



Análise computacional da influência do coeficiente de especularidade e de restituição em leito fluidizado circulante

Palavras-Chave: fluidodinâmica computacional, leito fluidizado, coeficientes de especularidade-restituição

Thaís M. da Costa, Julia L. M. Lima, Felipe Q. Mendes, Harrson S. Santana e Dirceu Noriler
Universidade Estadual de Campinas¹

INTRODUÇÃO:

Unidades de FCC (*Fluid Catalytic Cracking*) têm como função, em uma refinaria, proporcionar a quebra de moléculas pesadas na carga de gásleo em outras menores, mais leves e de maior valor agregado. O contato da carga com o catalisador pré-aquecido (500 a 700 °C) ocorre através de um fluxo ascendente promovido em um reator tubular, conhecido também como *riser*. O regenerador, por sua vez, é responsável por realizar, em leito fluidizado, a recuperação do catalisador, inutilizável devido ao depósito de coque em sua superfície, bem como fornecer as condições de temperatura necessárias para que ocorra novamente o processo de FCC (Khandeparker, 2012). Por serem sistemas complexos e com muitas variáveis, o estudo de leitos fluidizados é feito com auxílio de técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*), o qual permite um modelamento matemático para o escoamento, e, aplicando-se equações próprias da física de dinâmica dos fluidos, permite ao software gerar uma previsão da dinâmica do escoamento de acordo com o tempo.

Neste presente trabalho busca-se analisar a interferência nas alterações do coeficiente de especularidade e de restituição em uma geometria 2D (Figura 1) nos parâmetros de velocidade da fase sólida e de fração volumétrica da fase sólida. O coeficiente de especularidade representa a condição de deslizamento na parede e mostra a natureza da colisão entre os limites e as partículas (Loha *et. al.*, 2013). O coeficiente de restituição, por sua vez, representa a elasticidade colisional das partículas em um intervalo de 0, inelástico, e 1, elástico. A pouca informação na literatura sobre esses parâmetros e suas influências no sistema indica que há um grande potencial de estudo, o que pode melhorar, dessa forma, as predições atuais dos leitos fluidizados.

METODOLOGIA:

Como continuação e complementação dos estudos de Mendes (2020) também foi utilizada uma abordagem Euleriana-Euleriana monodispersa acoplada à equação de balanço populacional. O modelo de arraste gás-sólido utilizado é o de Shah *et al.* (2015) e o KTFG (*Kinetic theory of granular flow*) descreve o efeito das colisões entre as partículas. Nesse trabalho desconsiderou-se a turbulência da fase sólida e sua respectiva influência na fase gás. Além disso, a fase contínua no escoamento turbulento pode ser representada por equações médias de Reynolds pelo modelo $k-\epsilon$. O software utilizado para as simulações numéricas foi o ANSYS FLUENT.

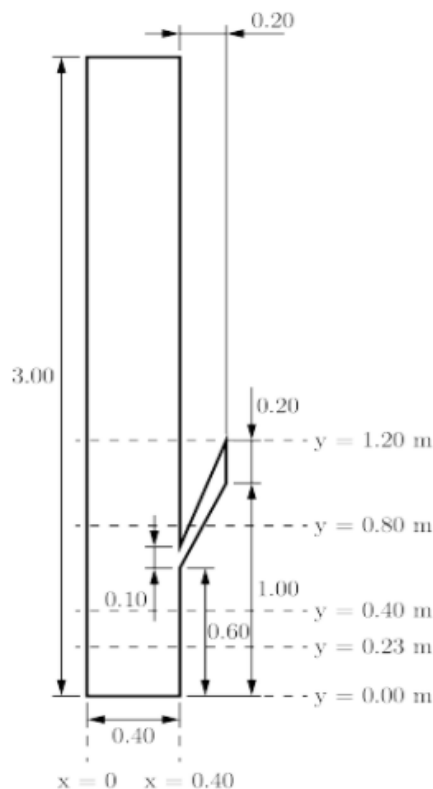


Figura 1: Geometria utilizada na simulação numérica. Fonte: Mendes (2020).

Foram rodados 13 casos utilizando o planejamento experimental DCCR (Delineamento Composto Central Rotacional), alterando-se os coeficientes de especularidade e de restituição de cada caso, a fim de se obter uma melhor representação dos dados e uma menor porcentagem de erros para a fração volumétrica de sólidos (SVF) e para a velocidade da fase sólida (VEL). A Tabela 1 contém os respectivos valores de coeficiente de especularidade (variável codificada – x_1) e de restituição (variável codificada – x_2) utilizados para cada caso. Foram rodados, ao total, 180 segundos para cada caso e os erros médios são calculados com a média dos 120 segundos finais. A geometria utilizada é representada na Figura 1. O software utilizado para o tratamento dos dados foi o *Statistica*.

Tabela 1. Valores das variáveis x_1 e x_2 utilizadas no DCCR.

Variável	Código	-1,41	-1	0	1	1,41
Coefficiente de especularidade	x_1	0,0005	0,003	0,0103	0,017	0,02
Coefficiente de restituição	x_2	0,60	0,72	0,80	0,88	0,99

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Os resultados obtidos nos ensaios numéricos são apresentados na Tabela 2. Os resultados foram avaliados em função da média de erro para fração volumétrica da fase sólida e para a média de erros para a velocidade da fase sólida nas alturas de: 23 cm, 40 cm, 80 cm e 120 cm. A análise dos

resultados de cada altura é realizada abaixo e os resultados para cada ensaio encontram-se nas Tabelas 3 e 4.

Tabela 2. Valores de variáveis codificadas e a média de erro para a fração volumétrica e velocidade da fase sólida.

Ensaio	x ₁	x ₂	Média de erro para Fração Volumétrica da fase Sólida	Média de erros para velocidade da fase sólida
1	-1	-1	9,09	15,6
2	+1	-1	9,11	20,3
3	-1	+1	9,24	20,1
4	+1	+1	8,05	22,0
5	-1,41	0	8,26	18,8
6	+1,41	0	8,76	22,4
7	0	-1,41	8,97	19,4
8	0	+1,41	8,49	26,2
9	0	0	9,25	20,1
10	1,41	-1,41	8,90	23,8
11	-1,41	1,41	9,43	18,54
12	-1,41	-1,41	8,61	19,21
13	1,41	1,41	9,87	26,46

Com a análise dos dados foi possível fazer algumas comparações de modo a entender melhor o resultado da alteração dos coeficientes de especularidade (CE) e restituição (CR). Inicialmente, observa-se que o menor erro ocorreu para o ensaio 4, quando se trata da fração volumétrica da fase sólida, e do ensaio 1, quando se trata da velocidade da fase sólida. O ensaio 4 é composto pelos maiores valores de CR e CE, que são 0,99 e 0,02 respectivamente (Tabela 1), enquanto o ensaio 1 é composto por valores menores: 0,72 e 0,03, respectivamente. Esse conjunto de fatores indica que o melhor caso para o SVF não é o melhor para a velocidade da fase sólida. Analisando as superfícies de resposta (Figura 2) obtidas através do *software Statistica* e cuja equação de superfície de resposta é de ordem 2, observa-se que a melhor aproximação, em ambos os casos, ocorre nos menores valores de CR e CE. Logo, a superfície não se encontra ajustada aos dados e não conseguiu representá-los com a exatidão esperada. Os ensaios 3 e 4 são muito interessantes de se observar, visto que ao aumentarmos o valor do coeficiente de especularidade, o erro diminui em 1,19% para a SVF, mas aumenta em 1,9% para a VEL, mantendo o valor do CR mais alto, em 0,88. Quando o mesmo é feito, nos ensaios 1 e 2, mas mantendo um CR menor e igual a 0,72, o erro aumenta para ambos os casos, em torno de 0,02% para SVF e 4,7% para VEL. Isso indica que, tanto para SVF quanto para VEL, quando o coeficiente de restituição é menor e em torno de 0,72, o coeficiente de especularidade que melhor se ajusta é também aquele que possui um valor menor.

Feitas todas essas comparações e observando o conjunto de dados, conclui-se que o ensaio 5 é promissor quando se procura ajustar um valor que sirva para diminuir erros médios tanto para a

fração volumétrica da fase sólida quanto para a velocidade da fase sólida. Comparando-se o mesmo, selecionado como de melhor potencial, com os casos onde houveram menores erros (ou seja, ensaio 4 para SVF e 1 para VEL) temos um aumento de 0,21% para o SVF (segundo menor valor de erro médio) e 3,2% para o VEL (terceiro menor valor de erro), de modo que em uma classificação geral, encontra-se o segundo menor valor de erro para SVF e o terceiro menor valor para VEL.

Tabela 3. Erros (%) para a Fração Volumétrica da fase Sólida

Caso	23 cm	40 cm	80 cm	120cm	Média
1	6,33	8,75	4,74	16,5	9,09
2	6,28	6,87	7,29	16,0	9,11
3	6,13	6,79	6,98	17,1	9,24
4	5,32	6,70	6,33	13,8	8,05
5	6,78	6,35	6,81	13,1	8,26
6	6,51	6,12	6,82	15,6	8,76
7	6,52	8,23	4,66	16,5	8,97
8	7,42	6,29	8,50	11,8	8,49
9	6,72	6,62	6,52	17,1	9,25
10	6,25	6,57	7,19	15,6	8,90
11	6,08	6,89	7,55	17,22	9,43
12	7,28	6,58	7,36	13,21	8,61
13	5,35	8,37	8,90	16,86	9,87

Tabela 4. Erros (%) para a Velocidade da Fase Sólida

Caso	23 cm	40 cm	80 cm	120cm	Média
1	22,7	14,2	17,5	8,04	15,6
2	23,1	23,1	23,6	11,6	20,3
3	23,4	20,0	23,3	13,7	20,1
4	26,2	21,2	26,4	14,3	22,0
5	24,4	18,2	20,5	12,2	18,8
6	25,2	23,2	27,0	14,4	22,4
7	22,6	16,9	22,4	15,5	19,4
8	29,8	29,9	30,5	14,5	26,2
9	22,3	20,5	24,9	12,8	20,1
10	27,4	24,1	28,5	15,2	23,8
11	24,35	16,85	21,44	11,52	18,54
12	21,64	18,99	22,98	13,25	19,21
13	27,17	32,05	33,42	13,21	26,46

Ao compararmos as alturas, também é possível obter algumas análises relacionadas ao quanto o erro aumenta ou diminui. Os erros para a velocidade da fase sólida são majoritariamente maiores, em termos de grandeza numérica, do que os da fração volumétrica dos sólidos. Entretanto, observa-se que para ambos os casos, os erros na altura de 23 cm são menores, aumentam para 40 cm e 80 cm e, em seguida, diminuem na altura máxima, 120 cm.

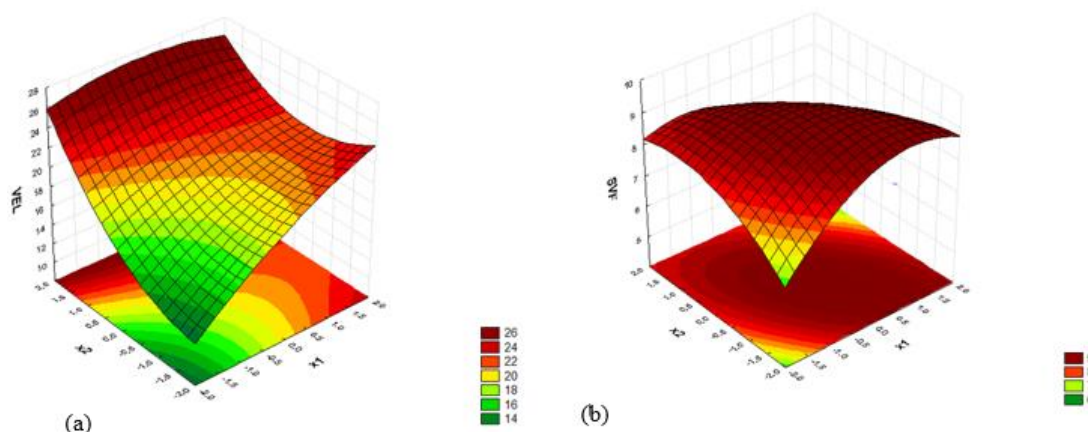


Figura 2. Efeitos das variáveis nos: (a) erros médios para a velocidade da fase sólida e (b) erros médios para a fração volumétrica da fase sólida.

CONCLUSÕES:

Nesse presente trabalho busca-se analisar a influência do coeficiente de especularidade (CE) e de restituição (CR) em leito fluidizado circulante nos parâmetros de velocidade da fase sólida e de fração volumétrica da fase sólida. O ensaio 5 (coeficiente de especularidade igual a 0,0005 e coeficiente de restituição igual a 0,80) foi o que se apresentou com maior potencial para representar tanto a velocidade da fase sólida (VEL) quanto a fração volumétrica (SVF) da mesma. Entre esse ensaio e aqueles com valores mínimos de erro há um aumento de 3,2% para VEL (terceiro menor valor de erro) e um aumento de apenas 0,21% para SVF (segundo menor valor de erro), o que justifica o potencial destes valores dentre o conjunto de testes feitos.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio à pesquisa do PRH-ANP e da Petrobras (Termo de Cooperação 5900.0112685.19.9).

BIBLIOGRAFIA

- [1] KHANDEPARKER, A. **Study of Different Operating Parameters of FCC unit with Aspen-Hysy**. 2012. Tese inicial de Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) (Bacharelado em Tecnologia em Engenharia Química) - National Institute of Technology, ROURKELA, 2012.
- [2] MENDES, F. Q.; UJUETA, J. P. V.; TUTA, D. S. B.; VALENCIA, L. Y. V.; Nicolas Rios RATKOVICH, N. R.; NORILER, D. **Efeito da polidispersividade do catalisador no comportamento fluidodinâmico de um riser**. In: XXXIX CONGRESSO BRASILEIRO DE SISTEMAS PARTICULADOS ENEMP 2019, 2019, Belém.
- [3] SHAH, S.; MYÖHÄNEN, K.; KALLIO, S.; HYPÄNEN, T. Cfd simulations of gas–solid flow in an industrial-scale circulating fluidized bed furnace using subgrid-scale drag models. **Particuology**, Elsevier, v. 18, p. 66–75, 2015.
- [4] LOHA, C.; CHATTOPADHYAY, H.; CHATTERJEE, P. K. Euler-Euler CFD modeling of fluidized bed: Influence of specularity coefficient on hydrodynamic behavior. **Particuology**, v. 11, n. 6, p. 673-680, 2013.