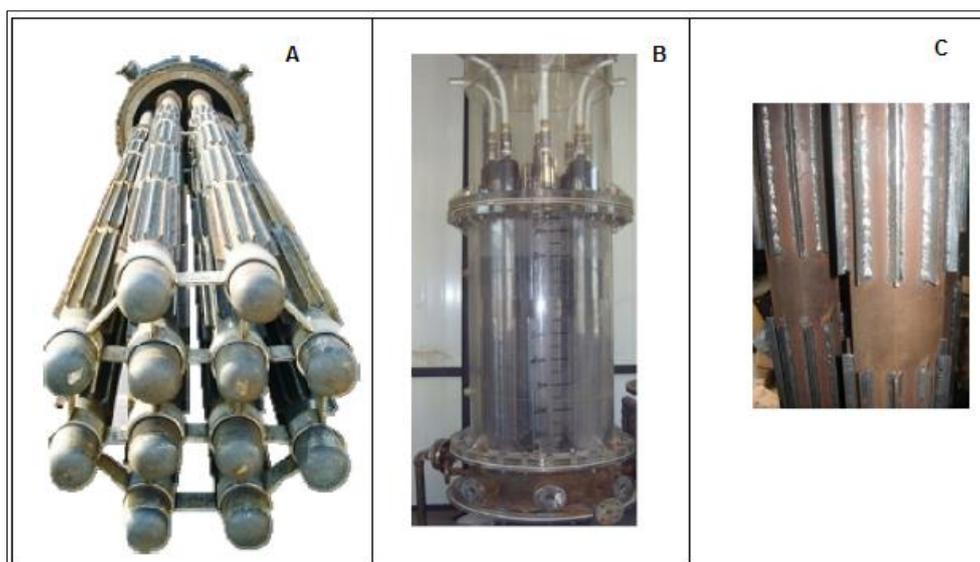
### Terceiro grupo de simulações (Caso 3)

Esta geometria foi baseada no trabalho de YAO et al. (2014, b). Nesta configuração, um feixe de tubos internos é colocado no resfriador para a troca de calor com a fase particulada. Assim, o trabalho experimental utilizou resfriadores de catalisador com arranjos de nove tubos (resfriador tradicional, caso 3.1) e oito tubos (resfriador modificado, casos 3.2 e 3.3), respectivamente.

Os resfriadores experimentais tinham um duto de realimentação de sólidos para reinserir no sistema as partículas que saem pelo topo. Assim, a UDF para realimentação de sólidos foi utilizada nestes casos de simulação.

Vale a pena destacar que os tubos no feixe interno para resfriamento eram aletados no trabalho original (Figura 16). Porém, o sistema aletado não foi considerado, de modo a simplificar a geometria nas simulações.

FIGURA 16 – Resfriador de catalisador industrial com tubos de troca térmica. A) Resfriador de catalisador industrial típico. B) Resfriador de catalisador tradicional. C) Tubos de troca térmica com aletas.



Fonte: MODIFICADO (YAO et. al, 2014).

As simulações realizadas neste caso foram em 2D. Naturalmente, não foi possível representar a totalidade dos tubos de troca térmica perfeitamente em simetria axial. Assim, uma parede cilíndrica de área de secção transversal igual à área de secção transversal dos tubos na periferia foi simulada para emular o efeito das tubulações.

- *Caso 3.1 - Resfriador de catalisador com nove tubos de troca térmica*

Este resfriador de catalisador é caracterizado por um leito fluidizado cilíndrico de 476 mm de diâmetro interno e 3 m de altura (ver seções 3.3.1 e 3.3.2). Foi usado um modelo de resfriador do tipo *down-flow*, onde nove tubos de troca térmica foram instalados.

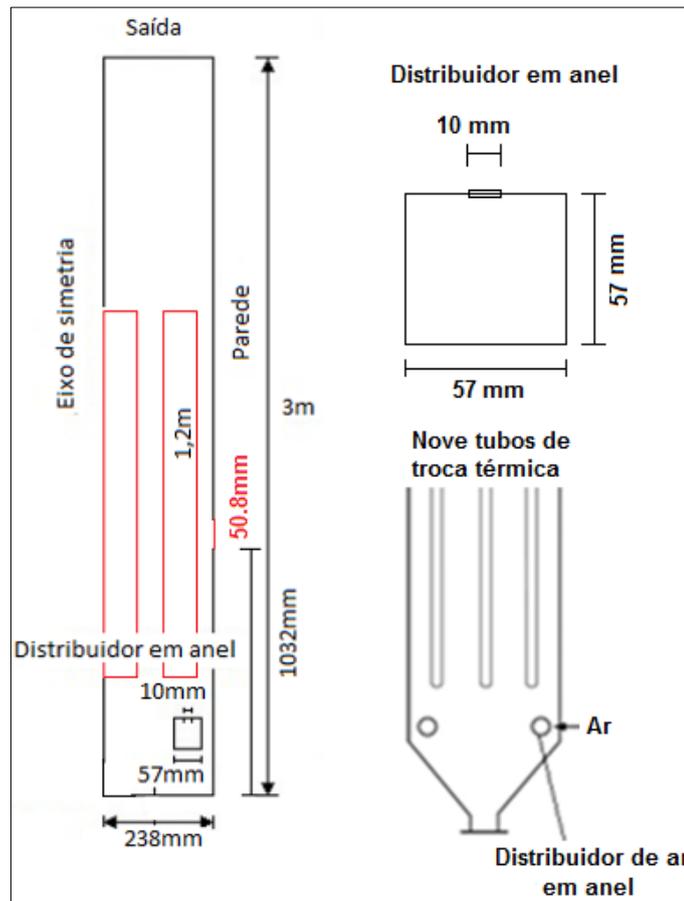
No aparato experimental (YAO et al., 2014b), quando o ar atravessa a coluna no sentido do topo, as partículas são coletadas mediante um sistema de separação por ciclones. Os sólidos coletados são retornados para o leito mediante um duto de realimentação para manter o inventário de sólidos.

De acordo com o estudo do resfriador de catalisador no trabalho de YAO et al. (2014, b) nove tubos para troca térmica de 76 mm de diâmetro e 1,2 m de altura estão inseridos dentro da coluna. Um dos tubos é localizado no centro e os outros oito ao redor de uma circunferência concêntrica de 334 mm de diâmetro (Figura 17).

A totalidade de gás é fornecido pelo distribuidor em anel. O distribuidor em anel teve um diâmetro de 57 mm, com 36 furos de 10 mm de diâmetro e foi instalado 100 mm abaixo do fundo dos tubos de troca térmica. Esta geometria não possui distribuidor de prato perfurado central nem distribuidor pleno.

Um leito estático de partículas com altura de 1,45 m foi usado no início dos experimentos.

FIGURA 17 – Detalhe da geometrias simulada (caso 3.1)



Fonte: MODIFICADO (YAO et al., 2014, b).

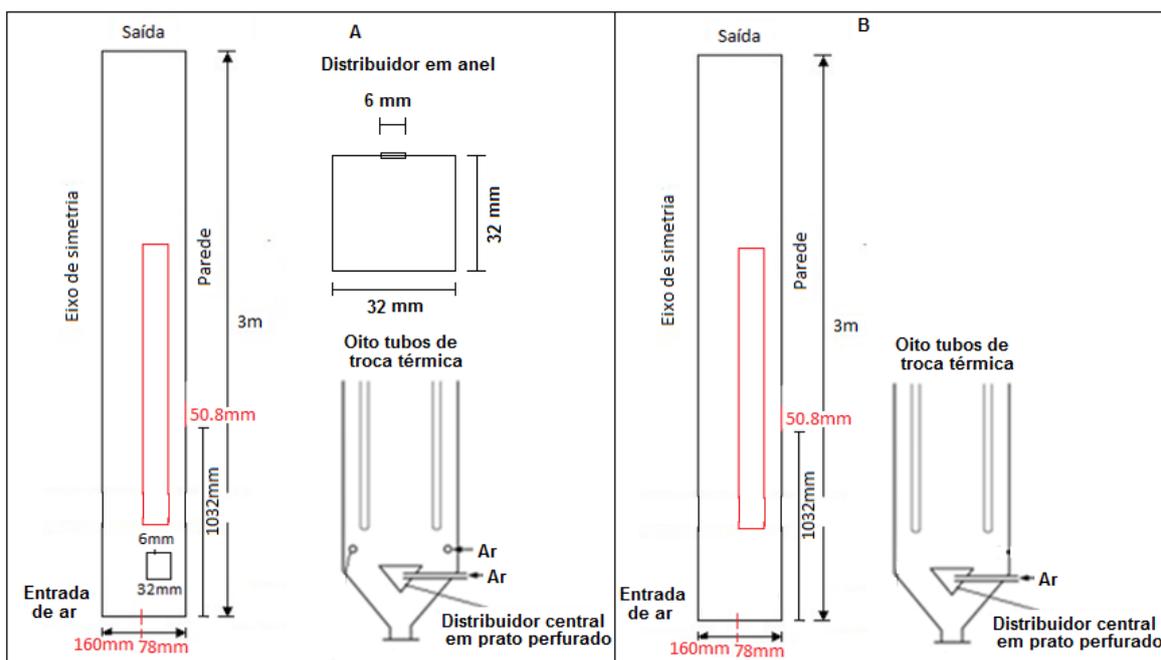
*- Casos 3.2 e 3.3 - Resfriador de catalisador com oito tubos de troca térmica*

Simulações foram feitas considerando distribuidores de prato central perfurado e anel (distribuidor duplo, caso 3.2) e somente distribuidor de prato central perfurado negligenciando o distribuidor em anel (caso 3.3). Em ambos os casos, foi considerada a realimentação dos sólidos.

O diâmetro do prato perfurado central foi de 320 mm, instalado 200 mm abaixo dos tubos de troca térmica de calor. O distribuidor de gás teve 32 mm de diâmetro, localizado 100 mm acima do prato perfurado central. O distribuidor teve 12 orifícios com diâmetro de 6 mm (caso 3.2). O caso 3.3 é similar ao caso 3.2, com a diferença de que o distribuidor de ar em anel foi retirado da configuração geométrica.

A Figura 18 mostra as geometrias simuladas, baseadas nos estudos de YAO et al. (2014, b).

FIGURA 18 - Detalhes das geometrias simuladas. A) Caso 3.2. B) Caso 3.3.



Fonte: Modificado (YAO et al., 2014, b).

A Tabela 9 apresenta, de forma resumida, os casos considerados para a simulação.

TABELA 9 - Resumo dos casos considerados nas simulações

Caso	Diâmetro (m)	L (m)	Realimentação de sólidos	Número de tubos para troca térmica	Distribuidor em anel	Distribuidor	
						Central	Pleno
1.1	0,286	6	Não	0	Sim	Sim	Não
1.2	0,286	6	Não	0	Não	Não	Sim
2.1	0,286	6	Sim	0	Sim	Sim	Não
2.2	0,286	6	Sim	0	Não	Não	Sim
3.1	0,476	3	Sim	9	Sim	Não	Não
3.2	0,476	3	Sim	8	Sim	Sim	Não
3.3	0,476	3	Sim	8	Não	Sim	Não

Fonte: AUTOR (2016), MODIFICADO.

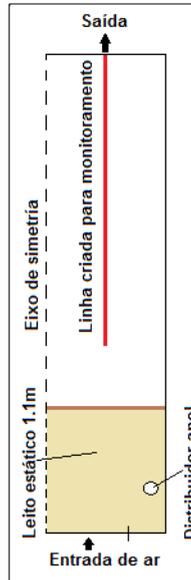
### 3.3.4. Condições operacionais e condições de contorno usadas nas simulações

Para que a análise de escoamento gás sólidos seja efetiva, deve-se certificar que a velocidade superficial do gás consiga vencer a velocidade mínima de fluidização (as velocidades com as quais se trabalhou estão apresentadas na Tabela 10, para cada caso).

Sendo assim, para monitorar a expansão do leito de sólidos original, por conseguinte, a fluidização deste, foi criada uma linha dentro do interior do domínio

computacional da simulação em cada caso simulado. A Figura 19 mostra a localização dessa linha, que será denominada *linha de monitoramento* ao longo do texto.

FIGURA 19 – Linha de monitoramento de máxima expansão do leito (Caso 1.2)



Fonte: AUTOR (2016), MODIFICADO.

Por conseguinte, através do monitoramento da fração volumétrica média de sólidos na linha criada, é esperado que para cada caso, seja comprovada a seguinte tese:

- Para o caso 1 (resfriadores de catalisador sem realimentação de sólidos): todas as partículas sejam ejetadas para fora do domínio, uma vez que a velocidade superficial do gás é maior do que a velocidade de mínima fluidização.

- Para o caso 2 (resfriadores de catalisador com realimentação de sólidos): se espera que as partículas sejam ejetadas para fora do domínio e retornem mantendo o inventário de sólidos aproximadamente constante ao longo do tempo.

- Para o caso 3 (resfriadores de catalisador com realimentação de sólidos e tubos de troca térmica inseridos): se espera uma estabilização do processo após a realimentação, mantendo também o inventário de sólidos.

Foram calculadas as velocidades de transporte para cada caso (Equação 74), com um diâmetro de partícula de 69,4  $\mu\text{m}$ . A utilização de uma velocidade superior à velocidade de transporte garante o regime de fluidização rápida.

$$u_{tr} = 1,45 \frac{\mu_g}{(\rho_g d_p)} Ar^{0,484} \quad (74)$$

A Tabela 10 mostra as velocidades nos contornos de entrada das simulações usadas para cada um dos casos. A velocidade de transporte calculada teoricamente (para as partículas de 69,4 $\mu$ m) para todos os casos é de 1,14 m/s. Quando ocorre distribuição dupla, a soma da velocidade superficial (baseada na área total de secção do leito) corresponde à velocidade de 0,4 m/s em todos os casos. Assim, em todos os casos, foi considerado que o escoamento é característico do regime turbulento, pois o cálculo dos parâmetros adimensionais considerados na Figura 1b (Número de Arquimedes e velocidade adimensional) mostra que a fluidização cai na região turbulenta em um trecho ascendente (*riser*). A Tabela 10 traz também a velocidade superficial (em toda a área do leito) de cada entrada quando se simulou dupla distribuição.

TABELA 10 - Velocidades de Fluidização para cada caso

Caso	Velocidade de Fluidização (m/s)				
	Distribuidor central perfurado (m/s)	Distribuidor pleno (m/s)	Distribuidor anelar (m/s)	Velocidade superficial (prato central) – m/s	Velocidade superficial (distrib. Anelar) – m/s
1.1	0,72	-	1,25	0,353	0,047
1.2	-	0,4	-	0,400	-
2.1	0,72	-	1,25	0,353	0,047
2.2	-	0,4	-	0,400	-
3.1	-	-	5,65	-	0,4
3.2	0,78	-	1,12	0,353	0,047
3.3	0,89	-	-	0,400	-

Fonte: AUTOR (2016).

A condição de contorno na saída do sistema foi definida como pressão especificada. A alimentação de gás ocorria pelos distribuidores, que eram de vários tipos (Tabela 7 e 8). A realimentação de sólidos foi definida por UDF nos casos em que foi simulada (vide seção 3.3.3). Além disso, a condição de contorno nas paredes do sistema foi assumida como de não escorregamento, para ambas as fases.

### 3.3.5. Esquema da Função Definida pelo Usuário

Os primeiros testes de simulação foram realizados para geometrias sem realimentação de sólidos a fim de avaliar o comportamento da fluidização no sistema sob condições de contorno e avaliar o comportamento em termos de escoamento gás-sólido, utilizando vazões constantes.

Nos casos que seguiram, a fase sólida era realimentada de modo a manter o inventário no sistema. O circuito inteiro da geometria simulada em termos do caminho

percorrido pelas partículas não foi incluso e a fim de garantir a realimentação a quantidade dos sólidos que sai pelo topo e retorna por uma entrada lateral foi mantida com o mesmo valor mediante uma função definida pelo usuário (UDF, do inglês *User Defined Function*). Tomando como referência a geometria do resfriador estudado por YAO et al. (2015), a Figura 20 mostra a função que foi escrita e depois compilada para monitorar a vazão de saída de sólidos e garantir a inserção da mesma vazão na região de alimentação, de modo a manter o mesmo inventário de sólidos no domínio computacional.

FIGURA 20 - Função definida pelo usuário para o monitoramento da realimentação dos sólidos

```
#include "udf.h"
#include <math.h>
real flow = 0.;
/*Leitura da vazão mássica na saída (ID=14)*/
DEFINE_ADJUST(mass_flux_par,d)
{
/*Somatório da massa da fase particulada atravessa cada uma das faces da superfície de saída*/
#if !RP_HOST
    face_t f;
    Thread *tf;
    d = Get_Domain(3);/*fasesolida*/
    tf = Lookup_Thread(d,14);
    flow = 0.;
    begin_f_loop(f,tf)
    {
    flow += F_FLUX(f,tf);
    }
    end_f_loop(f,tf)
    flow = PRF_GRSUM1(flow);
    #endif
    flow = flow*2*M_PI; /*para o caso de coordenadas cilíndricas (simetria axial) - somente*/
    Message("Valor de flow: %f\n", flow);
}
/*Define o perfil de velocidade a ser utilizado como condição de contorno, de acordo com a vazão calculada*/
DEFINE_PROFILE(set_mass_reflux_par,tf,i)
{
    face_t f;
    Message("Valor de flow_define_prof: %f\n", flow);
    begin_f_loop(f,tf)
    {
    F_PROFILE(f,tf,i) = flow/1500/0.63/M_PI/0.1938/2/0.0508; /* flow/ro/alfa/area_superficial */
    }
    end_f_loop(f,tf)
}
}
```

Fonte: PROGRAMA COMPUTACIONAL ANSYS FLUENT v14.5.

A função UDF soma a massa da fase dispersa que deixa o domínio da simulação a cada passo de tempo. A vazão mássica é então convertida para velocidade mediante a Equação 75.

$$u_{si} = \frac{m_{si}}{\rho_s \varepsilon_{si} A_{ti}} \quad (75)$$

Em que  $u_{si}$  é a velocidade dos sólidos na entrada de realimentação ao resfriador,  $m_{si}$  é a vazão mássica de sólidos desejada na entrada do resfriador,  $\varepsilon_{si}$  é a fracção

volumétrica de sólidos na entrada de realimentação do resfriador (definida como 0,63), e  $A_{ti}$  é a área superficial da entrada de realimentação no resfriador.

### 3.4. Malhas numéricas empregadas

#### 3.4.1. Número de células empregadas para cada teste de malha

Testes de malhas foram feitos para os casos 1 e 2 com o propósito de garantir a independência dos resultados obtidos por discretização em número de células empregadas para a resolução das equações do modelo. Portanto, para cada geometria proposta (tanto para o resfriador com distribuidor em anel e sem distribuidor em anel) três tipos de malhas foram construídas e avaliadas para determinar a diferença de resultados entre elas e se estas são afetadas pelos critérios de convergência. As malhas foram testadas desde a mais grosseira até conseguir malhas mais refinadas, seguindo os parâmetros de qualidade para assegurar uma boa convergência e comparando-as em termos de escoamento.

As Tabelas 11, 12 e 13 mostram as malhas testadas e o número de células que foram usadas para resolver as equações e avaliar o escoamento gás-sólido.

TABELA 11 - Número de células para cada uma das malhas testadas. Casos 1.1 e 1.2.

<b>Caso 1: Resfriador de catalisador sem considerar realimentação de sólidos</b>	<b>Tipo de malha</b>	<b>Tamanho de malha (número de células)</b>
<b>Resfriador de catalisador com distribuidor em anel (caso 1.1)</b>	Malha menos refinada	13 474
	Malha intermediária	25 016
	Malha Refinada	53 633
<b>Resfriador de catalisador sem distribuidor em anel (caso 1.2)</b>	Malha menos refinada	20 271
	Malha intermediária	33 111
	Malha refinada	88 441

Fonte: AUTOR (2016).

TABELA 12 - Número de células para cada uma das malhas testadas. Casos 2.1 e 2.2.

<b>Caso 2: Resfriador de catalisador considerando realimentação de sólidos</b>	<b>Tipo de malha</b>	<b>Tamanho de malha (número de células)</b>
<b>Resfriador de catalisador com distribuidor em anel (caso 2.1)</b>	Malha menos refinada	26 660
	Malha intermediária	49 444
	Malha Refinada	89 244
<b>Resfriador de catalisador sem distribuidor em anel (caso 2.2)</b>	Malha menos refinada	8 456
	Malha intermediária	29 253
	Malha refinada	57 643

Fonte: AUTOR (2016).

TABELA 13 - Número de células para cada uma das malhas testadas. Casos 3.1 e 3.2 e 3.3

<b>Caso 3: Resfriador de catalisador sem considerar realimentação de sólidos</b>	<b>Distribuidor de ar</b>	<b>Tipo de malha</b>	<b>Tamanho de malha (número de células)</b>
<b>Resfriador de catalisador com oito tubos de troca térmica</b>	<b>Prato perfurado central e distribuidor em anel (caso 3.2)</b>	Menos refinada	16 600
		Malha Intermediária	27 094
		Malha refinada	51 003
	<b>Prato perfurado central (caso 3.3)</b>	Menos refinada	17 303
		Malha Intermediária	26 179
		Malha refinada	51 108
<b>Resfriador de catalisador com nove tubos de troca térmica</b>	<b>Com distribuidor (caso 3.1)</b>	Menos refinada	20 340
		Malha Intermediária	29 213
		Malha refinada	63 935

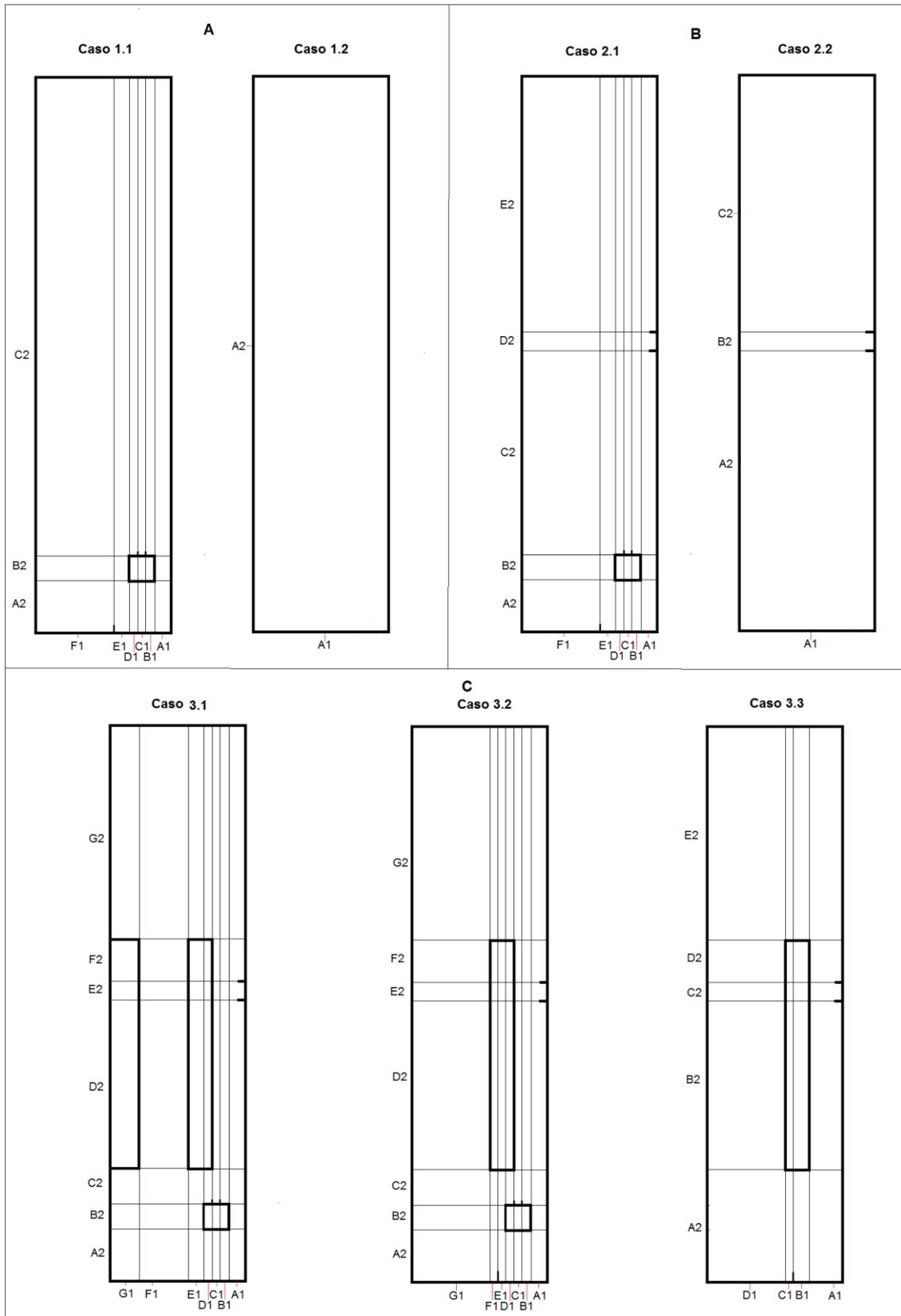
Fonte: AUTOR (2016).

### 3.4.2. Refinamento da malha.

Em todos os casos foram utilizadas malhas hexaédricas ou quadriláteras (malhas tipo 2D). As malhas foram mais refinadas nas paredes do sistema simulado.

A Figura 21 mostra como é que foram feitas as divisões das arestas nas malhas em cada uma das direções (largura e altura).

FIGURA 21 – Divisões das arestas: largura e altura (malhas intermediárias). A) Caso 1. B) Caso 2. C) Caso 3.



Fonte: AUTOR (2016).

O número de células empregadas em cada uma das divisões são apresentadas detalhadamente na Tabela 14.

Malhas hexaédricas não estruturadas foram geradas com base nas geometrias na seção 3.3.3. As razões de crescimento consideradas foram as seguintes:

- radial: variaram na faixa de 1,0 – 1,96 (Caso 1.1 com 25 016 volumes); 1,0 (Caso 1.2 com 33 111 volumes); 1,0 – 1,93 (Caso 2.1 com 49 444 volumes); 1,0 (Caso 2.2 com 29 253 volumes); 1,0 – 1,96 (Caso 3.1 com 29 213 volumes); 1,0 – 1,78 (Caso 3.2 com 27 094 volumes); 1,0 – 1,61 (Caso 3.3 com 26 179 volumes).

- axial: 1,0 – 3,53 (Caso 1.1 com 25 016 volumes); 1,0 (Caso 1.2 com 33 111 volumes); 1,0 – 2,22 (Caso 2.1 com 49 444 volumes); 0,92 – 1,0 (Caso 2.2 com 29 253 volumes); 1,0 – 2,19 (Caso 3.1 com 29 213 volumes); 1,0 – 2,18 (Caso 3.2 com 27 094 volumes); 1,0 – 1,69 (Caso 3.3 com 26 179 volumes).

O critério utilizado para as razões de crescimento foram mantidos em cada um dos testes de malhas. As malhas foram geradas com o programa computacional ANSYS ICEM CFD v14,5. Na Tabela 14 são apresentadas com detalhe todas a razões de crescimento por cada divisão das arestas.

TABELA 14 - Detalhes de divisões das arestas (largura e altura) e Razões de crescimento (axial e radial)

<b>Caso</b>	<b>Largura (número de divisões)</b>	<b>Razão de crescimento radial</b>	<b>Altura (número de divisões)</b>	<b>Razão de crescimento axial</b>
<b>1.1</b>	A1 (8)	1,00		
	B1 (4)	1,00	A2 (30)	1,00
	C1 (2)	1,00	B2 (6)	1,00
	D1 (4)	1,00	C2 (500)	3,53
	E1 (5)	1,07		
	F1 (30)	1,96		
<b>1.2</b>	A1 (30)	1,00	A2 (700)	1,00
<b>2.1</b>	A1 (12)	1,00	A2 (30)	1,00
	B1 (5)	1,20	B2 (7)	1,00
	C1 (3)	1,00	C2 (240)	1,73
	D1 (5)	1,20	D2 (12)	1,27
	E1 (7)	1,14	E2 (600)	2,22
	F1 (30)	1,93		
<b>2.2</b>			A2 (140)	1,00
	A1 (50)	1,00	B2 (10)	1,00
			C2 (450)	0,92
<b>3.1</b>	A1 (5)	1,00	A2 (35)	1,00
	B1 (9)	1,37	B2 (15)	1,33

	C1 (4)	1,32	C2 (35)	1,00
	D1 (8)	1,55	D2 (160)	1,69
	E1 (10)	1,73	E2 (15)	1,19
	F1 (30)	1,76	F2 (60)	2,19
	G1 (10)	1,96	G2 (200)	1,70
3.2	A1 (12)	1,00	A2 (25)	1,00
	B1 (6)	1,08	B2 (8)	1,00
	C1 (3)	1,00	C2 (25)	1,00
	D1 (5)	1,30	D2 (120)	1,67
	E1 (8)	1,38	E2 (10)	1,27
	F1 (6)	1,78	F2 (50)	1,75
	G1 (40)	1,73	G2 (180)	2,18
3.3	A1 (15)	1,00	A2 (50)	1,00
	B1 (12)	1,00	B2 (180)	1,00
	C1 (8)	0,93	C2 (10)	1,09
	D1 (30)	1,61	D2 (70)	1,08
			E2 (200)	1,69

Fonte: AUTOR (2016).

### 3.5. Esquemas de interpolação para resolução do equacionamento nos casos simulados.

Para escoamentos multifásicos, recomenda-se um critério de convergência que varia na faixa de  $10^{-3}$  e  $10^{-5}$ , adotando-se um valor de  $10^{-4}$  (HODAPP, 2012; ALMEIDA, 2015), o qual foi utilizado nesta dissertação, conforme aos dados apresentados nas Tabelas 4 e 5.

O esquema do tipo *Higher Upwind* foi adotado para interpolação do termo advectivo. Os termos difusivos foram calculados por um esquema de diferenças centrais de segundo ordem e o acoplamento pressão foi estimado pelo métodos SIMPLE (*Phase Coupled Simple*).

Na Tabela 15 é apresentado os métodos de solução utilizados em todos os casos simulados nesta dissertação.

TABELA 15 – Métodos de Resolução

Acoplamento Pressão Velocidade		Discretização espacial		Formulação transiente	
Esquema	SIMPLE	Gradiente	Baseado nos mínimos quadrados	Esquema	Primeiro Ordem Implícito
		Momento	Segunda Ordem <i>Upwind</i>		
		Fração de volume	Primeira Ordem <i>Upwind</i>		
		Energia cinética	Segunda Ordem <i>Upwind</i>		
		Taxa de dissipação	Segunda Ordem <i>Upwind</i>		
		Turbulenta	Segunda Ordem <i>Upwind</i>		

Fonte: AUTOR (2016).

### 3.6. Parâmetros de qualidade na malha

As malhas foram criadas com o auxílio do programa computacional ANSYS ICEM CFD v14,5. Para garantir a qualidade das malhas em termos de geometria, foram usadas dois critérios como parâmetros de qualidade, disponibilizados também no *software*: determinante  $3 \times 3 \times 3$  e o *aspect ratio*.

#### 3.6.1. Determinante $3 \times 3 \times 3$ .

O determinante  $3 \times 3 \times 3$  é definido como o determinante relativo, uma relação entre o determinante mais pequeno da matriz Jacobiana dividido pelo maior determinante da matriz Jacobiana. Este critério de qualidade representa a deformação dos elementos na malha pelo cálculo da matriz Jacobina de cada hexaedro e normalizado pelo determinante da matriz. Um determinante com um valor igual a 1,0 indica que o elemento da malha é perfeitamente regular, pelo contrário, o valor de 0,0 indica que o elemento está completamente degenerado.

Em todos os casos de simulação foram verificadas que o determinante indique um valor por acima do 0,80. Os valores de determinante  $3 \times 3 \times 3$  estão apresentados na Tabela 16.

### 3.6.2. Razão de aspecto (*Aspect Ratio*)

A relação de aspecto é uma medida da extensão da célula. Para os fluxos ou escoamentos altamente anisotrópicos, as relações de aspecto podem produzir resultados extremamente precisos com menos células. Geralmente, é melhor evitar a mudança súbita e grande nas células respeito às relações de aspecto, principalmente em aquelas regiões de fluxo onde existem grandes mudanças o fortes gradientes.

Em todos os casos de simulação foram verificadas que as relações de aspecto variassem na faixa de 1,0 até o 8,0. Os valores de relações de aspecto estão apresentados na Tabela 16.

TABELA 16 – Parâmetros de qualidade utilizados nas malhas, para todos os casos

Casos de estudo	Tipo de malha	Determinante 3x3x3: número de células	Razão de aspecto: número de células
<b>Caso 1.1</b>	Malha menos refinada	0,87-1,00: 13 474 (100%)	1-1,99: 1 865 (13,842%)
			2,98-3,97: 11 609 (86,158%)
	Malha intermediária	0,95-1,00: 25 016 (100%)	1-1,99: 1 563 (6,248%)
			2,98-3,97: 14 649 (58,559%)
			3,97-4,96: 5 311 (21,230%)
			4,96-5,95: 3 493 (13,963%)
Malha Refinada	0,95-1,00: 53 633 (100%)	1-1,99: 4 309 (8,034%)	
		3,97-4,96: 47 642 (70,184%)	
		5,95-6,94: 11 682 (21,781%)	
<b>Caso 1.2</b>	Malha menos refinada	0,95-1,00: 20 271 (100%)	1-1,99: 20 271 (100%)
	Malha intermediária	0,99-1,0: 33 111 (100%)	1-1,95: 33 111 (100%)
	Malha refinada	0,95-1,0: 88 411 (100%)	1-5,95: 88 441 (100%)
<b>Caso 2.1</b>	Malha menos refinada	0,99-1,0: 26 660 (100%)	1-1,99: 1 280 (4,801%)
			1,99-2,98: 7 206 (27,029%)
			2,98-3,97: 12 660 (47,487%)
			3,97-4,96: 2 721 (10,206%)
			4,96-5,95: 2 793 (10,476%)

	Malha intermediária	0,99-1,0: 49 444 (100%)	1-1,99: 8 533 (17,258%) 1,99-2,98: 18 142 (36,692%) 2,98-3,97: 6 303 (12,748%) 3,97-4,96: 8 679 (17,553%) 4,96-5,95: 7 787 (15,749%)
	Malha refinada	0,99-1,0: 89 244 (100%)	1-1,99: 7 051 (7,901%) 1,99-2,98: 15 316 (17,162%) 2,98-3,97: 35 987 (40,324%) 3,97-4,96: 8 175 (9,160%) 4,96-5,95: 7 788 (8,727%) 4,96-5,95: 14 927 (16,726%)
<b>Caso 2.2</b>	Malha menos refinada	0,99-1,0: 8 456 (100%)	1-1,99: 8 456 (100%)
	Malha intermediária	0,99-1,0: 29 253 (100%)	1-1,99: 441 (1,508%) 2,98-3,97: 28 812 (98,492%)
	Malha refinada	0,95-1,00: 57 643 (100%)	1-1,99: 1 121 (1,945%) 1,99-2,98: 56 522 (98,055%)
<b>Caso 3.1</b>	Malha menos refinada	0,95-1,00: 20 340 (100%)	1-1,99: 20 340 (100%)
	Malha intermediária	0,95-1,00: 29 213 (100%)	1-1,99: 16 061 (54,732%) 1,99-2,98: 12 488 (42,556%) 2,98-3,97: 664 (2,712%)
	Malha refinada	0,95-1,00: 63 935 (100%)	1-1,99: 62 190 (97,271%) 1,99-2,98: 1 745 (2,729%)
<b>Caso 3.2</b>	Malha menos refinada	0,95-1,00: 16 600 (100%)	1-1,95: 12 403 (74,717%) 1,95-2,9: 3 891 (23,440%) 2,9-3,85: 306 (1,843%)
	Malha intermediária	0,95-1,00: 27 094 (100%)	1-1,99: 8 916 (32,908%) 1,99-2,98: 13 441 (49,609%) 2,98-3,97: 2 768 (10,216%) 3,97-4,96: 1 969 (7,267%)
	Malha refinada	0,95-1,00: 51 003 (100%)	1-1,99: 28 881 (56,626%) 1,99-2,98: 19 342 (37,923%) 2,98-3,97: 2 752 (5,396%) 3,97-4,96: 28 (0,055%)
<b>Caso 3.3</b>	Malha menos refinada	0,95-1,00: 17 303 (100%)	1-1,99: 17 303 (100%)
	Malha intermediária	0,95-1,00: 26 179 (100%)	1-1,99: 19 811 (75,675%) 1,99-2,98: 6 368 (24,325%)

		1-1,99: 28 947 (56,639%)
Malha refinada	0,95-1,00: 51 108 (100%)	1,99-2,98: 19 422 (38,002%)
		2,98-3,97: 2 739 (5,359%)

Fonte: AUTOR (2016).

### **3.7. Análise e tratamento posterior do comportamento dos sólidos no estado quase estacionário.**

Devido à incorporação da UDF para simular a realimentação dos sólidos principalmente nos casos 2 e 3 (casos apresentados na Tabela 9), houve a necessidade de avaliar o comportamento dos sólidos no processo de fluidização, especificamente no estado quase estacionário, considerando os tempos de simulação expostos na Tabela 4.

A informações fornecidas pela análise permitiram comparar a eficiência na operação dos resfriadores de catalisador e a homogeneidade do escoamento das fases em termos de escoamento e hidrodinâmica.

Para esta dissertação, dois tipos de análise foram consideradas no tratamento do estado quase estacionário, ambas envolvendo estatísticas geradas a partir do escoamento simulado: análise de uma média de velocidade axial e fração de sólidos (casos 2 e 3); e média de fração de sólidos em contato com as paredes e desvio padrão (caso 3).

As estatísticas do escoamento foram obtidas depois da estabilização do sistema pelo próprio Fluent. Os tempos necessários para estabilização variaram dependendo da simulação analisada e estão apresentados nos resultados da dissertação. O pós-processamento foi realizado com o auxílio do programa computacional CFD-Post v14,5 do pacote computacional ANSYS v14.5.

#### **3.7.1. Média de velocidade axial e fração de sólidos.**

A análise foi aplicada nos casos 2 e 3 desta dissertação. O objetivo foi observar o comportamento dos sólidos no interior de resfriador de catalisador.

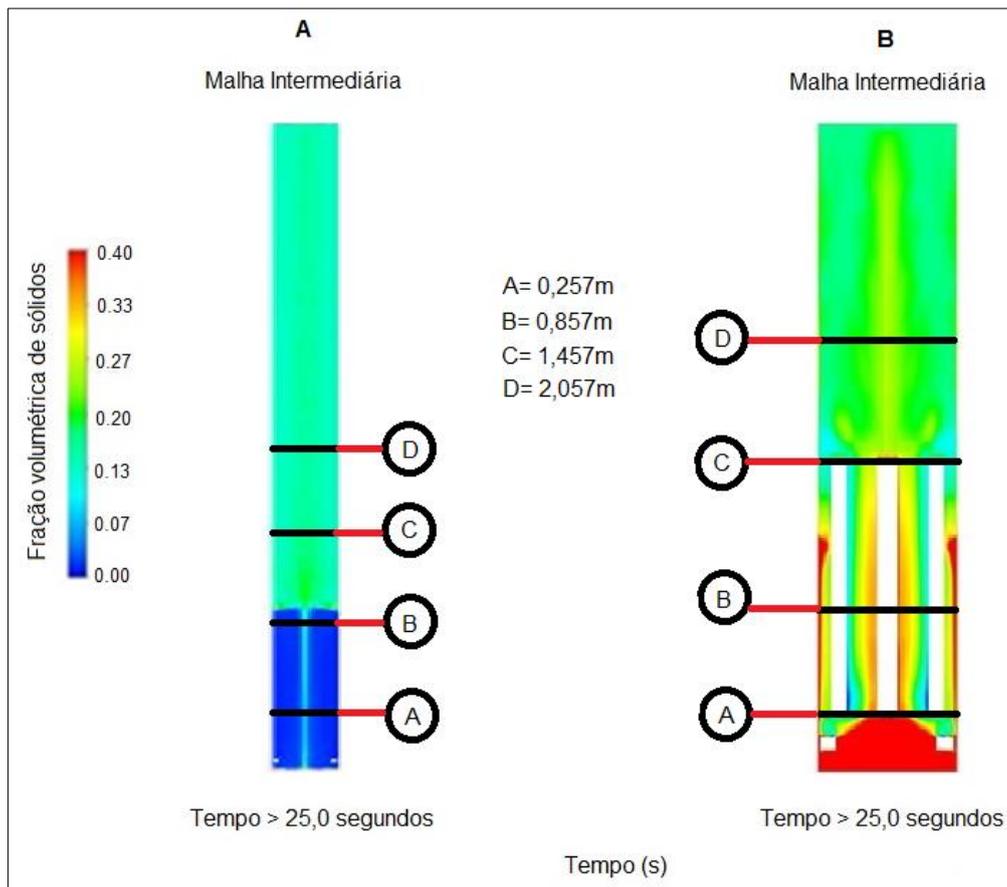
A média da velocidade axial dos sólidos permitiu conhecer perfis de velocidade dos sólidos ao longo do eixo do sistema, mapeando as regiões onde eram apresentadas diferentes velocidades em magnitude. Também, vetorialmente foi possível conhecer as direções que adotavam os sólidos num leito fluidizado, influenciado diretamente pela realimentação contínua de sólidos.

A média de fração de sólidos permitiu conhecer um perfil de concentração no domínio do sistema. Além disso, indicava a homogeneidade da mistura e, implicitamente, a previsão do comportamento na fluidização do leito.

Para obter os dados de média a partir do escoamento transiente foi considerado o tempo simulado uma vez que o sistema atinge o estado de estabilização. Esses valores de tempo simulados foram mostrados na Tabela 4.

A Figura 22 apresenta a localização e distribuição das superfícies ou linhas de monitoramento consideradas na análise estatística e que são repetidas para todas as simulações feitas nos casos 2 e 3.

FIGURA 22 – Superfícies ou Linhas de monitoramento para avaliar a média de velocidade axial de sólidos e fração volumétrica de sólidos. A) Malha Intermediária do caso 2.1. B) Malha Intermediária do caso 3.1



Fonte: AUTOR (2016).

### **3.7.2. Média de fração de sólidos na área das paredes dos tubos e desvio padrão**

Esta análise foi utilizada especificamente para o análise do caso 3, como uma medida de comparação da eficiência dos resfriadores de catalisador em termos de escoamento gás-sólido.

Esta medida forneceu uma importante informação sobre o comportamento dos sólidos nas paredes dos tubos de troca térmica e o objetivo de esta avaliação foi determinar a influência de contato das partículas sobre o transporte térmico (ressaltando que a transferência de calor não foi simulada em esta dissertação).

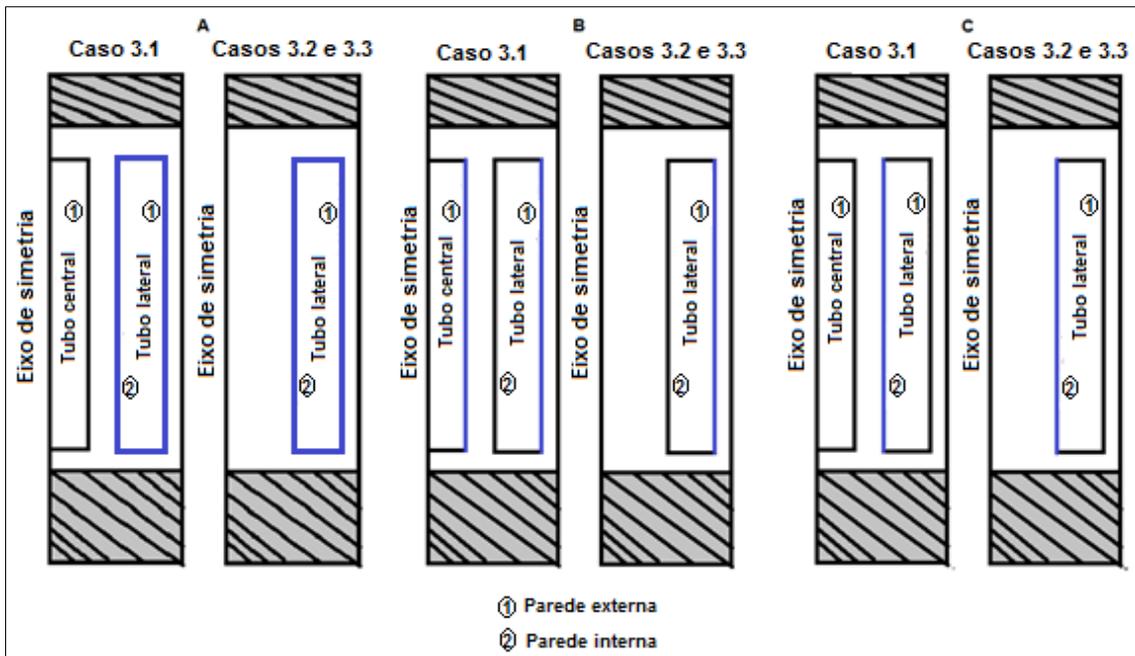
Dois parâmetros de avaliação foram analisados (apresentados na seção 4.3.5): média de fração de sólidos na área e o desvio padrão. O objetivo desta avaliação foi determinar qual dos dois parâmetros favorece a intensificação da troca térmica de calor.

A média de fração de sólidos na área fornece informação sobre o tempo de contato das partículas com as paredes dos tubos de troca térmica. No entanto, o desvio padrão foi considerada como uma medida da renovação de sólidos nas superfícies dos tubos, avaliado num sistema que atingiu o estado estabilizado.

A análise destes parâmetros foi feita mediante comparação em diferentes superfícies: comparativo global, comparativo na superfície exterior dos tubos e comparativo na superfície interior.

A Figura 23 apresenta a localização das superfícies de monitoramento para avaliar os comparativos de média de fração volumétrica de sólidos e o desvio padrão.

FIGURA 23 – Localização das superfícies de monitoramento para avaliar a média de fração volumétrica de sólidos e o desvio padrão. A) Comparativo global. B) Comparativo na parede exterior. C) Comparativo na parede interior.



Fonte: AUTOR (2016).

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados obtidos foram apresentados de acordo com os casos sumarizados na Tabela 9.

O caso 1 não possuía realimentação da fase particulada, assim, era essencialmente transiente. As simulações do caso 2 e caso 3 (com realimentação de sólidos) apresentavam duas etapas: a partida do processo (*startup*) e a estabilização do processo (estado *quase estacionário*). Assim, para as simulações que envolviam realimentação de sólidos mediante a UDF, somente foi analisada a fase estável do processo, para representar uma operação normal destes equipamentos.

### 4.1. Caso 1: Resultados das simulações de geometria de resfriador de catalisador de FCC sem realimentação de sólidos

O processo de *startup* foi simulado com um leito estático no sistema como uma condição inicial. O leito foi expandido ao longo do tempo até que o escoamento de partículas levou as mesmas a serem ejetadas para fora do domínio computacional. Em outras palavras, o desenvolvimento do escoamento gás-sólido indicou que os sólidos foram arrastados ao longo de todo o sistema.

#### 4.1.1. Teste de malhas

Foram analisadas diferentes malhas nas duas geometrias propostas (casos 1.1 e 1.2). Se observa que o comportamento repetido para cada um dos testes de malhas, o que indica que há independência da malha. Campos de fração volumétrica de sólidos estão apresentados na Figura 24a.

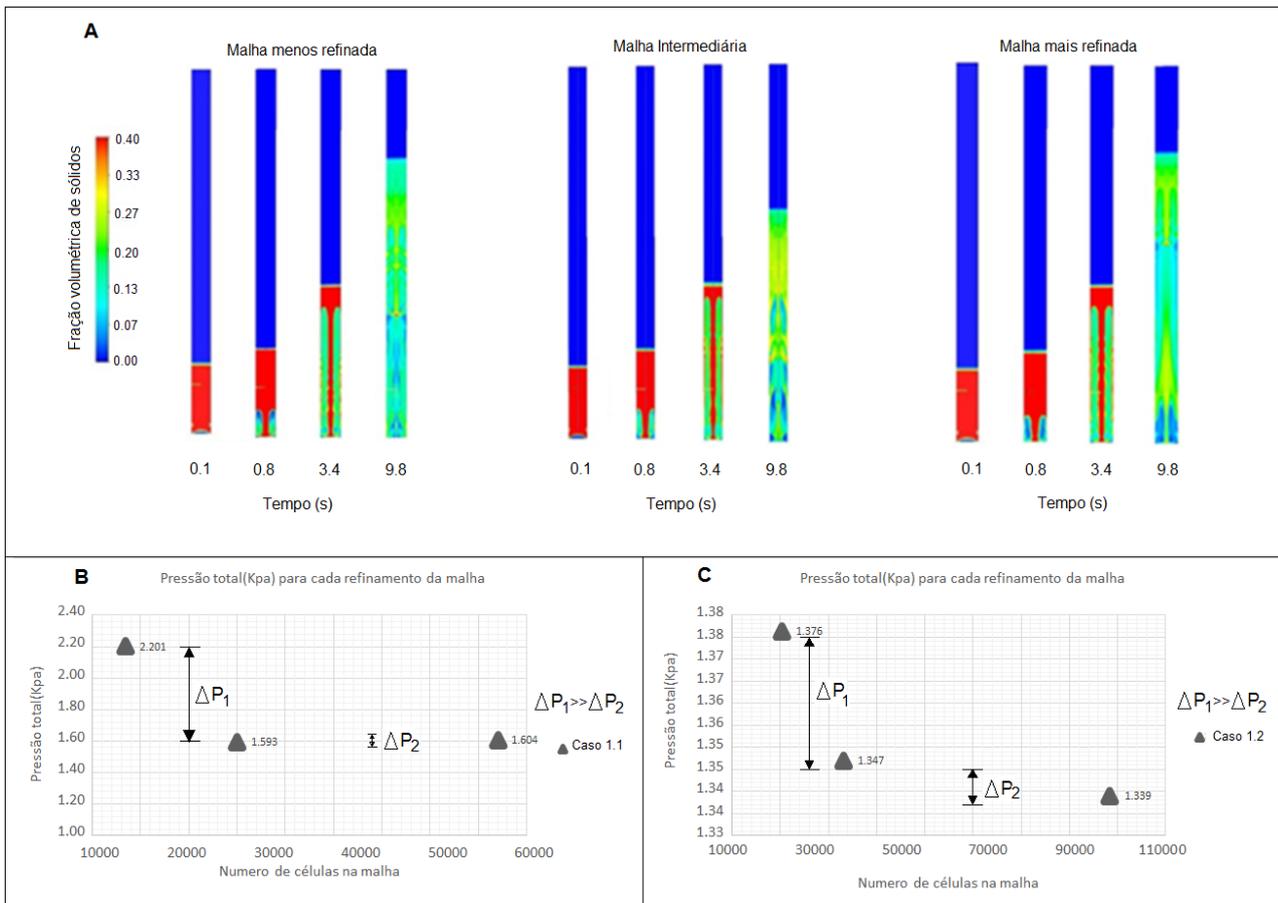
A Figura 24a mostra a expansão máxima no leito usando a fração volumétrica média na área (da linha de monitoramento) da fase sólida ao longo do tempo, por cada iteração.

O comportamento qualitativo para o caso sem distribuidor também indica independência da malha.

A análise da queda de pressão total no interior do resfriador (Figuras 24b e 24c) mostra que a diferença entre os valores obtidos para cada teste de malha diminui quanto maior é o refinamento, indicando que a resposta da simulação está estabilizando com o maior número de células. Naturalmente um acréscimo de células aumenta o custo

computacional para a resolução do modelo matemático, portanto, devido à independência dos resultados em relação à malha numérica, a malha intermediária foi escolhida para a apresentação dos resultados.

FIGURA 24 - Teste de malhas (caso 1.2). A: Campos de fração volumétrica. B: Pressão total em kPa para cada Refinamento da malha caso 1.1. C: Pressão total em kPa para cada Refinamento da malha caso 1.2.



Fonte: AUTOR (2016).

#### 4.1.2. Apresentação e análise de resultados (malha intermediária)

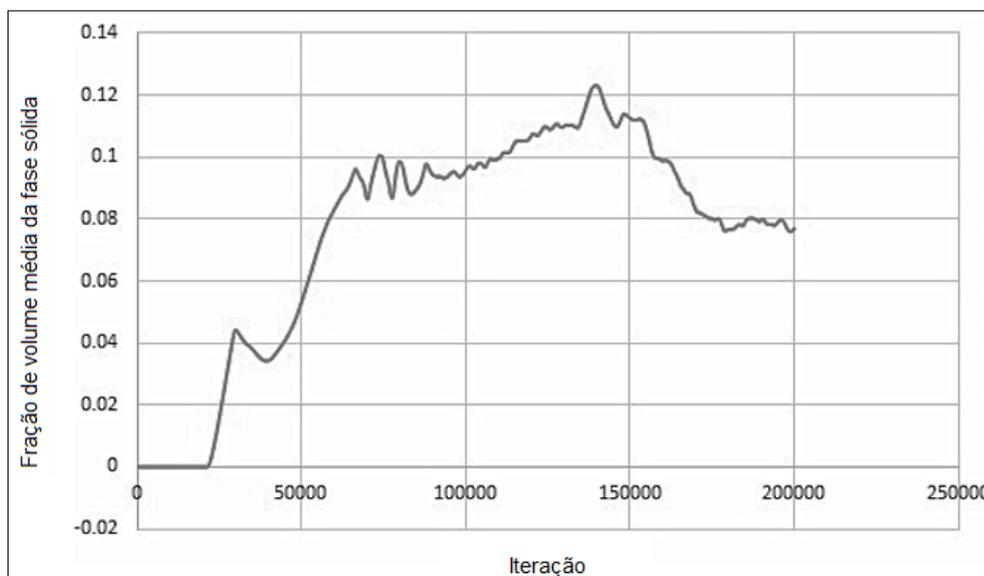
Os resultados obtidos das simulações para os casos 1.1 e 1.2 tomaram como referência a malha intermediária e são apresentados a seguir.

No início da simulação (*startup* do processo), o valor médio da fração de volume de sólido na linha de monitoramento era zero devido ao fato de que as partículas fluidizadas não atingem a linha criada. Ao longo do tempo o valor da fração média de volume aumentava, mostrando que não havia tendência da altura do leito em se estabilizar, o que significa que não há uma expansão máxima do leito e as partículas

continuavam sendo arrastadas para fora do domínio computacional, ultrapassando o topo do sistema.

A expansão do leito atingiu o topo do sistema depois de aproximadamente 16,5 s para a geometria com a distribuidora anular (caso 1.1) e 14,0 s sem ela (caso 1.2).

FIGURA 25 - Fração de volume da fase sólida medida ao longo do tempo em uma linha que atua como eixo no interior da coluna (caso sem distribuidor em anel)



Fonte: AUTOR (2016).

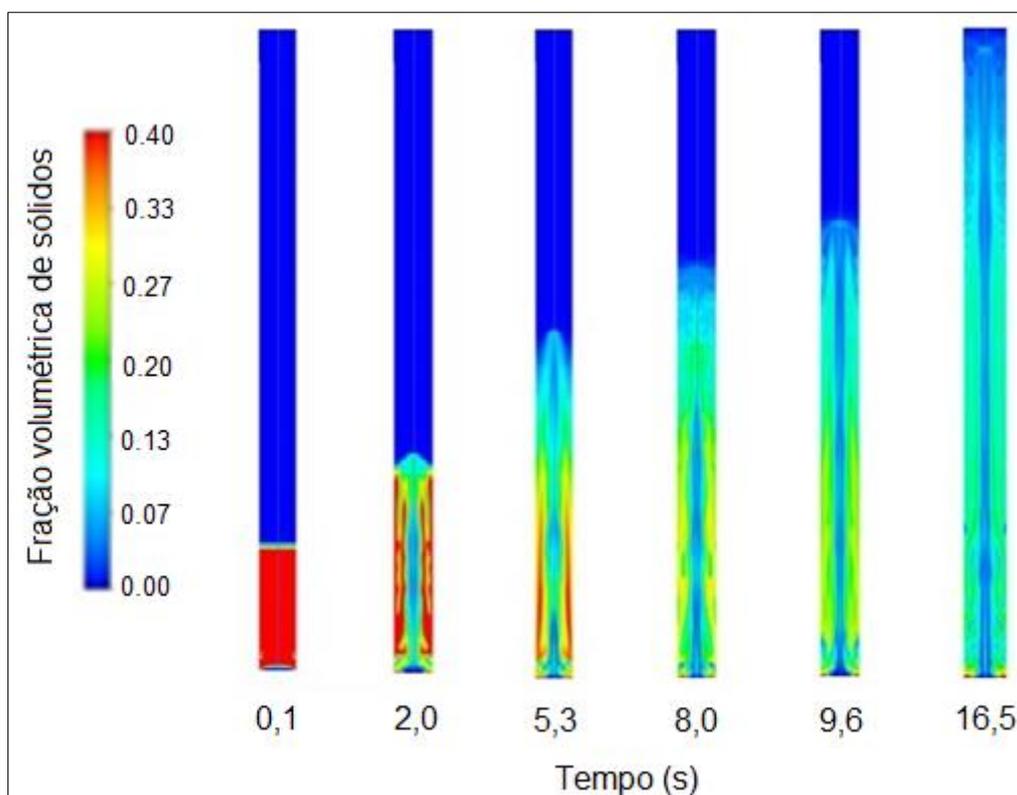
As condições aplicadas nas simulações foram avaliadas com diagramas para regimes de fluidização em *risers* (GRACE et al., 1997). Os diagramas indicaram que o regime de fluidificação em ambos os casos deve ser turbulento, perto da fluidização rápida, o que estava de acordo com os resultados das simulações. Em outras palavras, houve uma região mais densa no fundo, uma região de menor concentração no resto do sistema e ejeção de partículas. Além disso, a expansão do leito concordou com o exposto por YAO et al. (2015), uma vez que o sistema experimental operava com recirculação de sólidos.

### **Caso 1.1: Resfriador de catalisador com distribuidor central e distribuidor em anel e comentários gerais**

O campo fração volumétrica de sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido em um resfriador de catalisador com distribuidor anular mostra visualmente a expansão do leito ao longo do tempo (Figura 26). A fase gasosa foi desviada para o centro do sistema, desde o início, enquanto que a fase sólida foi concentrada perto das paredes.

O comportamento é explicado devido à alimentação central aliada à presença do distribuidor anelar, o que facilitou a canalização de ar. A canalização de ar na parte central do sistema é claramente observada na Figura 26.

FIGURA 26 - Campo de fração de sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no resfriador de catalisador com distribuidor em anel.



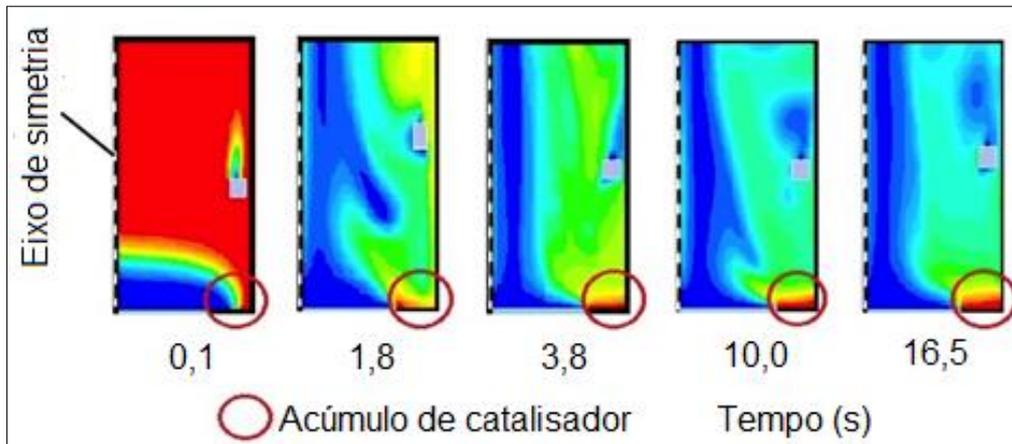
Fonte: AUTOR (2016).

Os sólidos também foram concentrados na região sob o distribuidor em anel, conforme apresentado na Figura 27 (campos da Figura 26, mas com foco na região inferior). Esta é uma indicação de que a região sob o anel não possui grande uniformidade, o que evitaria o processo de mistura e seria indesejável. O impacto desta região pode não ser muito relevante uma vez que um estado quase estacionário seja atingido, pois a fração da fase sólida parece diminuir nesta região ao longo do tempo e a alimentação de sólidos é feita por cima do distribuidor no equipamento experimental e industrial.

A canalização do gás para o centro do sistema é uma das características experimentais reportadas por YAO et al. (2015). Esta canalização, aliada a aeração de menor vazão promovida pelo anel, na presença de tubulações internas, deve levar à recirculação de sólidos e maior renovação dos pacotes de sólidos em contato com os tubos

(caso 3.1 e 3.2), de modo a promover maior coeficiente de troca de calor, como explica o trabalho de YAO et al. (2014b). Este é um indicativo de que o comportamento obtido para o *startup* é o esperado para o distribuidor em questão.

FIGURA 27 - Campo de fração de sólidos ao longo do tempo do escoamento gás-sólido no fundo do resfriador de catalisador com distribuidor em anel.



Fonte: AUTOR (2016).

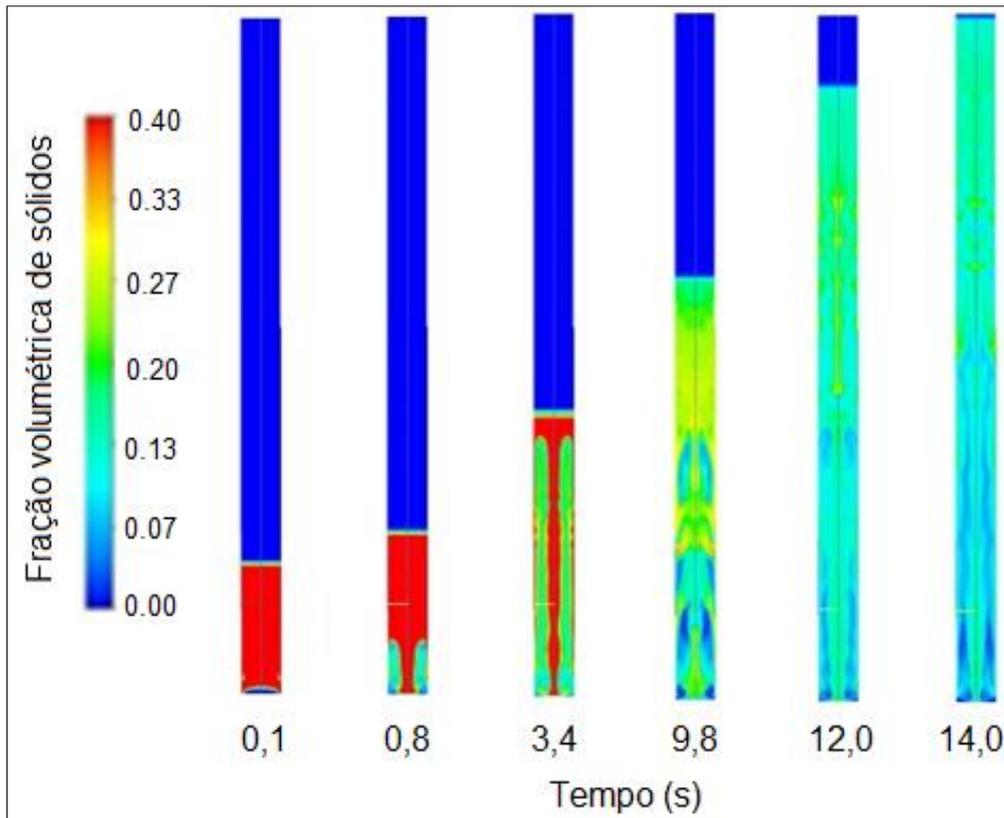
### Caso 1.2: Resfriador de catalisador com distribuidor pleno, sem distribuidor em anel e comentários gerais

Campos de fração volumétrica da fase sólida para a geometria sem distribuidor em anel é apresentado na Figura 28, que mostra uma estrutura de escoamento multifásico diferente no início da fluidização.

No caso do resfriador de catalisador sem distribuidor anular, os sólidos se aglomeram na região central do resfriador, enquanto que a canalização de gás aconteceu para a região das paredes.

A comparação entre ambas as estruturas de escoamento na partida do processo (casos 1.1 e 1.2) indica que a presença do anel é determinante para o comportamento do escoamento gás-sólido. O gás foi desviado para a parede quando não havia nenhum distribuidor anelar porque o fluxo de ar que entra encontra uma massa de sólidos estáticos (leito). Este processo dinâmico pode ser visto na Figura 28, quando se olha para a parte inferior do domínio para as geometrias simuladas sem distribuidor em anel. Naturalmente, a acumulação de sólidos não acontece na mesma região que foi observada na Figura 27 para o caso 1.1.

FIGURA 28 - Campo de fracção de sólidos ao longo do tempo no escoamento gás-sólido para o resfriador de catalisador sem distribuidor em anel.



Fonte: AUTOR (2016).

Como consequência, os sólidos permaneceram mais concentrados no centro do domínio computacional (Figura 28). No entanto, o desenvolvimento do escoamento gás-sólido levou à maior uniformidade e as estruturas foram dissipadas. Depois de 14 segundos, a fração volumétrica de sólidos é razoavelmente uniforme na parte inferior do equipamento simulado.

O gás foi desviado a partir do centro para as paredes, mas o desenvolvimento do escoamento gás-sólido levou a velocidades mais elevadas no centro do resfriador de catalisador. O comportamento após o desenvolvimento era esperado, uma vez que o sistema foi diluído ao longo do tempo.

É importante destacar que o resfriador de catalisador industrial opera continuamente. Os sólidos são alimentados e retirados para entrar na *riser*. O próximo passo para simulações de CFD foi então construir uma UDF (*User Defined Function*) como uma abordagem para calcular a vazão mássica de sólidos na saída e alimentar a mesma quantidade, para manter a carga de sólidos durante as simulações. Esta

implementação tornou possível obter informações sobre as condições constantes da operação do equipamento, similar ao que ocorreu nos ensaios experimentais de YAO et al. (2014b).

#### **4.2. Caso 2: Resultados das simulações de geometrias de Resfriador de catalisador de FCC com realimentação de sólidos**

As geometrias foram novamente baseadas nos trabalhos de YAO et al. (2015) e iniciadas com um leito estático no sistema como uma condição inicial. O leito, também era expandido ao longo do tempo até que as partículas fossem ejetadas do domínio computacional. Porém, com a incorporação da realimentação de sólidos mediante uma função definida pelo usuário, compilada dentro do programa computacional ANSYS FLUENT v14.5, o inventário de sólidos era mantido constante no domínio computacional. O tempo de escoamento real das simulações foi de 35,0 segundos em ambas situações.

Devido à incorporação de uma função definida pelo usuário (UDF) para caracterizar a realimentação dos sólidos, o comportamento do sistema pode ser dividido em duas etapas: a primeira etapa que implica a partida do (*startup* do processo), e a segunda etapa que focou na estabilização do sistema após a realimentação.

Os resultados apresentados nesta seção correspondem somente à estabilização do processo, pois essa etapa representa a operação normal e contínua do equipamento na indústria.

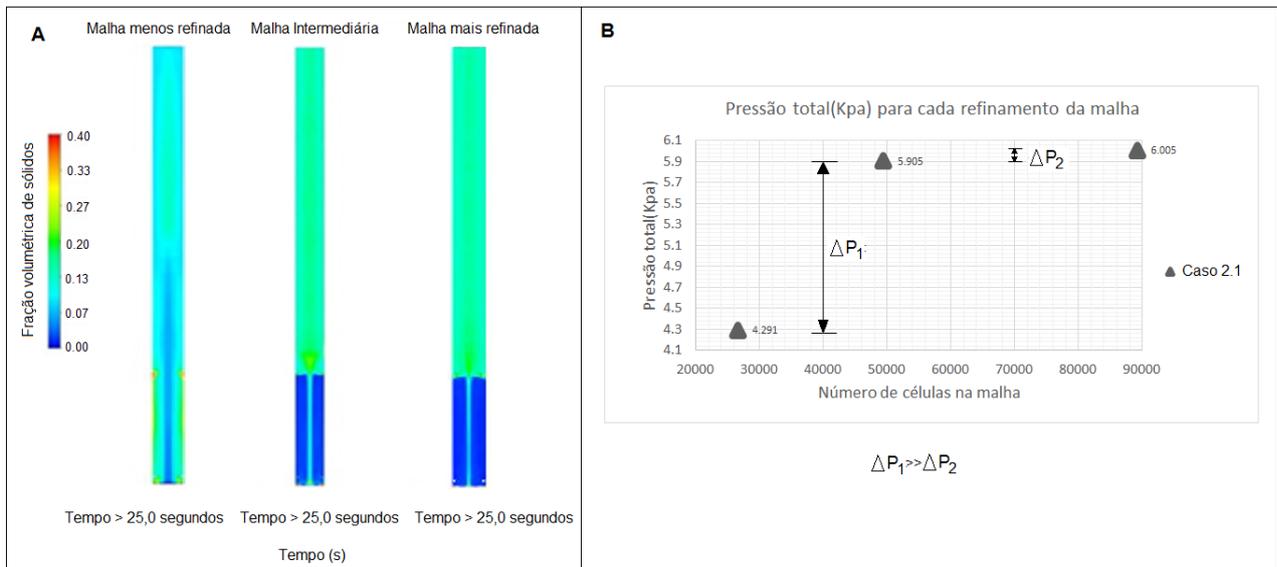
##### **4.2.1. Teste de malhas e análise da expansão do leito e da UDF**

No caso 2.1, o estado de estabilização (quase estacionário) foi obtido em aproximadamente 25,0 segundos de escoamento. A Figura 29a mostra os campos médios de fração volumétrica dos sólidos em simulação realizada sobre a operação transiente após a estabilização do sistema. Um comportamento similar é apresentado para as malhas intermediária e mais refinada, visando que a resposta em indica a independência da malha quanto mais o número de células é acrescentada. De fato, a malha menos refinada foi descartada do análise, por conseguinte, a malha intermediária foi tomada como referência para o análise e apresentação dos resultados.

A Figura 29b apresenta a análise da queda de pressão total no interior do resfriador, para cada refinamento da malha considerada nos testes. O resultados

mostraram que malhas mais refinadas indicaram estabilização da queda de pressão com o número de células, indicando que é possível aplicar a malha intermediária ao evitar grandes influências do erro numérico no problema.

FIGURA 29 – Teste de Malhas após atingir o estado quase estacionário. A) Campo médio de fração volumétrica de sólidos em cada uma das três malhas (caso 2.1). B) Pressão total em Kpa para cada refinamento da malha.

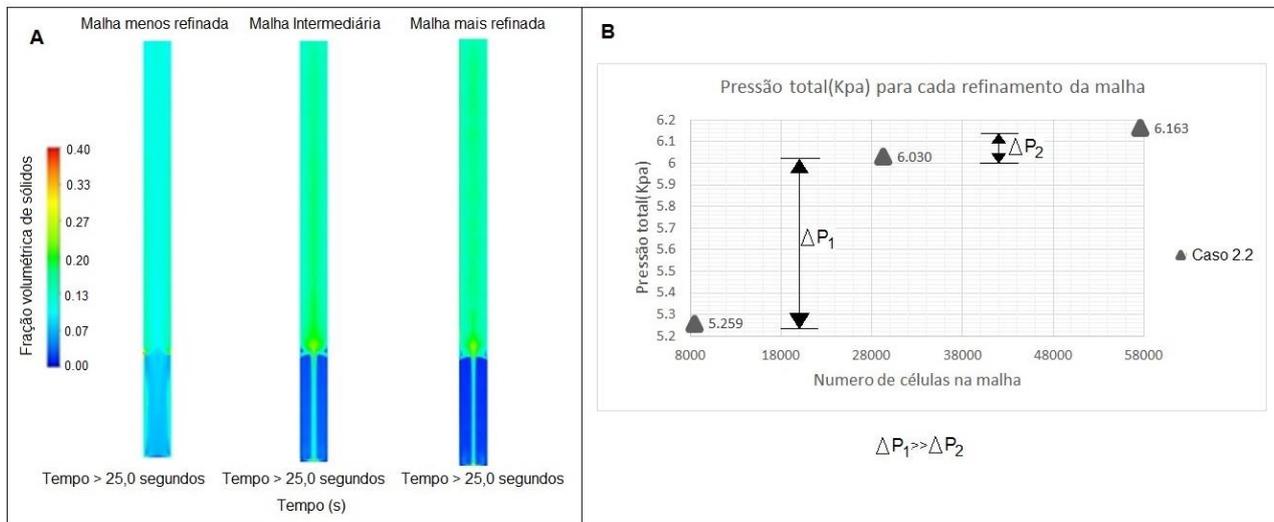


Fonte: AUTOR (2016).

No caso 2.2, para os três testes de malha, pode se inferir que o estado de estabilização ou também chamado de estado quase estacionário é atingido aproximadamente aos 25.0 segundos após o início do processo. Uma vez que alcança o estado de estabilização, nota-se que o comportamento tanto do campo de fração volumétrica (Figura 30a) quanto a queda de pressão (Figura 30b) são mantidos a partir da malha intermediária, o que indica independência dos resultados a partir dela.

Sendo assim, a malha intermediária foi adotada para descrever os resultados para os casos 2.1 e 2.2.

FIGURA 30 - Teste de Malhas após atingir o estado quase estacionário. A) Campo médio de fração volumétrica de sólidos em cada uma das três malhas (caso 2.1). B) Pressão total em Kpa para cada refinamento da malha.



Fonte: AUTOR (2016).

#### 4.2.2. Resultados e análise das simulações para a malha intermediária

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos das simulações para os casos 2.1 e 2.2, para os quais também foram tomados como referência as malhas intermediárias. Cabe ressaltar que a realimentação de sólidos foi realizada para manter constante um inventário de sólidos.

##### **Caso 2.1: Resfriador de catalisador com distribuidor de prato perfurado central, distribuidor em anel e realimentação de sólidos**

A Figura 31 mostra a expansão do leito usando a fração volumétrica média na linha de monitoramento (Figura 14) ao longo das iterações da simulação.

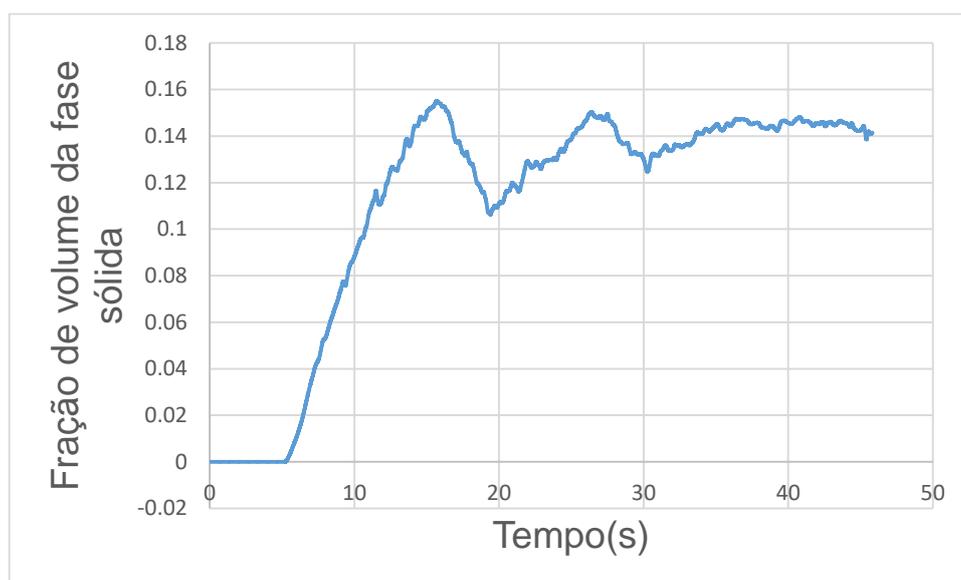
Devido à inclusão da realimentação dos sólidos, duas regiões definidas podem ser mostradas nas figuras, correspondentes ao início do processo (*startup*) e à estabilização do processo (estado quase estacionário).

No início do processo, o valor médio da fração volumétrica é zero, pois as partículas não atingem a linha criada para monitorar a expansão do leito. No decorrer do tempo o valor da fração média de volume na linha aumenta, o que significa que os sólidos estão sendo arrastados para o topo do domínio computacional, onde a linha de monitoramento está localizada. Em torno da iteração 200 000, houve a tendência à estabilização do processo, após a realimentação dos sólidos, o que corresponde à segunda

etapa da operação, contínua simulada para este tipo de equipamentos. De fato, este comportamento ocorreu devido à realimentação de sólidos, que manteve constante o inventário de partículas no domínio computacional.

Ao monitorar os resultados, notou-se que a realimentação dos sólidos ocorreu aproximadamente a partir dos 14,8 segundos.

FIGURA 31 - Fração de volume da fase sólida medida ao longo do tempo em uma linha de monitoramento no interior da coluna (caso 2.1). A) Malha grossa. B) Malha intermediária. C) Malha refinada

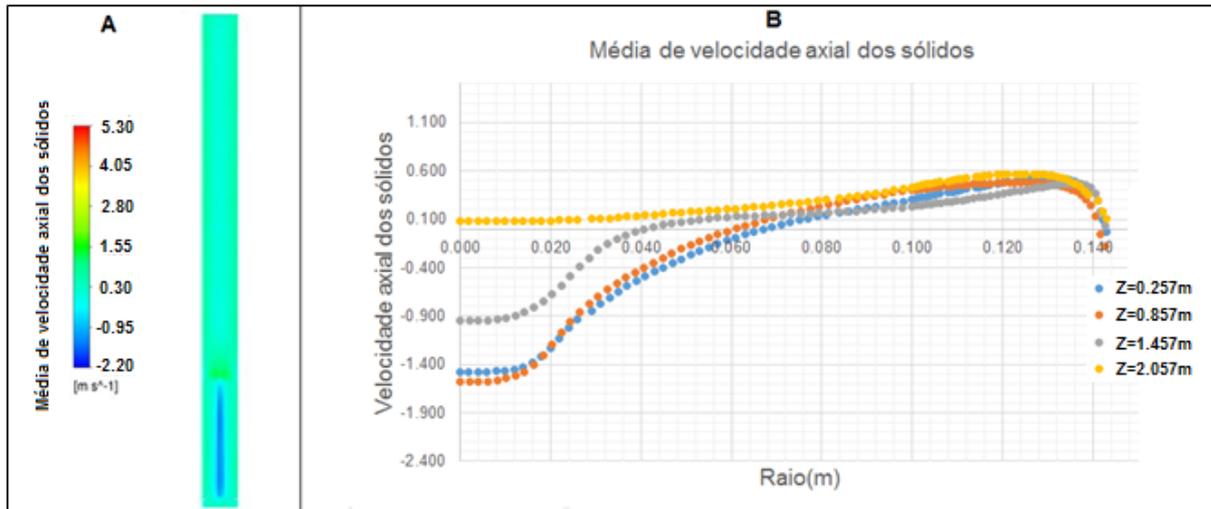


Fonte: AUTOR (2016).

Depois dos 25 segundos de simulação, o sistema conseguiu se estabilizar, correspondente a um estado quase estacionário. Para analisar o comportamento apresentado nos casos, é necessário avaliar as variáveis de interesse nos campos médios, o que representa o que acontece em uma operação contínua destes equipamentos, após a estabilização. Por esta razão, a velocidade axial dos sólidos no campo médio transiente é mostrada na Figura 32, o que permite caracterizar o comportamento dos sólidos no campo médio ao longo do comprimento da tubulação. Assim, a Figura 32 mostra que a maior velocidade axial dos sólidos em magnitude ocorreu no centro da tubulação, comportamento que é mantido até uma altura antes da localização da realimentação de sólidos. A velocidade decresce em magnitude em medida que se aproxima às paredes.

Vetorialmente, a velocidade axial dos sólidos é negativa, indicando que os sólidos tem movimento descendente na região central do equipamento na parte baixa do resfriador.

FIGURA 32 - Velocidade axial dos sólidos no campo médio transiente após a estabilização para o escoamento gás-sólido no caso 2.1, em diferentes alturas e a diferentes distancias do centro do tubo



Fonte: AUTOR (2016).

Uma avaliação da média dos campos de velocidade axial a diferentes alturas (Figura 32b) mostra que, em regiões inferiores, as velocidades são negativas no centro e positivas nas paredes da tubulação. Isto se deve ao fato de que o maior fluxo de gás é desviado para as paredes a partir do centro da tubulação, o que ocorre devido ao fornecimento de gás pelo distribuidor em anel. A análise desse gráfico também reafirma que os sólidos descem pelo centro do sistema e sobem pela região das paredes.

Os aglomerados que eram mostrados no caso 1.1 e que ocasionavam problemas de mistura, não aparecem já mais devido à realimentação (uso da UDF) e à ação do distribuidor em anel, que fornece a quantidade de gás necessária para fluidizar e misturar a fases corretamente.

Após a realimentação (altura superior a 2 m), é observada uma mistura homogênea das fases, com velocidade axial dos sólidos quase constante ao longo do comprimento da tubulação. De fato, a realimentação dos sólidos favorece a mistura das fases em grande medida.

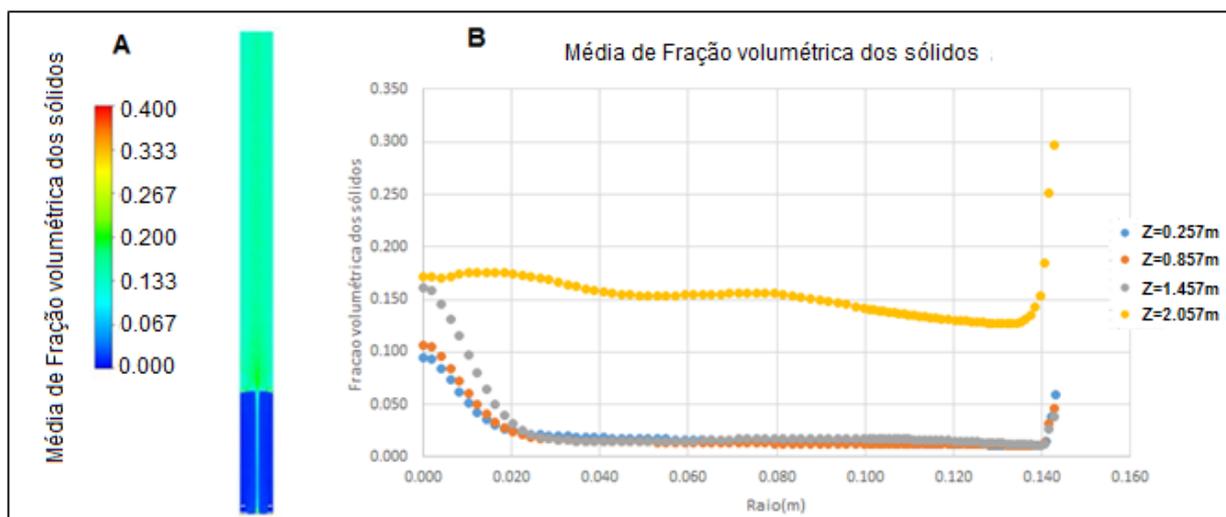
A Figura 33 apresenta a média de fração volumétrica dos sólidos avaliada em diferentes alturas ao longo da tubulação e também a uma distância desde o centro do tubo (raio da tubulação), quando o sistema alcançou um estado estável.

Efetivamente, a simulação no estado estável mostrou que, antes da região de realimentação dos sólidos, o ar canaliza desde o centro para as paredes da tubulação. Os

sólidos que foram realimentados, escoaram pelo centro até a região sob o anel e fluidizaram na região próxima às paredes, o que concorda com o exposto na Figura 32.

Depois da realimentação dos sólidos (altura superior a 2 m), houve mais uniformidade na mistura das fases, e a fração volumétrica de sólidos foi mantida aproximadamente constante em todo o resto do comprimento da tubulação. Baixos valores de fração de sólidos indicam que a fase está bem diluída.

FIGURA 33 - Fração volumétrica dos sólidos no campo médio após a estabilização para o escoamento gás-sólido no caso 2.1, em diferentes alturas e a diferentes distancias do centro do tubo



Fonte: AUTOR (2016).

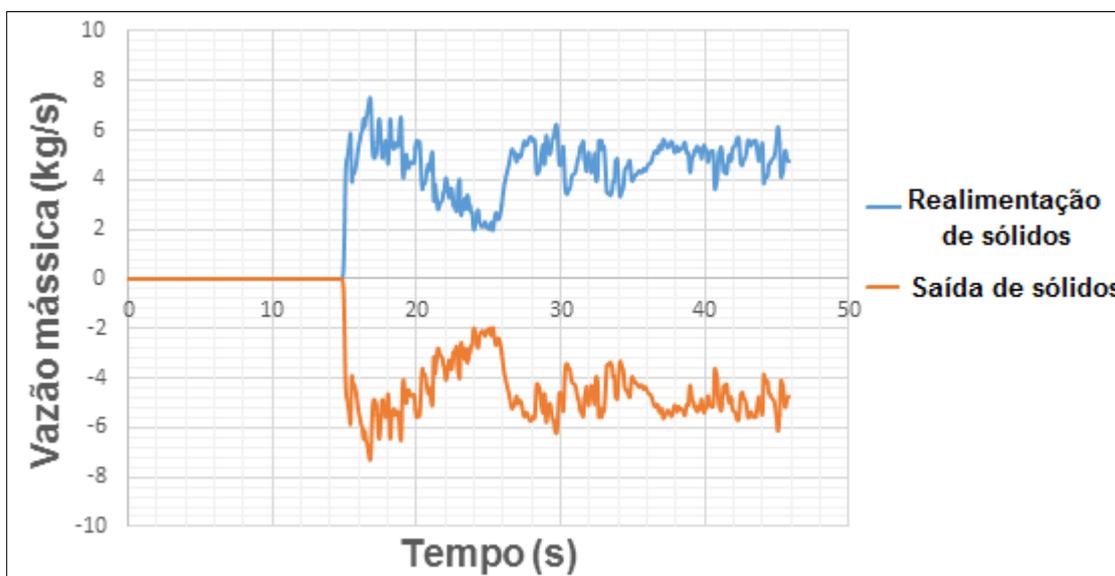
Uma avaliação dos campos médios da fração volumétrica dos sólidos (Figura 33) local a diferentes distâncias desde o centro da tubulação, mostra que, no centro da tubulação, tem-se a maior concentração de sólidos, o que pode ser explicado pela canalização de gás para as paredes. A medida que vai se aproximando às paredes, o valor de fração de sólidos volta a ser ampliado. Este comportamento ocorre devido à fluidização dos sólidos próximo às paredes.

Na Figura 33b, indica que os sólidos após descer pelo centro da tubulação, são fluidizadas pelas paredes, o que reafirma o mostrado na Figura 33a. Uma vez mais se confirma que, na região sob o anel, não há aglomeração de sólidos, pois este é fluidizado completamente mediante o gás fornecido pelo prato perfurado central. Focando a região sob o anel na Figura 33a, pode-se perceber a ausência de sólidos em essa região, reforçando a ideia que o distribuidor em anel proporciona o gás para que os sólidos sejam fluidizados pelas paredes.

Por último, na Figura 33b também mostra que, valores de concentração de sólidos são maiores a partir de uma determinada altura. Após o duto de recirculação, a realimentação e renovação de sólidos são feitas, mantendo o inventário de sólidos, fazendo que a fração de sólidos seja maior nessa zona. Portanto, nesta região, existe homogeneidade entre as fases e uma boa mistura.

A Figura 34 apresenta a vazão mássica de saída das partículas e a realimentação dos sólidos dentro do domínio computacional para a malha intermediária no caso 2.1. A figura revela que, no início da fluidização, a vazão mássica foi zero, pois a fase sólida não saiu do domínio computacional e portanto não é realimentada. Aproximadamente aos 14,8 segundos, os sólidos foram realimentados, o que pode ser notado pela separação dos gráficos na Figura 34. A vazão mássica de saída das partículas e a realimentação variou em torno de 4,57 kg/s após a estabilização. A Figura 34 deixa claro que a UDF desenvolvida estava funcionando.

FIGURA 34 - Saída e realimentação dos sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 2.1



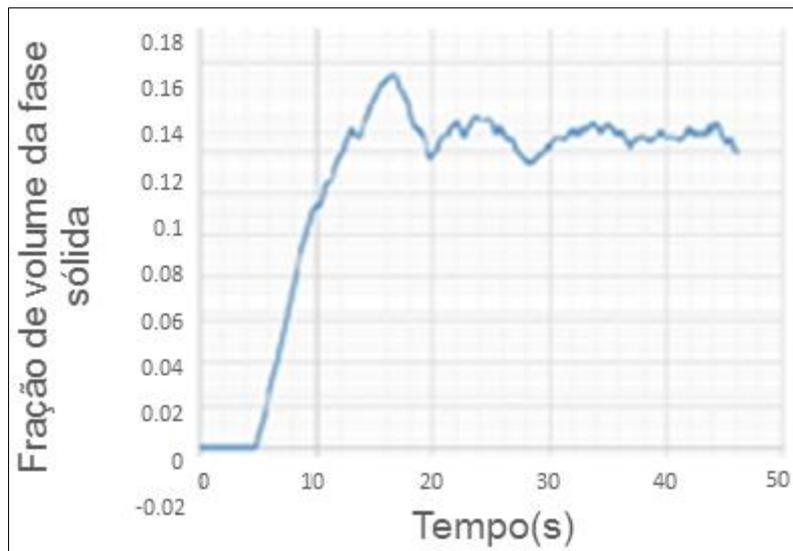
Fonte: AUTOR (2016).

### **Caso 2.2: Resfriador de catalisador com distribuidor pleno, sem distribuidor em anel e realimentação de sólidos. Comentários gerais.**

A Figura 35 indica a expansão do leito no caso 2.2. Um comportamento parecido foi apresentado ao mostrado na Figura 31. As partículas de sólidos foram também arrastadas e ejetadas para fora do domínio do sistema. Posteriormente foram

realimentadas, que ao longo do tempo levou ao estado quase estacionário (estabilização). A realimentação dos sólidos foi observada aproximadamente aos 14,4 segundos (aproximadamente à iteração 180 000). Cabe ressaltar também que o estado quase estacionário, para ambos casos, foi considerado a partir dos 25 segundos de simulação, que foi o instante de tempo em que o valor de fração média dos sólidos na linha de monitoramento se manteve oscilando em torno a um valor médio.

FIGURA 35 - Fração de volume da fase sólida medida ao longo do tempo em uma linha de monitoramento no interior da coluna (caso 2.2).



Fonte: AUTOR (2016).

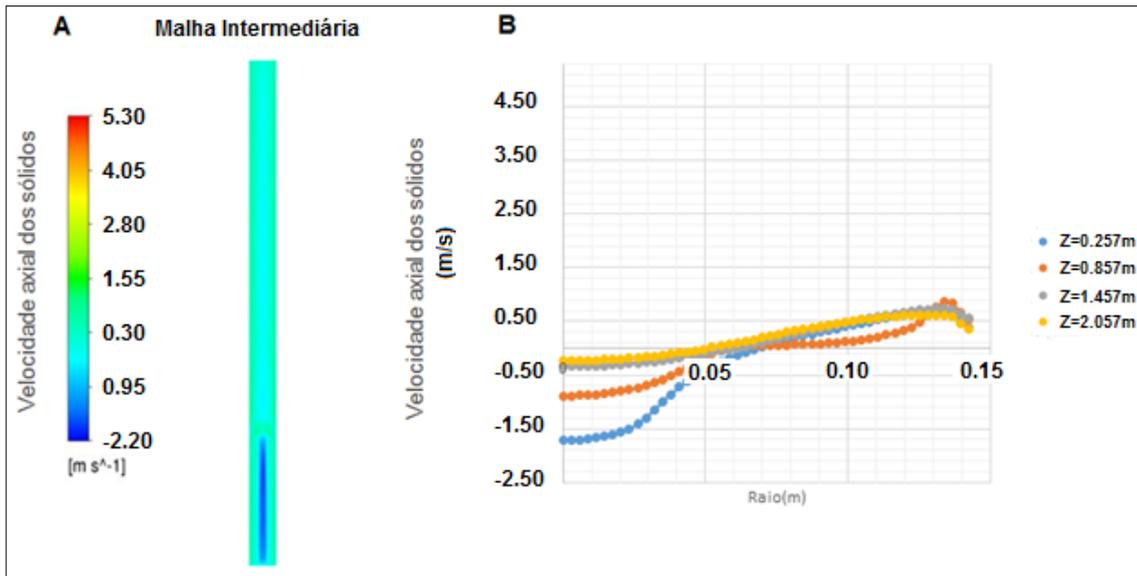
O campo de fração volumétrica de sólidos simulado ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 2.2 pode ser dividido em duas etapas: o início do processo (*startup*) e a estabilização do sistema (estado quase estacionário) alcançado depois dos 25,0 segundos. Os resultados apresentados nesta seção correspondem ao estado estabilizado.

A Figura 36 apresenta a velocidade axial dos sólidos no campo médio, o que permitiu caracterizar o comportamento local dos sólidos ao longo do comprimento da tubulação. Assim, da Figura 36 pode se inferir que na região inferior do domínio computacional as velocidades axiais são negativas no centro e positivas nas paredes. Isso indica que os sólidos realimentados no sistema escoavam descendentemente no centro da tubulação.

Como é mostrado na Figura 36, a massa de sólidos estáticos e a ausência do distribuidor anular fez com que o processo de mistura não fosse completo na região

central do sistema. O peso das partículas atua como força opostora à fluidização e as partículas escoam para a região inferior da tubulação e fluidizam na região próxima das paredes. Este comportamento é mantido mesmo acima do reingresso das partículas no domínio.

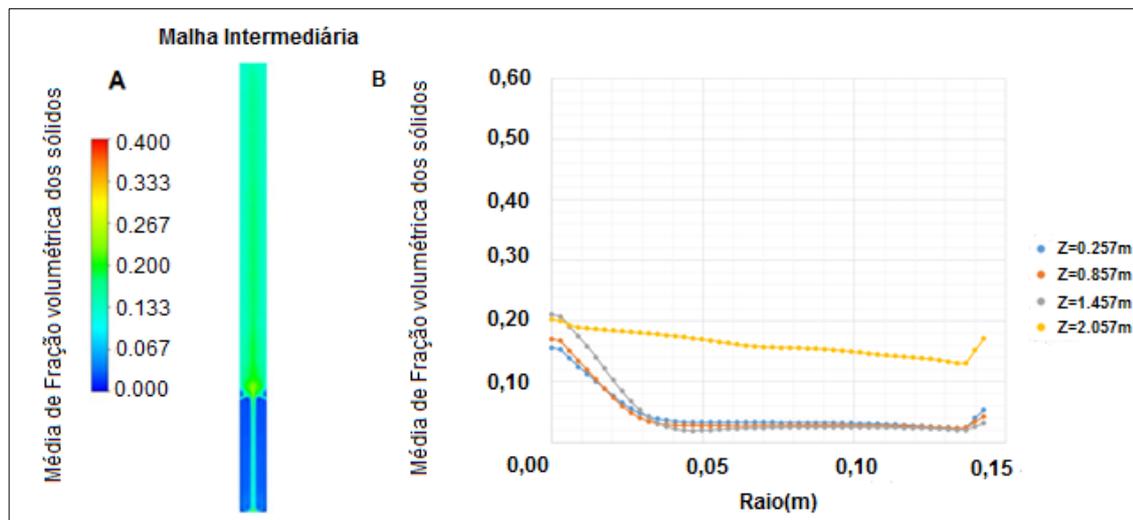
FIGURA 36 – velocidade axial dos sólidos no campo médio após a estabilização para o escoamento gás-sólido no caso 2.2, em diferentes alturas e a diferentes distancias do centro do tubo



Fonte: AUTOR (2016).

A Figura 37 mostra o a média de fração de sólidos ao longo em diferentes comprimentos e a diferentes distâncias a partir do centro da tubulação.

FIGURA 37 - Fração volumétrica dos sólidos no campo médio após a estabilização para o escoamento gás-sólido no caso 2.2, em diferentes alturas e a diferentes distancias do centro do tubo

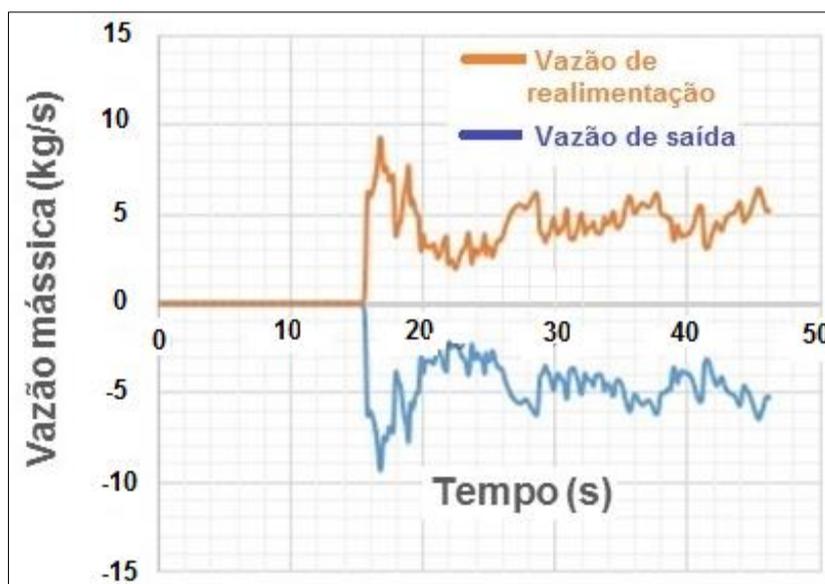


Fonte: AUTOR (2016).

A Figura 37 reafirma o exposto na Figura 36, o que indica que, após a realimentação, o sólido escoá pelo centro para depois ser desviado e fluidizar pelas regiões próximo às paredes de forma mais diluída. Acima da realimentação, uma região bem misturada entre as duas fases, mostra que essa região fica mais concentrada de sólidos.

A Figura 38 mostra a vazão mássica de saída das partículas e realimentação dos sólidos dentro do domínio computacional no caso de resfriador de catalisador sem distribuidor em anel. Similarmente ao caso de resfriador de catalisador com distribuidor, no início da fluidização a vazão mássica é zero. Aos 14,4 segundos, os sólidos foram realimentados (correspondente à iteração 170 000 na figura). Após a saída dos sólidos, ocorreu uma instabilidade do sistema por causa das partículas que foram realimentadas ao domínio, até o sistema estabilizar. Após a estabilização, a vazão mássica de saída das partículas e a realimentação variou em torno de 4,80 kg/s.

FIGURA 38 - Saída e realimentação dos sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 2.2.



Fonte: AUTOR (2016).

#### 4.2.3. Comparação entre os casos 2.1 e 2.2

A média de velocidade axial dos sólidos e da fração volumétrica de sólidos no estado quase estacionário permitiu analisar o comportamento do escoamento gás sólido em uma operação normal e contínua de um resfriador de catalisador de FCC, nos dois casos apresentados nesta seção.

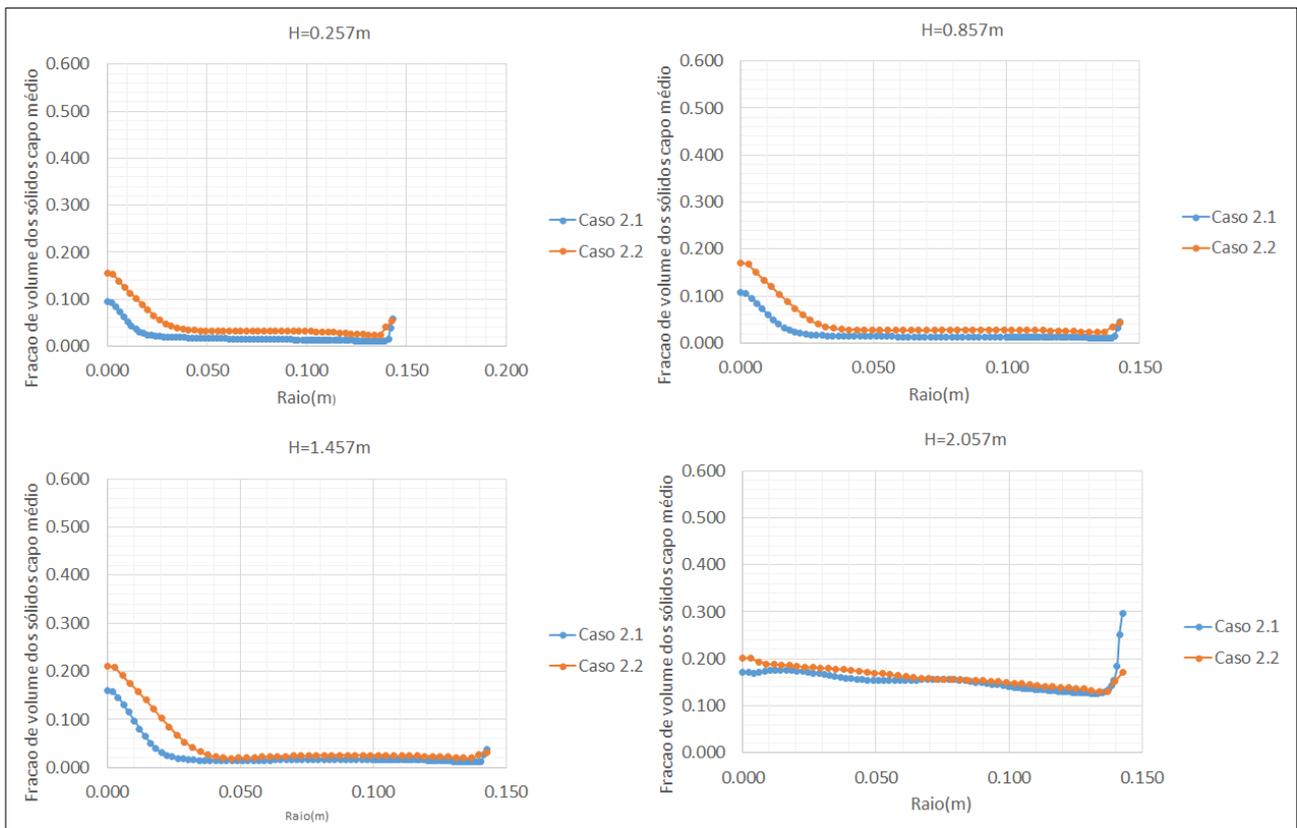
O propósito do distribuidor em anel no sistema experimental estudado por YAO et. al (2014, b) era aerar a fase sólida entre o feixe de tubos e a parede (quando há trocadores de calor dentro do domínio). Em seu estudo, foi determinado que a alimentação proposta de gás (prato-anel) ampliou o coeficiente de troca térmica ao estimular a circulação de sólidos e garantir um maior contato dos pacotes de sólidos com os tubos. Sendo assim, não foi possível nesta seção analisar o comportamento de escoamento visando a melhoria de transporte de calor pois os tubos de trocadores para os casos 2.1 e 2.2 não foram considerados. No entanto, é possível comparar os dois casos entre si e verificar a influência do tipo de alimentação de ar nos padrões de escoamento.

A Figura 39 mostra um comparativo dos campos médios de fração volumétrica local dos sólidos para os casos analisados (caso 2.1 e caso 2.2) em cada altura determinada.

Uma resposta similar foi observada para ambos casos, indicando que não há uma diferença significativa com respeito à inclusão de distribuidor em anel, em termos de escoamento.

Note-se que a fração de sólidos é maior no centro do sistema e maior nas regiões próximas as paredes para ambos casos (2.1 e 2.2). Isto significa que, o ar canaliza para as paredes do sistema e uma pequena parte dos sólidos realimentados descem pelo centro e escoam pelas paredes, fluidizados pelo gás proporcionado pelo distribuidor pleno ou pelo distribuidor em dupla. Só depois de ultrapassar a localização da realimentação, as fases foram melhor misturadas e houve homogeneidade nesse sentido. O valor da fração volumétrica foi quase constante nesta região, pois o inventário de sólidos se manteve na simulação.

FIGURA 39 - Comparativo dos campos médios da fração volumétrica local dos sólidos dos casos 2.1 e 2.2 em diferentes alturas



Fonte: AUTOR (2016).

A avaliação dos campos médios da fração volumétrica fornece uma importante informação sobre a distribuição dos sólidos do sistema em estado estável, mas não indica o sentido vetorial que tiveram os sólidos em uma operação contínua. Portanto, é

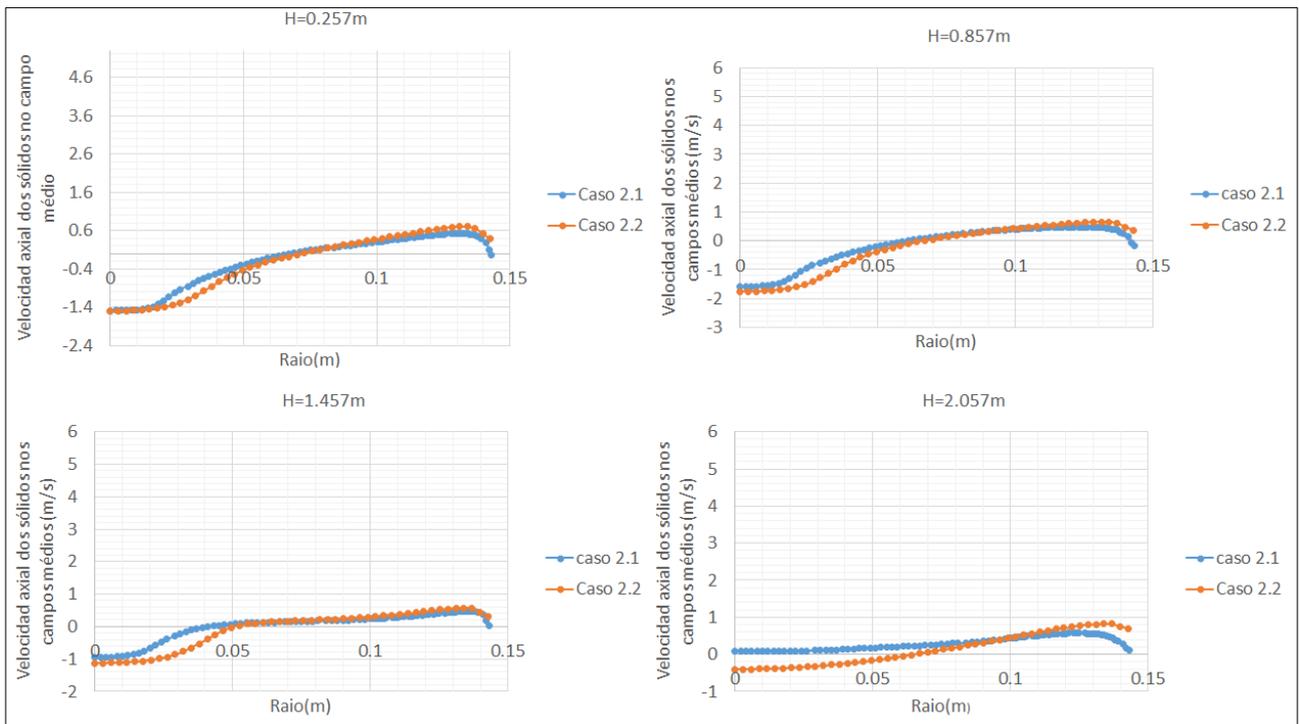
necessário conhecer a velocidade dos sólidos no eixo do sistema estável, para caracterizar o comportamento das partículas.

Em ambos casos, fazendo uma comparação na média de velocidade axial dos sólidos, duas regiões são definidas: região inferior ao duto de realimentação de sólidos e região superior de à realimentação, com características notoriamente marcadas.

A região inferior ao duto de realimentação de sólidos mostra que, no centro da tubulação, a velocidade axial dos sólidos é vetorialmente oposta ao movimento do leito fluidizado. Isto significa que, parte dos sólidos descem pelo centro da tubulação. Enquanto isso acontece, o gás é desviado para as paredes da tubulação, fazendo que a velocidade nas paredes aumente e mude de sentido vetorial (ascendente).

Na região superior à realimentação dos sólidos, a velocidade axial dos sólidos muda de sentido vetorial fazendo que as partículas sejam ejetadas para fora do sistema.

FIGURA 40 - Comparativo dos campos médios de velocidade axial dos sólidos dos casos 2.1 e 2.2 em diferentes alturas



Fonte: AUTOR (2016).

### **4.3. Caso 3: Resultados das simulações de geometria de resfriador de catalisador de FCC com tubos internos e realimentação de sólidos.**

A geometrias consideradas para a simulação foram baseadas nos trabalhos de YAO et al. (2014, b). Nestas simulações bidimensionais (simetria axial), um feixe de tubos interno foi simulado. Infelizmente, não é possível representar exatamente a geometria dos tubos em torno do eixo do sistema em 2D (simetria axial). Assim, evitando a complexidade e tempo computacional das simulações 3D, uma parede cilíndrica de área de secção transversal igual à área de secção transversal dos tubos periféricos foi simulada para emular o efeito das tubulações. A configuração é similar à de um leito fluidizado com tubo *draft* e os resultados das simulações são apresentados nas próximas sessões.

Resfriadores com oito e nove tubos de troca térmica foram simulados em um tempo computacional de 35,0 segundos para todos os casos. No caso do resfriador com nove tubos, o tubo central pode ser representado de modo mais preciso na geometria bidimensional, o que foi realizado nas simulações. Para representar a realimentação de sólidos em todos os casos foi necessário o uso da função definida pelo usuário (UDF), compilada dentro do programa computacional ANSYS FLUENT v14.5.

O processo foi simulado com um leito estático de 1.45 m no sistema como condição inicial. O leito foi expandido ao longo de tempo até que as partículas fossem ejetadas para fora do domínio computacional. A partir deste momento, as partículas sólidas eram realimentadas no domínio.

#### **4.3.1. Teste de malhas**

Em todos os casos (3.1, 3.2 e 3.3), o estado de estabilização do processo ou também chamado de quase estacionário, foi observado depois dos 15,0 de iniciada a simulação. Só para garantir que o estado quase estacionário seja atingido completamente, o análise das malhas foram feitas nos últimos 10,0 segundos do tempo simulado, ou seja, depois dos 25,0 segundos, tentando reproduzir com uma maior fidelidade o que acontece em uma operação normal deste tipo de equipamentos, o que é realmente a etapa do processo com maior interesse.

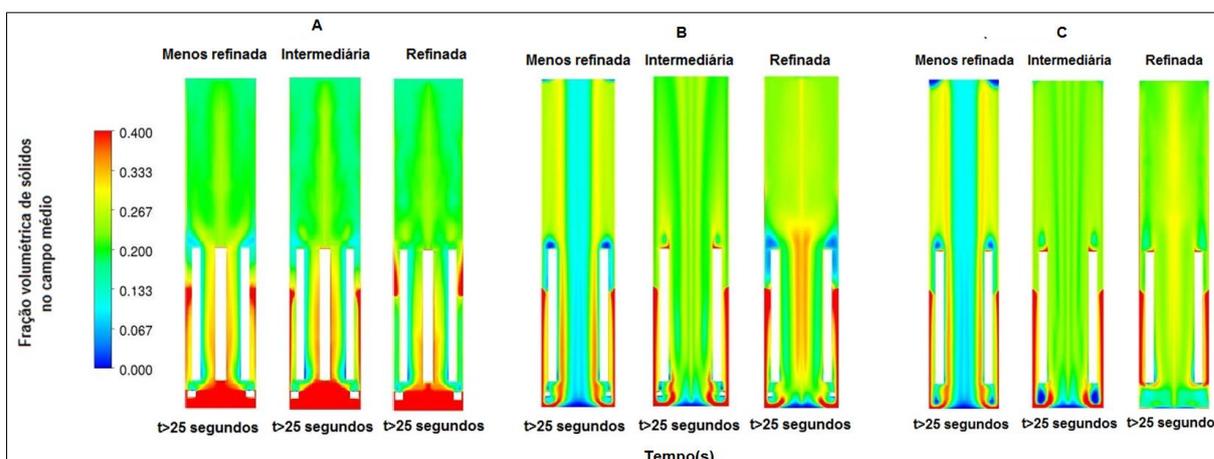
A Figura 41 apresenta um teste de malhas analisada na operação normal dos resfriadores considerados na Tabela 9 (caso 3.1, 3.2 e 3.3) desde a malha menos refinada até a malha mais refinada, tomando como referência o número de células que foram

empregadas segundo a Tabela 13. A análise foi feita a partir da média de fração volumétrica dos sólidos atingido na estabilização do processo.

Sendo assim, para os três casos (3.1, 3.2 e 3.3) um comportamento similar foi mostrado pelo menos entre as malhas intermediária e mais refinada, indicando que existe uma independência na resposta quanto mais se acrescentou o número de células empregadas para cada caso e, portanto, a resposta da simulação melhorou.

Por conseguinte, foi tomada como referência, nos três casos (3.1, 3.2 e 3.3) a malha intermediária para a análise e apresentação dos resultados, uma vez que esta fornece um resultado muito similar ao apresentado para as malhas mais refinadas.

FIGURA 41 – Teste de malhas. A) Caso 3.1. B) Caso 3.2. C) Caso 3.3.



Fonte: AUTOR (2016).

#### 4.3.2. Caso 3.1: Resfriador de catalisador com nove tubos de troca térmica, distribuidor em anel e realimentação de sólidos.

Este tipo de resfriador de catalisador foi simulado a partir de uma geometria com nove tubos de troca térmica (tubo central e parede cilíndrica) e sem entrada de ar pelo prato perfurado central. Portanto, a entrada de ar foi efetuada pelo distribuidor em anel.

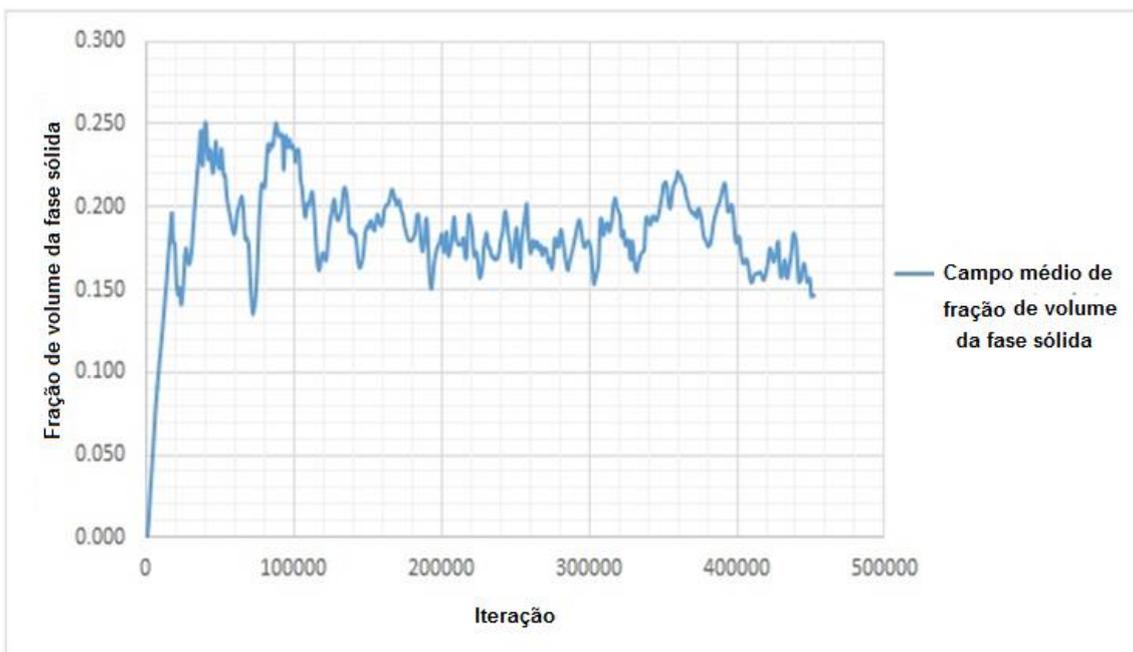
Devido à incorporação da realimentação de sólidos mediante a UDF, o processo de fluidização pode ser dividido em duas etapas: o início do processo (*startup*) e quando o sistema está estabilizado, atingindo um estado quase estacionário (depois dos 15 segundos).

No início da simulação, devido à grande velocidade superficial de gás através dos furos do distribuidor em anel, as partículas foram fluidizadas atingindo o topo do sistema e sendo realimentadas, o que ocorreu em aproximadamente 4,0 segundos. A fase sólida atingiu mais rapidamente o topo do sistema computacional (saída) se comparado ao caso sem internos porque a presença da parede cilíndrica que emula as tubulações aumenta a velocidade da fase gasosa na região inferior do leito.

A Figura 42 mostra que os sólidos após serem fluidizados atingem o topo do sistema aos 3,9 segundos (aproximadamente às 40 000 iterações). A realimentação ocorreu aos 4,0 segundos (50 000 iterações), mantendo constante o inventário das partículas.

Depois dos 15,0 segundos, considerou-se que ocorreu a estabilização do processo, onde o sistema atingiu o estado quase estacionário. Por conseguinte, o comportamento dos sólidos foi analisado neste estado através de comportamento médio transiente do sistema.

FIGURA 42 - Fração de volume da fase sólida medida ao longo do tempo em uma linha que atua como eixo no interior da coluna (caso 3.1)



Fonte: AUTOR (2016).

A Figura 43 mostra a fração volumétrica de sólidos do campo médio para o caso 3.1. Nota-se que o fluxo das partículas são canalizadas principalmente no centro do sistema e direcionadas pelo tubo inserido no centro.

Evidentemente, os sólidos foram mais concentrados próximo às paredes dos tubos e se distribuíram mais uniformemente após ultrapassar o comprimento dos tubos, sendo esta região mais diluída. No entanto, a tendência de canalizar a maior parte dos sólidos para o centro e desviar pelas paredes é mantida ao longo do tempo. Além disso, os sólidos realimentados tem tendência de se manterem próximos à parede interna do resfriador, onde não haveria troca térmica, o que é um comportamento de escoamento indesejado.

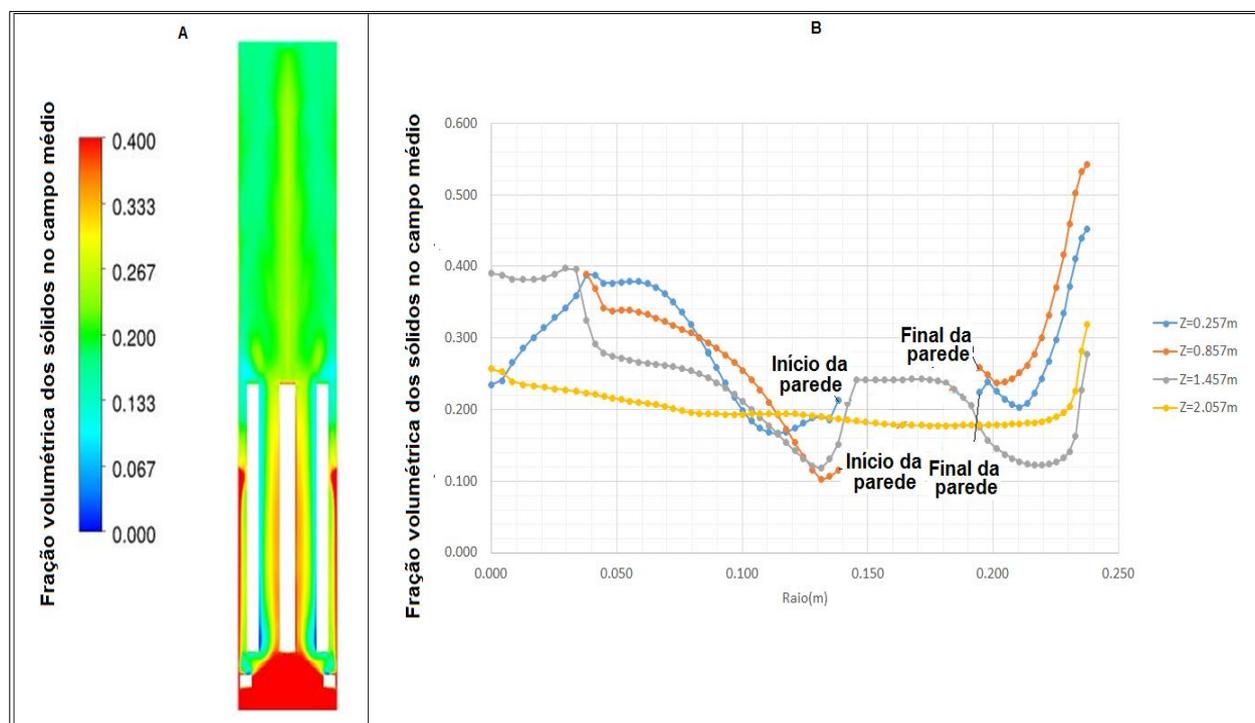
Por outro lado, depois da realimentação, as partículas escoam para a região inferior do resfriador até a região sob o anel, enquanto o gás tenta fluidizar as partículas para o topo. Nesta região (próximo às paredes da tubulação) ocorre uma oposição entre o leito fluidizado e o escoamento dos sólidos vindos da realimentação. Posteriormente, as partículas são arrastadas e fluidizadas pelo gás que sai dos furos do distribuidor anelar.

Na região inferior sob o anel, observa-se que os sólidos acumulam e que finalmente são arrastados pelo fluxo de ar que sai do distribuidor e fluidizam (Figura 43a). Da mesma maneira, os sólidos que escoaram pelas paredes da tubulação desceram até a região inferior sendo depois arrastados e fluidizados. Este comportamento ocorre devido à ausência de distribuidor central no resfriador, o que ocasiona uma aglomeração de sólidos na região inferior ao anel.

A Figura 43b, apresenta de forma quantitativa os campos médios da fração volumétrica dos sólidos no estado quase estacionário. Em suma, os resultados confirmaram o exposto na Figura 43a. As partículas sólidas estão mais concentradas na região inferior do resfriador e se distribuem melhor em maiores alturas. Ressalta-se que na direção radial da tubulação, pôde-se notar que no centro do sistema houve maior concentração de sólidos. O fato da descontinuidade no gráfico da Figura 43b, somente indica a presença da parede interna ao domínio computacional.

Finalmente, a ausência do distribuidor central de ar influencia diretamente no comportamento do sistema, fazendo com que não haja boa mistura entre as fases, portanto, uma parte dos sólidos provavelmente não resfriará.

FIGURA 43 - Fração volumétrica dos sólidos no campo médio no caso 3.1. A) Avaliação qualitativa de concentração de sólidos B) Avaliação quantitativa de concentração de sólidos em diferentes alturas do comprimento e diferentes distâncias do centro



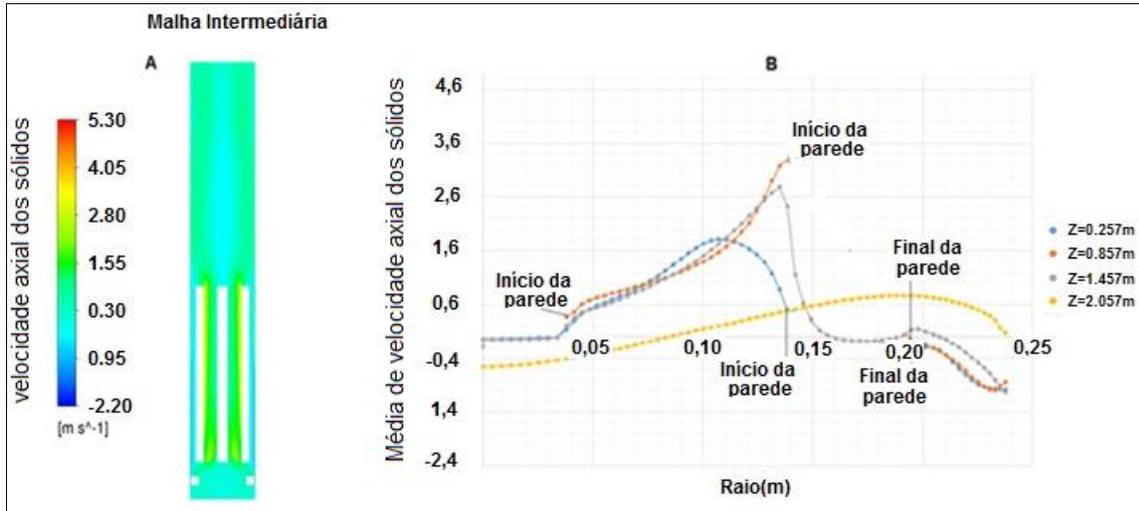
Fonte: AUTOR (2016).

A Figura 44 apresenta a velocidade axial dos sólidos no campo médio, depois de atingir o estado quase estacionário. Qualitativamente, a maior velocidade de sólidos aparece próxima às paredes dos tubos laterais de troca térmica. Depois de ultrapassar a localização da realimentação dos sólidos, a maior velocidade axial dos sólidos se apresenta próxima às paredes da tubulação. A região de menor velocidade dos sólidos ocorre onde há maior concentração dessa fase (Figura 43).

Como é mostrado na Figura 44a, focando na região inferior sob o anel, grande massa de sólidos foi aglomerada, o que ocasionou uma velocidade baixa nesta região. Além disso, se confirma que a alimentação de ar pelo anel é insuficiente para aerar os sólidos presentes entre as paredes dos trocadores e a parede externa, já que as maiores velocidades ocorrem no centro do sistema e a fração de sólidos é elevada nas paredes.

A Figura 44b, apresenta a velocidade axial dos sólidos em diferentes comprimentos e a diferentes distâncias do centro do tubo. A descontinuidade apresentada na Figura 44b é devida à presença dos tubos de troca térmica, onde não são calculados campos de escoamento.

FIGURA 44 - Velocidade axial dos sólidos no campo médio no caso 3.1. A) Avaliação qualitativa de velocidade axial dos sólidos B) Avaliação quantitativa de velocidade axial dos sólidos diferentes alturas do comprimento e diferentes distancias do centro



Fonte: AUTOR (2016).

Com respeito ao eixo da tubulação, a velocidade decaiu com o comprimento da tubulação. Em relação ao comportamento radial, depois de ultrapassar a realimentação, o centro do sistema apresenta velocidades relativamente baixas, ampliando seu valor quando se aproxima das paredes da tubulação (parede externa).

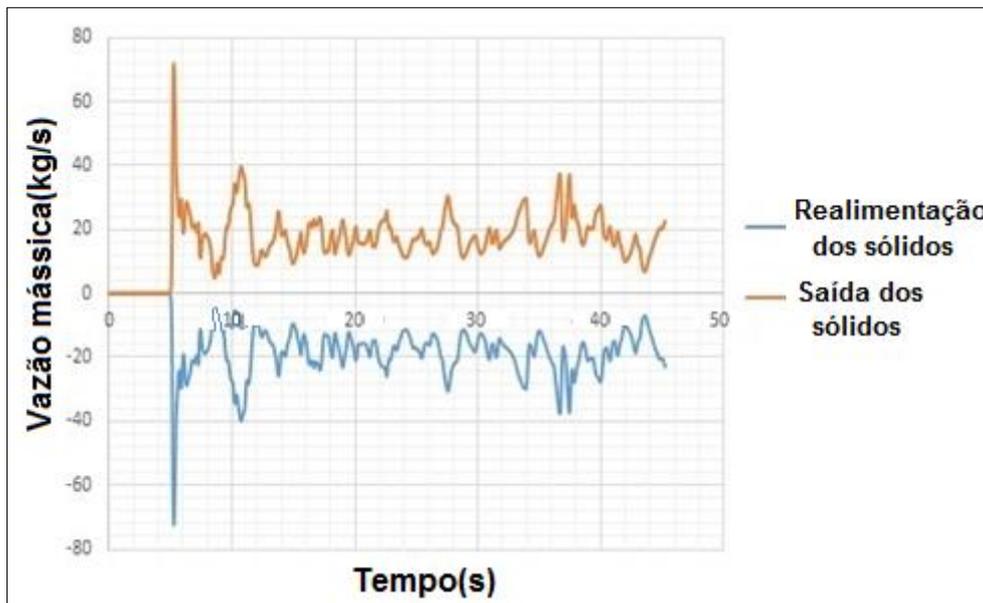
Na região abaixo da realimentação e em termos do comportamento radial, a velocidade axial dos sólidos aumenta à medida que se aproxima da parede dos tubos laterais (parede interna). Os valores negativos de velocidade significam que o sólido se movimenta na direção descendente. Isto ocorreu abaixo da realimentação (Figura 44b), em que as partículas escoaram para a região inferior do resfriador após sair da realimentação. Esta é a região em que se observa grande concentração de sólidos na parede do resfriador (externa), conforme mostra a Figura 43. Depois de ultrapassar a localização da realimentação, não é mais observado o comportamento descrito anteriormente. Este comportamento confirma a deficiência de aeração na região.

A Figura 45 mostra a vazão mássica de saída e realimentação dos sólidos dentro do domínio computacional. Similarmente aos casos anteriores, a vazão mássica é zero no início da fluidização, pois as partículas não saíram do domínio computacional nem foram realimentadas. Aproximadamente aos 4,0 segundos, ocorre a realimentação de sólidos (correspondente à iteração 50 000, como é mostrada na Figura 45). Os picos mostrados

indicam que os sistema é altamente instável e heterogêneo. A instabilidade é provocada pelo escoamento gás-sólido, que leva à distribuição de sólidos não uniforme.

No entanto, o sistema atinge a estabilização, pois manteve tendência que indica que o inventário de sólidos é aproximadamente constante. Neste caso, a vazão mássica de saída e realimentação de sólidos oscilou em torno de 22,8 kg/s.

FIGURA 45 - Saída e realimentação dos sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 3.1



Fonte: AUTOR (2016).

#### 4.3.3. Caso 3.2: Resfriador de catalisador com oito tubos de troca térmica, distribuidor em dupla (prato perfurado central e anelar) e realimentação de sólidos.

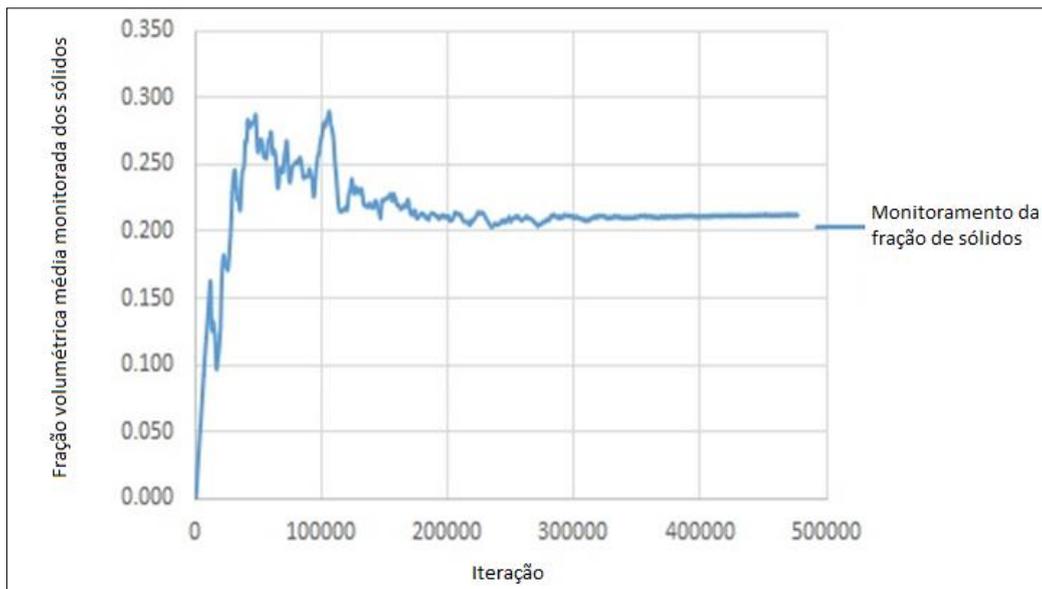
Similarmente ao caso 3.1, somente a análise sobre o estado quase estacionário (processo estabilizado) após os 15 segundos foi apresentado nessa seção. Do mesmo modo que o caso anterior, a realimentação de sólidos foi incorporado mediante uma função definida pelo usuário (UDF), compilada dentro do programa computacional ANSYS FLUENT v14.5. O tempo simulado total foi de 35,0 segundos de escoamento.

A Figura 46 mostra a expansão do leito usando o campo médio de fração volumétrica de sólidos ao longo do tempo mediante a linha de monitoramento (Figura 14). A tendência apresentada na Figura 46 mostra que houve uma parte constante na

curva, correspondente à realimentação contínua dos sólidos. O leito expandiu até as partículas serem ejetadas para depois serem realimentadas.

A expansão do leito atingiu o topo do sistema depois de aproximadamente 4,80 segundos para o caso 3.2. Do mesmo modo que o caso anterior, a rápida expansão foi ocasionada porque o feixe de tubos internos de troca térmica aumentaram a velocidade da fase gasosa na região inferior do leito.

FIGURA 46 - Fração volumétrica de sólidos para o caso 3.2.

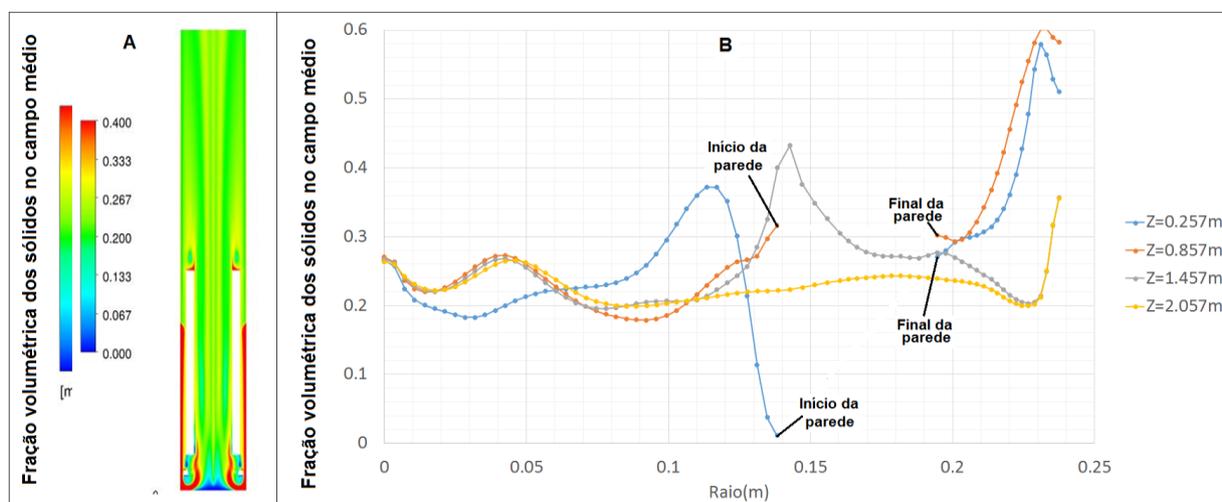


Fonte: AUTOR (2016).

Depois dos 15 segundos, considerou-se que o sistema estabilizou-se (estado quase estacionário).

A Figura 47 mostra a fração volumétrica de sólidos no campo médio do caso 3.2, analisando os perfis a diferentes raios e comprimentos da tubulação. Qualitativamente, no processo de escoamento gás-sólido apresentado na Figura 47a, a fração de sólidos é mais uniforme no centro do sistema que o caso 3.1.

FIGURA 47 - Fração volumétrica dos sólidos no campo médio no caso 3.2. A) Avaliação qualitativa de concentração de sólidos B) Avaliação quantitativa de concentração de sólidos em diferentes alturas do comprimento e diferentes distancias do centro



Fonte: AUTOR (2016).

A Figura 47 mostra que houve uma maior homogeneidade no comportamento do escoamento em relação ao caso 3.1. Além disso, houve uma boa mistura dos sólidos e da fase gasosa em grande parte do domínio do sistema.

Sendo assim, diferença entre os casos 3.1 e 3.2 pode ser explicada pela presença dos dois distribuidores (prato perfurado central e anel) no caso 3.2, portanto, caso 3.2 apresenta um comportamento altamente estável e fácil de ser previsto no estado quase estacionário do que o caso 3.1.

Na Figura 47a, visivelmente as partículas realimentadas escoam pelas paredes e foram arrastadas pelo gás até o centro do sistema para serem fluidizadas, portanto a região sob o anel está em constante movimento. Desde o ponto de vista da homogeneidade da fase sólida, este tipo de resfriador parece ser mais eficiente do que aquele do caso 3.1 (convencional).

Focando na região sob o anel, é claro que existe ausência de aglomeração e uma melhora da mistura, devido à presença do distribuidor de prato perfurado. A indicação de maior eficiência obtida pela análise dos campos médios concorda com as conclusões do trabalho de YAO et al. (2014, b) obtidas a partir de resultados experimentais.

A Figura 47b apresenta de forma quantitativa os campos médios de fração volumétrica dos sólidos no estado quase estacionário. Em suma, os resultados

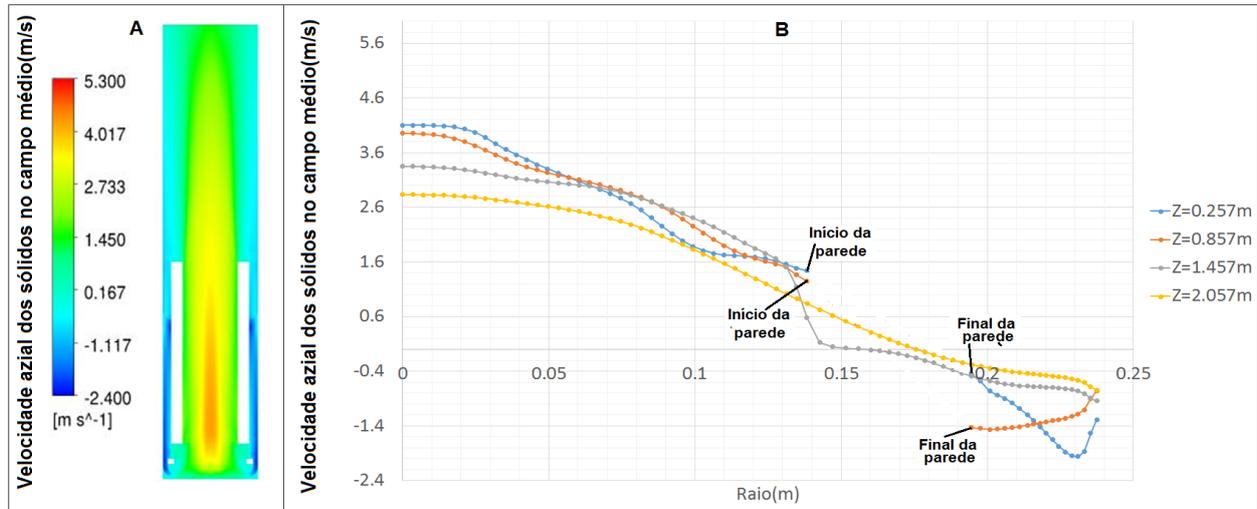
confirmaram o exposto pela Figura 47a. Devido à boa mistura entre as fases, existe menor variação com respeito ao comprimento da tubulação se compararmos com o caso 3.1, o que reafirma a premissa de que a configuração geométrica deste tipo de resfriador fornece um escoamento gás sólido mais uniforme.

Por outro lado, na região baixa do equipamento, as partículas realimentadas escoaram pelas paredes da tubulação até a região sob o anel para depois serem fluidizadas pelo ar mediante os distribuidores. Os valores altos de fração de sólidos apresentados na Figura 47b correspondem aos sólidos escoados pelas paredes da tubulação. Cabe ressaltar que, a descontinuidade desses gráficos indica a presença das paredes dos tubos de troca térmica.

A Figura 48 apresenta a velocidade axial dos sólidos no campo médio, depois de atingir o estado quase estacionário. A figura fornece conhecimento sobre a distribuição de velocidades dos sólidos em todo o domínio do sistema. A maior velocidade dos sólidos aparece no centro do sistema, comportamento que é mantido inclusive depois de ultrapassar a localização do *draft tube*.

A Figura 48b apresenta a média de velocidade axial dos sólidos avaliada em diferentes alturas e diferentes distâncias do centro da tubulação. Observa-se que para este equipamento existe grande uniformidade quanto à distribuição de velocidade axial dos sólidos em todo o domínio do sistema. A Figura 48b reafirma o exposto pela Figura 48a, onde a maior velocidade apareceu no centro da tubulação e decaiu enquanto se afasta do centro. Os valores negativos de velocidade indicam que a fase sólida está indo em sentido descendente próximo às paredes do equipamento. Isto é visível ao observar o comportamento do campo de fração de sólidos ao longo do tempo, pois as partículas realimentadas escoaram pelas paredes, o que concorda plenamente com a Figura 47b.

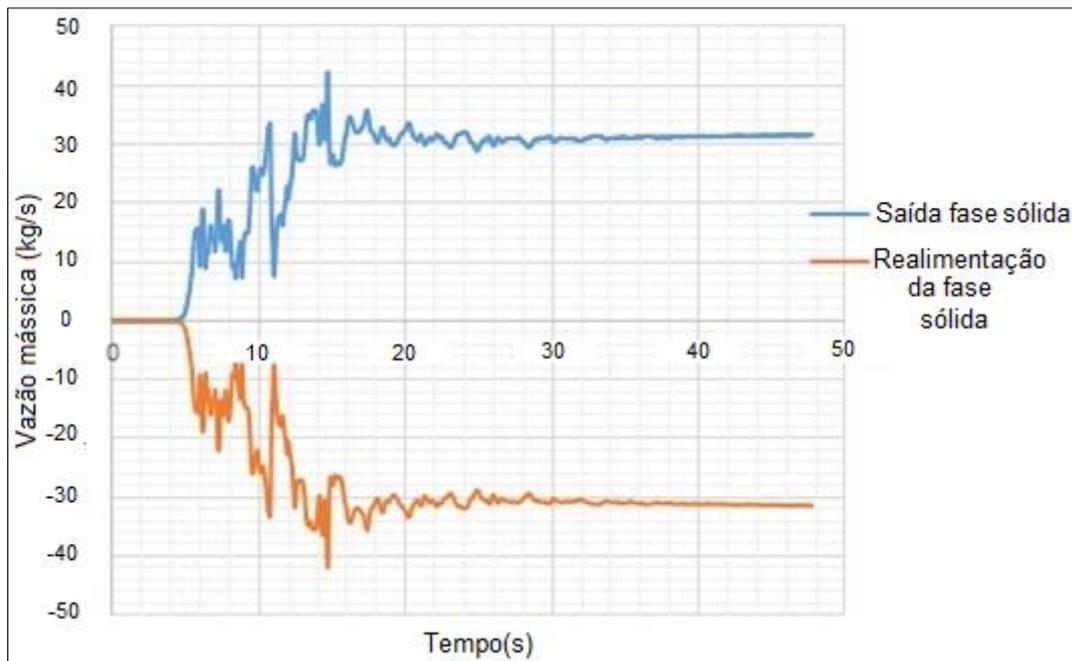
FIGURA 48 - Velocidade axial sólidos no campo médio no caso 3.2. A) Avaliação qualitativa de velocidade axial dos sólidos B) Avaliação quantitativa de velocidade axial dos sólidos em diferentes alturas do comprimento e diferentes distancias do centro



Fonte: AUTOR (2016).

A Figura 49 apresenta a vazão mássica de sólidos na saída e na realimentação, dentro do domínio computacional. Para o caso 3.2, aproximadamente aos 4,95 segundos ocorre a realimentação de sólidos (correspondente à iteração 50 000). A curva mostrada indica que houve uma estabilidade no sistema com pouca presença de perturbações. Isto provocou boa mistura, o que levou à maior uniformidade na distribuição de sólidos. A vazão mássica de saída e realimentação dos sólidos após alcançar a estabilidade oscilava em torno de 31,3 kg/s.

FIGURA 49 - Saída e realimentação dos sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 3.2.



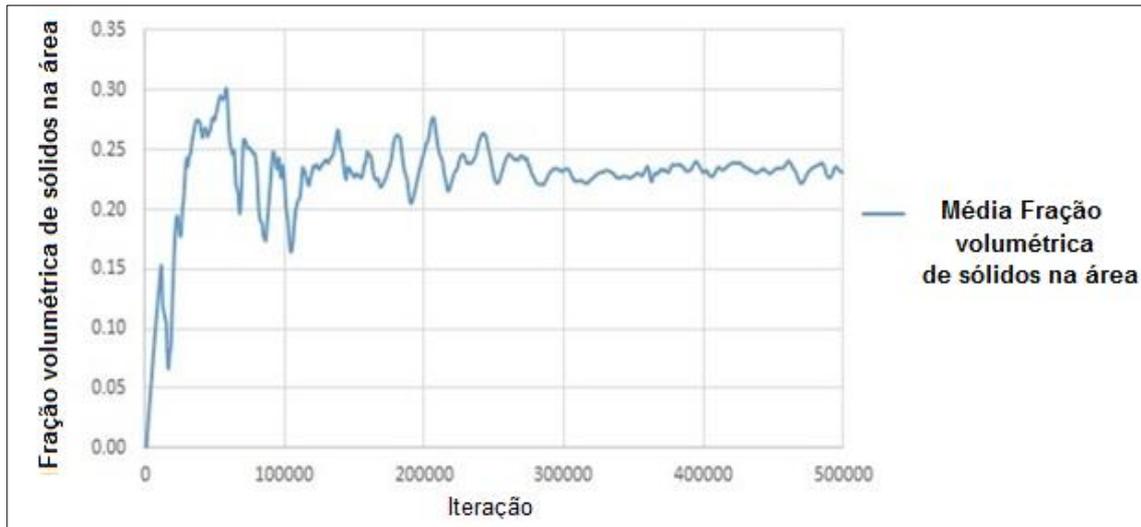
Fonte: AUTOR (2016).

#### 4.3.4. Caso 3.3: Resfriador de catalisador com oito tubos de troca térmica, distribuidor de prato perfurado central e realimentação.

A geometria considerada para essa simulação foi a mesma do caso 3.2, no entanto o distribuidor de gás usados nesta simulação é o que simula um prato perfurado central. Assim como os casos 3.1 e 3.2, a simulação do caso 3.3 foi iniciada com um leito estático de partículas de 1,45 m. A realimentação de sólidos foi incorporado mediante uma função definida pelo usuário e o tempo simulado foi 35,0 segundos.

A Figura 50 mostra a expansão máxima do leito usando o campo médio de fração volumétrica de sólidos por cada iteração, no tempo. Neste caso, as partículas alcançaram o topo do resfriador aos 4,0 segundos.

FIGURA 50 – Média Fração volumétrica de sólidos na área (caso 3.3)



Fonte: AUTOR (2016).

Depois dos 15 segundos, considerou-se que o sistema estava estável (estado quase estacionário) e o comportamento dos sólidos foi analisado neste estado.

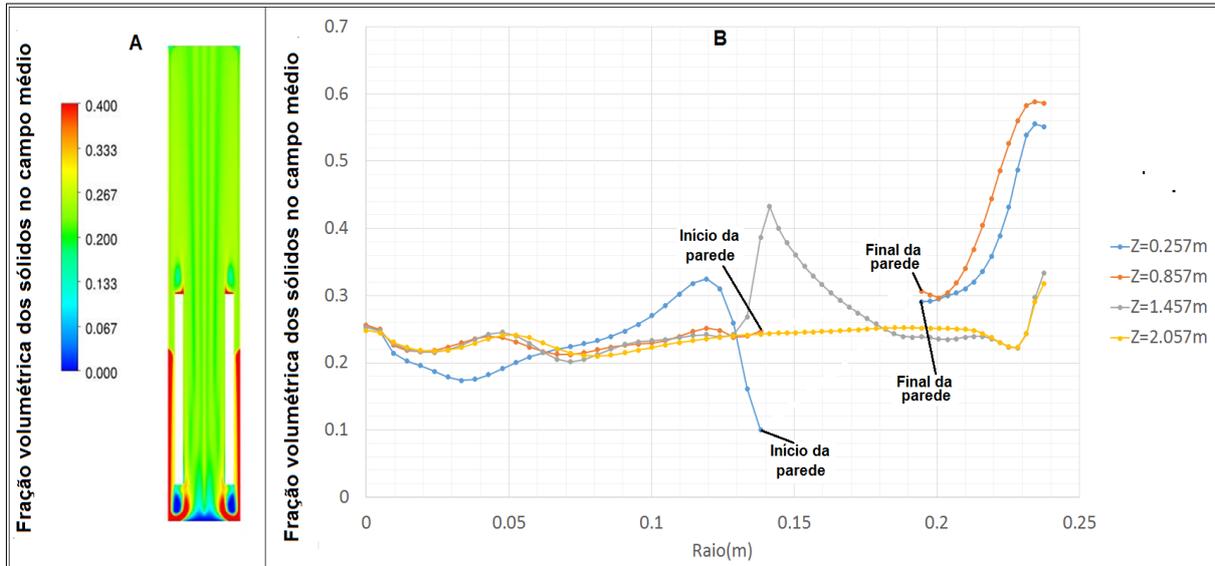
A Figura 51 mostra a fração volumétrica dos sólidos no campo médio transiente do caso 3.3, analisando os perfis a diferentes comprimentos da tubulação e a diferentes distâncias do centro. Qualitativamente, no processo de escoamento gás-sólido apresentado na Figura 51a, evidencia-se que as partículas efetivamente canalizaram para o centro com grande uniformidade, comportamento parecido com o caso 3.2. Isto indica também que houve uma boa mistura entre as fases e que, a presença de distribuidor em anel, não influenciou de maneira significativa no processo de fluidização, pelo menos segundo as variáveis e campos médios em destaque aqui.

As partículas que foram realimentadas desciam pelas paredes da tubulação e eram arrastadas e fluidizadas pelo gás que entrava no distribuidor central. Como não houve aglomeração de partículas no fundo do resfriador, uma conclusão preliminar obtida foi que este tipo de resfriador foi mais eficiente em termos de escoamento que aquele apresentado no caso 3.1.

A Figura 51b, apresenta de forma quantitativa os campos médios de fração volumétrica dos sólidos no estado quase estacionário. Excetuando as regiões que estão embaixo do *draft tube* de realimentação de sólidos, as maiores concentrações de partículas estiveram na parede da tubulação, pois o sólidos realimentado desce até o fundo do resfriados para depois serem fluidizadas. Além disso, a concentração de sólidos é

relativamente uniforme no domínio computacional, mais que aquela apresentada nos casos 3.1 e 3.2.

FIGURA 51 - Fração volumétrica dos sólidos no campo médio no caso 4.3.3. A) Avaliação qualitativa de concentração de sólidos B) Avaliação quantitativa de concentração de sólidos em diferentes alturas do comprimento e diferentes distancias do centro



Fonte: AUTOR (2016).

A Figura 52 apresenta a velocidade axial dos sólidos no campo médio, depois de atingir o estado quase estacionário. A figura fornece um conhecimento da distribuição de velocidades dos sólidos em todo o domínio do sistema.

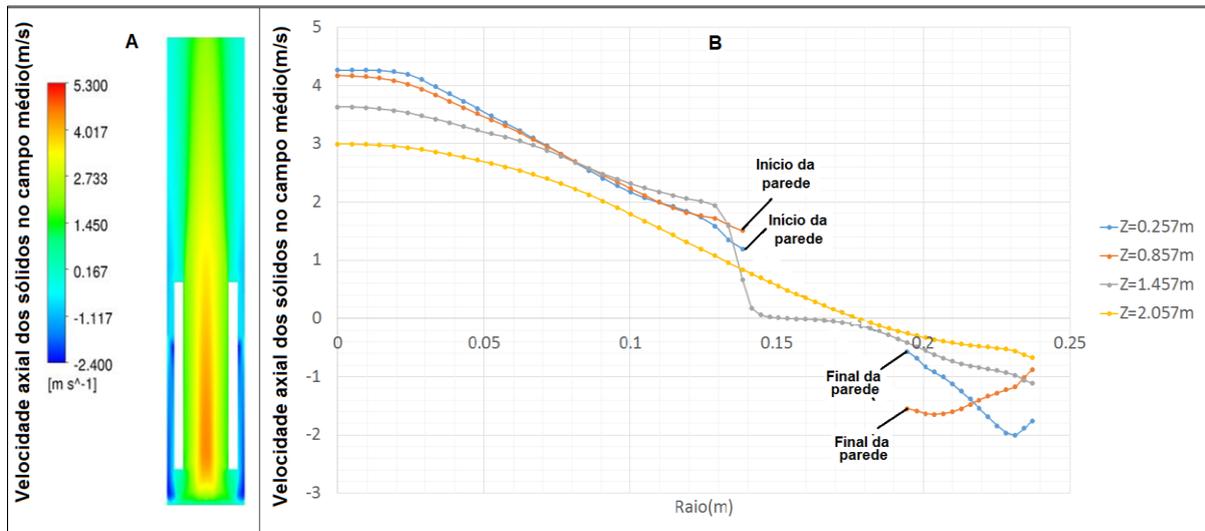
A maior velocidade dos sólidos aparece no centro do sistema, comportamento que é mantido inclusive depois de ultrapassar a localização do *draft tube* de realimentação de sólidos (muito semelhante ao caso 3.2).

Como é mostrado na Figura 52, a presença de distribuidor central fornece uma boa mistura, o que ocasiona na inexistência de aglomeração de partículas no fundo do resfriador.

A Figura 52b apresenta a velocidade axial dos sólidos avaliado em diferentes alturas e diferentes distâncias do centro da tubulação. Se observa que existe uma grande uniformidade quanto à distribuição de velocidade axial dos sólidos, assim como no caso 3.2.

A Figura 52b reafirma o exposto pela Figura 52a, onde a maior velocidade apareceu no centro da tubulação e decaiu enquanto se afasta do centro. Os valores negativos de velocidade indicam que, vetorialmente, a velocidade nesta região está em sentido contrário à fluidização. Comportamento análogo foi observado nas Figuras 44a e 48a, e explica o valor negativo de velocidades, pois as partículas realimentadas escoaram pelas paredes.

FIGURA 52 - Velocidade axial sólidos no campo médio no caso 3.3. A) Avaliação qualitativa de velocidade axial dos sólidos B) Avaliação quantitativa de velocidade axial dos sólidos em diferentes alturas do comprimento e diferentes distancias do centro



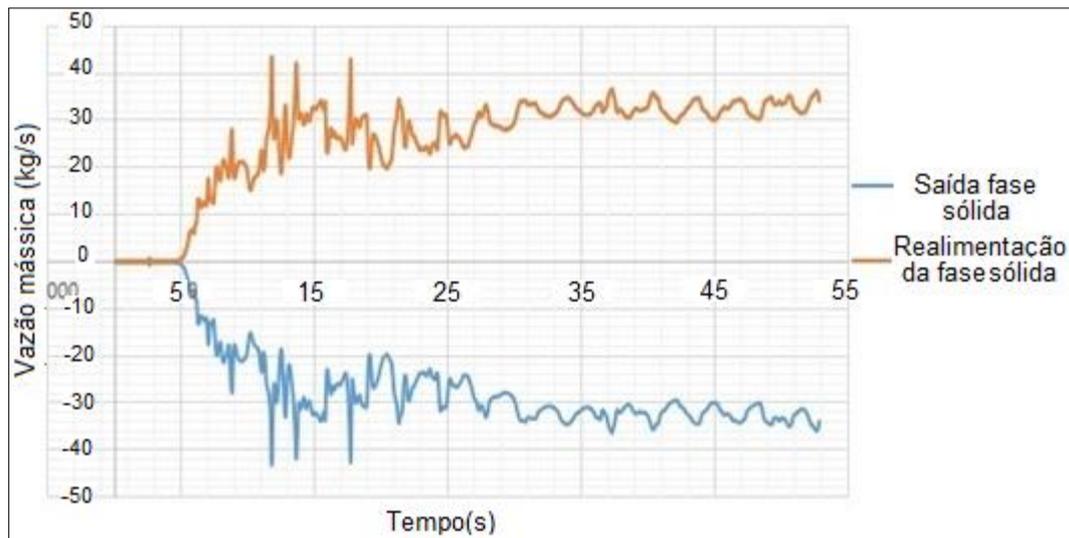
Fonte: AUTOR (2016).

Para o caso 3.3, aproximadamente aos 4,10 segundos ocorre a realimentação de sólidos (correspondente à iteração 50 000, como é mostrada na Figura 53).

A tendência mais acentuada da instabilidade foi observada a partir dos 5,85 segundos. O exposto pode dar um indício de que o resfriador de catalisador de oito tubos proposto por YAO et al. (2014) é mais estável e eficiente do que os outros analisados.

Finalmente, o valor da vazão mássica de saída e realimentação dos sólidos foi 33,6 kg/s.

FIGURA 53 - Saída e realimentação dos sólidos ao longo do tempo para o escoamento gás-sólido no caso 3.3.



Fonte: AUTOR (2016).

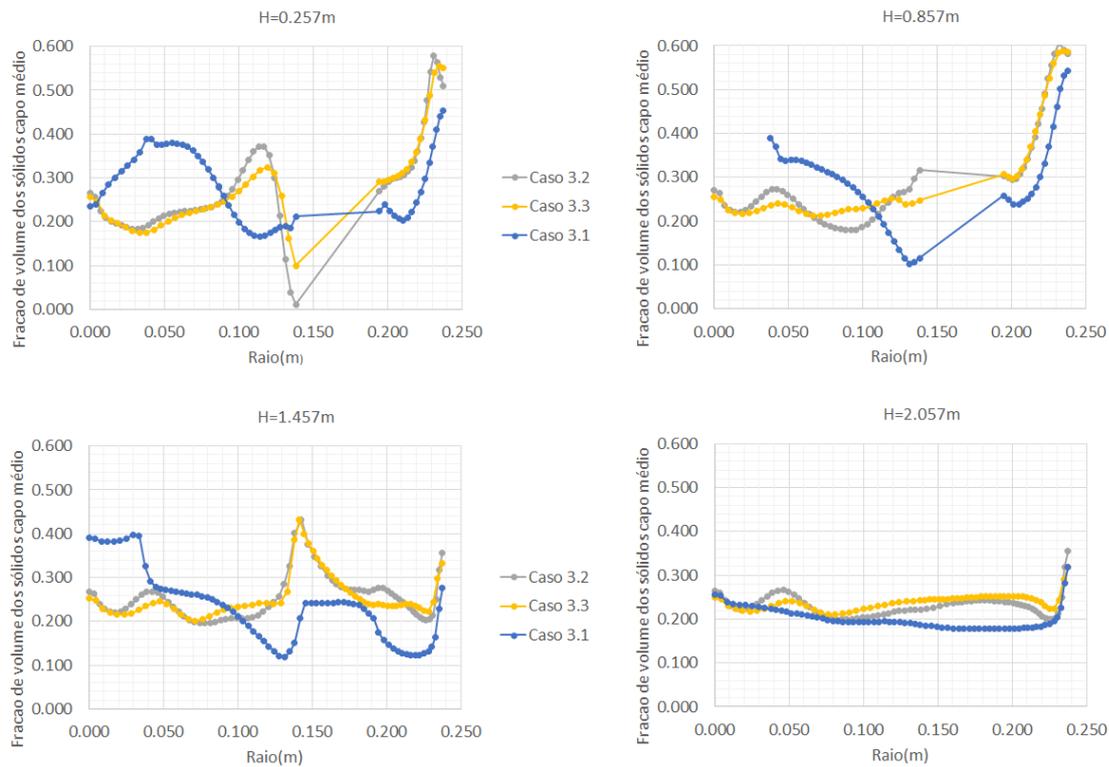
#### 4.3.5. Comparação entre os casos 3.1, 3.2 e 3.3

A presente seção apresenta resultados das três simulações em conjunto, de modo a confirmar as características já analisadas e aprofundar as discussões de forma comparativa.

A Figura 54 mostra o comparativo dos campos médios de fração volumétrica local dos sólidos para os casos analisados (caso 3.1, caso 3.2 e caso 3.3) em diferentes alturas.

Observe-se que os casos 3.2 e 3.3 apresentam comportamentos similares com respeito à distribuição dos sólidos, o que indica que, para estes casos, a presença de distribuidor em anel não fez uma diferença significativa na distribuição dos sólidos pelo sistema, pelo menos no que tange aos campos médios. Já o caso 3.1 apresenta um comportamento diferente do que os outros casos, o que é devido principalmente à ausência de distribuidor de prato perfurado central e à presença do tubo de troca térmica central.

FIGURA 54 - Comparativo dos campos médios da fração volumétrica local dos sólidos dos casos 3.1, 3.2 e 3.3, em diferentes alturas.



Fonte: AUTOR (2016).

Tendências diferentes foram apresentadas em duas regiões bem definidas: a região sob o *draft tube* de realimentação e em cima da realimentação dos sólidos. Na região sob o *draft tube* de realimentação, para os casos 3.2 e 3.3, apresentam baixos valores de fração volumétrica no centro do tubo, que foi aumentando a medida que se aumentou a distância desde o centro da tubulação, alcançando valores maiores próximo às paredes. Isto significa que, no centro do sistema as fases são bem diluídas (o que indica mistura e homogeneidade em essa região), enquanto que nas paredes existe um escoamento de partículas que foram realimentadas e descem para a região inferior do resfriador, para depois serem ejetadas para fora do domínio computacional.

No entanto, para o caso 3.1, uma distribuição de sólidos diferente foi apresentada. Na parede do tubo concêntrico a fração de sólidos mostra valores baixos para depois se aumentar nas regiões perto das paredes dos tubos de troca térmica laterais. Isto indica que, em termos de escoamento e fluidização, houve maior heterogeneidade neste resfriador do que nos outros. O valores altos de fração volumétrica de sólidos nas paredes indicam que os sólidos realimentados escoaram nessa região.

Depois da localização do *draft tube*, e a medida que se aumenta o comprimento da tubulação, o decaimento da fração de sólidos diminui, e depois de ultrapassar a realimentação de sólidos, o valor da fração volumétrica foi quase constante, uma vez que o inventário de sólidos se manteve constante ao longo do tempo (sistema estabilizado).

A avaliação dos campos médios da fração volumétrica fornece uma importante informação sobre a distribuição dos sólidos do sistema em estado estável, mas não indica o sentido vetorial que tiveram os sólidos em uma operação contínua. Portanto, é necessário conhecer a velocidade dos sólidos no eixo do sistema estável, para caracterizar o comportamento das partículas.

A Figura 55 expõe um comportamento do campo médio de velocidade axial local dos sólidos para os casos analisados (caso 3.1, caso 3.2 e caso 3.3), o qual permite se conhecer o sentido vetorial da velocidade da fase sólida em diferentes pontos do comprimento da tubulação.

Para os casos 3.2 e 3.3, antes da localização do *draft tube*, observa-se um comportamento similar em ambos os casos. Valores maiores de velocidade axial foram apresentados no centro da tubulação, os quais diminuem quando se aproxima das paredes. Isto concorda com a avaliação de velocidade axial dos sólidos nos casos 3.2 e 3.3 e, pode ser explicado pela ação do distribuidor central que fornece o fluxo maioritário de gás, pela ausência do tubo de troca térmica concêntrico e localização dos tubos de troca térmica laterais, o que favoreceram notoriamente à canalização de ar no centro do sistema.

Os valores negativos mostrados na Figura 55 representam a oposição vetorial de velocidade dos sólidos, o que indica que as partículas realimentadas estão escoando descendentemente nessa região.

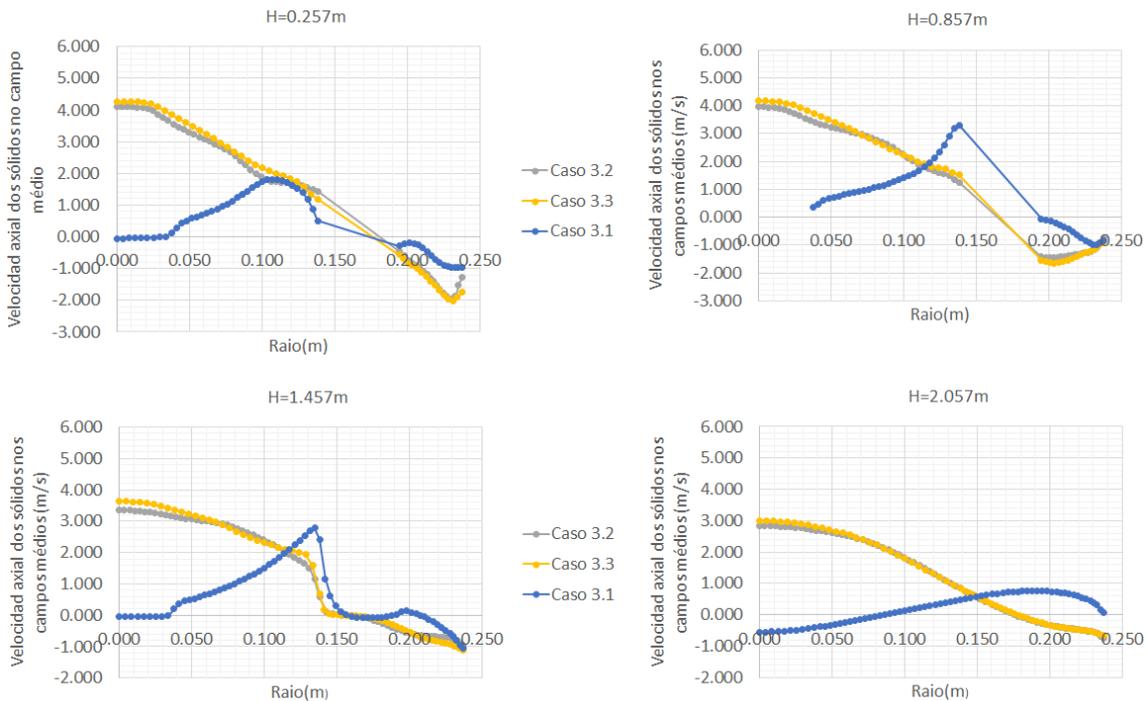
Após ultrapassar a localização do *draft tube* esta tendência é mantida, como pode se observar na Figura 55.

O comportamento no caso 3.1 é diferente dos outros. Devido ao tubo de troca térmica central inserido no interior do resfriador, houve uma perda de pressão do gás que passa na superfície do resfriador. Conseqüentemente, a velocidade diminui consideravelmente. Efetivamente, a tendência antes do *draft tube* evidenciou que, no centro do sistema, as velocidade axial dos sólidos é baixa e foi aumentando a medida que se aproximava aos tubos de troca térmica laterais. Também é mostrado que, as partículas

realimentadas escoam pelas paredes da tubulação, o que justifica os valores de velocidade negativa.

Após ultrapassar a localização do *draft tube*, apresentou uma homogeneidade na mistura das fases, tendência que é mantida ao longo do comprimento.

FIGURA 55 - Comparativo dos campos médios de velocidade axial dos sólidos dos casos 3.1, 3.2 e 3.3, em diferentes alturas



Fonte: AUTOR (2016).

#### 4.3.6. Avaliação do comportamento dos sólidos nas paredes para troca térmica para os casos 3.1, 3.2, e 3.3.

Uma forma de comparar a eficiência na hidrodinâmica dos resfriadores de catalisador de FCC no caso 3 é mediante a avaliação da média da fração volumétrica dos sólidos nas paredes dos tubos e do desvio padrão nestes locais (superfícies diretamente em contato com o escoamento dentro do resfriador). Esta informação fornece uma ideia do comportamento dos sólidos sobre as paredes dos tubos de troca térmica, uma vez que a transferência de calor não foi simulada para essa dissertação. YAO et al. (2014, b) considera que a renovação de sólidos em contato com os tubos de troca térmica tem papel fundamental na eficiência do resfriador.

Além da renovação de sólidos, também o maior tempo de contato das partículas com as paredes dos tubos de trocadores de calor influencia o coeficiente de troca de calor. Deste modo, uma maior renovação de sólidos não necessariamente favorece a intensificação de transferência de calor. Além disso, a proximidade das partículas entre si (concentração) na região da parede deve influir no processo de transferência, já que a fase sólida possui maior condutividade térmica que o gás.

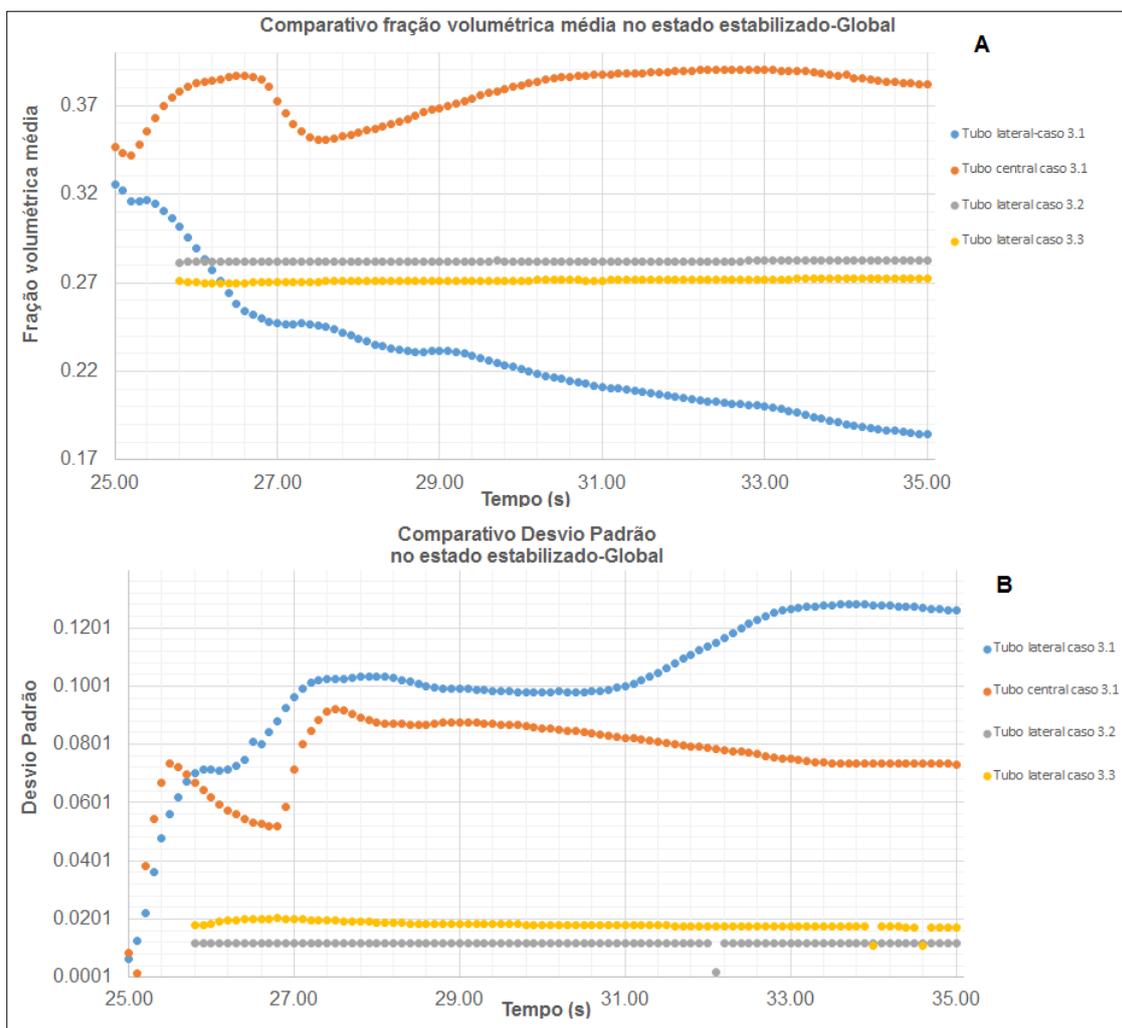
Nas simulações desta dissertação, a renovação de sólidos nas paredes foi avaliada através do desvio padrão do sistema estabilizado nas superfícies apropriadas, enquanto a média de fração volumétrica de sólido foi utilizada para análise dos demais fatores de contato (tempo de contato e concentração).

Cabe ressaltar que as geometrias consideradas para a análise foram as dos casos caso 3.1 (resfriador convencional), 3.2 (proposta de intensificação de YAO et al. 2014, b) e 3.3 (retirada do distribuidor em anel do caso 3.2), uma vez que as outras geometrias simuladas neste trabalho não emulam tubos de troca térmica. Foram consideradas as superfícies interior e exterior dos tubos, pois nessa região o contato dos sólidos com as paredes é maior, negligenciando a zona superior e inferior dos tubos, cujas áreas não são significativas. Maiores detalhes sobre as superfícies consideradas na dissertação foram dados nos métodos do trabalho.

A Figura 56 mostra um comparativo da fração volumétrica média e desvio padrão dos sólidos global (tanto parede interna como externa) no estado estabilizado ao longo do tempo. Para o caso 3.1, é apresentada a fração volumétrica média global no tubo central e no tubo lateral separadamente. Nos casos 3.1 e 3.2 somente se apresenta a média global no tubo lateral, uma vez que não há tubo central nesses casos.

Na Figura 56a se observa que os tubos laterais dos casos 3.2 e 3.3 apresentam uma maior concentração de sólidos do que o tubo lateral do caso 3.1, sendo que neste último caso existe uma alta instabilidade e a concentração de sólidos é desviada para o tubo central, que apresenta uma alta concentração de sólidos em contato com ele. Pode-se observar ainda, nesta figura, que os casos 3.2 e 3.3 são mais estáveis ao longo do tempo do que o caso 3.1, uma vez que as curvas de fração volumétrica média tanto do tubo central quanto no tubo lateral variam ao longo do tempo, mesmo após 25,0 segundos de simulação.

FIGURA 56 - Comparativo da média transiente e Desvio Padrão global dos sólidos no estado estabilizado, para os casos 3.1, 3.2 e 3.3.



Fonte: AUTOR (2016).

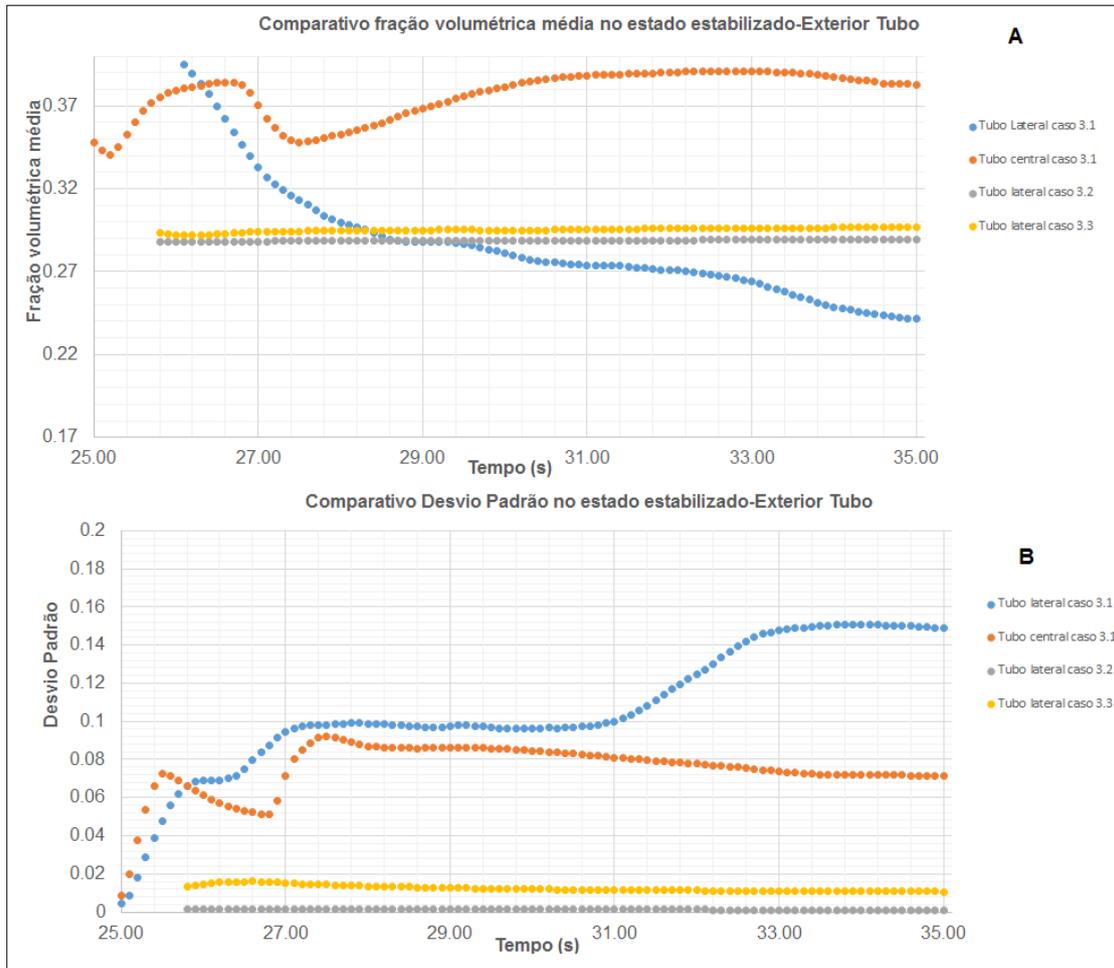
A Figura 56b mostra o desvio padrão, e se observa que existe um desvio padrão maior no caso 3.1 do que nos demais. O menor desvio padrão foi observado para o caso 3.2. Esta análise indica que uma maior renovação de sólidos em contato com os tubos ocorre no caso 3.1, principalmente no tubo lateral, onde o desvio padrão é o maior entre todos.

Sendo assim, no comparativo global, no caso 3.1 existe maior renovação de sólidos para os tubos laterais. Porém, a fração de sólidos média em contato com a tubulação é em muito reduzida ao se comparar com os demais casos. Maior contato das partículas com as paredes dos trocadores térmicos foi apresentado pelo caso 3.2, ou seja, maior média de fração volumétrica nas superfícies das paredes entre todos os analisados.

A Figura 57 mostra um comparativo da fração volumétrica e desvio padrão dos sólidos, na superfície exterior da parede dos tubos de troca térmica. Na Figura 57a se observa que após 29 segundos, a concentração de sólidos em contato com a parede externa dos tubos de troca térmica é maior para os casos 3.2 e 3.3 quando se analisam apenas os tubos laterais. Para o caso 3.1, se observa que o sistema é mais instável (maior desvio padrão, Figura 57b) e os sólidos tem pouco contato com as paredes dos tubos laterais de troca térmica, pois os sólidos são desviados maioritariamente para as paredes do tubo central. Assim, analisando o perfil axial de concentração de sólidos nas paredes externas dos tubos laterais, confirma-se que há maior contato dos sólidos para o caso 3.2 se comparado ao 3.1.

A Figura 57b compara o desvio padrão da fração volumétrica de sólidos. Se observa que, o desvio padrão é majoritariamente acentuado nas superfícies exteriores dos tubos laterais e central do caso 3.1 e menor nos casos 3.2 e 3.3. Isto indica que, no caso 3.1 existe uma maior renovação de sólidos para esta região.

FIGURA 57 - Comparativo da média transiente e Desvio Padrão na região exterior, dos sólidos no estado estabilizado, para os casos 3.1, 3.2 e 3.3.

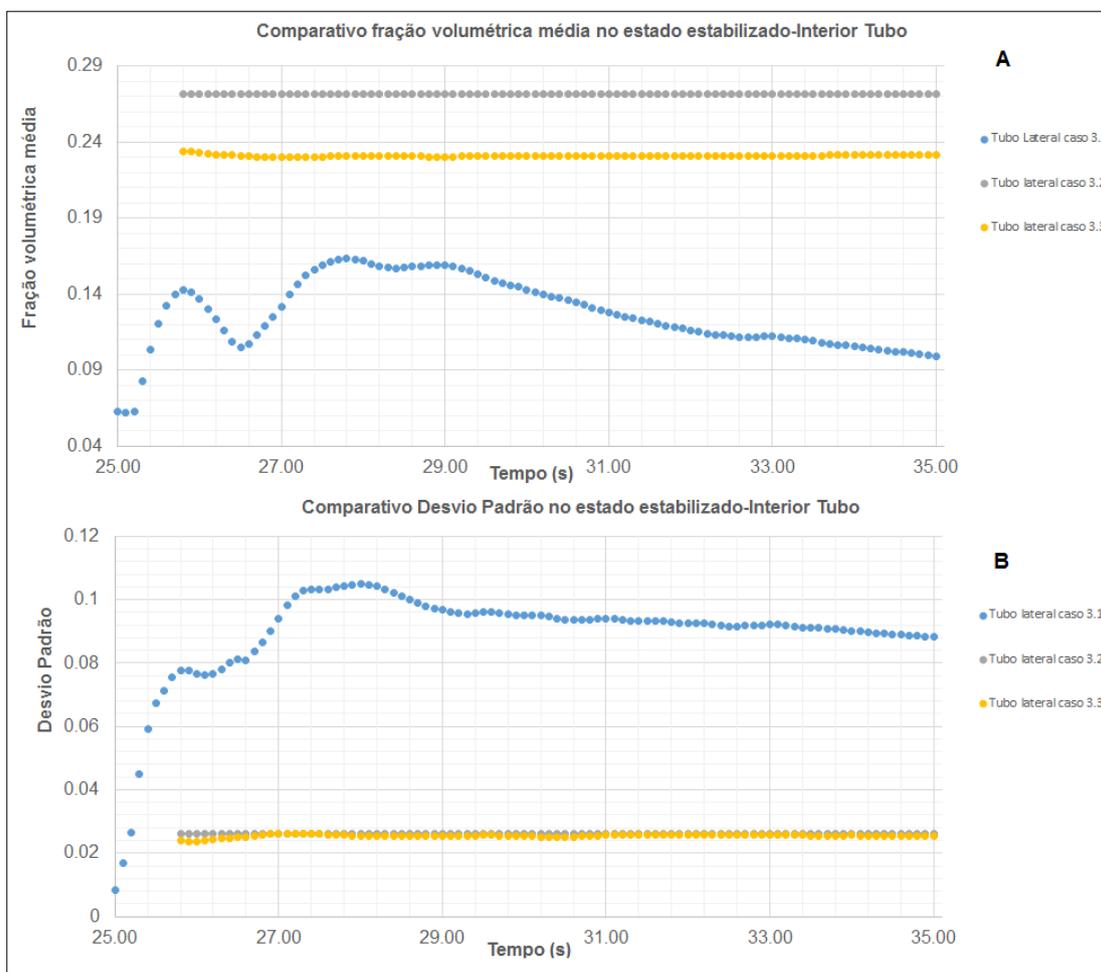


Fonte: AUTOR (2016).

A Figura 58 mostra um comparativo da fração volumétrica e desvio padrão dos sólidos no estado estabilizado na superfície interior da parede dos tubos de troca térmica. A Figura 58a, mostra que, na superfície interior dos tubos de troca térmica laterais, os sólidos estão mais concentrados no caso 3.2. Isto significa que o contato direto das partículas com os tubos de troca térmica é mais acentuado para o caso 3.2 na região central ao ser comparado com todos demais casos.

A Figura 58b compara o desvio padrão, mostrando que é majoritariamente acentuado nas superfícies internas dos tubos laterais do caso 3.1 e menor nos casos 3.2 e 3.3. Por conseguinte, no caso 3.1 existe maior renovação de sólidos para esta região.

FIGURA 58 - Comparativo da média transiente e Desvio Padrão na região interna, dos sólidos no estado estabilizado, para os casos 3.1, 3.2 e 3.3.



Fonte: AUTOR (2016).

Em suma, o comparativo global ou nas superfícies internas e externas separadamente indica que a maior renovação de sólidos foi apresentada pelo caso 3.1. Porém, a maior fração volumétrica média foi obtida para os casos 3.2 e 3.3. Deste modo, o contato direto das partículas de catalisador com os tubos de troca térmica foi apresentado majoritariamente nos casos 3.2 e 3.3.

YAO et al. (2014, b) obtiveram maior transferência de calor para a proposta de intensificação (caso 3.2) ao compará-la experimentalmente com o resfriador convencional (caso 3.1). Os autores atribuíram a melhoria à renovação de sólidos (de pacotes de sólidos) na região da parede. Porém, a hidrodinâmica simulada indicou que a explicação para a melhoria reportada pelo trabalho de YAO et al. (2014, b) estaria no maior contato existente entre a fase sólida e a parede das tubulação lateral para a proposta de intensificação (caso 3.2). Para tanto, os efeitos do tubo central do caso convencional

(caso 3.1) devem ser desprezados na análise, já que o mesmo apresentou tanto altos níveis de fração volumétrica de fase sólida como alto desvio padrão na parede. A justificativa para isso seria que a tubulação central não teria área suficiente para compensar a melhoria introduzida pela proposta de intensificação.

As variáveis analisadas das simulações indicaram que o tubo central do resfriador convencional apresentou os melhores parâmetros hidrodinâmicos no sistema. Esta característica levanta a questão de se não valeria a pena incluir o tubo central na proposta de intensificação, pois segundo as simulações grande parte dos sólidos do caso 3.2 escoou nessa região, que recebe as partículas recirculadas. Os autores da proposta (YAO et al. 2014, b) não incluíram o tubo central para evitar que atrapalhasse o processo de circulação e reduzisse a renovação de pacotes de partículas nas tubulações laterais. Porém, o sistema com tubo central e distribuição dupla não foi testado experimentalmente. A simulação e avaliação dessa proposta podem ser feitas em trabalhos futuros.

As hipóteses levantadas aqui para os efeitos hidrodinâmicos sobre o coeficiente de transferência de calor no sistema precisariam naturalmente de comprovação, o que poderia ser feito através de simulações de transferência de calor e medidas experimentais. Além disso, a condição de contorno considerada adotada para a fase sólida na parede foi de não escorregamento. Esta condição de contorno pode ter influência sobre as análises realizadas aqui. Assim, a simulação considerando coeficiente de especularidade na parede foi proposta como sugestão para trabalhos futuros.

Comparando as simulações 3.2 e 3.3 observamos que houve diferenças no desvio padrão e média de fração de sólidos no contato com as paredes, apesar de não ter ocorrido grandes diferenças nos campos e distribuição de sólidos, como já indicado. Os valores estabilizados foram muito próximos tanto no global como na parede exterior. No caso global, os resultados indicam maior contato dos sólidos com as paredes para o caso 3.2 e maior renovação de sólidos para o caso 3.3 (maior desvio padrão). Este comportamento ocorre porque a fração volumétrica média para a parede interna (centro) é consideravelmente maior no caso 3.2, apesar de ser pouco menor na parede externa. Caso o contato com os sólidos tenha de fato importância relativa maior do que a renovação para os casos analisados, o distribuidor em anel passa a ter papel relevante no aumento de transferência de calor no sistema, mas essa hipótese ainda carece de futuras comprovações.

Trabalhos futuros também poderiam avaliar através de simulações o papel da posição radial do anel e da altura da entrada de realimentação de sólidos nas análises aqui realizadas.

## 5. CONCLUSÕES

As simulações sem realimentação de sólidos (casos 1.1 e 1.2) indicaram que de fato a fase particulada era arrastada para fora do domínio computacional, característica esperada devido ao regime de operação dos resfriadores em que a presente dissertação se baseou. As simulações também indicaram que a presença de distribuidor em anel tende a canalizar o ar de fluidização e a fase sólida para o centro do sistema.

As simulações com realimentação de sólidos e sem tubos internos ao domínio computacional levaram à comportamentos similares de escoamento da fase sólida, independentemente de qual distribuidor foi utilizado na base do leito para a inserção do ar de fluidização (caso 2.1 e 2.2). Assim, ressaltaram a importância de incluir internos à coluna para simulação, emulando os tubos de troca térmica, de modo a avaliar os efeitos da distribuição no sistema.

As simulações realizadas com tubo(s) interno(s) para emular os feixes de tubos dos resfriadores e com realimentação de sólidos indicaram que a configuração tradicional de resfriador (caso 3.1) possuía grande heterogeneidade na distribuição dos sólidos no sistema, ou seja, houve indicação de má mistura das fases no processo de escoamento. Além disso, havia baixa fração volumétrica em contato com a parte de dentro da tubulação em torno do eixo do sistema (“feixe de tubos”), sendo um indicativo negativo para a troca de calor no sistema, pois haveria redução do contato sólido-parede do trocador nessa região.

As simulações indicaram uma explicação hidrodinâmica distinta daquela de YAO et. al, (2014b; 2015) para o fato de que a proposta de intensificação dos autores venha a ter maior coeficiente global de transferência de calor do que o resfriador tradicional. Na explicação dada originalmente, a responsável pela melhoria seria a renovação de pacotes de sólido em contato com os trocadores de calor. As simulações da dissertação sugeriram que a observação experimental seria devido ao maior contato sólido-parede. Naturalmente, a comprovação desta hipótese depende da importância relativa dos fatores envolvidos para transferência de calor e pode vir a ser comprovada por simulações com

solução para a parte térmica na modelagem e medidas experimentais que avaliem o contato de sólidos reportado.

Em conclusão, uma comparação entre os resultados das simulações de um resfriador tradicional (caso 3.1) e a proposta para intensificação de coeficiente de troca térmica (casos 3.2 e 3.3) indicou que estes últimos possuíram um maior tempo de contato dos sólidos com as paredes dos tubos de troca térmica, portanto, em termos de escoamento gás- sólido, resultaram os mais eficientes.

Em suma, a dissertação contribuiu para análise da hidrodinâmica de resfriadores de catalisador, equipamentos pouco estudados na literatura. A partir daí, concebeu hipótese para explicar o funcionamento da proposta de intensificação presente na literatura, o que certamente é o ponto chave para o desenvolvimento do processo, constituindo na maior contribuição do presente trabalho.

## 6. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

A falta de estudos sobre este tipo de equipamentos motivou o desenvolvimento deste trabalho de pesquisa, como uma forma de contribuir ao novo conhecimento sobre um equipamento chave dentro da operação industrial nas refinarias e outros processos produtivos. Mesmo que as simulações não foram feitas em 3D tentando simular uma operação industrial real, este trabalho significou um ponto de partida para os posteriores estudos e acrescentar o pouco conhecimento respeito a este tema.

Ainda deverá ser dada a continuidade aos estudos sobre condições de contorno. A alteração da condição de contorno para a fase sólida na parede pode alterar as análises e conclusões do trabalho, sendo necessário avaliar a sensibilidade da hidrodinâmica e do conjunto de fatores *contato e renovação de sólidos com a parede* frente a esse fator. Trabalhos futuros poderão definir o coeficiente de especularidade como condição de contorno e testar a sensibilidade das respostas frente ao parâmetro.

A inclusão da equação da energia nas simulações poderá ser desenvolvida para verificar os efeitos de transferência de calor parede-leito fluidizado. Na continuidade de pesquisas sobre o tema, análises da influência da temperatura no sistema seriam ponto chave, até mesmo para comprovar conclusões e discussões da presente dissertação. Além disso, sugere-se simular geometrias com uma fidelidade maior à realidade (geometrias em 3D).

Outra motivação que surge a partir deste trabalho é a busca de melhorias dentro das geometrias estudadas ou testar novas modificações para garantir a intensificação de troca térmica, abrindo possibilidades para desenvolvimento de trabalhos futuros em esta linha de pesquisa.

Trabalhos futuros poderão avaliar o efeito de alguns parâmetros geométricos na hidrodinâmica e comportamento térmico do sistema, tais como: raio do anel de distribuição e posição da entrada de recirculação de sólidos. Além disso, poderiam avaliar a proposta desta dissertação para inclusão de tubo central na configuração proposta para intensificação de YAO et. al. (2014b).

## 7. REFERÊNCIAS

- 1) ALMEIDA MARTINS, C. **Simulação do perfil axial de pressão na coluna Riser de um leito fluidizado circulante**. Dissertação de Mestrado. Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Departamento de Engenharia Mecânica. 21-60p., 2015.
- 2) ANDERSON, T. B.; JACKSON, R. Fluid mechanical description of fluidized beds. Equation of motion. **Indust. Engng. Chem. Fundam.**, Vol. 6, pp. 527-239, 1967.
- 3) ANSYS ICEM CFD Help Manual. **ANSYS, Inc., Canonsburg, PA. 2012.**
- 4) BARBOSA, A. C. **Simulação de reações de Craqueamento catalítico e térmico em riser industrial**. Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química. 58p. 2012.
- 5) BARREIRA MORENO, V.M. **Estudio Hidrodinámico de um Lecho Fluidizado**. Proyecto de fin de carrera. Universidad Carlos III de Madrid. Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos.12-112 p. 2007.
- 6) BASU, P. **Combustion and Gasification in Fluidized Beds**. *Ed.Taylor& Francis, Boca Raton-U.S.A*, 473 p. 2006.
- 7) BENYAHIA, S.; ARASTOPOUR, H.; KNOWLTON, T.M.; MASSAH, H. Simulation of particles and gas flow behavior in the riser section of a circulating fluidized bed using kinetic theory approach for the particulate phase. **Powder Technology**. Vol. 112, p. 24 – 33, 2000.
- 8) BLANCO LABRADO, M. **Estúdio Numérico de las Características Hidráulicas de un Diafragma Multiorificio**. Proyecto de fin de carrera. Universidad Carlos III de Madrid. Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos.17-22 p. 2010.
- 9) D. GELDART & ABRAHAMSEN A.R., **Powder Technol.**, 19, 133 (1978); 26,

- 34, 47 (1980); in *Fluidization III*, J.R. GRACE & J.M. MATSEN, eds., p.453, Plenum, New York, 1980.
- 10) D. S. J. JONES, & P. R. PUJADÓ, **Handbook of petroleum processing** (Springer, The Netherlands, 2008).
- 11) ERGUN. Fluid Flow through Packed Columns. **Chem Eng. Prog.** 48(2). 89-94. 1952.
- 12) FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. 3. Ed. Berlin, Germany: Springer, p. 583, 2002.
- 13) G. C. LOPES, L. M. DA ROSA, M. MORI, J. R. NUNHEZ, & W. P. MARTIGNONI, CFD study of industrial FCC risers: the effect of outlet configurations on hydrodynamics and reactions, **International Journal of Chemical Engineering**, 193639, 2012, 1-16.
- 14) GELDART, D. Types of gas fluidization. **Powder Technology**, v. 7. pp. 285-92, 1973.
- 15) GIDASPOW, D. **Multiphase Flow and Fluidization** – Continuum and Kinetic Theory Descriptions, Academic Press, Inc., San Diego, California, 467p. 1994.
- 16) GOLDSCHMIDT, M.; BEETSTRA, R.; KUIPERS, J. Hydrodynamic modelling of dense gas-fluidized beds: comparison and validation of 3D discrete particle and continuum models, **Powder Technology**, Vol. 142, pp. 23 – 47, 2004.
- 17) J.A.CAPOTE, D.ALVEAR, O.V.ABREU, M.LÁZARO, P.ESPINA. Influencia del Modelo de Turbulencia y del Refinamiento de la discretización espacial en la exactitud de las simulaciones computacionales de incendios. **Revista Internacional de Métodos Numéricos para el Cálculo y Diseño en Ingeniería**, 227-245, 2008, 1-19.
- 18) J. L. URPI, **Tecnología y margen de refino del petróleo**. Editora Díaz de Santos, Espanha, 2008.

- 19) L. ZHOUPING, Catalyst cooling techniques in heavy oil FCCU, **Petroleum Refinery Engineering**, 25(6), 1995, p 44-48.
- 20) HERNANDEZ RUELAS, P. **Estudio Hidrodinámico de la Fluidización de partículas cilíndricas**. Tesis de Maestría. Instituto Tecnológico de Durango. Departamento de Ingeniería Química. 8-26 p. 2009.
- 21) HODAPP, M. J. **Simulação trifásica por técnicas de CFD da combustão de carvão mineral em leito fluidizado**. Tese de Doutorado. Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, 172p., 2012.
- 22) HOWARD, J. R., **Fluidized bed technology: Principles and Applications**, 1989.
- 23) HUILIN, L., GIDASPOW, D., Hydrodynamic Simulation of Gas – Solid Flow in a Riser using Kinetic Theory of Granular Flow, **Chemical Engineering Science**, n. 95, p. 1-13, 2003.
- 24) KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. **Fluidization Engineering**. New York: John Wiley & Sons, Butterworth-Heinemann, 2nd Ed, 1991, 491p.
- 25) LUNA, C. M. R., **Estudo numérico de modelos de arrasto e do coeficiente de restituição no escoamento gás-sólido em leito fluidizado**. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica), Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá – UNESP, Guaratinguetá, 2013.
- 26) LÓPEZ C., P. **Simulación Numérica de un Lecho Fluido Bidimensional para la Determinación de la Velocidad Mínima de Fluidización**. Proyecto de Fin de Carrera. Universidad Carlos III de Madrid. Escuela Politécnica Superior Área de Ingeniería Térmica. 82p. 2009.
- 27) MARINI, F. **Simulação de um leito fluidizado aplicando a técnica CFD baseada na teoria cinética do escoamento granular**. Dissertação de Mestrado.

- Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química. 75p. 2008.
- 28) MASSARANI, G., **Problemas em sistemas particulados**, 1 ed., Edgard Blucher Ltda, São Paulo, 1984.
- 29) J. R. GRACE, & F. TAGHIPOUR, Verification and validation of CFD models and dynamic similarity for fluidized beds, **Powder Technology**, 139, 2004, 99-110.
- 30) J. R. GRACE, A. A. Avidan, & T. M. Knowlton, **Circulating fluidized bed** (*Chapman and Hall*, London, 1997).
- 31) ROTAVA, E., **Simulações sub-malha com modelo de dois fluidos do escoamento gás-sólido em risers de leitos fluidizados circulantes**. Dissertação de mestrado, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 80p., 2008.
- 32) SANTOS, D. A. **Contribuições ao estudo da fluidodinâmica em leito de jorro: Estudos experimentais e de simulação via CFD**. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Uberlândia. 106p. 2011.
- 33) SINCLAIR, J.L.; JACKSON, R. Gas-particle flow in a vertical pipe with particle interactions. **AIChE Journal**, Vol. 35, pp. 1473-1486, 1989.
- 34) SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T. **MFIX Documentation theory guide**. U.S. Department of Energy, West Virginia, 1993.
- 35) SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T.J. Computer simulation of bubbles in a fluidized bed, **AIChE Symp.** V.85, p.22 – 31, 1989.
- 36) WANG, D.J. Lift forces on a cylindrical particle in a plane poiseuille flow of shear thinning fluids. **Physics of Fluids**, 2267-2278, 2003.
- 37) WEN, C.Y.; YU, Y. H. Mechanics of Fluidization, Chem. **Eng. Prog. Symp.** Series, v.62, p. 100, 1966.

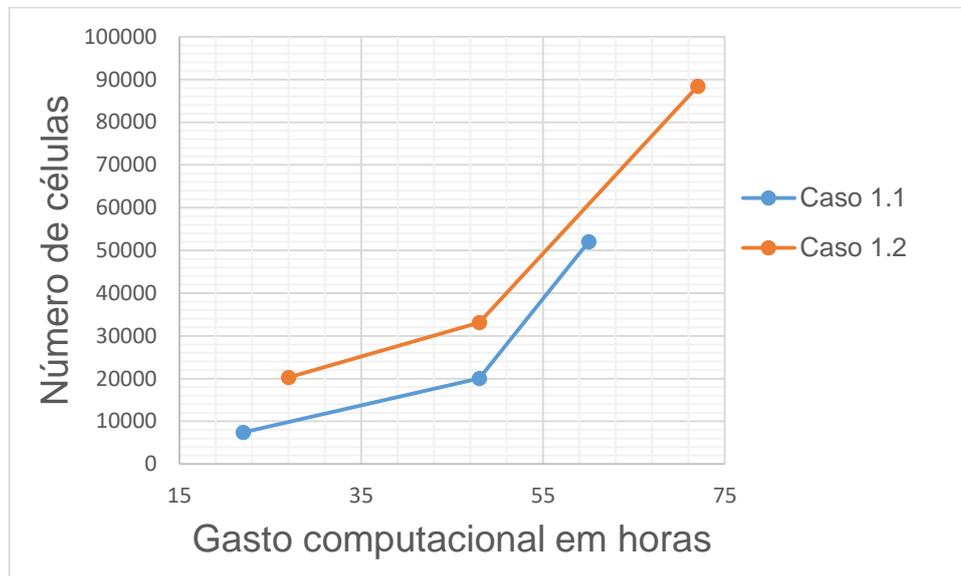
- 38) X. YAO, F. SUN, Y. ZHANG, C. LU, Experimental validation of a new heat transfer intensification method for FCC external catalyst coolers, **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, 75, 2014, 19-30.
- 39) X. YAO, Y. ZHANG, & C. LU, Systematic study on heat transfer and surface hydrodynamics of a vertical heat tube in a fluidized bed of FCC particles, **AIChE Journal**, 61(1), 2014, 68-83.
- 40) X. YAO, Y. ZHANG, C. LU, & X. HAN, Investigation of the heat transfer intensification mechanism for a new fluidized catalyst cooler, **AIChE Journal**, 61(8), 2015, 2415-2427.
- 41) Y. BAI, Heat transfer in the circulating fluidized bed of a commercial catalyst cooler, **Powder Technology**, 111, 2000, 83-93.

## APÊNDICE - A

### TEMPO COMPUTACIONAL REQUERIDO PARA AS SIMULAÇÕES

Os primeiros resultados com respeito aos testes de malhas mostram a dependência de campos com o tempo em cada malha e o número de células empregados na resolução de equações. Pode-se observar que, quanto maior o número de células da malhas, maior é o tempo computacional empregado para fornecer a solução, o qual concorda com os resultados esperados. A Figura 59 apresenta o gasto computacional para cada teste de malha, empregada para a análise dos casos 1.1 e 1.2, respectivamente.

FIGURA 59 - Gasto computacional para os casos 1.1 e 1.2



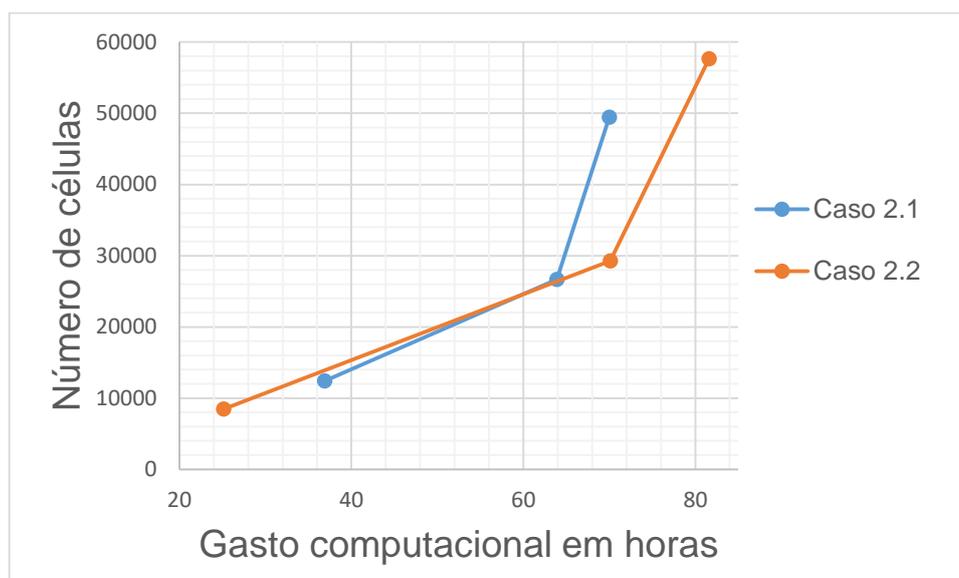
Fonte: AUTOR (2016).

Dependendo do tipo de processo (serial o paralelo) que seja usado e do número de núcleos usados para a resolução das equações, o tempo de requerido para simular pode ser acrescentado ou não.

Devido à inserção da UDF para caracterizar a realimentação dos sólidos, o tempo requerido para a resolução das equações aumentou notavelmente. Isto significa que, enquanto mais funções de cálculos sejam inseridas dentro do programa, pode aumentar o gasto computacional para as simulações.

A Figura 60 mostra o gasto computacional requerido para as simulações dos casos 2.1 e 2.2, respectivamente.

FIGURA 60 - Gasto computacional para os casos 2.1 e 2.2



Fonte: AUTOR (2016).

Além da UDF para a caracterização da realimentação dos sólidos, nos casos 3.1, 3.2 e 3.3 foram inseridos tubos de troca térmica nas geometrias, o que acrescentou o tempo requerido para simular, assim que o domínio computacional destes equipamentos foram menores do em tamanho de malha do que os casos anteriores. A Tabela 17 mostra o gasto computacional para as três malhas consideradas

TABELA 17 - Gasto computacional para o caso 3

<b>Caso 3: Resfriador de catalisador sem considerar realimentação de sólidos</b>	<b>Distribuidor de ar</b>	<b>Tipo de malha</b>	<b>Tamanho de malha (número de células)</b>	<b>Gasto computacional em horas</b>
	<b>Prato perfurado central e distribuidor em anel (caso 3.2)</b>	Menos refinada	16 600	54
		Malha Intermediária	27 094	72
		Malha refinada	51 003	98
<b>Resfriador de catalisador com oito tubos de troca térmica</b>	<b>Prato perfurado central (caso 3.3)</b>	Menos refinada	17 303	48
		Malha Intermediária	26 179	65
		Malha refinada	51 108	95
<b>Resfriador de catalisador com nove tubos de troca térmica</b>	<b>Com distribuidor (caso 3.1)</b>	Menos refinada	20 340	52
		Malha Intermediária	29 213	75
		Malha refinada	63 935	94

Fonte: AUTOR (2016).

## ANEXO - A

### ERROS NA MODELAGEM (SANCHES E C.FURLAN, 2007)

#### Conceito de Erro

##### Introdução

A noção de erro está presente em todos os campos do Cálculo Numérico. De um lado, os dados em si, nem sempre são exatos, e de outro lado, as operações sobre valores não exatos propagam esses erros a seus resultados. Finalmente, os próprios métodos numéricos, frequentemente métodos aproximados, buscam minimizar os erros procurando resultados o mais próximo possível do que seriam valores exatos.

Erro é a diferença entre o valor exato e o valor apresentado.

##### Erros na fase da modelagem

Ao se tentar representar um fenômeno do mundo físico por meio de um método matemático raramente se tem uma descrição correta deste fenômeno. Normalmente são necessárias várias simplificações do mundo físico para que se tenha um modelo.

Exemplo: Estudo do movimento de um corpo sujeito a uma aceleração constante. Tem-se a seguinte equação:

$$d = d_0 + v_0 t + \frac{1}{2} \alpha t^2$$

Onde:

$d$  : distância percorrida.

$d_0$  : distância inicial.

$v_0$  : velocidade inicial.

$t$  : tempo.

$\alpha$  : aceleração.

Determinar a altura de um edifício com uma bolinha de metal e um cronometro: 3 segundos.

$$d = 0 + 0 \times 3 + \frac{1}{2} \times 9.8 \times 3^2$$

Este resultado é confiável?

- Fatores não considerados: resistência do ar, velocidade do vento, etc.

-Precisão dos dados de entrada: se o tempo fosse 3.5 segundos então a distância tenderia a 60.025 m. Variação de 16.7% no cronometro.

### Erros na fase da resolução

Para a resolução de modelos matemáticos muitas vezes torna-se necessária a utilização de instrumentos de cálculo que necessitam, para o seu funcionamento, que sejam feitas certas aproximações. Tais aproximações podem gerar erros, tais como: conversão de bases, erros de arredondamento e erros de truncamento.

### Erros absolutos e relativos.

*Erro absoluto:* é a diferença entre o valor exato de um número N e o seu valor aproximado N':

$$N = N' + E_{An} (N > N' \rightarrow E_{An} > 0)$$

$$N < N' \rightarrow E_{An} < 0$$

$$E_{An} = N - N' \text{ **Erro absoluto**}$$

*Erro relativo* é definido como o erro absoluto dividido pelo valor aproximado:

$$ER_N = \frac{E_{An}}{N'} = \frac{N - N'}{N'}$$

### Erros de arredondamento.

Ao se aplicar um método numérico, os erros devidos ao valores iniciais, intermediários e finais conduzem a um erro global (diferença entre o exato e o obtido) também chamado de arredondamento.

Erros iniciais são cometidos no arredondamento dos dados iniciais. Os erros intermediários são decorrentes dos erros cometidos durante a aplicação do método numérico e os erros finais decorrentes da apresentação final do resultado.

Os tipos de arredondamento mais conhecidos são:

- Arredondamento para baixo ou por falta.
- Arredondamento para cima ou por excesso.

Arredondamento para o número de máquina mais próximo.

*Critérios de arredondamento:* No cálculo manual ao registrar um valor aproximado, costuma-se usar a seguinte regra:

- Somar meia unidade após a última casa decimal a conservar.
- Desprezar as demais casas.

Deve-se ressaltar a importância de saber-se o número de dígitos significativos do sistema de representação da máquina que está sendo utilizada para que se tenha a noção da precisão do resultado obtido.

Além da precisão decimal, o cálculo do chamado Épsilon da máquina nos dá uma ideia da exatidão da máquina.

### Erros de truncamento.

São erros provenientes da utilização de processos que deveriam ser infinitos ou muito grandes para a determinação de um valor e que, por razões práticas, são truncadas.

Estes processos infinitos são muito utilizados na avaliação de funções matemáticas, tais como, exponenciação, logaritmos, funções trigonométricas e várias outras que uma máquina pode ter.

Exemplo: Uma máquina poderia calcular a função seno(x) e exponencial (x) utilizando as seguintes técnicas.

$$\text{sen}(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots$$

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots$$

Fazendo o truncamento:

$$\text{sen}(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots + (-1)^n \frac{x^n}{n!}$$

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!}$$

A solução é a de interromper os cálculos quando uma determinada precisão é atingida.

De uma maneira geral, pode-se dizer que o erro de truncamento pode ser diminuído até chegar a ficar da ordem do erro de arredondamento; a partir desse ponto, não faz sentido diminuir-se mais, pois o erro de arredondamento será dominante.

## ANEXO - B

### MÉTODO DE VOLUMES FINITOS

O primeiro passo na aplicação da dinâmica computacional dos fluidos consiste na discretização espacial do domínio para depois calcular sobre a mesma a aproximação numérica dos escoamentos convectivos e difusivos.

Podemos classificar os distintos esquemas de discretização em três categorias principais: Diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos. Todos eles requerem uma previa discretização espacial geométrica para poder resolver as equações que governam o escoamento. Existem dois tipos de malha:

#### **Malha estruturada**

A vantagem das malhas estruturadas consiste na ordenação dos elementos em memória, pois desta forma, os acessos às células vizinhas resulta rápido e fácil, é só somar e restar um valor ao valor índice correspondente.

As malhas estruturadas podem ser representadas num sistema cartesiano ou curvo. No primeiro caso, as linhas que configuram as células são paralelas ao sistema de eixos coordenados. No entanto, nos sistemas curvos, os sistemas de coordenados é deformado e adaptado ao objetivo de estudo.

Por outro lado, também pode se classificar em malhas ortogonais e malhas não ortogonais. As malhas ortogonais são aquelas nas quais todas as linhas que a configuram interpenetram-se entre elas mesmas com um ângulo de  $90^\circ$ . Alguns escoamentos podem ser considerados com axisimétricos, nesses casos, as equações de fluxo ou escoamento podem ser expressadas em coordenadas polares invés de cartesianas.

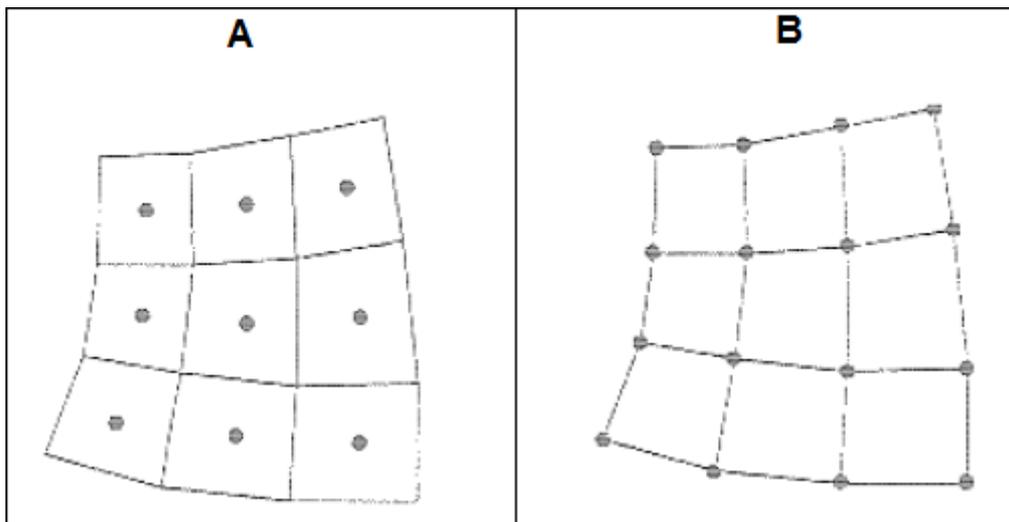
Outra metodologia relacionada com os malhados estruturais é a *técnica da quimera*. A ideia básica é gerar no começo, as malhas separadas ao redor de cada um das entidades geométricas no domínio. Depois, as malhas combinam para produzir sobreposições dos elementos. O mais importante é que a transferência precisa de quantidades entre as diferentes malhas e a região onde se produz a sobreposição. A vantagem desta metodologia de malhado é o que pode gerar malhas para problemas particulares sem gerar malhas particulares, independentes umas das outras. Por outro lado, o problema desta técnica é a conservação das propriedades das equações que

governam o fluido, pois não são satisfeitas exatamente na região onde se produz a sobreposição.

**Malhas não estruturadas.**

O segundo tipo de malhas são as não estruturadas. Estas oferecem uma grande flexibilidade no tratamento de geometrias complexas. A principal vantagem destes malhados não estruturados reside nos triângulos (2D) ou nos tetraedros(3D), podem-se gerar automaticamente, independente da complexidade do domínio. Na prática, é necessário determinar uns parâmetros adequados para obter uma boa qualidade da malha. O tempo requerido por um computador para gerar uma malha não estruturada é muito menor do que uma estruturada. Outra vantagem deste tipo de metodologia é que a solução obtida depende do refinamento da malha. A desvantagem é o espaço que a malha ocupa num computador, pois requer mais memória que as malhas estruturadas.

FIGURA 61- A) Malhas com nós centrados nos elementos. B) Malha com nós centrados nos vértices.



Fonte: MODIFICADO (STORLI, 2007).

**Método de volumes finitos em 2D**

Consideramos a equação de conservação C.1 aplicado sobre um volume de controle:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_j} U d\Omega + \oint_{ABCD} (f dy - g dx) = \int_{\Omega_j} Q d\Omega \dots\dots\dots(C.1)$$

Onde a derivada temporal pode ser extraída da integral sempre que seja considerada o caso do domínio e da malha fixa, f e g representam os componentes cartesianos do vetor de fluxo ou escoamento F. No momento de discretizar, estas integrais fornecem a seguinte expressão:

$$\frac{\partial}{\partial t}(U\Omega)_{ij} + \sum_{ABCD}[f_{AB}(yB - yA) - g_{AB}(xB - xA)] = (Q\Omega)_{ij} \dots\dots\dots(C.2)$$

$$\Omega_{ABCD} = \frac{1}{2} / X_{AC} \wedge X_{BD} / \dots\dots\dots(C.3)$$

**Avaliação dos escoamentos convectivos**

A avaliação dos escoamentos  $f_{AB}$  e  $g_{AB}$  depende do esquema escolhido também como da localização das variáveis de escoamento respeito à malha. Como é habitual nos métodos numéricos em mecânica de fluidos podemos distinguir entre esquemas centrados e aqueles que tem *upwinding*. Os primeiros requerem estimações locais de escoamento enquanto os últimos determinam os fluxos de acordo com a direção de propagação das componentes ondulatórias.

Esquema central- Centrado na célula.

1. - Média dos fluxos

$$f_{AB} = \frac{1}{2}(f_{i,j} + f_{i,j+1}) \dots\dots\dots(C.4)$$

$$f_{ij} = f(U_{i,j}) \dots\dots\dots(C.5)$$

2. – O fluxo dos médios

$$f_{AB} = \frac{1}{2}(U_{i,j} + U_{i,j+1}) \dots\dots\dots(C.6)$$

3. – Outra média dos fluxos

$$f_{AB} = \frac{1}{2}(f_A + f_B) \dots\dots\dots(C.7)$$

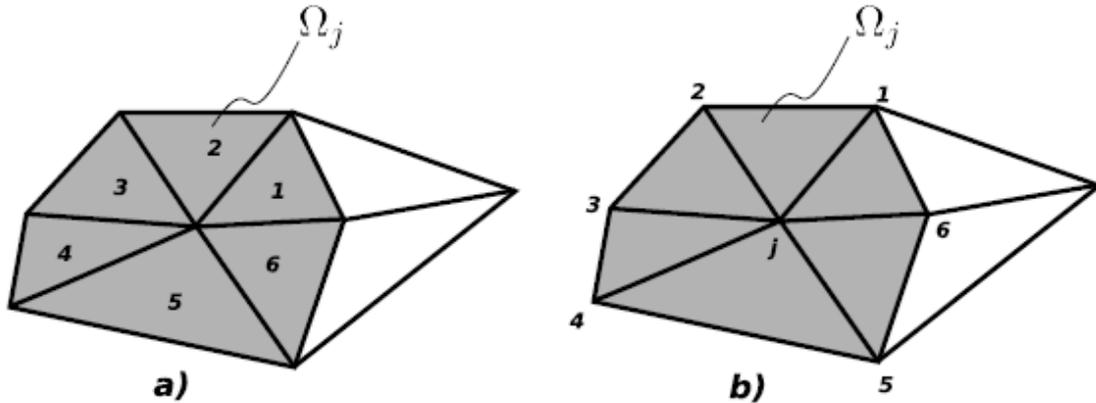
$$f_A = f(U_A) \dots\dots\dots(C.8)$$

Com

$$U_A = \frac{1}{4}(U_{i,j} + U_{i,j+1} + U_{i+1,j-1} + U_{i,j-1}) \dots\dots\dots(C.9)$$

$$f_A = \frac{1}{4}(f_{i,j} + f_{i,j+1} + f_{i+1,j-1} + f_{i,j-1}) \dots\dots\dots(C.10)$$

FIGURA 62 – Malhas bidimensionais de volumes finitos. A) Formulação centrada nas células. B) Formulação centrada nos vértices.



Fonte: MODIFICADO (STORLI, 2007).

Tanto a equação C.6 como a equação C.7 são aproximações diretas ao fluxo  $f_{AB}$ . Em especial esta última equivale a integrar o fluxo sobre cada superfície usando a regra do trapézio:

$$\int_{AB} f dy = \frac{1}{2}(f_A + f_B)(y_B - y_A) \dots\dots\dots(C.11)$$

$$\oint_{ABCD} F \cdot dS = \frac{1}{2}[(f_A - f_C)\Delta y_{DB} + (f_B - f_D)\Delta y_{AC} - (g_A - g_D)\Delta x_{AC}] \dots\dots\dots(C.12)$$

Isto equivale ao método de Galerkin sobre os elementos triangulares ou quadrangulares. Para o método dos volumes finitos centrado nas células usando esquemas *upwind*, o fluxo convectivo é avaliado como uma função da direção de propagação da velocidade convectiva associada. Se pensarmos no caso bidimensional, isto último pode ser expressado como:

$$A(U) = \frac{\partial F}{\partial U} = a(U)i + b(U)j \dots\dots\dots(C.13)$$

$$a(U) = \frac{\partial f}{\partial U} \quad b(U) = \frac{\partial g}{\partial U} \dots\dots\dots(C.14)$$

Considerando a Figura 58 na região superior (centrado nas células), pode se definir:

$$(F.S)_{AB} = (F.S)_{ij} \quad \text{si } (A.S)_{AB} > 0 \dots\dots\dots(C.15)$$

$$(F.S)_{AB} = (F.S)_{ij} \quad \text{si } (A.S)_{AB} < 0 \dots\dots\dots(C.16)$$

Enquanto para o caso do centrado nos vértices: tem-se

$$(F.S)_{AB} = (F.S)_{CD} \quad \text{si } (A.S)_{AB} > 0 \dots\dots\dots(C.17)$$

$$(F.S)_{AB} = (F.S)_{EF} \quad \text{si } (A.S)_{AB} < 0 \dots\dots\dots(C.18)$$

A desvantagem desta técnica está em que aumenta bastante o suporte de informação de forma desnecessária já que estão envolvidos os vértices (i-2, j) e (i, j-2).

**Esquema central sobre uma malha cartesiana.**

Se olharmos na malha da Figura 63 e a retificamos um pouco a maneira de alinhar os lados com os eixos cartesianos e colocarmos as integrais de contorno sobre a curva ABCD, encontraremos:

LADO AB

$$\Delta y_{AB} = y_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - y_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \Delta y \quad \dots\dots\dots(C.19)$$

$$\Delta x_{AB} = x_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - x_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = 0 \quad \dots\dots\dots(C.20)$$

LADO BC

$$\Delta y_{BC} = y_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - y_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = 0 \quad \dots\dots\dots(C.21)$$

$$\Delta x_{BC} = x_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - x_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = -\Delta x \dots\dots\dots(C.22)$$

LADO CD

$$\Delta y_{CD} = y_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} - y_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = -\Delta y \dots\dots\dots(C.23)$$

$$\Delta x_{CD} = x_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = 0 \dots\dots\dots(C.24)$$

LADO DA

$$\Delta y_{DA} = y_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} - y_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = 0 \dots\dots\dots(C.25)$$

$$\Delta x_{DA} = x_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = -\Delta x \dots\dots\dots(C.26)$$

$$\Omega_{ij} = \Delta x \Delta y \dots \dots \dots (C.27)$$

$$f_{AB} = f_{i+1/2j} \dots \dots \dots (C.28)$$

$$f_{BC} = f_{i, j+1/2} \dots \dots \dots (C.29)$$

$$f_{CD} = f_{i-1/2j} \dots \dots \dots (C.30)$$

$$f_{DA} = f_{i, j-1/2} \dots \dots \dots (C.31)$$

Rearranjando na Equação C.3, tem-se a expressão:

$$\Delta x \Delta y \frac{\partial U_{ij}}{\partial t} + \left( f_{i+\frac{1}{2}j} - f_{i-\frac{1}{2}j} \right) \Delta y + \left( g_{i, j+\frac{1}{2}} - g_{i, j-\frac{1}{2}} \right) \Delta x = Q_{ij} \Delta x \Delta y \dots \dots \dots (C.32)$$

$$\frac{\partial U_{ij}}{\partial t} + \frac{\left( f_{i+\frac{1}{2}j} - f_{i-\frac{1}{2}j} \right)}{\Delta x} + \frac{\left( g_{i, j+\frac{1}{2}} - g_{i, j-\frac{1}{2}} \right)}{\Delta y} = Q_{ij} \dots \dots \dots (C.33)$$

$$\frac{\partial U_{ij}}{\partial t} + \frac{\left( f_{i+1j} - f_{i-1j} \right)}{2\Delta x} + \frac{\left( g_{i, j+1} - g_{i, j-1} \right)}{2\Delta y} = Q_{ij} \dots \dots \dots (C.34)$$

Aplicando um esquema do centro nas células

$$\frac{\partial U_{ij}}{\partial t} + \frac{1}{4} \left[ \frac{2(f_{i+1j} - f_{i-1j})}{2\Delta x} + \frac{2(f_{i+1,j+1} - f_{i+1,j-1})}{2\Delta x} + \frac{2(f_{i+1,j-1} - f_{i+1,j+1})}{2\Delta x} \right] + \frac{1}{4} \left[ \frac{(g_{i,j+1} - g_{i,j-1})}{2\Delta y} + \frac{(g_{i+1,j+1} - g_{i+1,j-1})}{2\Delta y} + \frac{(g_{i-1,j+1} - g_{i-1,j-1})}{2\Delta y} \right] = Q_{ij} \dots \dots \dots (C.35)$$

Foi demonstrado que estes esquemas são de segundo ordem de precisão.

Não dependem dos valores dos fluxos  $f_{ij}$ ,  $g_{ij}$ .

Podem gerar oscilações devido ao desacoplamento das equações correspondentes a  $(i+j)$  par de aquelas onde  $(i+j)$  é ímpar. C.35 não tem esse inconveniente.

Para o caso das formulações centradas nos vértices é usado o mesmo tratamento.

### Esquemas *upwind* em malhas cartesianas

Suponhamos a Equação C.36:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + a \frac{\partial U}{\partial x} + b \frac{\partial U}{\partial y} = 0 \text{ onde } a, b > 0 \dots \dots \dots (C.36)$$

Sobre uma malha similar à representada na seção anterior, mas retificada de uma maneira que consiga-se alinhar com os eixos cartesianos. Se  $f = aU$  e  $g = bU$ , então:

$$(F.S)_{AB} = f_{ij}\Delta y = aU_{ij}\Delta y \dots\dots\dots(C.37)$$

$$(F.S)_{CD} = -f_{i-1,j}\Delta y = -aU_{i-1,j}\Delta y \dots\dots\dots(C.38)$$

$$(F.S)_{BC} = g_{ij}\Delta x = bU_{ij}\Delta x \dots\dots\dots(C.39)$$

$$(F.S)_{CD} = -g_{i,j-1}\Delta x = -bU_{i,j-1}\Delta x \dots\dots\dots(C.40)$$

Rearranjando as equações:

$$\frac{\partial U_{ij}}{\partial t} + a \frac{(U_{ij} - U_{i-1,j})}{\Delta x} + b \frac{(U_{ij} - U_{i,j-1})}{\Delta y} = 0 \dots\dots\dots(C.41)$$

### Malhas não uniformes

Garantir a precisão de segundo ordem de alguns esquemas quando as malhas envolvidas são não uniformes não é uma tarefa fácil. Não entraremos em detalhes sobre essa questão devido a que é um tema demasiadamente específico.

### **Fórmulas gerais de integração**

A diferença dos problemas onde os fluxos são homogêneos de primeiro ordem nas variáveis de estado, os problemas com difusão contem em geral fluxos difusivos que são dependentes tanto das variáveis a resolver como do seu gradiente. Para estes casos é necessário fazer uma média das derivadas das variáveis invés das variáveis mesmas. Um exemplo típico disto são as Equações de Navier Stokes que contem  $F_d = F_d(U, \nabla U)$ .

Uma forma bastante geral de resolver isto é utilizando o teorema da divergência e a integração por partes.

$$\int_{\Omega} \nabla U d\Omega = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial U}{\partial x} i + \frac{\partial U}{\partial y} j \right) d\Omega = \oint_S U dS \dots\dots\dots(C.42)$$

$$\left( \frac{\partial U}{\partial x} \right)_{\Omega} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\partial U}{\partial x} d\Omega = \frac{1}{\Omega} \oint_S U_i dS \dots\dots\dots(C.43)$$

$$\left( \frac{\partial U}{\partial y} \right)_{\Omega} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\partial U}{\partial y} d\Omega = \frac{1}{\Omega} \oint_S U_j dS \dots\dots\dots(C.44)$$

$$\left( \frac{\partial U}{\partial x} \right)_{\Omega} = \frac{1}{\Omega} \int_S U dy = \frac{1}{\Omega} \oint_S y dU \dots\dots\dots(C.45)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)_{\Omega} = -\frac{1}{\Omega} \int_S U dx = \frac{1}{\Omega} \oint_S x dU \dots \dots \dots (C.46)$$

Aplicando a regra de integração do trapézio:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)_{\Omega} &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\partial U}{\partial y} d\Omega = \frac{1}{2\Omega} \sum_l (U_l + U_{l+1})(y_{l+1} - y_l) = -\frac{1}{2\Omega} \sum_l (y_l + y_{l+1})(U_{l+1} - \\ U_l) &= \frac{1}{2\Omega} \sum_l U_l (y_{l+1} - y_{l-1}) = -\frac{1}{2\Omega} \sum_l y_l (U_{l+1} - U_{l-1}) \dots \dots \dots (C.47) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_{\Omega} &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\partial U}{\partial x} d\Omega = -\frac{1}{2\Omega} \sum_l (U_l + U_{l+1})(x_{l+1} - x_l) = \frac{1}{2\Omega} \sum_l (x_l + x_{l+1})(U_{l+1} - \\ U_l) &= -\frac{1}{2\Omega} \sum_l U_l (x_{l+1} - x_{l-1}) = \frac{1}{2\Omega} \sum_l x_l (U_{l+1} - U_{l-1}) \dots \dots \dots (C.48) \end{aligned}$$

A mesma expressão pode ser aplicada para o cálculo da área das células.

$$\begin{aligned} \Omega &= \frac{1}{2} \sum_l (x_l + x_{l+1})(y_{l+1} - y_l) = -\frac{1}{2} \sum_l (y_l + y_{l+1})(x_{l+1} - x_l) = \frac{1}{2} \sum_l x_l (y_{l+1} - \\ y_{l-1}) &= -\frac{1}{2} \sum_l y_l (x_{l+1} - x_{l-1}) \dots \dots \dots (C.49). \end{aligned}$$

## ANEXO - C

### ESQUEMA DE CÁLCULO E RESOLUÇÃO (ALMEIDA, 2015)

Para que seja possível o cálculo dos Fluxos difusivo e convectivo, é necessário o conhecimento e utilização de esquemas de interpolação.

Entre os principais esquemas de interpolação disponibilizados no programa computacional ANSYS FLUENT v14.5, têm-se os seguintes:

#### **Diferenças centrais (Central Difference Scheme – CDS):**

Utiliza a interpolação linear entre dois nós adjacentes para determinar a variável genérica transportada ( $\phi$ ) no centro de uma face do volume de controle. Na interface p de uma malha computacional,  $\phi_p$  é expresso por:

$$\phi_p = \phi_P \lambda_P + \phi_W (1 - \lambda_P) \dots \dots \dots (D.1)$$

Onde o fator de interpolação  $\lambda_P$  é definido como:

$$\lambda_P = \frac{\lambda_e - \lambda_P}{\lambda_E - \lambda_P} \dots \dots \dots (D.2)$$

Este esquema, apesar de ser de segundo ordem, pode ocasionar problemas de desacoplamento, sendo mais indicado para simulações LES (HODAPP, 2009).

#### **Upwind (Upwind Difference Scheme – UDS):**

Aproxima o valor de  $\phi_p$  por seu valor a montante da face p, por meio da Equação D.3.

$$\phi_p = \{\phi_P, \quad (\vec{v}\vec{n})_l > 0 \dots \dots \dots (D.2)$$

$$\phi_p = \{\phi_E, \quad (\vec{v}\vec{n})_l < 0 \dots \dots \dots (D.3)$$

Este esquema é de primeiro ordem, sendo, portanto, necessária malhas refinadas para a obtenção de soluções precisas. É a única aproximação que não gera resultados oscilatórios. Entretanto, é numericamente difusivo.

#### **Higher Upwind:**

Este esquema é de segunda ordem e mais preciso, umavez que introduz um termo na aproximação da série de Taylor.

$$\phi_P = \frac{3}{2}\phi_p - \frac{1}{2}\phi_w \quad \dots\dots\dots (D.4)$$

**QUICK (Quadratic Upwind Difference):**

Este esquema também é baseado no Upwind, no entanto utiliza uma expressão de terceira ordem, considerando dois pontos anteriores e um posterior à face em questão.

$$\phi_P = \frac{3}{8}\phi_E + \frac{3}{4}\phi_p - \frac{1}{8}\phi_w \quad \dots\dots\dots(D.5)$$

Para escoamentos incompressíveis, a massa específica, embora possa variar com a temperatura, é constante e, então, por definição, não vinculada à pressão. Neste caso, torna-se necessário o acoplamento pressão velocidade, o qual impõe uma restrição ao campo do escoamento: se o campo de pressão correto é aplicado às equações de quantidade de movimento, o campo de velocidade deve satisfazer a condição da continuidade.

Para tanto, alguns modelos foram propostos para acoplar a pressão e a velocidade. Esses modelos são formados por uma equação derivada da conservação da massa, que inclua um termo de pressão.

Um desses modelos é o SIMPLE, desenvolvido por Patankar e Spalding, baseado nas concepções de Chorin para escoamentos incompressíveis, que envolve os seguintes passos:

- as velocidades são corrigidas para satisfazer a equação da conservação da massa.
- as pressões são avançadas para completar o ciclo iterativo.

A representação unidimensional da conservação da massa pode ser escrita como:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^3 A}{4m^*} \left(\frac{\partial^4 p}{\partial x^4}\right)_i = 0 \quad \dots\dots\dots(D.6)$$

Onde

$$m^* = \rho v_j \Delta n_j \quad \dots\dots\dots(D.6)$$

Sendo A a área superficial e v a velocidade.

A equação da conservação da massa é uma aproximação por diferenças centrais de segundo ordem para a derivada primeira da velocidade modificada por uma derivada quarta da pressão, a qual age na redistribuição da influência da mesma.