



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ROSEBRÍCIA PEREIRA BRITO

ANÁLISE NUMÉRICA DA INFLUÊNCIA DE DEFLETORES SOBRE O ESCOAMENTO
GÁS-SÓLIDO EM RISERS DE FCC VIA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

NUMERICAL ANALYSIS OF THE INFLUENCE OF BAFFLES ON GAS-SOLID FLOW IN
FCC RISERS BY COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS

CAMPINAS
2018

ROSEBRÍCIA PEREIRA BRITO

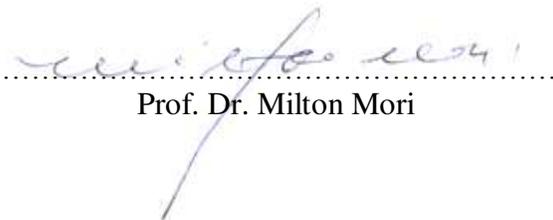
ANÁLISE NUMÉRICA DA INFLUÊNCIA DE DEFLETORES SOBRE O ESCOAMENTO
GÁS-SÓLIDO EM RISERS DE FCC VIA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

NUMERICAL ANALYSIS OF THE INFLUENCE OF BAFFLES ON GAS-SOLID FLOW IN
FCC RISERS BY COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS

*Dissertação apresentada à Faculdade de
Engenharia Química da Universidade
Estadual de Campinas como parte dos
requisitos exigidos para a obtenção do
título de Mestra em Engenharia Química.*

Orientador: Milton Mori

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL
DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELA ALUNA
ROSEBRÍCIA PEREIRA BRITO E ORIENTADA
PELO PROF. DR. MILTON MORI.



.....
Prof. Dr. Milton Mori

CAMPINAS
2018

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): CAPES, 1485585/3-2015

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6062-1595>

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Luciana Pietrosanto Milla - CRB 8/8129

B777a Brito, Rosebricia Pereira, 1991-
Análise numérica da influência de defletores sobre o escoamento gás-sólido em risers de FCC via fluidodinâmica computacional / Rosebricia Pereira Brito. – Campinas, SP : [s.n.], 2018.

Orientador: Milton Mori.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Craqueamento catalítico. 2. Fluidodinâmica computacional (CFD). 3. Reatores fluidizados. 4. Escoamento multifásico - Petróleo. 5. Estatística - Análise. I. Mori, Milton, 1947-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Numerical analysis of the influence of baffles on gas-solid flow in FCC risers by computational fluid dynamics

Palavras-chave em inglês:

Catalytic cracking

Computational fluid dynamics (CFD)

Fluidized reactors

Multiphase flow - Oil

Statistics - Analysis

Área de concentração: Engenharia Química

Titulação: Mestra em Engenharia Química

Banca examinadora:

Milton Mori [Orientador]

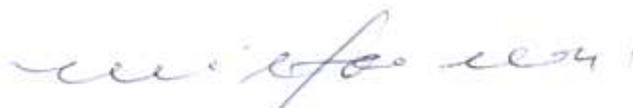
João Lameu da Silva Júnior

Nicolas Spogis

Data de defesa: 27-02-2018

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Dissertação de Mestrado defendida por Rosebrícia Pereira Brito e aprovada em 27 de fevereiro de 2018 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Milton Mori



Prof. Dr. João Lameu da Silva Júnior



Prof. Dr. Nicolas Spogis

DEDICATÓRIA

À minha família, ao meu namorado, aos meus amigos e ao maior mestre de todos os tempos: JESUS.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço à Deus que me proporcionou o dom da vida e que me sustenta em todos os momentos.

Gostaria de agradecer imensamente ao meu orientador, Prof. Dr. Milton Mori, pela oportunidade e suporte concedidos que me proporcionaram uma experiência riquíssima em conhecimentos. Muito obrigada de coração!

À minha família e aos meus amigos de Manaus, sem dúvida a parte mais difícil de toda essa caminhada foi estar longe de vocês. Senti muita saudade!

Quero agradecer em especial à minha mãe, minha maior inspiração para vencer na vida, que sempre me apoiou e me incentivou nos estudos, que doou sua vida para me proporcionar uma boa educação, mesmo que sem recursos financeiros. Suas orações me acompanharam e me sustentaram nos momentos mais difíceis. Obrigada por tudo!

Agradeço especialmente também ao meu namorado por todo companheirismo, compreensão, paciência e cuidado diário que teve comigo, além de todo apoio psicológico e financeiro. Cada abraço seu recarregava minhas energias. Você sabe a grande contribuição que teve neste trabalho.

Deixo meus agradecimentos também ao Dr. Victor Armellini por me acompanhar desde o início deste trabalho, por todos os conselhos concedidos e, principalmente, pela paciência e humildade em dedicar todo o seu conhecimento. Agradeço também ao Daniel Pelissari por ter me ajudado e acompanhado na conclusão deste trabalho.

Aos meus amigos João de Deus e Fabrícia Farias por me incentivarem a fazer mestrado na UNICAMP e pelo apoio concedido quando cheguei na cidade de Campinas. Agradeço também a minha amiga Ingrid Lopes Motta pela amizade desde a época da graduação e por sempre estar disposta a me ajudar.

Deixo os meus agradecimentos também à banca examinadora por aceitar avaliar e contribuir para o aperfeiçoamento do trabalho.

À CAPES pela bolsa financeira concedida.

E também àqueles que não foram citados aqui mas que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

À todos, meus sinceros e eternos agradecimentos.

RESUMO

Muitos processos industriais, onde o escoamento de fluidos se faz presente, incluem fenômenos multifásicos, como é o caso do craqueamento catalítico fluidizado (FCC), presente nas refinarias de petróleo. O processo consiste em craquear as frações pesadas do petróleo e converter em produtos de alto valor agregado. Apesar da sua viabilidade econômica, o processo opera sob condições extremas de temperatura e pressão e se caracteriza por apresentar escoamento multifásico reativo e uma série de fenômenos complexos, o que torna o processo difícil de ser avaliado experimentalmente. Dentro desse contexto, a fluidodinâmica computacional (CFD) tem se mostrado uma poderosa ferramenta para o estudo de muitos problemas práticos de engenharia que apresentam escoamento, pois além do custo reduzido, é possível avaliar equipamentos mesmo com condições extremas de operação. A fluidodinâmica dentro do riser é de caráter heterogêneo e com acúmulo de partículas de catalisador na parede. Esse padrão de escoamento conhecido como *core-annulus* (centro anular) causa queda no rendimento do processo. Nesse sentido, o uso de defletores em risers de FCC tem despertado o interesse dos pesquisadores com o propósito de minimizar o acúmulo de partículas sólidas na parede e garantir uma melhor distribuição e uniformidade entre as fases dentro de um riser de FCC. Desta forma, o principal objetivo deste trabalho consistiu em avaliar a influência de defletores em riser de FCC sobre o escoamento gás-sólido utilizando fluidodinâmica computacional. Foram realizadas simulações numéricas a partir de uma matriz de planejamento variando os parâmetros geométricos: quantidade (Z), comprimento (H) e estrangulamento (E) dos defletores em riser de FCC. Os resultados das simulações numéricas mostraram que defletores em riser de FCC podem ocasionar mudanças no escoamento proporcionando maior homogeneização no sistema. A análise estatística dos resultados apontou os parâmetros que mais influenciam no rendimento da gasolina, coque, frações leves e frações pesadas, bem como o aumento ou redução da queda de pressão.

Palavras chave: Craqueamento Catalítico Fluidizado (FCC); Riser; Defletores; Fluidodinâmica Computacional (CFD); Análise Estatística.

ABSTRACT

Many industrial processes with fluids flow include multiphase phenomena, such as fluidized catalytic cracking (FCC), which is present in oil refineries. This process consists of cracking the heavy oil fractions and converting them into high added-value products. Despite its economic viability, this process operates under extreme conditions of temperature and pressure and is characterized by the presence of multiphase reactive flow and a series of complex phenomena, which makes the process difficult to be evaluated experimentally. In this context, Computational Fluid Dynamics (CFD) has proved to be a powerful tool for the study of many practical engineering problems in which a flow pattern is observed because, besides the reduced costs, it is possible to evaluate equipment even under extreme operating conditions. The fluid dynamics inside the riser is heterogeneous and characterized by accumulation of catalyst particles onto the wall. This flow pattern known as core-annulus causes a decrease in process yields. In this sense, the use of baffles in FCC risers has attracted the interest of researchers with the purpose of minimizing the accumulation of solid particles onto the wall and ensuring better distribution and uniformity between the phases within FCC risers. Therefore, the main objective of this work was to evaluate the influence of baffles in FCC riser on the gas-solid flow using computational fluid dynamics. Numerical simulations were performed using a three-level factorial design by varying the geometric parameters: quantity (Z), length (H) and throttling (E) of baffles in the FCC riser. The results of the numerical simulations showed that baffles in FCC riser can cause changes to the flow, providing greater homogenization in the system. The statistical analysis of the results pointed out the parameters that most influenced the yields of gasoline, coke, light fractions and heavy fractions, as well as the increase or decrease of pressure.

Keywords: Fluid Catalytic Cracking (FCC); Riser; Baffles; Computational Fluid Dynamics (CFD); Statistic Analysis.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1: Estágios de fluidização segundo Kunii e Levenspiel (1968)	25
FIGURA 2: Representação de uma unidade de craqueamento catalítico	29
FIGURA 3: Aplicação de CFD em indústria aeroespacial	31
FIGURA 4: CFD aplicado à aerodinâmica de automóveis	31
FIGURA 5: Simulação numérica de CFD para um fluxo passando por 3 cilindros	31
FIGURA 6: Aplicação de CFD em motor de combustão interna à diesel	31
FIGURA 7: Simulações numéricas de CFD em riser industrial de FCC	32
FIGURA 8: Simulação via CFD do campo de velocidade em tubo de trocador de calor	32
FIGURA 9: Aplicação de CFD na simulação de um reator de tanque agitado com gás	32
FIGURA 10: Construção de um novo tanque em uma usina de tratamento de água. A figura do lado direito superior descreve a simulação de CFD do tanque de água que será instalado dentro do local escavado	33
FIGURA 11: Aplicação de CFD para prever o campo de velocidade de um turbina eólica e nas imediações do parque eólico	33
FIGURA 12: Previsão via CFD da dependência do tempo e da tensão de cisalhamento no ponto mais estreito	33
FIGURA 13: Aplicação CFD para formação de partículas na dispersão de spray nasal como transporte de partícula e deposição na cavidade nasal	34
FIGURA 14: Exemplo de geometria de uma árvore brônquica criada para simulação CFD	34
FIGURA 15: Representação do fenômeno <i>clustering</i>	39
FIGURA 16: Perfil de escoamento da fração volumétrica de sólido em diferentes configurações de saída em riser de FCC	40
FIGURA 17: Distribuição da fração volumétrica de catalisador para diferentes bicos injetores em riser de FCC	41
FIGURA 18: Representação do padrão de escoamento <i>core-annulus</i>	42
FIGURA 19: Modelo cinético de 10 <i>lumps</i>	55
FIGURA 20: Adaptação do modelo cinético de 10- <i>lumps</i> para 11- <i>lumps</i>	59

FIGURA 21: Configuração de riser sem a presença de defletores e com a presença de defletores	62
FIGURA 22: Detalhes da malha numérica para o riser sem defletor	65
FIGURA 23: Detalhes da malha numérica para riser com defletores	65
FIGURA 24: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtido a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil volumes de controles	70
FIGURA 25: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtidos a partir de malhas numéricas da ordem de 400 mil e 500 mil volumes de controles	70
FIGURA 26: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtidos a partir de malhas numéricas da ordem de 400 mil, 500 mil e 600 mil volumes de controles	71
FIGURA 27: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtidos a partir de malhas numéricas da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil e 700 mil volumes de controles.....	71
FIGURA 28: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtidos a partir de malhas numéricas da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil e 800 mil volumes de controles	72
FIGURA 29: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtidos a partir de malhas numéricas da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil, 800 mil e 900 mil volumes de controles	72
FIGURA 30: Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtido a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil volumes de controles	73
FIGURA 31: Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtidos a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil e 500 mil volumes de controles	74
FIGURA 32: Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtidos a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil e 600 mil volumes de controles	74
FIGURA 33: Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtidos a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil e 700 mil volumes de controles	75
FIGURA 34: Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtido a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil e 800 mil volumes de controles.....	75

FIGURA 35: Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtidos a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil, 800 mil e 900 mil volumes de controles	76
FIGURA 36: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil volumes de controles	77
FIGURA 37: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil e 500 mil volumes de controles	78
FIGURA 38: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil e 600 mil volumes de controles	78
FIGURA 39: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil e 700 mil volumes de controles	79
FIGURA 40: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil e 800 mil volumes de controles	79
FIGURA 41: Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil, 800 mil e 900 mil volumes de controles	80
FIGURA 42: Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil volumes de controles	80
FIGURA 43: Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil e 500 mil volumes de controles	81
FIGURA 44: Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil volumes de controles	81
FIGURA 45: Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil e 700 mil volumes de controles	82
FIGURA 46: Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil e 800 mil volumes de controles.....	82
FIGURA 47: Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil, 800 mil e 900 mil volumes de controles	83

FIGURA 48: Definição da altura dos defletores no riser	85
FIGURA 49: Perfil de queda de pressão ao longo do riser para o caso 0, caso 12 e caso 13.....	87
FIGURA 50: Perfil radial de velocidade da fase sólida para o caso 0, caso 12 e caso 13.....	90
FIGURA 51: Perfil de queda de pressão ao longo do riser para o caso 0, caso 3 e caso 16.....	91
FIGURA 52: Perfil de produção de gasolina ao longo do riser para o caso 0, caso 3 e caso 16	92
FIGURA 53: Perfil de produção de coque ao longo do riser para o caso 0, caso 7 e caso 8.....	93
FIGURA 54: Perfil de rendimento de LFO e HFO ao longo do riser para o caso 0, caso 3 e caso 16.....	94
FIGURA 55: Conversão de carga ao longo do riser para o caso 0, caso 3 e caso 16.....	95
FIGURA 56: Perfil de fração volumétrica de sólidos após a passagem pelo defletor e perfil radial de fração volumétrica de sólidos a 9,5 m e 10,5 m de altura no riser; caso 3 e caso 16.....	96
FIGURA 57: Gráfico normal dos efeitos para a gasolina	98
FIGURA 58: Gráfico normal dos efeitos para o coque	99
FIGURA 59: Gráfico normal dos efeitos para LFO	99
FIGURA 60: Gráfico normal dos efeitos para HFO	100
FIGURA 61: Gráfico normal dos efeitos para conversão	100
FIGURA 62: Gráfico normal dos efeitos para a queda de pressão	101
FIGURA 63: Diagrama de pareto dos efeitos para a gasolina	103
FIGURA 64: Diagrama de pareto dos efeitos para o coque	104
FIGURA 65: Diagrama de pareto dos efeitos para LFO	104
FIGURA 66: Diagrama de pareto dos efeitos para HFO	105
FIGURA 67: Diagrama de pareto dos efeitos para a conversão	105
FIGURA 68: Diagrama de pareto dos efeitos para a queda de pressão	106

LISTA DE TABELAS

TABELA 1: Propriedades físicas dos grupos envolvidos envolvidos nas reações	56
TABELA 2: Propriedades físicas do catalisador	56
TABELA 3: Parâmetros cinéticos do craqueamento catalítico	57
TABELA 4: Propriedades físicas do gás seco	59
TABELA 5: Parâmetros cinéticos do craqueamento térmico	60
TABELA 6: Indicação dos níveis de cada variável	62
TABELA 7: Matriz de planejamento estatístico 3^3 na forma não codificada e na forma codificada	63
TABELA 8: Condições iniciais de operação	66
TABELA 9: Modelagem matemática empregada para cada aspecto do sistema	67
TABELA 10: Valores experimentais e valores encontrados através de simulação na saída do riser	69
TABELA 11: Resultados do teste de malha na saída do riser	77
TABELA 12: Resultados do teste de malha na saída do riser com 3 defletores	84
TABELA 13: Resultados obtidos na saída do riser para cada caso simulado	86
TABELA 14: Nomenclaturas usadas pelo Statistica 8.0 para os efeitos principais e de interações	98
TABELA 15: Interações e efeitos significativos pela análise por gráficos normais	101
TABELA 16: Níveis de confiança definidos para cada resposta	102
TABELA 17: ANOVA calculada para o modelo completo referente à gasolina	108
TABELA 18: ANOVA calculada para o modelo simplificado referente à gasolina	108
TABELA 19: Resumo dos resultados das análises de R^2 ajustado e do Teste F	109
TABELA 20: Interações e efeitos com significância estatística para os modelos que foram considerados significativos ou mais significativos	112
TABELA 21: ANOVA calculada para o modelo completo referente ao coque	126
TABELA 22: ANOVA calculada para o modelo simplificado referente ao coque	127
TABELA 23: ANOVA calculada para o modelo completo referente à LFO	128
TABELA 24: ANOVA calculada para o modelo simplificado referente à LFO	129

TABELA 25: ANOVA calculada para o modelo completo referente à HFO	130
TABELA 26: ANOVA calculada para o modelo simplificado referente à HFO	131
TABELA 27: ANOVA calculada para o modelo completo referente à conversão	132
TABELA 27: ANOVA calculada para o modelo simplificado referente à conversão	133
TABELA 28: ANOVA calculada para o modelo completo referente à queda de pressão.....	134
TABELA 29: ANOVA calculada para o modelo simplificado referente à queda de pressão.....	135

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

FCC	Fluidized Catalytic Cracking (Craqueamento Catalítico Fluidizado)
CFD	Computational Fluid Dynamics (Fluidodinâmica Computacional)
LFB	Leito Fluidizado Borbulhante
LFC	Leito Fluidizado Circulante
DNS	Direct Numerical Simulation
LES	Large Eddy Simulation
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RSM	Reynolds Stress Models
CAE	Computer Aided Engineering (Engenharia Auxiliada por Computador)
Nh	Naftênicos pesados
Ph	Parafínicos pesados
Ah	Aromáticos pesados
Cah	Aromáticos pesados com grupos substituintes
HFO	Frações pesadas
Nl	Naftênicos leves
Pl	Parafínicos leves
Al	Atomáticos leves
Cal	Aromáticos leves com grupos substituintes
LFO	Frações leves
G	Gasolina
C	Coque e gases leves

LISTA DE SÍMBOLOS

α	Fração volumétrica
ρ	Massa específica
v	Velocidade
$Y_{g,i}$	Fração mássica da espécie i
$\rho_{g,i}$	Massa específica da espécie i presentes na fase gasosa
β	Coeficiente de transferência da quantidade de movimento
P	Pressão
g	Aceleração da gravidade
τ	Tensor de tensão
μ	Viscosidade
τ	Tensor de Reynolds
H	Entalpia específica de cada fase
λ	Condutividade térmica
T	Temperatura
h	Coeficiente de transferência de calor entre as fases
ΔH_r	Entalpia da reação
$Y_i _r$	Fração mássica do reagente i na reação r
Nu	Número de Nusselt
d_s	Diâmetro da partícula
Re	Número de Reynolds
Pr	Número de Prandtl
D_i	Coeficiente de difusão da espécie i na fase gasosa
R_i	Taxa de produção ou consumo da espécie química
C_D	Coeficiente de arraste
$f(\alpha)$	Fator de correção do modelo de arraste
e_{ss}	Coeficiente de restituição para colisões entre as partículas
$g_{0,ss}$	Função de distribuição radial

$\alpha_{s,max}$	Parâmetro de máximo empacotamento da fase sólida
θ_s	Temperatura granular
ϕ	Pressão de deformação
ϕ_1	Pressão de deformação lenta
ϕ_2	Pressão de deformação rápida
δ	Função de delta de Kronecker
ψ	Termo de produção exata
a	Tensor de anisotropia
S_d	Taxa de deformação
W	Vorticidade
k	Energia cinética turbulenta
ϵ	Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta
P^K	Produção de energia cinética turbulenta
K_{dc}	Coefficiente de arraste entre as fases
k_{dc}	Covariância entre as velocidades das fases contínua e dispersa
k_c	Energia cinética turbulenta da fase contínua
V_{rel}	Velocidade relativa
V_{arift}	Velocidade de deslizamento
φ	Atividade catalítica
K_h	Constante de adsorção
C_{ah}	Porcentagem mássica de aromáticos pesados
$M_{w,i}$	Massa molar do componente i
C_i	Concentração molar da espécie i
K_r	Constante de reação
E_r	Energia de ativação
K_r^o	Fator pré-exponencial
R	Constante dos gases
A_C, B_C	Constantes de desativação
C_C	Concentração mássica do coque no grupo C

ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

Para melhor entendimento e organização, este trabalho está dividido nos seguintes tópicos:

1 Introdução: Apresenta, de modo geral, o tema do trabalho incluindo a importância e motivação do tema escolhido. É apresentado também o problema científico a ser abordado que justifique a realização desta pesquisa e a hipótese definida para a resolução do problema científico. Ao final desta seção, são listados os objetivos da pesquisa.

2 Revisão Bibliográfica: Nesta seção, são abordados os principais conceitos que fundamentam este trabalho e faz-se um levantamento na literatura de trabalhos que fazem alusão ao tema escolhido. Ao final, são apresentados alguns pontos de investigação que norteiam esta dissertação.

3 Modelagem Matemática: São descritos, nesta seção, as equações e modelos matemáticos utilizados nas simulações numéricas de modo a representar o sistema em estudo.

4 Metodologia CFD: Apresenta a metodologia computacional utilizada, a divisão das etapas para a obtenção de resultados, bem como a descrição dos procedimentos realizados.

5 Resultados e Discussões: Nesta seção, são exibidos de modo sequencial e por meio de gráficos, tabelas e figuras, os resultados obtidos pelas diferentes etapas deste estudo; além de toda explanação e discussão.

6 Conclusões e Sugestões: São traçadas as principais conclusões obtidas a partir das análises dos resultados. E são apresentados também algumas sugestões para trabalhos futuros.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	22
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	25
2.1 FLUIDIZAÇÃO.....	25
2.1.1 Leito Fluidizado Gás-Sólido	26
2.2 CRAQUEAMENTO CATALÍTICO FLUIDIZADO	28
2.3 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL	29
2.3.1 Modelagem Fluidodinâmica	34
2.3.2 Fluidodinâmica em risers de FCC	38
2.3.3 Geometrias de riser	39
2.4 PONTOS DE INVESTIGAÇÃO	43
3 MODELAGEM MATEMÁTICA	45
3.1 EQUAÇÕES DE TRANSPORTE	45
3.2 MODELO DE ARRASTE	48
3.3 TEORIA CINÉTICA DO ESCOAMENTO GRANULAR	49
3.4 MODELO DE TURBULÊNCIA	51
3.5 MODELO CINÉTICO	54
4 METODOLOGIA CFD	61
4.1 CRIAÇÃO DE GEOMETRIA E MALHAS COMPUTACIONAIS	61
4.1.1 Teste de Independência de Malhas	64
4.2 SIMULAÇÃO NUMÉRICA	66
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES	68
5.1 VALIDAÇÃO DOS MODELOS FLUIDODINÂMICO E CINÉTICO	68
5.2 INDEPENDÊNCIA DE MALHAS	69
5.3 ANÁLISE DOS DEFLETORES	84

5.4 ANÁLISE ESTATÍSTICA	97
5.4.1 Influência Significativa das Variáveis	97
5.4.2 Ajuste e Significância Estatística dos Modelos	106
6 CONCLUSÕES	113
6.1 SUGESTÕES	114
7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	115
ANEXOS.....	126

1 INTRODUÇÃO

Muitos processos industriais, onde o escoamento de fluidos se faz presente, incluem fenômenos multifásicos. Tais processos tem inúmeros interesses na engenharia, com aplicações em torres de extração, destiladores, condensadores, evaporadores, torres de resfriamento, transporte pneumático, conversão de energia, manufatura de papel, manufatura alimentícia, aplicações farmacêuticas, na indústria química, petroquímica e nuclear (ENWALD et al., 1999; FRANÇA, 2008; PAIVA, 2011). Dentre esses processos multifásicos, destacam-se os processos de fluidização gás-sólido, que são amplamente empregados em unidades de craqueamento catalítico fluidizado (FCC).

Criado há mais de meio século, o processo de FCC desempenha um papel fundamental nas refinarias de petróleo, gerando cerca de 45% de toda produção mundial de gasolina. Economicamente, é um processo de conversão muito rentável, uma vez que faz uso de frações residuais de baixo valor comercial que, se não fossem utilizados como matéria prima na unidade de FCC, seriam simplesmente adicionados ao óleo combustível ou usados na composição do asfalto. Essas frações residuais são convertidas, por meio de um catalisador, em derivados de alto valor agregado como gasolina, diesel, GLP e olefinas leves (SADEGHBEIGI, 2000; MOREIRA, 2008; PELISSARI et al., 2014).

Uma unidade de FCC é composta, basicamente, de um reator com fluxo ascendente (chamado riser), onde ocorrem as reações de craqueamento; de um separador onde ocorre a separação inercial entre as partículas do catalisador e os gases provenientes do craqueamento; e de um regenerador, no qual o catalisador é regenerado. O processo ocorre inicialmente através da mistura da carga alimentada (gasóleo) no riser com um catalisador que apresenta propriedades de um fluido quando arrastado pelo vapor. As reações de craqueamento catalítico ocorrem dentro do riser onde as moléculas vaporizadas penetram nos poros do catalisador dando origem às reações de craqueamento (SADEGHBEIGI, 2000; SOUZA, 2001; ALVAREZ-CASTRO, 2014).

Apesar da sua viabilidade econômica, os desafios são grandes no que se refere ao entendimento dos fenômenos inerentes ao escoamento multifásico reativo encontrado em um reator de craqueamento catalítico, pois envolvem operações sob condições extremas de

temperaturas e pressão, difícil acesso, insalubre e bastante remoto, além de uma série de fenômenos complexos como transferência de calor e momento entre as fases presentes, expansão dos gases, vaporização da carga, reações heterogêneas, perda da atividade catalítica, entre outros; processos esses difíceis de serem avaliados experimentalmente (GEORG, 2005; LOPES et al., 2011; PAIVA, 2011).

Dentro desse contexto, muitos estudos de simulação utilizando fluidodinâmica computacional (CFD) tem sido empregados para processos que envolvem escoamentos multifásicos, reações químicas, turbulência e outros diversos fenômenos físico-químicos. Para a realização de simulações computacionais envolvendo escoamentos multifásicos é necessário a utilização de modelos matemáticos que, quando são validados, podem ser utilizados para reduzir tempo e custo, fazendo previsões da conversão, rendimento, velocidade, temperatura, entre outros (AZEVEDO, 2012; BARBOSA; PINTO; NOGUEIRA, 2014).

Ainda que as simulações numéricas relacionadas ao estudo da dinâmica dos fluidos sejam amplamente utilizadas como uma maneira eficaz para determinar o comportamento físico dos escoamentos nas mais diversas situações e geometrias consideradas (AZEVEDO, 2012; BARBOSA; PINTO; NOGUEIRA, 2014), contudo, para que seja possível melhorar a performance do processo, é necessário conhecer a dinâmica desse escoamento. Embora seja extremamente importante dominar modelos matemáticos e ferramentas computacionais, sem o conhecimento profundo do processo físico-químico em estudo, torna-se difícil uma análise crítica, detalhada e compreensiva das simulações numéricas.

Sabe-se que a fluidodinâmica dentro do riser é de caráter heterogêneo e com acúmulo de partículas de catalisador na parede. Muito se tem estudado na melhor distribuição da carga e homogeneização do sistema para gerar maior conversão dos produtos. Dada a importância do entendimento aos fenômenos inerentes do escoamento em risers de FCC e da problemática enfrentada nesse processo, o problema científico deste trabalho concerne na necessidade de otimizar a fluidodinâmica do sistema a fim de obter uma melhor distribuição da carga. Dentro desse contexto, o corrente trabalho adotou como hipótese implementar defletores em um riser industrial para avaliar a influência dos mesmos sobre o escoamento e rendimento do processo.

Sendo assim, o principal objetivo deste trabalho consistiu em avaliar numericamente, através de simulações CFD, a influência de defletores em risers industriais de FCC. Desta forma, foram realizadas simulações de risers com defletor e sem defletor. A determinação da influência foi avaliada a partir de uma matriz de planejamento estatístico onde foram estudados diferentes parâmetros geométricos dos defletores no riser com o intuito de avaliar a influência dos mesmos sobre o rendimento do processo.

Com a finalidade de alcançar o objetivo geral, alguns objetivos específicos foram definidos de modo a auxiliar o desenvolvimento deste trabalho:

- Determinar a modelagem matemática mais adequada a ser empregada para simulações numéricas em risers com defletores;
- Elaborar geometrias e malhas numéricas de acordo com os padrões reportados na literatura para os casos em estudo;
- Realizar testes de independência de malhas para obter o refino de malha ideal a ser utilizado nas simulações e garantir que a malha não reproduza resultados enganosos.
- Efetuar simulações numéricas para riser sem defletor e risers com defletores empregando a mesma modelagem matemática para todos os casos simulados.
- Comparar os resultados obtidos entre os casos simulados verificando as mudanças ocorridas na dinâmica dentro do riser de FCC.
- Estimar a influência de defletores em riser de FCC através de ferramentas estatísticas obtendo as variáveis que mais influenciam significativamente no rendimento do processo.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 FLUIDIZAÇÃO

A terminologia fluidização se refere ao processo de suspensão de uma fase de partículas sólidas através do escoamento de um gás ou líquido conferindo comportamento de fluido à fase sólida em suspensão (KUNII; LEVENSPIEL, 1991). Kunii e Levenspiel (1968) consolidaram diversos estudos sobre sistemas de fluidização, apresentando teorias detalhadas de uma coluna com partículas sólidas, denominando o sistema de leito fluidizado. O estudo consistiu em injetar um fluido na parte inferior desta coluna. O procedimento foi realizado com diferentes velocidades de entrada do fluido a fim de avaliar o fenômeno. A Figura 1 exemplifica o estudo avaliado.

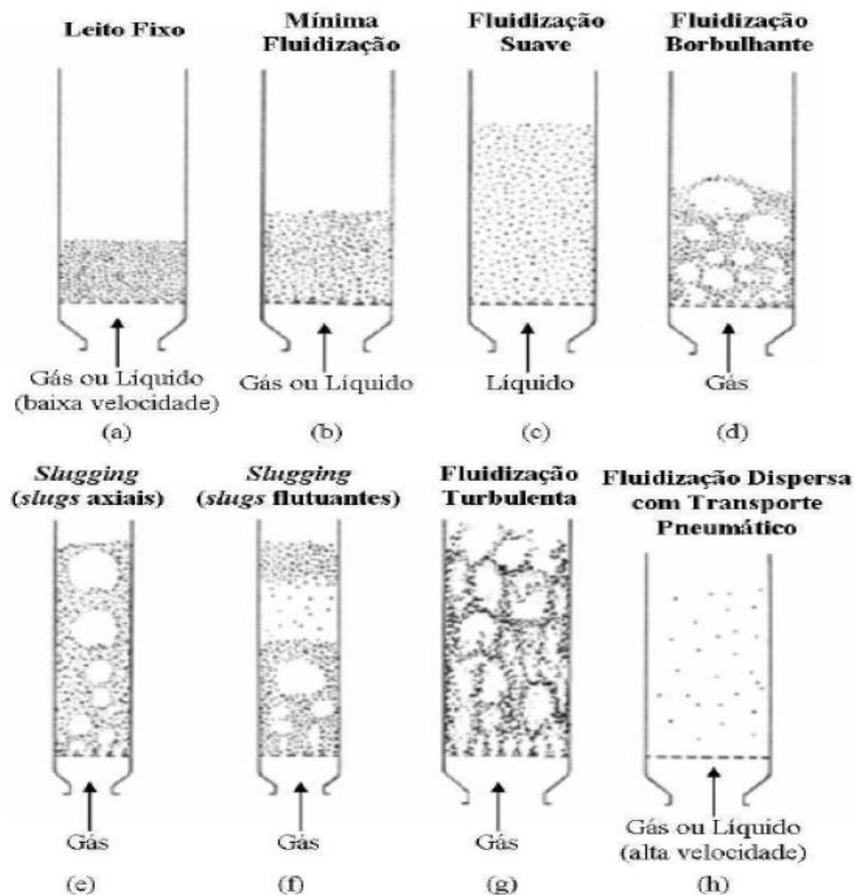


Figura 1 – Estágios de fluidização segundo Kunii e Levenspiel (1969).

Fonte: KUNII; LEVENSPIEL, 1969.

Observa-se na Figura 1 que, inicialmente, a velocidade do sólido no leito fixo é nula. Neste estágio inicial ocorre apenas a passagem do fluido pelas partículas sólidas, nada ocorre com o leito (sistema particulado). Com o aumento da velocidade de entrada do fluido, as partículas começam a expandir dentro da coluna. Quando todas as partículas atingem o estado de suspensão, ocorre um equilíbrio da força peso do sólido e das forças de arraste do fluido caracterizando a mínima fluidização, também conhecida pelo nome de fluidização incipiente (SOUZA; JÚNIOR; PAGLIUSO, 1999; HODAPP, 2009).

A velocidade mínima de fluidização é uma das mais importantes variáveis operacionais no projeto de uma unidade de fluidização, essa relevância fica evidenciada na quantidade de trabalhos experimentais reportados na literatura para uma ampla variedade de condições. A velocidade mínima de fluidização depende, além de outras variáveis, do fluxo do fluido. Para controle dos processos químicos são realizadas medições do fluxo, o que nos permite saber a quantidade de fluido que entra ou sai de uma etapa do processo, facilitando na realização dos balanços de massa e de energia necessários para o controle do custo operacional e da qualidade dos produtos (SOUZA; JÚNIOR; PAGLIUSO, 1999; MOURA; GAMA; CARDIM, 2011).

2.1.1 Leito Fluidizado Gás-Sólido

Segundo Mineto (2009), leitos fluidizados de escoamentos gás-sólido podem ser divididos em leito fluidizado borbulhante (LFB) e leito fluidizado circulante (LFC). Os leitos borbulhantes são caracterizados pelo surgimento de bolhas do gás, as quais afetam o desempenho do reator. Essa característica se deve principalmente pela alta densidade de particulado e pelo processo de elutriação que promove o arraste de particulados mais finos, além do regime de escoamento. Os leitos circulantes são caracterizados por baixas densidades de particulado, além de operar em regime de fluidização rápida (FELIPE, 2004; MORITA, 2009).

Os leitos fluidizados gás-sólido integram processos de produção em inúmeras áreas da engenharia. Dentre as aplicações e ocorrências tem-se: torres de extração, destiladores, condensadores, evaporadores, torres de resfriamento, transporte pneumático, conversão de

energia, manufatura de papel, manufatura alimentícia, aplicações farmacêuticas, na indústria química, petroquímica e nuclear (ENWALD et al., 1999; FRANÇA, 2008; PAIVA, 2011).

Na engenharia química, as aplicações estão concentradas principalmente em secadores e em reatores químicos. Dentre as aplicações destacam-se: secagem de sólidos, reações gás-sólido, reações catalisadas por sólidos, combustão de sólidos, incineração de resíduos sólidos, gaseificação do carvão, recobrimento e granulação de partículas e adsorção de gases (MINETO, 2009; MARTINS et al., 2014).

Na indústria alimentícia, os leitos fluidizados gás-sólido participam dos sistemas de torrefação de café, congelamento e secagem de alimentos e ainda no recobrimento de doces e pastilhas e sistemas de microencapsulação. Na indústria do minério, suas aplicações estão principalmente no processo de *roasting* que é a oxidação de minérios como sulfetos de cobre e de zinco à cerca de 800 °C e na calcinação de minérios como calcário e bauxita. Na indústria petroquímica, sua principal aplicação está nas unidades de craqueamento catalítico e craqueamento térmico, atuando no processo de produção de etileno, propileno e gasolina, além da polimerização do etileno e propileno (ENWALD et al., 1999; FRANÇA, 2008; PAIVA, 2011).

A fluidização gás-sólido tem em seu emprego uma série de vantagens a serem consideradas, entre elas estão: possibilidade de operar com vazões elevadas do gás, altas velocidades de reação, maior uniformidade do leito e ausência de gradientes na maioria dos processos, facilidade de escoar o material em dutos, os sólidos se comportam como fluidos e maior interação entre gás e partícula (MOURA; GAMA; CARDIM, 2011).

Há ainda algumas desvantagens que comprometem o bom desempenho da fluidização, como o desgaste do equipamento e do material particulado em virtude do frequente impacto e atrito entre os sólidos e a parede; necessidade de uma grande estrutura de operação, pois geralmente são ineficientes para pequenas escalas; e consumo de energia devido à alta velocidade do fluido (MOURA; GAMA; GARDIM, 2011).

2.2 CRAQUEAMENTO CATALÍTICO FLUIDIZADO

Na indústria petroquímica, uma das famosas aplicações de leito fluidizado gás-sólido estão nas unidades de craqueamento catalítico, conhecida pela sigla FCC que deriva da sua expressão em inglês (*fluidized catalytic cracking*) (NITZ; GUARDANI, 2008). As unidades de FCC estão presentes em muitas refinarias e consistem em craquear a fração de gasóleo da etapa de destilação gerando um conjunto de produtos de alto valor agregado como a gasolina, GLP e diesel (GEORG, 2005; GAO et. al., 2008).

Em leitos fluidizados, o craqueamento catalítico é feito através da mistura da carga alimentada no riser (reator) com um catalisador que apresenta propriedades de um fluido quando arrastado pelo vapor (BUCHANAN, 1994; BEHJAT; SHAHHOSSEINI; MARVAST, 2010). No riser ocorrem as reações de craqueamento das frações pesadas do petróleo gerando produtos de grande interesse comercial. Vapor d'água é adicionado pelo fundo do riser e os hidrocarbonetos pesados são injetados por um atomizador (ou bico injetor) (CHEN, 2006; ALVAREZ, 2012). Pela entrada lateral são adicionados vapor d'água e catalisadores vindos do regenerador. Ao misturar com o catalisador quente, a carga é vaporizada quase que instantaneamente, dando início às reações de craqueamento (BEHJAT; SHAHHOSSEINI; MARVAST, 2010).

A medida em que as reações ocorrem, a atividade do catalisador diminui devido a deposição do coque e a adsorção de hidrocarbonetos pesados, reduzindo assim a taxa de reação. Juntamente com as reações de craqueamento catalítico, nas regiões de temperatura elevada, também ocorrem as reações de craqueamento térmico. Essas reações são indesejáveis, pois reduzem a eficiência do processo por aumentar o rendimento do coque, além de gerar produtos de qualidade inferior aos produtos gerados pelo craqueamento catalítico. Portanto, é de grande importância investigar parâmetros do processo que podem ser modificados para amenizar esses fenômenos indesejados (ALVAREZ-CASTRO et al., 2012; BARBOSA, 2012).

As fases gasosa e particulada são arrastadas até chegar ao topo do reator, onde são separadas por ciclones. O catalisador segue para o regenerador onde o coque e os hidrocarbonetos adsorvidos são queimados. Com a combustão desses compostos, os sítios ativos das partículas de

catalisador são regenerados, aumentando novamente sua atividade. Desta forma, eles podem ser reutilizados em novas reações de craqueamento (BEHJAT; SHAHHOSSEINI; MARVAST, 2010). A Figura 2 esquematiza uma unidade de FCC e ilustra o processo descrito.

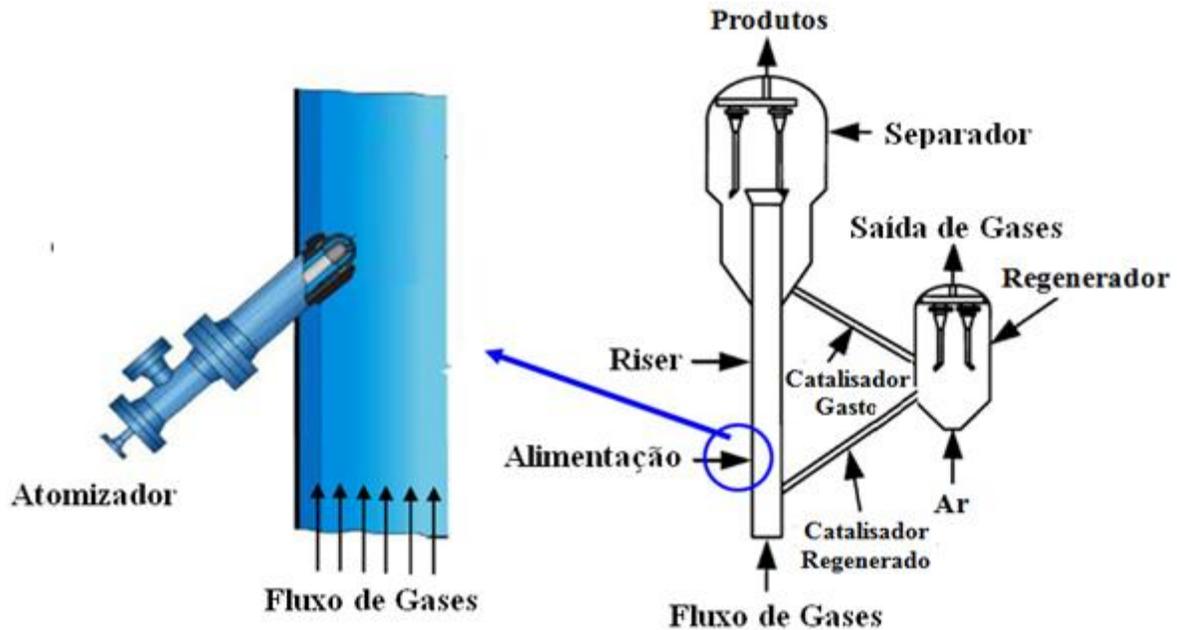


Figura 2 – Representação de uma unidade de craqueamento catalítico.

Fonte: BEHJAT; SHAHHOSSEINI; MARVAST, 2010 (adaptado).

2.3 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Durante muito tempo, a mecânica dos fluidos conseguiu estabelecer e consolidar os princípios fundamentais da dinâmica dos fluidos e formulação das equações para processos fluídicos. Todavia, com o avançar dos estudos e a necessidade de aprimorar o conhecimento para a otimização de processos que envolvessem variáveis mais complexas, as equações para descrever tais fenômenos também passaram a ser mais difíceis de se resolver manualmente. Surgiu-se então a necessidade de utilizar ferramentas computacionais para a resolução de problemas numéricos mais complexos, dando início assim à fluidodinâmica computacional (JAMERSON, 2012).

Derivada do termo inglês *Computational Fluid Dynamics* (CFD), trata-se de um ramo da mecânica dos fluidos que surgiu no final da década de 70 com a finalidade de estudar a dinâmica de fluidos através do uso da matemática aplicada, física e softwares computacionais. Atualmente, a fluidodinâmica computacional tem se apresentado como uma ferramenta importante na interpretação gráfica de processos, fluxo de trabalho, diagramas de fluxo e controle. Portanto, tem sido muito empregado em gerenciamento de projetos, gerenciamento de configurações, gestão de processos e controle de qualidade, pois através de CFD é possível avaliar um processo de ciclo fechado, analisar e controlar os balanços de tal sistema, podendo prever cenários de impacto no desempenho (NUNHEZ; SPOGIS, 2002; OLIVEIRA et. al., 2012).

Com o avanço da tecnologia e de computadores com alto poder de processamento, o uso da fluidodinâmica computacional na estimativa e análise de problemas tem sido empregado nos mais diversos setores como a aerodinâmica de veículos terrestres, aeronaves, turbinas eólicas, mísseis, transferência de calor e massa em processos industriais (caldeiras, trocadores de calor, equipamentos de combustão, bombas, ventiladores, tubulações etc); aplicações biomédicas (fluxo sanguíneo e fluxo do ar em pulmões, por exemplo); transferência de calor em sistemas de geração de energia; ventilação, aquecimento e refrigeração de fluidos em edifícios; transferência de calor em aplicações de embalagens de eletrônicos; deposição de vapor químico em circuitos integrados etc (RUMPFKEIL, 2014).

Muitas pessoas estão familiarizadas com o uso de CFD em análises de fluxo de ar ao redor de carros e aviões e a forma como o gás ou líquido afeta os objetos à medida que o fluido percorre. Todavia, as aplicações de CFD podem incluir todos os processos de fluidos e transferências de calor. Baseado nos balanços de quantidade de movimento, energia e massa, essas equações descrevem como a velocidade, pressão, temperatura e a densidade de um fluido em movimento estão relacionados. Na engenharia química, seu uso mais comum envolve processos com equações de conservação de energia e concentração de uma dada espécie química em tanques agitados, reatores, regeneradores, torres de destilação, trocadores de calor, entre outros. (NUNHEZ; SPOGIS, 2002; ROUSE, 2014). As Figuras 3 à 14 mostram algumas aplicações de CFD.

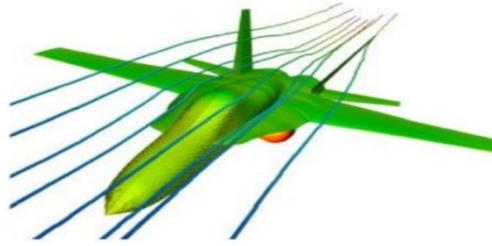


Figura 3 – Aplicação de CFD em indústria aeroespacial.

Fonte: RUMPFKEIL, 2014.

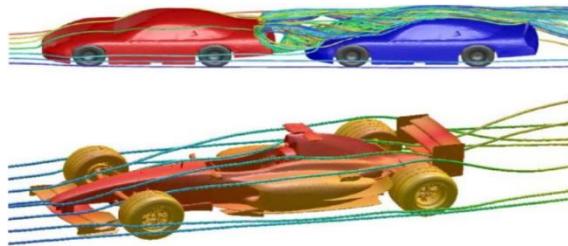


Figura 4 – CFD aplicado à aerodinâmica de automóveis.

Fonte: RUMPFKEIL, 2014.

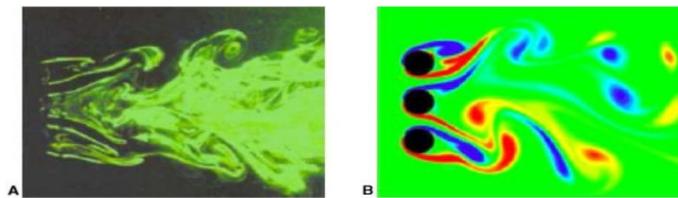


Figura 5 – Simulação numérica de CFD para um fluxo passando por 3 cilindros.

(A) Observação experimental (B) Simulação numérica.

Fonte: RUMPFKEIL, 2014.



Figura 6 – Aplicação de CFD em motor de combustão interna à diesel

Fonte: RUMPFKEIL, 2014.

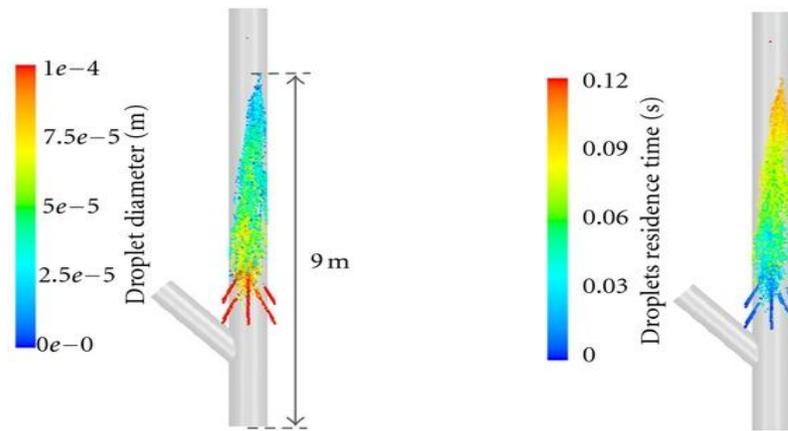


Figura 7 – Simulações numéricas de CFD em riser industrial de FCC.

Fonte: LOPES et al., 2012.

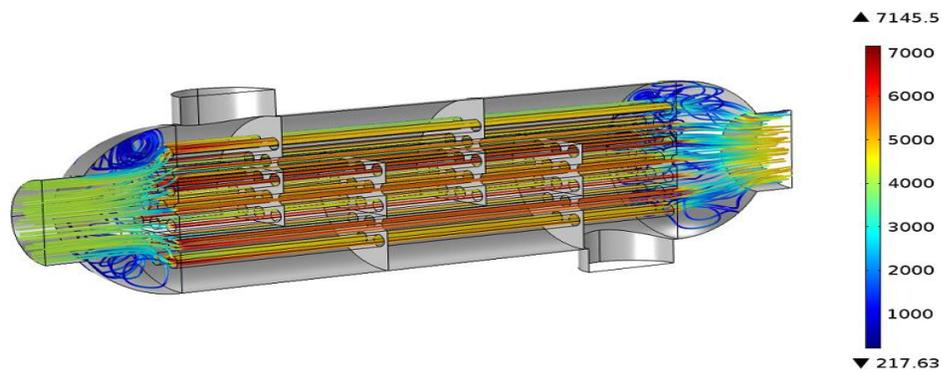


Figura 8 – Simulação das linhas de corrente do campo médio de velocidade da água em tubo de trocador de calor. A escala representa o número de Reynold.

Fonte: BANNACH, 2014.

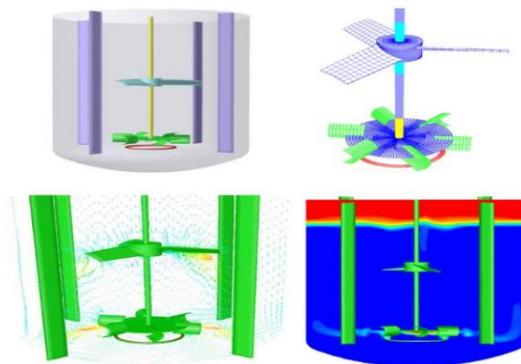


Figura 9 – Aplicação de CFD na simulação de um tanque agitado com gás.

Fonte: RUMPFKEIL, 2014.



Figura 10 – Construção de um novo tanque em uma usina de tratamento de água. A figura do lado direito superior descreve a simulação de CFD do tanque de água que será instalado dentro do local escavado.

Fonte: RUMPFKEIL, 2014.

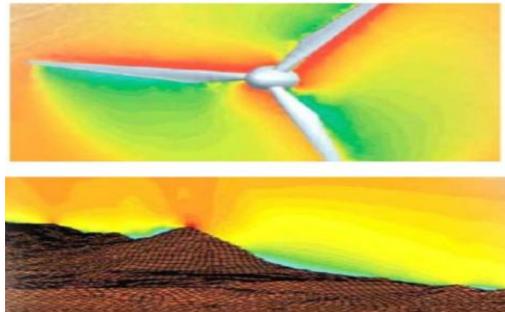


Figura 11 – Aplicação de CFD para prever o campo de velocidade de um turbina eólica e nas imediações do parque eólico.

Fonte: RUMPFKEIL, 2014.

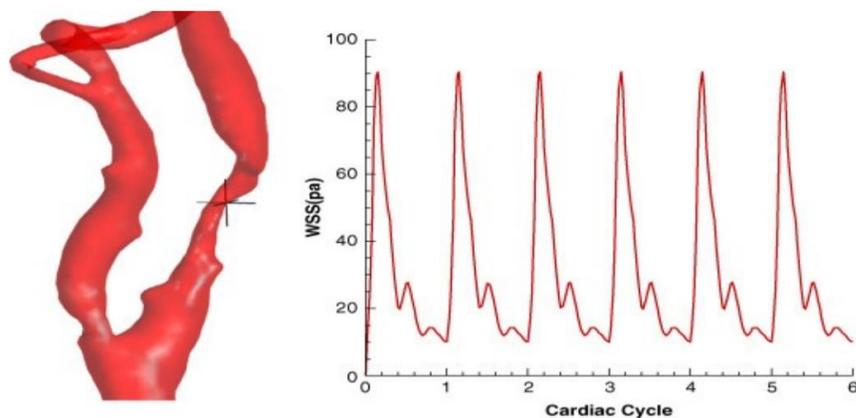


Figura 12 – Previsão via CFD da dependência do tempo e da tensão de cisalhamento no ponto mais estreito.

Fonte: RUMPFKEIL, 2014.

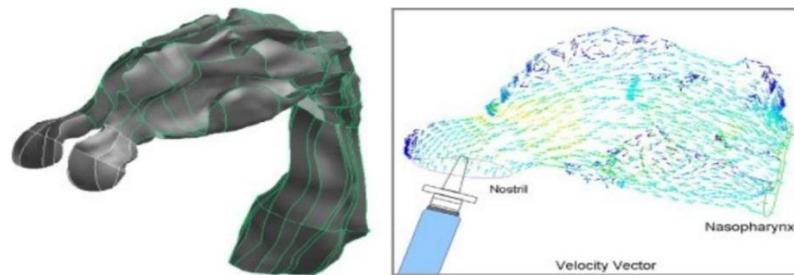


Figura 13 – Aplicação CFD para formação de partículas na dispersão de spray nasal como transporte de partícula e deposição na cavidade nasal.

Fonte: RUMPFKEIL, 2014.

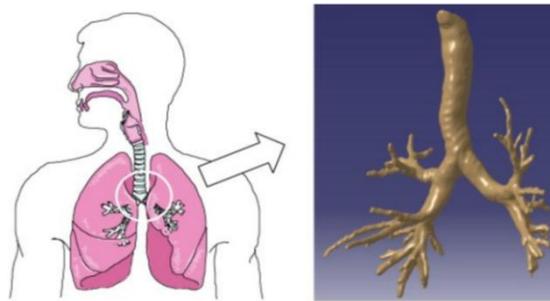


Figura 14 – Exemplo de geometria de uma árvore brônquica criada para simulação CFD.

Fonte: RUMPFKEIL, 2014.

O estudo computacional da dinâmica dos fluidos tem se mostrado uma poderosa ferramenta para a resolução de modelos matemáticos de muitos problemas práticos que apresentam escoamento. A utilização das técnicas de CFD tem proporcionado também resultados com maior acurácia mesmo em sistemas com escoamentos complexos, em situações onde o acesso a instrumentação de equipamentos industriais é remoto e onde os ensaios experimentais são ineficientes (NUNHEZ; SPOGIS, 2002; OLIVEIRA et. al., 2012).

2.3.1 Modelagem Fluidodinâmica

A solução de problemas complexos de engenharia e de qualquer problema físico, exige a solução de equações que representem o sistema de estudo. A esse conjunto de equações que representam a física de um problema dá-se o nome de modelagem matemática (MALISKA,

2004). Sendo assim, modelos matemáticos consistem no desenvolvimento de expressões matemáticas baseadas em modelos físicos que permitam descrever o comportamento do sistema em função de qualquer combinação das variáveis de operação ou dimensionamento, ou seja, os modelos matemáticos são capazes de representar numericamente a realidade (LEVENSPIEL, 2000; PERRY; GREEN, 2008; BASSANEZI, 2011).

Uma etapa importante do processo é a validação dos modelos que serão utilizados na simulação, essa validação requer comparações dos resultados numéricos com os resultados experimentais. Uma vez que os modelos matemáticos são validados, eles podem ser utilizados para reduzir tempo e custo, fazendo previsões da conversão, rendimento, velocidade, temperatura e outras variáveis de processo. Portanto, as simulações numéricas relacionadas ao estudo da dinâmica dos fluidos são amplamente utilizadas como uma maneira eficaz para determinar o comportamento físico dos escoamentos nas mais diversas situações e geometrias consideradas (SANTOS; MEDRONHO, 2007).

Para a modelagem do escoamento de fluidos, é necessário compreender informações relativas ao processo como o movimento do fluido. Num campo de escoamento, uma partícula é considerada uma pequena massa de fluido, também conhecida como partícula fluida, cada uma contendo uma grande quantidade de moléculas. As partículas fluidas possuem identidade fixa e ocupam um pequeno volume ΔV que se move com o escoamento. Na fluidodinâmica, a descrição do movimento dos fluidos é fundamentada nas técnicas de análise abordadas por Joseph Louis Lagrange (Turim 1736 – Paris 1813) e Leonhard Paul Euler (Basiléia 1707 – São Petersburgo 1783), as quais são conhecidas na literatura como descrição ou abordagem lagrangeana e descrição ou abordagem euleriana, respectivamente (RODRIGUEZ, 2015).

A descrição de Lagrange descreve o movimento do fluido a partir da observação individual de cada partícula fluida, acompanhando simultaneamente a trajetória da partícula. Sendo assim, pode-se afirmar que o método de Lagrange é função do tempo, pois é possível avaliar se as propriedades da partícula variam com o decorrer do tempo. Na descrição de Euler, também conhecida como descrição euleriana, o movimento do fluido é descrito em função do espaço e tempo específicos, ou seja, nesse caso, as informações do escoamento são obtidas

fixando o tempo e estabelecendo vários pontos de análise dentro do escoamento fluídico (pontos fixos do espaço), os quais permitiram obter uma visão do comportamento do escoamento naquele instante t (CAVALCANTI, 2001; RAMOS, 2007; RODRIGUEZ, 2015).

Em resumo e na prática, em situações onde é possível identificar e acompanhar elementos isolados, pode-se usar a descrição Lagrangeana, conferindo assim uma análise mais próxima da realidade. Entretanto, na maioria das aplicações, a implementação dessa técnica tende a ser mais dificultosa e custosa. Além disso, na engenharia, geralmente é mais importante avaliar o comportamento do conjunto de partículas dentro do processo de escoamento do que o comportamento de uma partícula individual. Ou seja, o comportamento individual de cada partícula na qual a abordagem Lagrangeana consegue avaliar, em muitos casos, pode ser desprezada. Portanto, em virtude da praticidade, a abordagem Euleriana tem sido o método atualmente mais empregado para estudar fluidodinâmica (CAVALCANTI, 2001, ROSA, 2016).

Para a modelagem de escoamentos bifásicos gás-sólido, existem dois tipos de abordagens: a abordagem euleriana-lagrangiana, também conhecida como Particle-Tracking e a abordagem euleriana-euleriana, também conhecida como modelos de dois fluidos ou modelo de fases separadas (MILLIOLI; SANTOS, 2011; ALVAREZ-CASTRO et al, 2012). Na abordagem euleriana-lagrangiana cada partícula da fase sólida é tratada individualmente, aplicando equações newtonianas para o movimento e considerando os efeitos das colisões das partículas e a ação da força do gás. Devido a sua complexidade, a abordagem euleriana-lagrangiana é recomendada para fluidos de baixa concentração de sólidos ou em aplicações onde a fração volumétrica da fase secundária não é significativa (JACKSON, 1963; MURRAY, 1965; GIDASPOW, 1994, SANTOS, 2010).

A abordagem euleriana-euleriana é amplamente utilizada em processos com escoamentos multifásicos e consiste em tratar ambas as fases como um fluido, sendo cada uma delas consideradas como contínuas e interpenetrantes, portanto, as fases são representadas por um conjunto de equações análogas de conservação de massa, energia e quantidade de movimento, onde tal modelo analisa as equações de conservação para os campos médios das variáveis de cada fase. (JACKSON, 1963; MURRAY, 1965; GIDASPOW, 1994). Consequentemente, a

abordagem Euleriana torna-se menos custosa a nível computacional quando comprada à abordagem Lagrangeana, pois exige a resolução de um menor número de equações (SANTOS, 2010; ARMELLINI, 2015).

Em processos de fluidização onde há uma grande quantidade de partículas presentes e em escoamentos multifásicos onde a interação entre as fases desempenham um papel significativo na determinação da hidrodinâmica dos sistemas, como é o caso dos processos de FCC, a abordagem de fluidos mais utilizada é a abordagem euleriana-euleriana (MASSAH; OSHINOWO, 2011). Por se tratar da abordagem de dois fluidos mais utilizada atualmente, é possível encontrar muitos trabalhos na literatura que aborde a fluidodinâmica do processo como modelagem euleriana-euleriana. Theologos e Markatos (1993), Theologos et al (1997), Rosa (2002), Lopes et al (2011) e Armellini (2015) são alguns exemplos de trabalhos que utilizaram a modelagem euleriana-euleriana em análises numéricas de risers de FCC.

A maioria dos escoamentos de interesse da engenharia são escoamentos turbulentos. O estado turbulento de um escoamento se caracteriza por movimentos irregulares e aleatórios onde quantidades transportadas (massa, momento, espécies escalares) flutuam no tempo e no espaço. Sendo assim, a turbulência exerce grande influência na distribuição das propriedades fluídicas e a modelagem fluidodinâmica da turbulência também se faz necessário (SOUZA et al., 2011).

Dentre as abordagens encontradas na literatura para simulações numéricas de escoamentos turbulentos tem-se: o DNS (Direct Numerical Simulation) onde as equações de Navier-Stokes são resolvidas para todas as escalas de turbulência; o LES (Large Eddy Simulation) que consiste em resolver as equações de Navier-Stokes apenas as escalas maiores de turbulência e utilizar equações algébricas simples para resolver as escalas menores de turbulência; e o RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) que se baseia na média temporal das equações de Navier-Stokes (LIMA, 2013).

2.3.2 Fluidodinâmica em risers de FCC

Os fenômenos que ocorrem no riser consistem em um escoamento multifásico e turbulento e com reações químicas endotérmicas. O entendimento desses fenômenos é fundamental para a otimização do processo (BUCHANAN, 1994; CHEN, 2006). Muitos estudos de simulação utilizando fluidodinâmica computacional (CFD) tem sido empregados para processos que envolvem escoamento multifásicos com reações químicas, turbulência e outros diversos fenômenos físico-químicos (OLIVEIRA et. al., 2012).

Os primeiros estudos em risers de FCC utilizando CFD baseava-se em simulações unidimensionais. Tsuo e Gidaspow (1990) demonstraram que análises unidimensionais em leitos fluidizados circulantes de FCC não são capazes de prever a realidade do processo. As simulações unidimensionais foram comparadas com resultados experimentais. Segundo os autores, a fração volumétrica de sólidos calculada na região totalmente desenvolvida do riser apresentou aproximadamente a metade do valor quando comparado ao valor experimental.

Sabe-se que análises de simulações unidimensionais não são confiáveis, pois pouco descrevem fidedignamente a realidade do processo em estudo, todavia, estudos que utilizaram simulações unidimensionais em risers de FCC foram importantes como base e direcionamento para estudos posteriores. No mesmo trabalho de Tsuo e Gidaspow (1990) citado anteriormente, os autores concluíram que o valor calculado da fração volumétrica de sólidos no riser foi inferior devido à formação de aglomerados de partículas sólidas, conhecidas atualmente como *clusters* (LI et al., 1993).

A Figura 15 demonstra o fenômeno de *clustering* em leitos fluidizados gás-sólido. Em casos como risers de FCC, as partículas sólidas quando em contato com o gás tendem a se aglomerar em algumas regiões do leito, caracterizando o sistema como heterogêneo e dificultando a validação de modelos que descrevam com acurácia o comportamento da fluidodinâmica do riser, o que tem desafiado muitos pesquisadores da área (LI et al., 1993; AGRAWAL et al., 2001; LI; KWAUK, 2003; LOPES, 2012).

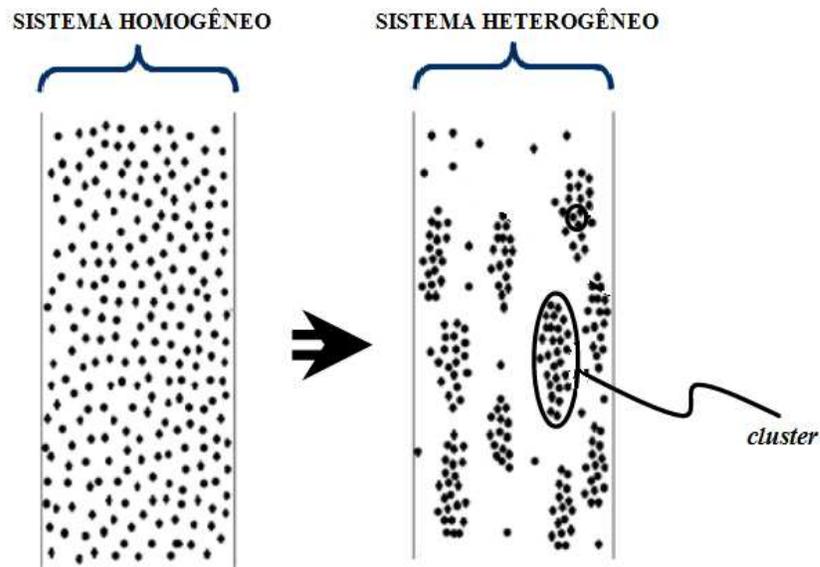


Figura 15 – Representação do fenômeno *clustering*.

Fonte: LI; KWAIK, 2003 (adaptado).

Com o aumento do poder de processamento dos computadores, mais estudos de simulação com CFD puderam ser realizados e análises bidimensionais e tridimensionais passaram a ser o foco dos pesquisadores com o objetivo de obter modelos matemáticos mais próximos da realidade e garantindo maior confiabilidade nos resultados de simulações computacionais. O tema de modelagem matemática será abordado com mais detalhes nos subitens posteriores deste trabalho.

2.3.3 Geometrias de riser

Com o avanço dos modelos fluidodinâmicos bidimensionais e tridimensionais, os risers começaram a ser simulados com geometrias cada vez mais complexas. Atualmente, existem muitos trabalhos registrados na literatura que comprovam que a geometria do riser influencia no padrão de escoamento entre as fases sólida e gasosa em seu interior. Sendo assim, muitas simulações numéricas com diferentes geometrias de riser tem sido realizadas por diversos autores na busca por melhores rendimentos e condições de processos (ROSA, 2002; LAN et al., 2009).

Lopes (2012) avaliou em seu trabalho o efeito da geometria sobre o escoamento em um riser industrial. A injeção do gásóleo se deu por bicos injetores localizados acima da região de alimentação do catalisador. O trabalho também avaliou diferentes configurações de saída do riser. Os resultados mostraram que diferentes configurações da geometria do riser podem modificar fortemente o padrão de escoamento e, conseqüentemente, o rendimento do processo. Os resultados obtidos das diferentes configurações de geometria na saída do riser estão expostos na Figura 16.

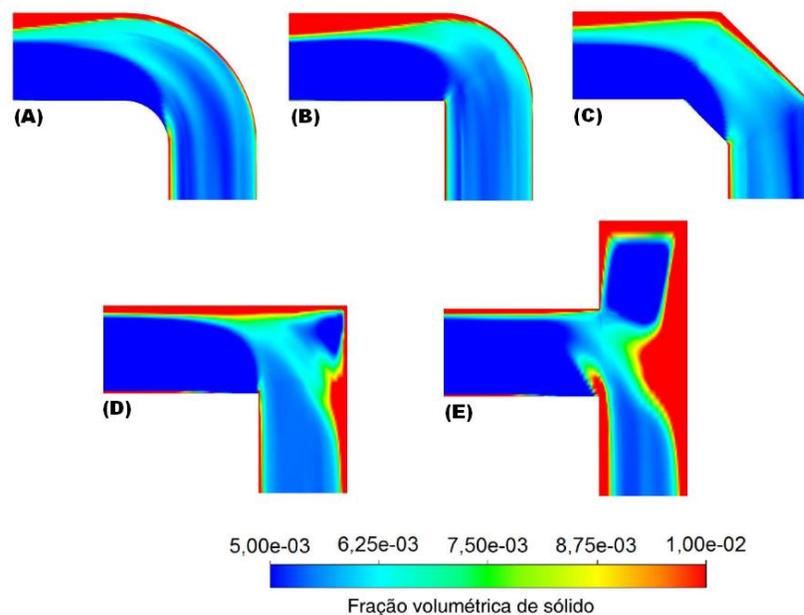


Figura 16 – Perfil de escoamento da fração volumétrica de sólido em diferentes configurações de saída em riser de FCC.

Fonte: LOPES, 2012.

Pelissari (2015) avaliou diferentes configurações de bicos injetores, examinando diferentes designs e ângulos dos mesmos, resultando em um estudo mais detalhado da influência de bicos injetores sobre o escoamento do processo. Na Figura 17 observa-se o resultado do efeito da fluidodinâmica para diferentes designs de bicos injetores obtidos por simulação numérica. Em ambos os trabalhos foi possível obter melhoria na distribuição da carga.

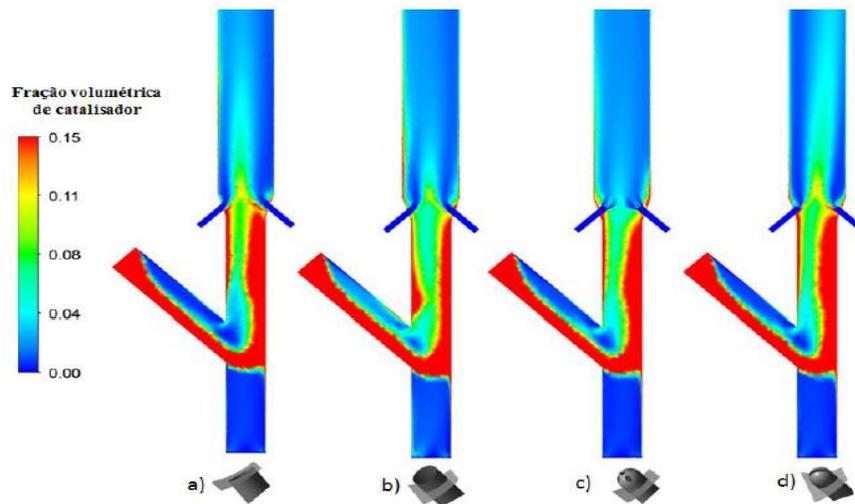


Figura 17 – Distribuição da fração volumétrica de catalisador para diferentes bicos injetores em riser de FCC.

Fonte: PELISSARI, 2015.

Ambos os trabalhos de Lopes (2012) e Pelissari (2015) confirmaram através de simulações numéricas a presença de elevadas concentrações de partículas de catalisador próximo à parede ao longo do riser. Esse padrão de escoamento, conhecido como *core-annulus*, já havia sido descrito por Berruti e Kalogerakis (1989) e também foi presenciado experimentalmente por Grace (1990) e Miller (1992). Segundo Zhang e seus colaboradores (1991), o padrão *core-annulus* também foi observado para as mais diversas condições de operação, diâmetros de coluna e propriedades dos sólidos. A representação do padrão de escoamento *core-annulus* está demonstrada na Figura 18.

No escoamento padrão *core-annulus* (centro-anular), há uma região central diluída de sólidos caracterizada por altas velocidades, enquanto que na região próxima à parede a velocidade diminui favorecendo a concentração de partícula. A concentração de catalisador próximo à parede pode provocar fluxo descendente nesta região, o que afetaria o tempo de residência do catalisador e demandaria mais energia para a circulação das partículas. Esse fenômeno pode ocasionar queda no rendimento do processo, gerando gasolina craqueada e diminuindo a atividade catalítica através da deposição do coque na superfície do catalisador, fazendo com que o mesmo precise ser regenerado com mais frequência e conseqüentemente diminua a sua vida útil (AGRAWAL et al., 2001; HARRIS, DAVIDSON; THORPE, 2002).

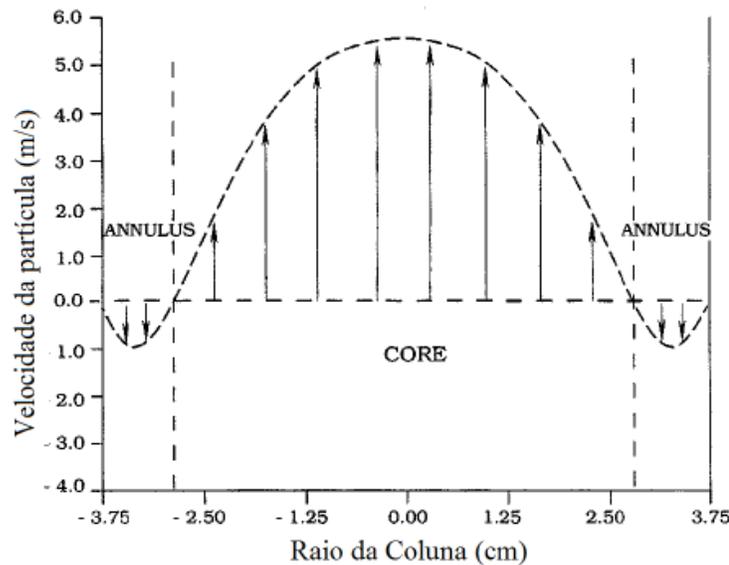


Figura 18 – Representação do padrão de escoamento *core-annulus*.

Fonte: NERI; GIDASPOW, 2000.

Sabendo que diferentes geometrias de riser afetam a dinâmica do escoamento e, conseqüentemente, o rendimento do processo; diversos autores tem despendido esforços em estudos de risers com diferentes geometrias e escoamento à frio, a fim de avaliar a fluidodinâmica e a influência no padrão de escoamento. Nesse sentido, defletores em risers tem despertado o interesse dos pesquisadores com a finalidade de minimizar o acúmulo de partículas sólidas na parede e garantir uma melhor distribuição e uniformidade das fases sólida e gasosa no riser de FCC (JIN; WEI; WANG, 2003; CHEN, 2006; JOHNSON; DAYVOD, 2014).

Defletores são estruturas que agem como obstáculos e são capazes de mudar o padrão de escoamento. Sua principal finalidade em riser de FCC consiste em diminuir o acúmulo de sólidos na parede de modo que as partículas de catalisador permaneçam na região central do reator onde a fase gasosa flui com maior velocidade. Seu uso foi inicialmente investigado por Jiang, Bi e Jean (1991) que compararam a conversão de ozônio em leito fluidizado com e sem estruturas internas, verificando experimentalmente que os leitos fluidizados modificados com estruturas internas apresentaram maiores conversões.

Há diversos modelos e formas geométricas de estruturas internas reportadas na literatura aplicados em equipamentos industriais a fim de modificar o escoamento padrão dos fluidos. Os

parâmetros geométricos de anéis internos em riser de FCC mais estudados são: a área aberta, a espessura e a quantidade. Esses parâmetros são os principais responsáveis pela mudança causada no escoamento (SAMRUAMPHIANSKUN; PIUMSOMBOOM; CHALERMSINSUWAN, 2012; ARMELLINI, 2015, ROSSBACH et al, 2015).

Zhu, Salah e Zhou (1997) estudaram a influência de anéis internos em riser de FCC a partir de cinco posições axiais diferentes com área de estrangulamento de 5, 10 e 30%. Os resultados apresentaram maior uniformidade da fração volumétrica de sólido e um escoamento mais diluído nas paredes do riser quando operado em altas velocidades de gás. Os autores também notaram que a presença dos anéis internos modificaram o escoamento do fluxo induzindo à formação de um perfil de velocidade axial em forma de S.

Chen (2006) comparou perfis de velocidade e de concentração em riser antes e depois da instalação de defletores de parede. Os resultados experimentais mostraram que a utilização de estruturas internas em riser geram perfil de velocidade mais uniforme quando comparado ao riser sem a presença de defletores de parede, melhorando assim a distribuição do catalisador e a hidrodinâmica do processo.

Shah et al (2012) investigou através de simulações numéricas bidimensionais, o efeito de defletores distribuídos ao longo da parede de um riser de FCC. Para descrever o movimento de fluxo multifásico do processo, os autores utilizaram a abordagem euleriana-euleriana-lagrangeana. Os resultados das simulações com e sem defletores foram analisados e verificou-se que os defletores foram capazes de diminuir o fluxo descendente de partículas de catalisador na região próximo à parede.

2.4 PONTOS DE INVESTIGAÇÃO

Com base na revisão bibliográfica apresentada, muitos pesquisadores tem direcionado os estudos em riser de FCC utilizando defletores na parede ao longo do tubo do riser. Existem muitas patentes de trabalhos com diversos modelos e formas geométricas de estruturas internas

em riser. A grande maioria relata melhorias na fluidodinâmica do processo, todavia, devem-se levar em consideração alguns fatores passíveis de investigação. Entre eles estão:

- Quais os parâmetros geométricos de defletores em risers de FCC que mais influenciam na mudança do padrão de escoamento?
- Quais os parâmetros que são estatisticamente significativos?
- Quão vantajosa pode ser essa mudança do escoamento em um riser de FCC?
- Quais as desvantagens do uso de defletores em risers de FCC?

As questões listadas acima ainda não foram respondidas satisfatoriamente pelos estudos reportados na literatura. Ainda há muitas informações contraditórias, como por exemplo: Há trabalhos publicados que a utilização de estruturas internas em risers de FCC podem diminuir a queda de pressão no sistema, enquanto que outros trabalhos relatam que uma das desvantagens do uso de defletores em risers de FCC é a queda de pressão acentuada que esse pode provocar no equipamento afetando as condições de operação.

Sendo assim, mais estudos são necessários quanto ao uso de defletores em risers de FCC principalmente quanto aos parâmetros geométricos dos mesmos, pois são os principais responsáveis pelas mudanças provocadas no escoamento. Além disso, muitos estudos de simulação utilizam apenas métodos comparativos simples para avaliar a influência dos fatores de interesse. Este trabalho se propõe a estudar a influência não apenas por métodos comparativos, mas também através de ferramentas estatísticas para avaliar os fatores que são mais significativos no processo. Portanto, espera-se através deste trabalho responder algumas das questões acima e agregar mais conhecimento acerca o uso de defletores em risers de FCC.

3 MODELAGEM MATEMÁTICA

Para descrever o escoamento bifásico gás-sólido em um riser de FCC, este trabalho utilizou o método Eulerian-Eulerian. Sabendo que o método faz uso das equações de fenômenos de transporte, serão necessárias equações de conservação para cada fase (gasosa e sólida), bem como a interação entre elas. As equações e os modelos matemáticos descritos a seguir foram extraídos do Guia Teórico (Theory Guide) do software ANSYS Fluent (2017), os quais foram utilizadas na modelagem numérica do escoamento considerando regime transiente e fluxo tridimensional. Para diferenciar as equações de cada uma das fases foram utilizados os índices “g” para a fase gasosa e “s” para a fase sólida.

3.1 EQUAÇÕES DE TRANSPORTE

As equações de conservação de massa para cada fase são:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s) = 0 \quad (2)$$

Onde para cada fase, α corresponde a fração volumétrica, ρ corresponde a massa específica em kg/m^3 e \mathbf{v} corresponde a velocidade em m/s . A transferência de massa não foi considerada entre as fases e o escoamento foi considerado incompressível, porém a massa específica da fase gasosa não é constante, varia proporcionalmente com a composição da mistura, ou seja, cada espécie i da fase gasosa tem um valor de massa específica diferente. Nesse caso, a massa específica média da fase gasosa é calculada da seguinte forma:

$$\rho_g = \sum [(Y_{g,i})(\rho_{g,i})] \quad (3)$$

Na Equação (3), $Y_{g,i}$ representa a fração mássica da espécie i e $\rho_{g,i}$ representa a massa específica de cada espécie i presente na fase gasosa.

As equações para o transporte de quantidade de movimento de ambas as fases são:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = \nabla \{[\alpha_g \mu_g (\nabla \mathbf{v}_g) + (\nabla \mathbf{v}_g)^T]\} + \alpha_g (\rho_g \mathbf{g} - \nabla P_g) + \beta (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g) \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = \nabla \{[\alpha_s \mu_s (\nabla \mathbf{v}_s) + (\nabla \mathbf{v}_s)^T]\} + \alpha_s (\rho_s \mathbf{g} - \nabla P_s) + \beta (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) \quad (5)$$

Onde:

$$\nabla \{[\alpha_g \mu_g [(\nabla \mathbf{v}_g) + (\nabla \mathbf{v}_g)^T]]\} = \nabla \cdot \tau_g \quad (6)$$

$$\nabla \{[\alpha_s \mu_s [(\nabla \mathbf{v}_s) + (\nabla \mathbf{v}_s)^T]]\} = \nabla \cdot \tau_s \quad (7)$$

Substituindo as Equações (6) e (7) nas Equações (4) e (5), podemos reescrevê-las da seguinte maneira:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = \nabla \cdot \tau_g + \alpha_g (\rho_g \mathbf{g} - \nabla P_g) + \beta (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g) \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = \nabla \cdot \tau_s + \alpha_s (\rho_s \mathbf{g} - \nabla P_s) + \beta (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) \quad (9)$$

Onde $\beta (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g)$ e $\beta (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s)$, representam a interação entre as fases no escoamento bifásico gás-sólido, β o coeficiente de transferência da quantidade de movimento entre as fases cujo equacionamento será abordado no tópico “Modelo de Arraste”, P é a pressão do sistema, \mathbf{g} a aceleração da gravidade e; τ_g e τ_s , os tensores de tensão, sendo esses últimos expressos pelas equações (10) e (11) a seguir.

$$\tau_g = \alpha_g \mu_g [(\nabla \mathbf{v}_g) + (\nabla \mathbf{v}_g)^T] - \frac{2}{3} \alpha_g \mu_g (\nabla \cdot \mathbf{v}_g) \mathbf{I} + \alpha_g \tau_t \quad (10)$$

$$\tau_s = \alpha_s \mu_s [(\nabla \mathbf{v}_s) + (\nabla \mathbf{v}_s)^T] - \frac{2}{3} \alpha_s \mu_s (\nabla \cdot \mathbf{v}_s) \mathbf{I} \quad (11)$$

Nas Equações (10) e (11), μ_g e μ_s são as viscosidades das fases gasosa e sólida, respectivamente; e $\boldsymbol{\tau}_t$ representa a tensão de Reynolds ou tensão de cisalhamento turbulenta. O equacionamento do tensor de Reynolds ($\boldsymbol{\tau}_t$) será abordado posteriormente no tópico “Modelo de Turbulência”.

As equações de transporte de energia térmica são dadas pelas Equações (12) e (13):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g H_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g H_g) = \nabla \cdot (\alpha_g \lambda_g \nabla T_g) + \mathbf{h}(T_s - T_g) + \alpha_g \rho_g \sum_r \Delta H_r \frac{\partial Y_i}{\partial t} \Big|_r \quad (12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s H_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s H_s) = \nabla \cdot (\alpha_s \lambda_s \nabla T_s) + \mathbf{h}(T_g - T_s) \quad (13)$$

Onde H é a entalpia específica de cada fase, λ sua condutividade térmica, T é a temperatura, e \mathbf{h} o coeficiente de transferência de calor entre as fases. O termo fonte ao final da Equação (12) contabiliza a variação da entalpia da fase gasosa devido às reações endotérmicas de craqueamento. Neste termo, ΔH_r representa a entalpia da reação e $Y_i \Big|_r$ é a fração mássica do reagente i na reação r .

O coeficiente de transferência de calor (\mathbf{h}) entre as fases, cujo equacionamento é designado pela Equação 14, é expresso em função da condutividade térmica (λ_g) da fase gasosa, do número de Nusselt (Nu) e do diâmetro da partícula (d_s).

$$\mathbf{h} = \frac{Nu \lambda_g}{d_s} \quad (14)$$

O número de Nusselt (Nu) foi modelado pela correlação de Ranz-Marshall, cuja correlação é apresentada na Equação 15.

$$Nu = 2 + 0,6Re^{0,5}Pr^{0,3} \quad (15)$$

Onde (Re) é o número de Reynolds e (Pr) é o número de Prandtl.

E finalmente, devido à presença das reações químicas, são necessárias equações que garantam a conservação das espécies químicas, representadas por suas respectivas frações mássicas na fase gasosa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g Y_i) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g Y_i) = \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g D_i \nabla Y_i) + R_i \quad (16)$$

Onde D_i é o coeficiente de difusão da espécie i na fase gasosa e R_i é a taxa de produção ou consumo da espécie química. Mais detalhes serão abordados no tópico “Modelo Cinético”.

3.2 MODELO DE ARRASTE

Para representar o efeito de arraste de partículas causado pela fase gasosa, fenômeno muito corrente em processos de FCC, usa-se o coeficiente de transferência de quantidade de movimento (β) apresentado anteriormente nas equações de conservação de quantidade de movimento. Atualmente, existem vários modelos que representam o fenômeno de arraste de partículas. Neste trabalho, optou-se por utilizar o modelo de arraste desenvolvido por Yang et al. (2003) denominado EMMS cujo modelo matemático está apresentado nas equações a seguir.

Coeficiente de transferência de quantidade de movimento (β):

$$\beta = \begin{cases} \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_s \rho_g |\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g|}{d_\alpha} f(\alpha) & , \quad \alpha_g \geq 0,74 & (17) \\ 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g d_s^2} + 1,75 \frac{\alpha_s \rho_g |\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g|}{d_s} & , \quad \alpha_g < 0,74 & (18) \end{cases}$$

Coeficiente adimensional de arraste (C_D):

$$C_D = \begin{cases} 0,44 \alpha_s^{-1,65} & , \quad Re \geq 1000 & (19) \\ \alpha_s^{-1,65} \frac{24}{\alpha_s Re'} [1 + 0,15(\alpha_s Re')^{0,687}] & , \quad Re < 1000 & (20) \end{cases}$$

Sendo:

$$Re' = \alpha_s Re \quad (21)$$

$$Re = \frac{\rho_g d_s |\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g|}{\mu_g} \quad (22)$$

Na equação de arraste de Yang et al. (2003), d_s é o diâmetro médio das partículas sólidas, C_D é o coeficiente de arraste e $f(\alpha)$ é o fator de correção estimado por Wen e Yu (1996) que corresponde à:

$$f(\alpha) = -0,570 + \frac{0,0214}{4(\alpha_g - 0,7463)^2 + 0,0044} \quad (0,74 \leq \alpha_g \leq 0,82) \quad (23)$$

$$f(\alpha) = -0,0101 + \frac{0,0038}{4(\alpha_g - 0,7789)^2 + 0,004} \quad (0,82 < \alpha_g \leq 0,97) \quad (24)$$

$$f(\alpha) = -31,8295 + 32,8295 \alpha_g \quad (\alpha_g > 0,97) \quad (25)$$

3.3 TEORIA CINÉTICA DO ESCOAMENTO GRANULAR

A teoria cinética do escoamento granular aplica o conceito de temperatura granular análoga à temperatura termodinâmica dos gases da teoria cinética dos gases. Trata-se de uma variável relacionada à energia cinética do movimento de flutuações das partículas, sendo responsável pela determinação da pressão e viscosidade da fase sólida.

A pressão dos sólidos (P_s) encontrada na equação de conservação de momento da fase sólida (Equação 5) equaciona o choque entre as partículas e pode ser dada por:

$$P_s = \alpha_s \rho_s \theta_s + 2\rho_s (1 + e_{ss}) \alpha_s^2 g_{0,ss} \theta_s \quad (26)$$

A Equação (26) é composta de um termo cinético (dominante em regiões diluídas) e um termo responsável pelas colisões entre as partículas (mais significativa em regiões densas).

O termo e_{ss} é o coeficiente de restituição para colisões entre as partículas. Através deste termo é possível equacionar a dissipação de energia devido às colisões entre as partículas. Baseados em estudos, foi definido um valor de 0,9 para o coeficiente de restituição.

E o termo $g_{0,ss}$ é a função de distribuição radial que rege a transição entre a condição “compressível” ($\alpha_s < \alpha_{s,max}$) e a condição “incompressível” ($\alpha_s = \alpha_{s,max}$) entre as partículas. A função de distribuição radial ($g_{0,ss}$) foi modelada de acordo com a Equação 27:

$$g_{0,ss} = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} \quad (27)$$

Sendo $\alpha_{s,max}$ o parâmetro de máximo empacotamento, ou seja, a máxima fração volumétrica possível para a fase granular (fase sólida). Neste trabalho, utilizou-se o valor de 0,63 como máximo empacotamento, considerando as partículas como esféricas monodispersas.

O termo (θ_s) refere-se à temperatura granular que foi calculado através da Equação 28 definida por Syamlal et al. (1993), o qual assume que os termos difusivo e convectivo podem ser desprezados sobre a premissa de que a produção e a dissipação da energia granular estão em equilíbrio.

$$\theta_s = \left\{ \frac{-K_1 \alpha_s \nabla \cdot \mathbf{v}_s + \sqrt{(K_1 \alpha_s \nabla \cdot \mathbf{v}_s)^2 + 4K_4 \alpha_s [K_2 (\nabla \cdot \mathbf{v}_s)^2 + 2K_3 (\nabla \cdot \mathbf{v}_s^2)]}}{2K_4 \alpha_s} \right\}^2 \quad (28)$$

Onde:

$$K_1 = 2(1 + e_{ss})\rho_s g_{0,ss} \quad (29)$$

$$K_2 = \frac{4d_s \rho_s (1 - e_{ss}) \alpha_s g_{0,ss}}{3\sqrt{\pi}} - \frac{2}{3} K_3 \quad (30)$$

$$K_3 = \frac{d_s \rho_s}{2} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{3(3 - e_{ss})} [1 + 0,4(1 - e_{ss})(3e_{ss} - 1)\alpha_s g_{0,ss}] + \frac{8\alpha_s g_{0,ss}(1 + e_{ss})}{5\sqrt{\pi}} \right\} \quad (31)$$

$$K_4 = \frac{12(1 - e_{ss}^2)\rho_s g_{0,ss}}{d_s \sqrt{\pi}} \quad (32)$$

Através da variável temperatura granular (θ_s) é possível também calcular a viscosidade dos sólidos (μ_s) da equação de conservação de momento da fase sólida (Equação 5). O modelo da viscosidade dos sólidos (Equação 33) também é composto de um termo cinético (dominante em regiões diluídas) e um termo colisional (mais significativo nas regiões densas).

$$\mu_s = \mu_{s,kin} + \mu_{s,col} \quad (33)$$

Onde:

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5} \alpha_s \rho_s d_s g_{0,ss} (1 + e_{ss}) \left(\frac{\theta_s}{\pi} \right)^{1/2} \alpha_s \quad (34)$$

$$\mu_{s,kin} = \frac{\alpha_s \rho_s d_s \sqrt{\theta_s \pi}}{6(3 - e_{ss})} \left[1 + \frac{2}{5} (1 + e_{ss})(3e_{ss} - 1)\alpha_s g_{0,ss} \right] \quad (35)$$

3.4 MODELO DE TURBULÊNCIA

Sabe-se que o escoamento em riser de FCC é classificado como turbulento. Neste trabalho, para modelar a turbulência, optou-se pelo método de RANS, pois é o que apresenta menor custo computacional e vem sendo utilizado com êxito em muitas simulações de riser de FCC, principalmente de escalas industriais. Dentre os modelos do método de RANS, o modelo RSM (Reynolds Stress Models), também conhecido como modelo de segunda ordem do método de RANS, é o modelo mais completo para esse tipo de abordagem (VEGENDLA, 2012; LOPES, 2012; LIMA, 2013). Além disso, o modelo consegue prever com grande precisão as características do escoamento nas regiões onde ocorrem mudanças bruscas na direção do fluxo (LOPES, 2012). Sendo assim, o modelo RSM foi escolhido para ser utilizado neste trabalho.

Sabe-se que, matematicamente, o regime de escoamento de um fluido é classificado pelo número de Reynolds. O modelo de Reynolds Stress Model (RSM), como o próprio nome sugere, é capaz de modelar tensores de Reynolds. Neste tipo de modelagem, descreve-se o comportamento médio do escoamento turbulento, ou seja, as propriedades do fluxo são decompostas num valor médio. A correlação das flutuações das variáveis médias é interpretada pelo tensor de Reynolds, que está apresentado na equação a seguir.

$$\tau_t = -\overline{\rho v'_i v'_j} \quad (36)$$

A equação do momento em termos das variáveis médias resulta, portanto, em:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g \overline{v' v'}) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g v_g \overline{v' v'}) \\ = -\alpha_g \rho_g \left[\overline{v' v'} (\nabla v_g)^T + (\nabla v_g) \overline{v' v'} \right] + \nabla \cdot \left[\alpha_g \left(\mu_g + \rho_g \frac{C_\mu k^2}{\sigma_k \epsilon} \right) \nabla \overline{v' v'} \right] \\ + \alpha_g \phi - \frac{2}{3} \alpha_g \delta \rho_g \epsilon + \Pi_{R,ij} \end{aligned} \quad (37)$$

Em que C_μ e σ_k são constantes, ϕ corresponde à deformação em virtude da pressão e $\Pi_{R,ij}$ representa a influência da fase dispersa sobre a turbulência da fase contínua.

Para estimar o termo de deformação devido à pressão (ϕ) foi utilizado o modelo *Linear Pressure-Strain* proposto por Gibson e Launder (1978):

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 \quad (38)$$

Na Equação (37), ϕ_1 é o termo relacionado à pressão de deformação lenta e ϕ_2 o termo relacionado à pressão de deformação rápida.

$$\phi_1 = -\rho_g \alpha_g \left[C_{S1} a + C_{S2} \left(a \cdot a - \frac{1}{3} a \cdot a \delta \right) \right] \quad (39)$$

$$\begin{aligned} \phi_2 = & -C_{R1}\Psi a + -C_{R2}\rho_g k S_d - C_{R3}\rho_g k S_d \sqrt{a \cdot a} + C_{R4}\rho_g k \left(a S_d^T + S_d a^T - \frac{2}{3} a \cdot S_d \delta \right) \\ & + C_{R5}\rho_g k (a W^T + W a^T) \end{aligned} \quad (40)$$

Sendo:

δ é a função matemática conhecida como delta de Kronecker

$$\Psi = \overline{\mathbf{v}'\mathbf{v}'}(\nabla\mathbf{v}_g)^T + (\nabla\mathbf{v}_g)\overline{\mathbf{v}'\mathbf{v}'} \quad (41)$$

$$a = \frac{\overline{\mathbf{v}'\mathbf{v}'}}{k} - \frac{2}{3}\delta \quad (42)$$

$$S_d = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{v}_g + (\nabla\mathbf{v}_g)^T] \quad (43)$$

$$W = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{v}_g - (\nabla\mathbf{v}_g)^T] \quad (44)$$

$$k = \frac{1}{2}\overline{\mathbf{v}'\mathbf{v}'} \quad (45)$$

$$C_{S1} = 1,7; C_{S2} = -1,05; C_{R1} = 0,9; C_{R2} = 0,8; C_{R3} = 0,65; C_{R4} = 0,625; C_{R5} = 0,2$$

Onde Ψ é o termo de produção exata, a é o tensor de anisotropia, S_d é a taxa de deformação, W é a vorticidade e k refere-se à energia cinética turbulenta. O termo referente à taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ) é calculado a partir da solução de uma equação diferencial de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \epsilon) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \epsilon) = \nabla \cdot \left[\alpha_g \left(\mu_g + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + \alpha_g \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon,1} P^K - C_{\epsilon,2} \rho_g \epsilon) \quad (46)$$

Onde σ_ϵ , $C_{\epsilon,1}$ e $C_{\epsilon,2}$ são constantes e P^K corresponde à produção de energia cinética turbulenta devido às forças viscosas.

$$\sigma_\epsilon = 1,3; C_{\epsilon,1} = 1,44; C_{\epsilon,2} = 1,92 \quad (47)$$

$$P^K = \mu_t \nabla \mathbf{v}_g \cdot [\nabla \mathbf{v}_g - (\nabla \mathbf{v}_g)^T] \quad (48)$$

O termo $(\Pi_{R,ij})$ da Equação (37) pode ser calculado da seguinte maneira (COKLJAT et al., 2006):

$$\Pi_{R,ij} = \frac{2}{3} \delta K_{dc} (k_{dc} - 2k_c + V_{rel} \cdot V_{drift}) \quad (49)$$

Onde K_{dc} é o coeficiente de arraste entre as fases, k_{dc} é a covariância entre as velocidades das fases contínua e dispersa, k_c é a energia cinética turbulenta da fase contínua, V_{rel} é a velocidade relativa, V_{drift} a velocidade de deslizamento e δ o delta de Kronecker.

3.5 MODELO CINÉTICO

Em um riser de FCC ocorrem diversas reações químicas simultaneamente para cada espécie química. Em razão disso, fica inviável definir todas as reações químicas e espécies envolvidas na modelagem matemática. Sendo assim, a modelagem cinética utilizada neste trabalho foi baseada pelo método de *lumps* proposto por Weekman e Nace (1970), onde cada *lump* representa um grupo de espécie química. Existem diversos modelos cinéticos na literatura baseados no método de *lumps*, desde modelos mais simples (3 e 4 *lumps*) e modelos mais completos (10, 12 ou mais *lumps*).

Para o referente trabalho, optou-se por utilizar o modelo cinético de 11-*lumps* implementado por Barbosa (2012) que, por sua vez, foi baseado no modelo de 10-*lumps* de Jacob et al. (1976). A modelagem consiste em dividir os componentes da fração de petróleo de acordo com seus respectivos pontos de ebulição e/ou números de carbonos em suas moléculas. A Figura

19 abaixo, exhibe o esquema cinético de 10-lumps de Jacob et al (1976) utilizado como referência.

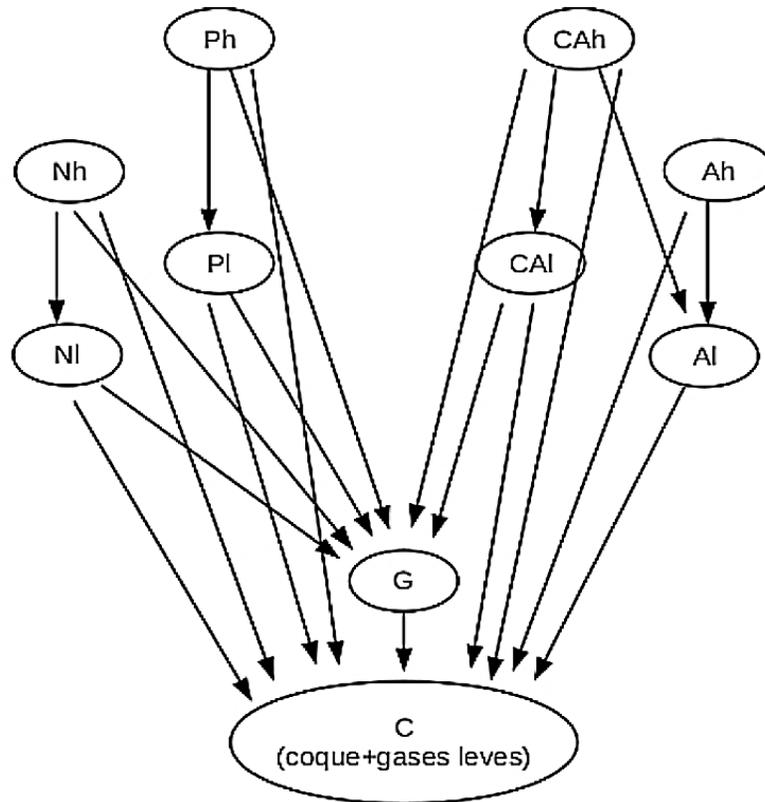


Figura 19 – Modelo cinético de 10-lumps.

Fonte: JACOB et al., 1976.

Onde:

- Nh (naftênicos pesados), Ph (parafínicos pesados), Ah (aromáticos pesados) e CAh (aromáticos pesados com grupos substituintes): Frações pesadas (HFO) e ponto de ebulição acima de 342°C.
- NI (naftênicos leves), PI (parafínicos leves), AI (aromáticos leves) e CAI (aromáticos leves com grupos substituintes): Frações Leves (LFO) e ponto de ebulição entre 221°C e 342°C.
- G (gasolina): C₅ e ponto de ebulição de 221°C.
- C (coque e gases leves): C₁ a C₄ + coque.

As propriedades físicas de cada um dos grupos envolvidos nas reações estão organizadas na Tabela 1 abaixo.

Tabela 1 – Propriedades físicas dos grupos envolvidos nas reações.

Espécie	Massa molecular (kg.kmol⁻¹)	Massa específica (kg.m⁻³)	Calor específico (J.kg⁻¹.K⁻¹)	Viscosidade (kg.m⁻¹.s⁻¹)	Condutividade térmica (W.m⁻¹.K⁻¹)	Calor de formação (J.kg⁻¹)
Nh	400	6,0	2420	5x10 ⁻⁵	2,50x10 ⁻²	5,23x10 ⁵
Ph	400	6,0	2420	5x10 ⁻⁵	2,50x10 ⁻²	5,23x10 ⁵
Ah	400	6,0	2420	5x10 ⁻⁵	2,50x10 ⁻²	5,23x10 ⁵
Cah	400	6,0	2420	5x10 ⁻⁵	2,50x10 ⁻²	5,23x10 ⁵
NI	200	2,0	2420	1,66x10 ⁻⁵	2,50x10 ⁻²	4,22x10 ⁵
PI	200	2,0	2420	1,66x10 ⁻⁵	2,50x10 ⁻²	4,22x10 ⁵
Al	200	2,0	2420	1,66x10 ⁻⁵	2,50x10 ⁻²	4,22x10 ⁵
Cal	200	2,0	2420	1,66x10 ⁻⁵	2,50x10 ⁻²	4,22x10 ⁵
G	100	2,0	2420	1,66x10 ⁻⁵	2,50x10 ⁻²	3,72x10 ⁵
C	155	420	1150	1,66x10 ⁻⁵	2,50x10 ⁻²	0

Fonte: PITAULT et al., 1994; NAYAK et al., 2005; LOPES et al., 2011.

As propriedades do grupo C foram definidas proporcionalmente à quantidade de cada um dos seus componentes, ou seja, 30% de coque e 70% de gases leves (BARBOSA, 2012). As propriedades do catalisador, extraídas de Lopes et al. (2011), são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2 – Propriedades físicas do catalisador.

Massa específica (kg.m⁻³)	Calor específico (J.kg⁻¹.K⁻¹)	Viscosidade (kg.m⁻¹.s⁻¹)	Condutividade térmica (W.m⁻¹.k⁻¹)	Diâmetro da partícula (µm)
1400	1090	1,7x10 ⁻⁵	4,54x10 ⁻²	65

Fonte: LOPES et al., 2011.

A Tabela 3 a seguir, exhibe os parâmetros cinéticos necessários para os cálculos referente ao modelo de 10-*lumps*. Os dados foram fornecidos por Arbel et al. (1995).

Tabela 3 – Parâmetros cinéticos do craqueamento catalítico.

Reação	Fator Pré-Exponencial a 811 K (10^3 s^{-1})	Energia de ativação (J.kmol^{-1})
Nh \rightarrow NI	60	0,196
Ph \rightarrow NI	60	0,196
Ah \rightarrow Al	60	0,049
Cah \rightarrow Cal	60	0,196
Nh \rightarrow G	23	0,939
Ph \rightarrow G	23	0,611
Cah \rightarrow G	60	0,685
Nh \rightarrow C	73	0,149
Ph \rightarrow C	73	0,099
Cah \rightarrow C	73	0,149
Ah \rightarrow C	73	0,198
Cah \rightarrow Al	60	0,489
NI \rightarrow G	60	0,752
PI \rightarrow G	60	0,282
Cal \rightarrow G	60	0,196
NI \rightarrow C	73	0,099
PI \rightarrow C	73	0,099
Al \rightarrow C	73	0,050
Cal \rightarrow C	73	0,010
G \rightarrow C	42	0,048

Fonte: ARBEL et al., 1995.

No modelo de 10-*lumps* proposto por Jacob et al. (1976) todas as reações são de primeira ordem. Sendo assim, taxa de reação para cada uma das espécies pode ser dado por Secchi et al. (2001):

$$R_i = \varphi \left(\frac{1}{1 + K_h C_{ah}} \right) M_{w,i} \sum K_r C_i \quad (50)$$

Onde:

φ é a atividade catalítica;

K_h é a constante de adsorção ($5,68 \times 10^{-5}$);

C_{ah} é a porcentagem mássica de aromáticos pesados;

$M_{w,i}$ é a massa molar do componente i ;

C_i é a concentração molar da espécie i ;

K_r é a constante de reação;

A contante de reação obedece a equação de Arrhenius:

$$K_r = K_r^o \exp\left(\frac{-E_r}{RT}\right) \quad (51)$$

Sendo E_r é a energia de ativação, K_r^o é o fator pré-exponencial (apresentados na Tabela 3), R é a constante dos gases e T a temperatura absoluta.

Sabendo que o coque representa 30% do grupo C, Nayak et al (2005) também considera esta proporção para a desativação do catalisador devido a deposição de coque. Quanto mais coque no sistema, maior a probabilidade do mesmo se depositar nos sítios ativos do catalisador, diminuindo a atividade catalítica. Sendo assim, apenas o coque do grupo C é levado em consideração no cálculo da atividade catalítica, φ , dado por Nayak et al. (2005):

$$\varphi = \frac{B_C + 1}{B_C + \exp(A_C \cdot 0,3C_C)} \quad (52)$$

Onde:

$A_C = 4,29$ e $B_C = 10,24$ são constantes de desativação;

C_C é a concentração mássica do coque no grupo C

Outro fator a ser levado em consideração na modelagem cinética do processo de craqueamento em riser de FCC é o craqueamento térmico que ocorre paralelamente ao

craqueamento catalítico. Barbosa et al. (2012) propôs um modelo de 11-*lumps* baseado no modelo cinético de 10-*lumps* de Jacob et al. (1976) incrementando um novo grupo denominado “gás seco” (produto formado no craqueamento térmico). Portanto, neste trabalho, empregou-se o modelo cinético de 11-*lumps* proposto por Barbosa et al. (2012) e esquematizado na Figura 20.

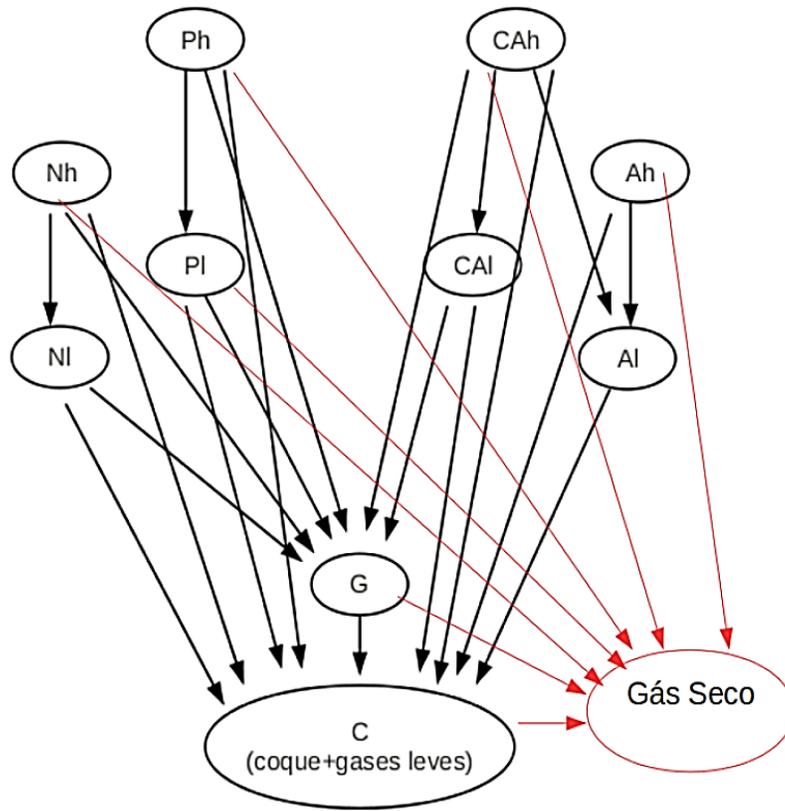


Figura 20 – Adaptação do modelo cinético de 10-*lumps* para 11-*lumps*.

Fonte: BARBOSA, 2012.

As propriedades do novo grupo denominado “gás seco” (DG) estão expostas na Tabela 4 a seguir.

Tabela 4 – Propriedades físicas do gás seco.

Espécie	Massa molecular (kg.kmol^{-1})	Massa específica (kg.m^{-3})	Calor específico ($\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	Viscosidade ($\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$)	Condutividade térmica ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	Calor de formação (J.kg^{-1})
DG	18,4	0,8	1090	$1,66 \times 10^{-5}$	$2,5 \times 10^{-2}$	$7,5 \times 10^4$

Fonte: BARBOSA, 2012.

A Tabela 5 exibe os parâmetros cinéticos das reações de craqueamento térmico. Os dados foram fornecidos por Bolla et al. (2007).

Tabela 5 – Parâmetros cinéticos do craqueamento térmico.

Reação	Fator Pré-Exponencial 10^3 ($\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$)	Energia de ativação ($\text{J}\cdot\text{kmol}^{-1}$)
(Nh, Ph, Ah, Cah, Pl) \rightarrow DG	60	0,196
(Ni, Al, Cal) \rightarrow DG	60	0,282
G \rightarrow DG	42	0,048
C \rightarrow DG	42	0,048

Fonte: BOLLAS et al., 2012.

As reações que formam os gases secos são provenientes apenas do craqueamento térmico e, não estão associadas à atividade do catalisador. As taxas de reação para o craqueamento térmico são dadas por:

$$R_i = M_{w,i} \sum K_r C_i^n \quad (53)$$

Sendo $n = 2$ para as reações de craqueamento térmico.

4 METODOLOGIA CFD

Simulações de fluidodinâmica computacional utilizam ferramentas computacionais da Engenharia Auxiliada por Computador, cuja sigla CAE deriva da sua expressão em inglês *Computer Aided Engineering*. A metodologia computacional deste trabalho é dividida basicamente em 3 etapas: pré-processamento, processamento e pós-processamento. Cada etapa faz uso de um software CAE. Todos os softwares utilizados nesta etapa são de uso comercial e de domínio da ANSYS®.

O pré-processamento consiste em construir o domínio do escoamento (geometria e malha do sistema), inserir os modelos matemáticos, as condições de contorno, bem como as propriedades dos fluidos. A etapa do processamento consiste na solução numérica da simulação. Essa é a fase que demanda mais tempo, pois a convergência varia conforme a malha utilizada e os parâmetros inseridos no pré-processamento. Essa etapa também é conhecida como *Solver* nos softwares de CAE e produz um ou vários arquivos de resultados que são analisados no pós-processador, onde é possível visualizar os resultados da simulação, verificar o comportamento fluidodinâmico do sistema e analisar as variáveis de interesse.

4.1 CRIAÇÃO DE GEOMETRIA E MALHAS COMPUTACIONAIS

O primeiro passo para introduzir uma simulação computacional é definir a geometria do sistema e o domínio de estudo. Todas as geometrias foram criadas de forma tridimensional utilizando as ferramentas de desenho do software comercial ANSYS DesignModeler 17.2.

A geometria do riser sem deflector foi baseada na geometria do equipamento descrito por Ali e seus colaboradores (1997). A configuração geométrica do riser utilizado neste trabalho foi de 33 metros de altura, diâmetro de 0,8 metros, entrada de vapor d'água na parte inferior do tubo, saída do tubo com ângulo de 90°, entrada lateral de catalisador formando ângulo de 45° com o duto principal e injeção da carga de gásóleo através de 6 bicos injetores de diâmetro igual a 0,06 metros e distribuídos uniformemente ao redor do diâmetro do riser. Os bicos injetores foram

situados a 5 metros acima do fundo do riser e formam ângulo de 45° com o riser. Os detalhes da geometria podem ser visualizados na Figura 21.

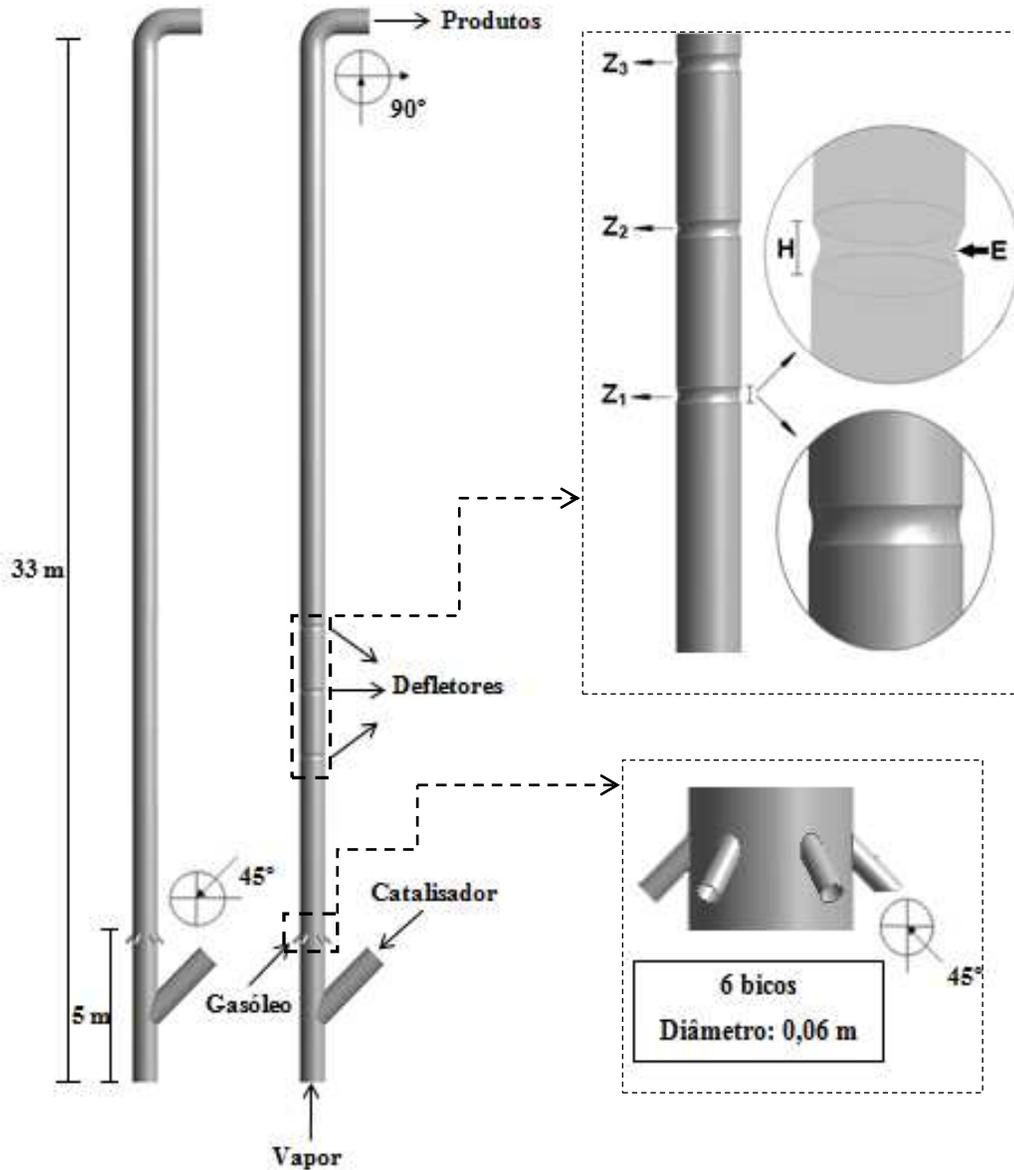


Figura 21 – Configuração de riser sem a presença de defletores e com a presença de defletores.

Fonte: PRÓPRIA.

A configuração das geometrias para os risers com defletores foram as mesmas descritas para o riser sem defletor, porém com a adição dos defletores. A altura no riser onde foram introduzidos os defletores foi determinada a partir dos resultados obtidos por simulação numérica apresentados no capítulo 5 (Resultados e Discussões) deste trabalho.

A influência dos defletores no riser foi avaliada por meio de 3 variáveis: comprimento do defletor (H), estrangulamento (E) e quantidade de defletores ao longo do riser (Z). Uma matriz de planejamento completa 3^3 foi gerada para a análise estatística. Os níveis para cada variável estão apresentados na Tabela 6 e a matriz de planejamento estatístico está apresentada na Tabela 7. É importante ressaltar que por se tratar de uma experimentação numérica, não são necessários réplicas.

Tabela 6 – Indicação dos níveis de cada variável.

Nível	Comprimento (H)	Estrangulamento (E)	Quantidade (Z)
-1	0,1	5%	1
0	0,2	7,5%	2
+1	0,3	10%	3

Fonte: PRÓPRIA.

Tabela 7 – Matriz de planejamento estatístico 3^3 na forma não codificada e na forma codificada.

Casos	Não Codificada			Codificada		
	H	E	Z	H	E	Z
1	0,1 m	5%	1	-1	-1	-1
2	0,2 m	5%	1	0	-1	-1
3	0,3 m	5%	1	+1	-1	-1
4	0,1 m	7,5%	1	-1	0	-1
5	0,2 m	7,5%	1	0	0	-1
6	0,3 m	7,5%	1	+1	0	-1
7	0,1 m	10%	1	-1	+1	-1
8	0,2 m	10%	1	0	+1	-1
9	0,3 m	10%	1	+1	+1	-1
10	0,1 m	5%	2	-1	-1	0
11	0,2 m	5%	2	0	-1	0
12	0,3 m	5%	2	+1	-1	0
13	0,1 m	7,5%	2	-1	0	0
14	0,2 m	7,5%	2	0	0	0

15	0,3 m	7,5%	2	+1	0	0
16	0,1 m	10%	2	-1	+1	0
17	0,2 m	10%	2	0	+1	0
18	0,3 m	10%	2	+1	+1	0
19	0,1 m	5%	3	-1	-1	+1
20	0,2 m	5%	3	0	-1	+1
21	0,3 m	5%	3	+1	-1	+1
22	0,1 m	7,5%	3	-1	0	+1
23	0,2 m	7,5%	3	0	0	+1
24	0,3 m	7,5%	3	+1	0	+1
25	0,1 m	10%	3	-1	+1	+1
26	0,2 m	10%	3	0	+1	+1
27	0,3 m	10%	3	+1	+1	+1

Fonte: PRÓPRIA.

4.1.1 Teste de Independência de Malhas

Após criar as geometrias de interesse com as dimensões requeridas, a próxima etapa consistiu em gerar a malha numérica utilizando o software ANSY Mesh 17.2. Para todos os casos simulados foram utilizadas malhas do tipo não estruturada com elementos tetraedros no centro e elementos de primas próximo à parede. As malhas analisadas foram da ordem de 400 a 900 mil volumes. A Figura 22 e a Figura 23 apresentam os detalhes da malha numérica para o riser sem defletor e com defletores, respectivamente.

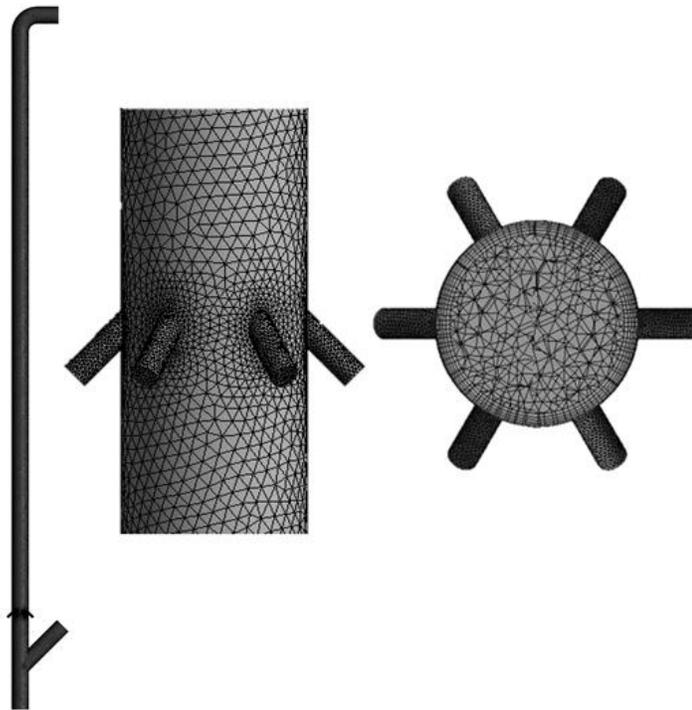


Figura 22 – Detalhes da malha numérica para o riser sem defletor.

Fonte: PRÓPRIA.

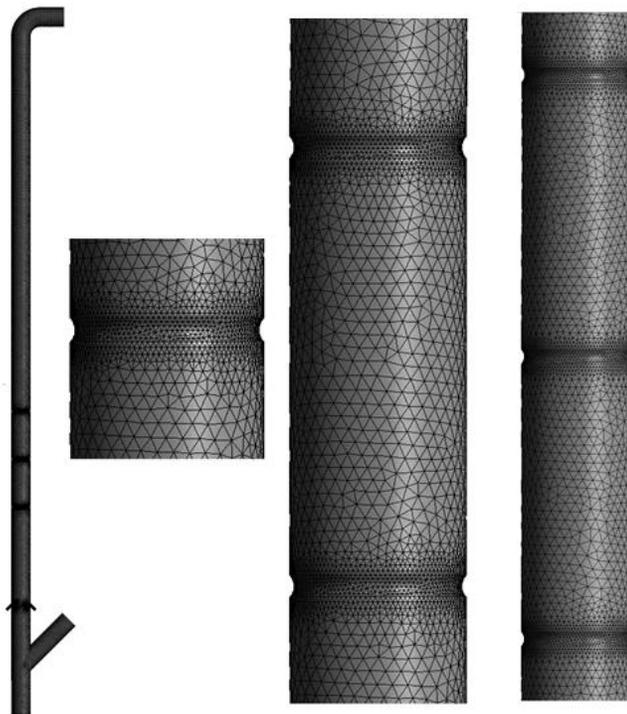


Figura 23 – Detalhes da malha numérica para riser com defletores.

Fonte: PRÓPRIA.

4.2 SIMULAÇÃO NUMÉRICA

As simulações numéricas deste trabalho, baseadas no método de volumes finitos, foram realizadas utilizando o software ANSYS Fluent (versão 17). Uma vez criada a malha, a mesma foi exportada para o Fluent 17.2, onde foram inseridas as propriedades dos materiais, modelos físicos e as condições de contorno. Os risers foram modelados como sistema gás-sólido, onde o vapor d'água e o gasóleo foram considerados como fase gasosa e o catalisador como fase sólida. Foi considerado também um sistema de regime transiente, turbulento, reativo e com transferência de calor entre as fases. Todas as propriedades físicas, modelagem fluidodinâmica e cinética e condições de contorno utilizadas estão expostas de forma sucinta na Tabela 8 e na Tabela 9.

Para efeito de comparação, em todas as malhas empregou-se a mesma modelagem matemática e condições de operação. As malhas utilizadas para as simulações do planejamento estatístico foram baseadas nos testes de independência do tamanho da malha abordado no subitem anterior. Além disso, foram realizadas simulações tridimensionais a fim de avaliar a influência de parâmetros geométricos sob o escoamento padrão.

Tabela 8 – Condições iniciais de operação.

Parâmetros	Medidas
Temperatura de entrada do catalisador	900 K
Temperatura de entrada da alimentação	500 K
Fluxo de alimentação de gasóleo	25 kg/s
Fluxo de alimentação de catalisador	340 kg/s
Velocidade do vapor d'água	6 m/s
Fração volumétrica de sólidos	0,54
Massa específica do catalisador	1400 kg/m ³
Massa específica do gasóleo vaporizado	6 kg/m ³
Vapor d'água (% em massa)	3

Fonte: PRÓPRIA.

Tabela 9 – Modelagem matemática empregada para cada aspecto do sistema.

Aspectos do sistema	Modelo
Aproximação bifásica	Abordagem euleriana-euleriana
Equações de Transportes	Equações de conservação de massa, de momento, de energia e das espécies químicas.
Interação gás-sólido	Modelo de arraste EMMS
Turbulência	Modelo RSM: Linear Pressure-Strain
Cinética	Modelo de 11 <i>lumps</i>
Regime	Transiente

Fonte: PRÓPRIA.

O tempo total de simulação utilizado para cada malha foi baseado no trabalho de Armellini (2015) que desenvolveu uma metodologia específica para o tempo total de simulação em risers de FCC. Sendo assim, o tempo total de simulação utilizado para cada malha foi de 30 segundos, onde os 10 segundos finais foram considerados para o cálculo da média. O passo de tempo utilizado nos cálculos para cada interação foi de 10^{-3} segundos. A definição do passo de tempo foi baseada na análise do número de Courant menor que 1, de modo a obter maior estabilidade nas simulações e resultados independentes do passo de tempo. As condições de parede utilizadas foram “no-slip” para a fase gasosa e “free-slip” para a fase sólida.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados deste trabalho seguem basicamente uma sequência de 3 etapas: validação dos modelos fluidodinâmico e cinético, independência de malhas e análise da influência dos defletores no escoamento.

5.1 VALIDAÇÃO DOS MODELOS FLUIDODINÂMICO E CINÉTICO

De modo a certificar de que a modelagem matemática descreve e representa os fenômenos reais decorrentes do processo, é imprescindível a validação dos modelos empregados. Sendo assim, os resultados numéricos das simulações devem ser compatíveis com os resultados experimentais. Os modelos fluidodinâmico e cinético utilizados neste trabalho estão baseados na validação dos modelos feito por Armellini (2015), o qual realizou vários testes de simulações numéricas obtendo ao final resultados numéricos que mais se aproximassem dos resultados experimentais. Os resultados obtidos por simulação computacional foram comparados com os resultados experimentais extraídos de Parssinen e Zhu (2001) e Ali et al. (1997).

Parssinen e Zhu (2001), coletaram dados de fração volumétrica de sólidos de através de um aparato experimental de um riser de FCC de 10 m de altura e 76 mm de diâmetro. Experimentalmente, o perfil de fração volumétrica de sólidos no riser apresenta baixas concentrações de partículas na zona central e vai aumentando à medida que se aproxima da parede. Tal comportamento se repete praticamente ao longo de toda a altura do riser. Todavia, quantitativamente, a concentração de sólidos próximo à parede vai diminuindo com a elevação do riser. O acúmulo de sólidos próximo à parede já é descrito por diversos autores, o que corrobora a validade dos experimentos e dos resultados fornecidos pelos autores.

O trabalho de Armellini (2015) apresenta a comparação dos resultados experimentais e os resultados obtidos por simulação numérica, cujos resultados conseguiram descrever a tendência do aumento de sólidos próximo à parede e a concentração relativamente constante de sólidos no centro do riser. Além disso, os resultados de fração volumétrica de sólidos obtidos via simulação

numérica condiz com os resultados experimentais e, portanto, representam satisfatoriamente a fluidodinâmica do processo.

Os dados fornecidos por Parssinen e Zhu (2001) foram essenciais para a validação do modelo fluidodinâmico do processo. Todavia, não é possível validar a cinética, pois os dados experimentais coletados são apenas de escoamento a frio, ou seja, sem reações químicas e sem troca térmica entre as fases. Portanto, para a validação do modelo cinético, Armellini (2015) baseou-se no trabalho de Ali et al (1997). O modelo cinético foi aplicado em conjunto com o modelo fluidodinâmico validado e as mesmas condições operacionais utilizadas por Ali et al. (1997) foram definidas para a simulação numérica com o intuito de comparar resultados experimentais e numéricos. Os valores encontrados via simulação numérica estão condizentes com os dados experimentais reportados por Ali et al (1997), como mostra a Tabela 10.

Tabela 10 – Valores experimentais e valores encontrados através de simulação na saída do riser.

	Gasolina (%)	Coque (%)	Temperatura (K)
Experimental (ALI et al., 1997)	43,90	5,80	795,00
Simulação	37,89	7,50	801,30

Fonte: ARMELLINI, 2015.

5.2 INDEPENDÊNCIA DE MALHAS

Os resultados obtidos por simulação numérica estão diretamente ligados ao refino das malhas, portanto, é necessário avaliar a densidade das mesmas de modo a minizar os erros numéricos associados às malhas. De modo geral, quanto mais refinada a malha, mais precisos são os resultados, pois envolvem maior número de volume de controle. Sabendo que os cálculos de conservação de massa e momento são realizados em cada volume de controle, conseqüentemente, quanto maior o número de volume de controle, maior o tempo e a capacidade de processamento.

Portanto, para se obter uma malha numérica ideal, são necessários testes de refinamento de malha e comparar os resultados. A malha ideal deve ser capaz de simular o mesmo resultado com o menor custo computacional. Isso garante com que o resultado seja independente da

densidade da malha adotada (CÓSTOLA; ALUCCI, 2011). Neste trabalho, para atestar essa independência, foram confeccionadas desde malhas mais grossas à malhas mais refinadas. Os resultados dos testes de malhas estão mostrados graficamente nas Figuras 24 à 29 a seguir.

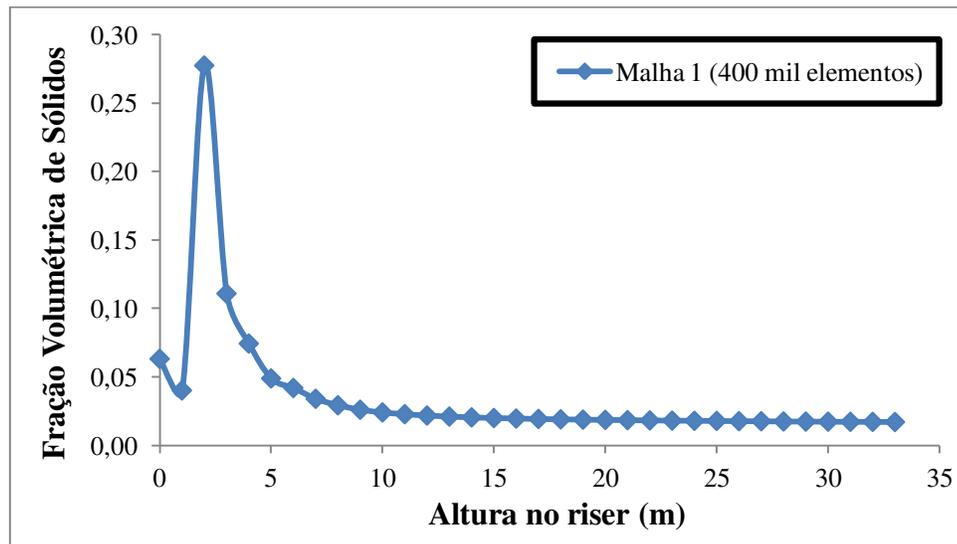


Figura 24 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtido a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

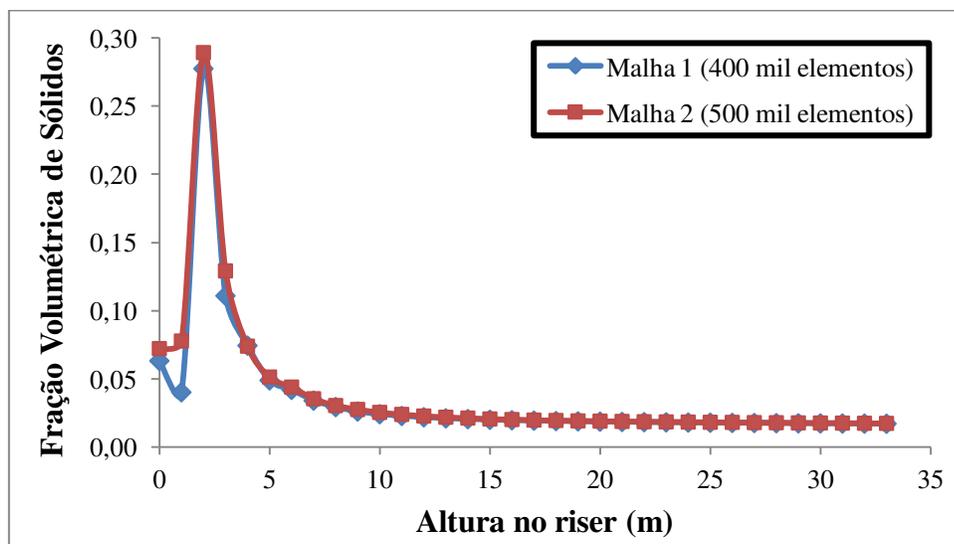


Figura 25 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtidos a partir de malhas numéricas da ordem de 400 mil e 500 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

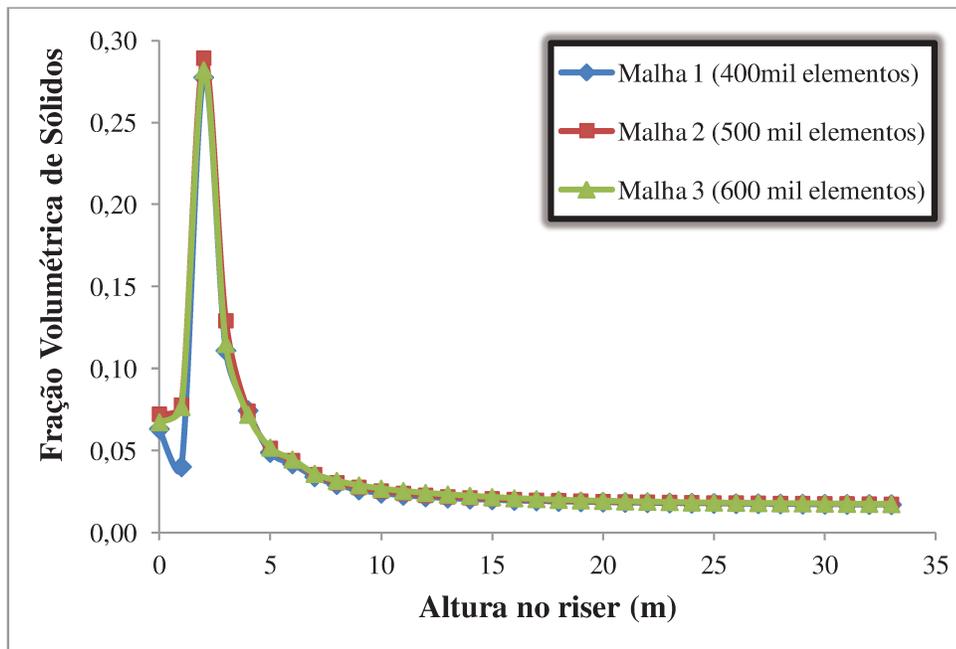


Figura 26 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtidos a partir de malhas numéricas da ordem de 400 mil, 500 mil e 600 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

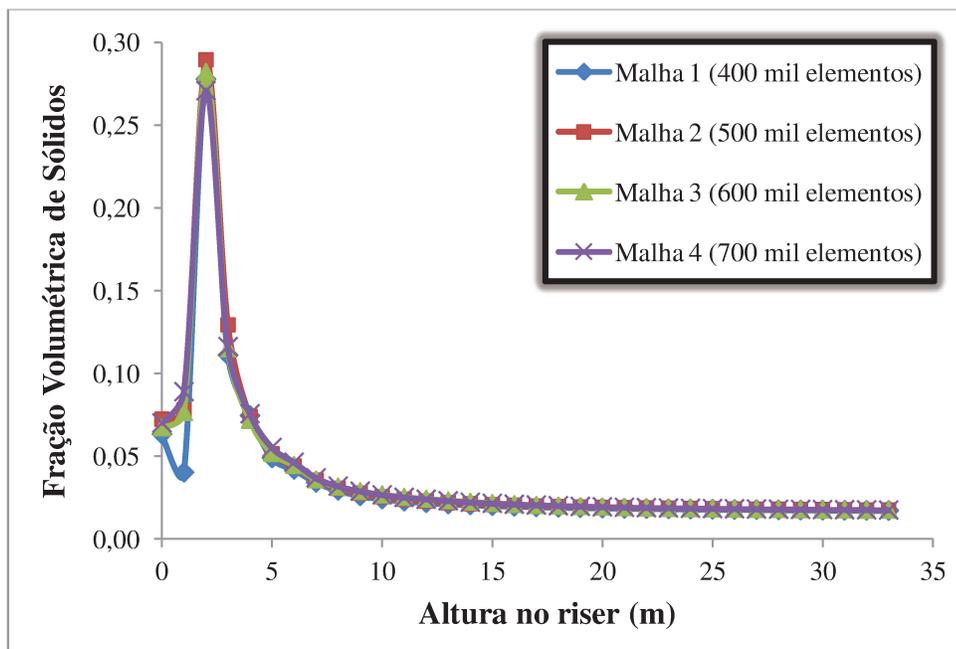


Figura 27 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtidos a partir de malhas numéricas da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil e 700 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

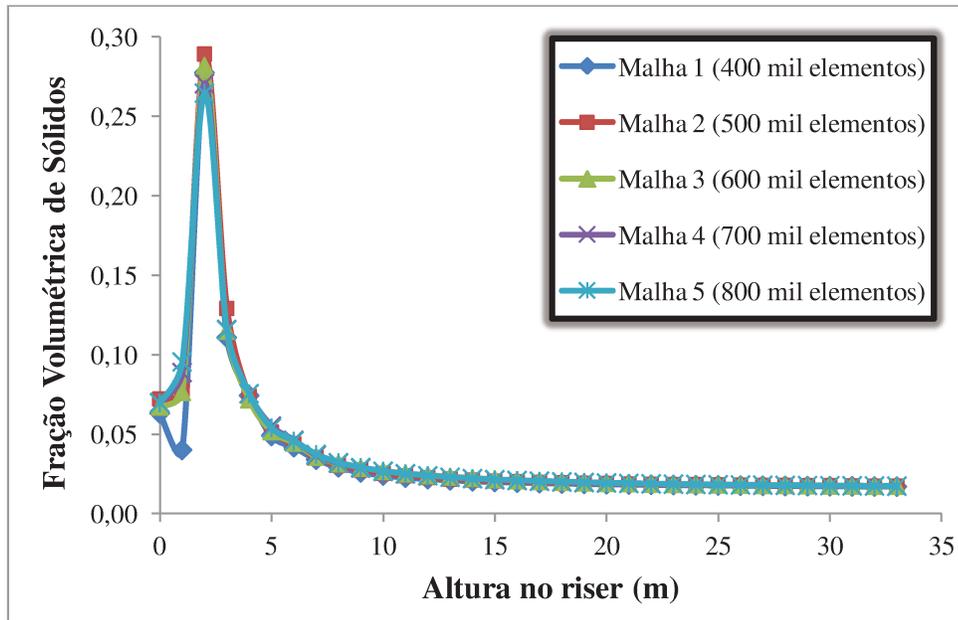


Figura 28 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtidos a partir de malhas numéricas da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil e 800 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

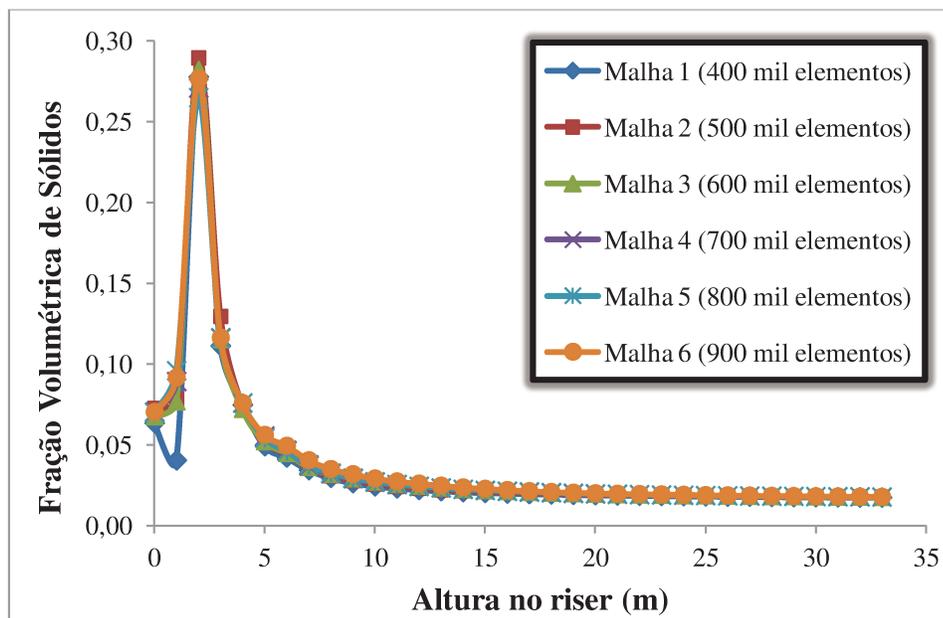


Figura 29 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser obtidos a partir de malhas numéricas da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil, 800 mil e 900 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

Como se pode perceber, os resultados dos perfis de fração volumétrica de sólidos foram decompostos em vários gráficos para melhor compreensão e comparação dos resultados, pois os perfis tendem a se igualar, dificultando a visualização dos resultados pertencentes a cada malha analisada. Ao avaliar os gráficos, nota-se que o perfil da fração volumétrica de sólidos ao longo do riser apresenta maior diferença para a malha mais grosseira (400 mil elementos) quando comparado aos perfis obtidos pelas demais malhas. Porém, à medida que a malha é refinada, os perfis vão se aproximando, garantindo a independência da malha com relação ao resultado.

A independência de malha para a fração volumétrica de sólidos se obtém a partir da malha de 700 mil volumes de controle. O mesmo acontece com os resultados do perfil da queda de pressão ao longo do riser, como mostra as Figuras 30 a 35 a seguir.

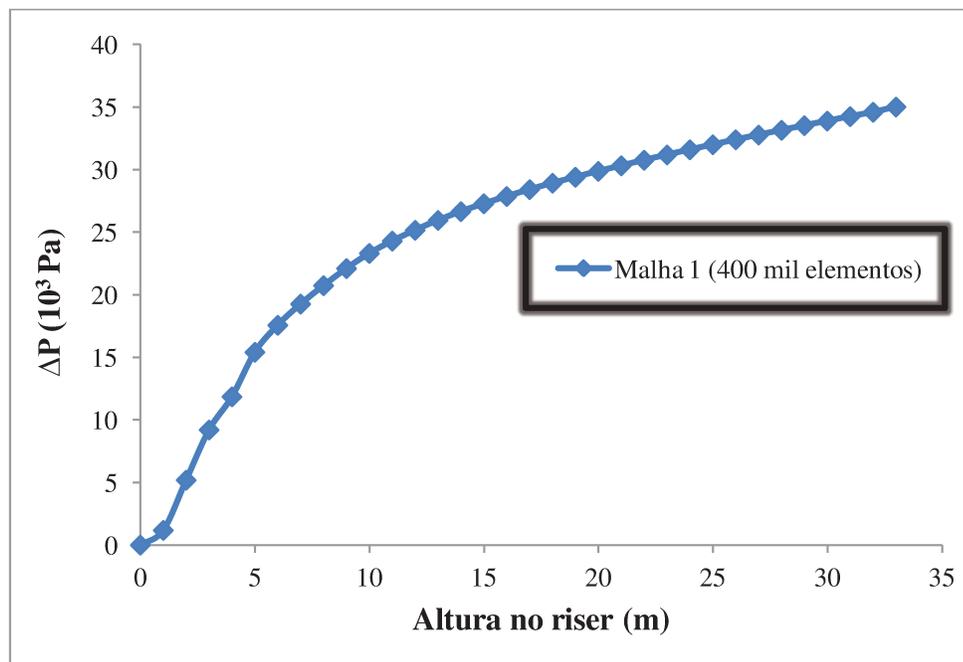


Figura 30 – Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtido a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

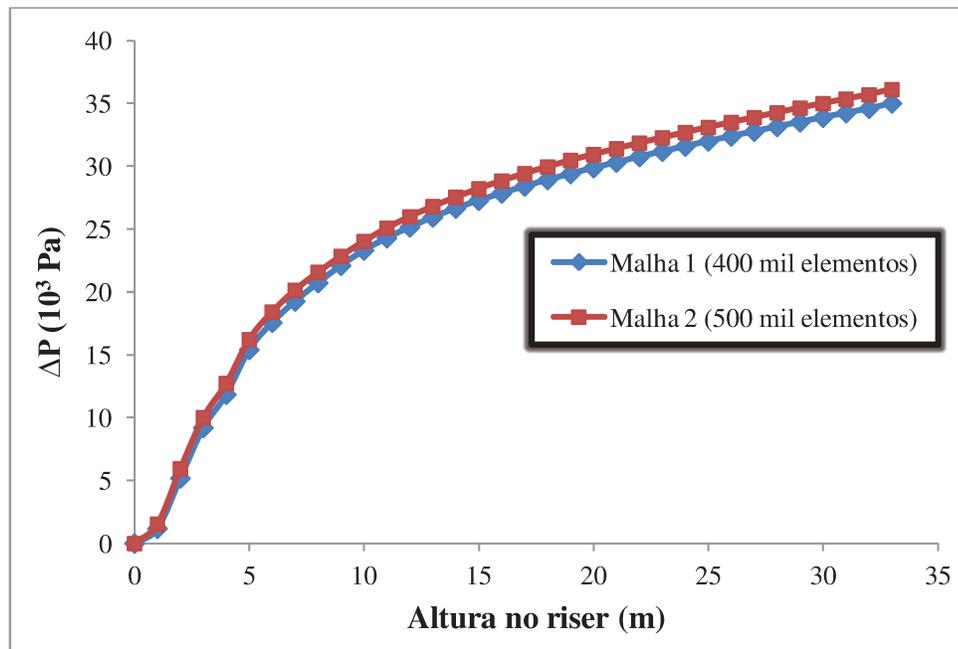


Figura 31 – Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtidos a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil e 500 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

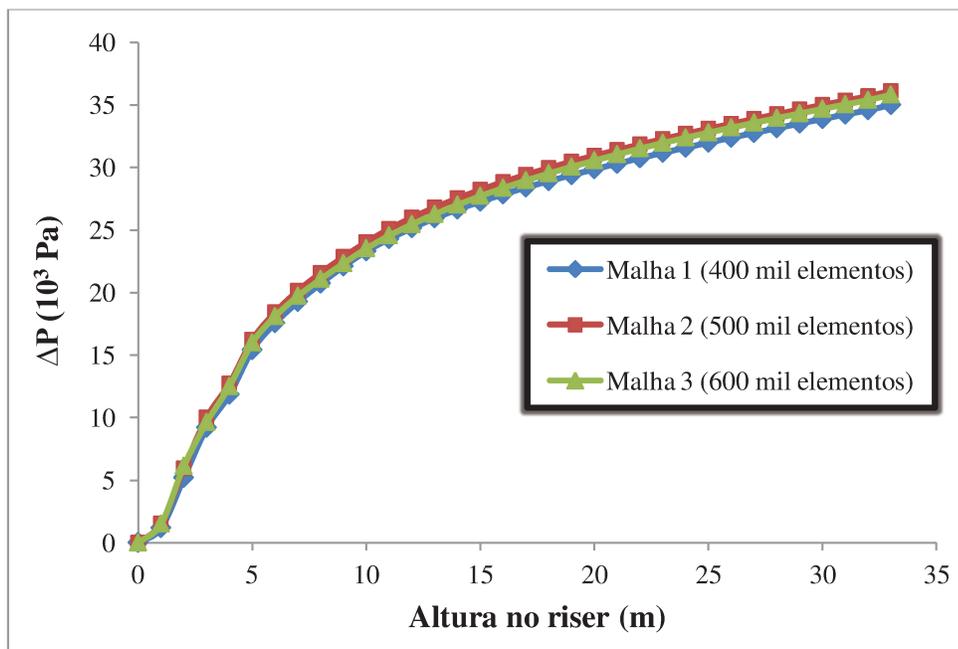


Figura 32 – Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtidos a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil e 600 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

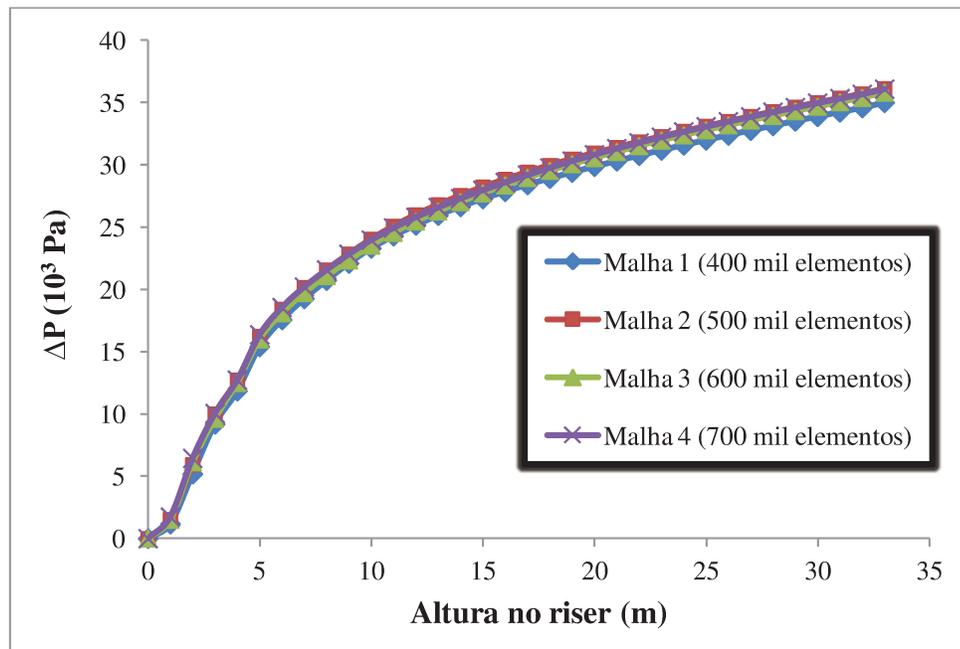


Figura 33 – Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtidos a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil e 700 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

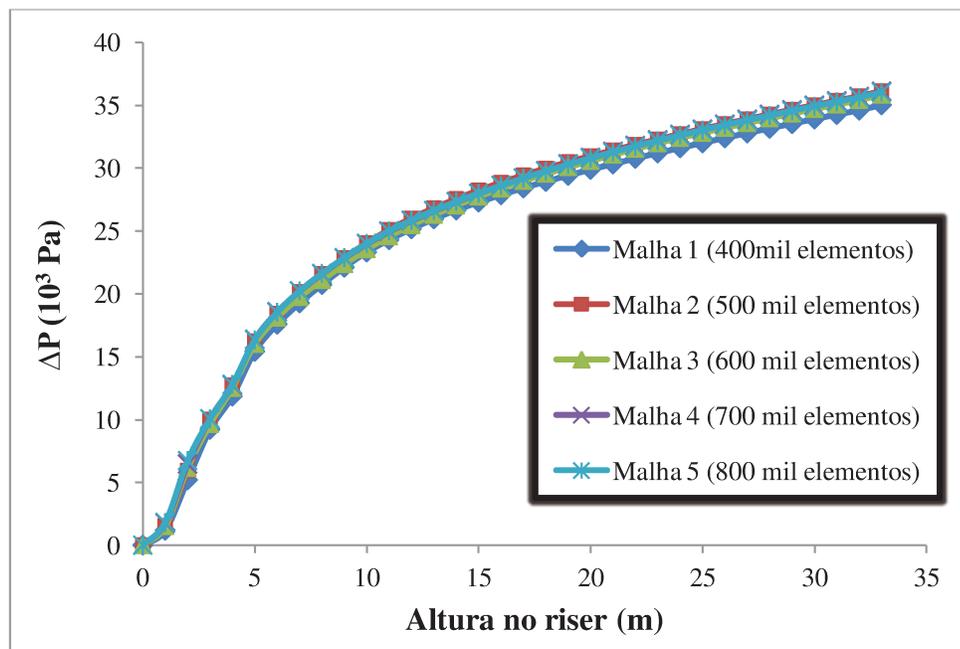


Figura 34 – Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtidos a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil e 800 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

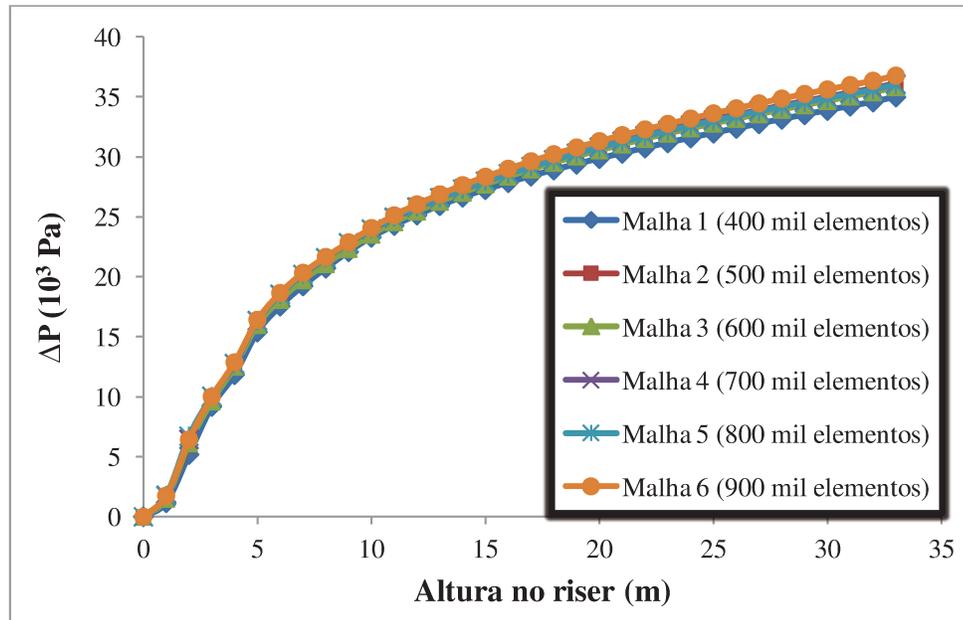


Figura 35 – Perfil de queda de pressão ao longo do riser obtidos a partir de uma malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil, 800 mil e 900 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

Ao avaliar os gráficos, nota-se que o perfil de queda de pressão ao longo do riser apresenta maior diferença para a malha mais grosseira (400 mil elementos) quando comparado aos perfis obtidos pelas demais malhas. À medida que a malha é refinada, os perfis vão se aproximando, garantindo a independência da malha com relação ao resultado. A independência de malha para a queda de pressão se obtém a partir da malha de 700 mil volumes de controle, assim como fora obtido também para a fração volumétrica de sólidos.

É importante salientar que a partir da malha de 900 mil elementos há um aumento na queda de pressão quando comparada à malha de 700 mil e 800 mil elementos, cujos resultados não apresentam variação na queda de pressão. Nesse caso, a malha de 900 mil elementos torna-se inapropriada para os cálculos de simulação por interferir e causar variação dos resultados. Há trabalhos reportados na literatura que também apresentam resultados de maior queda de pressão em malhas mais refinadas (ARMELLINI, 2015; PELISSARI, 2015).

A Tabela 11, a seguir, apresenta os resultados obtidos do teste de malha para a fração volumétrica de sólidos, queda de pressão e fração mássica de gasolina na saída do riser.

Tabela 11 – Resultados do teste de malha na saída do riser.

Volumes de controles	Fração Volumétrica de sólidos (10^{-2})	Queda de Pressão (10^3 Pa)	Fração Mássica de Gasolina (% em massa)
400	1,97	41,84	41,8
500	1,99	42,99	42,0
600	1,99	42,75	41,8
700	1,99	42,87	41,7
800	1,97	42,86	41,7
900	1,99	43,62	41,6

Fonte: PRÓPRIA.

Sabendo que a implementação de estruturas defletoras nos risers geram mudanças na configuração geométrica do riser, um novo teste de independência de malha foi realizado para um riser com 3 defletores a fim de avaliar se o mesmo refino de malha onde se obteve a independência de malha para o riser sem defletor pode ser aplicada também para os casos de risers com defletores. Os resultados obtidos a partir do refinamento das malhas para um riser com 3 defletores estão apresentados graficamente nas Figuras 36 à 47 a seguir.

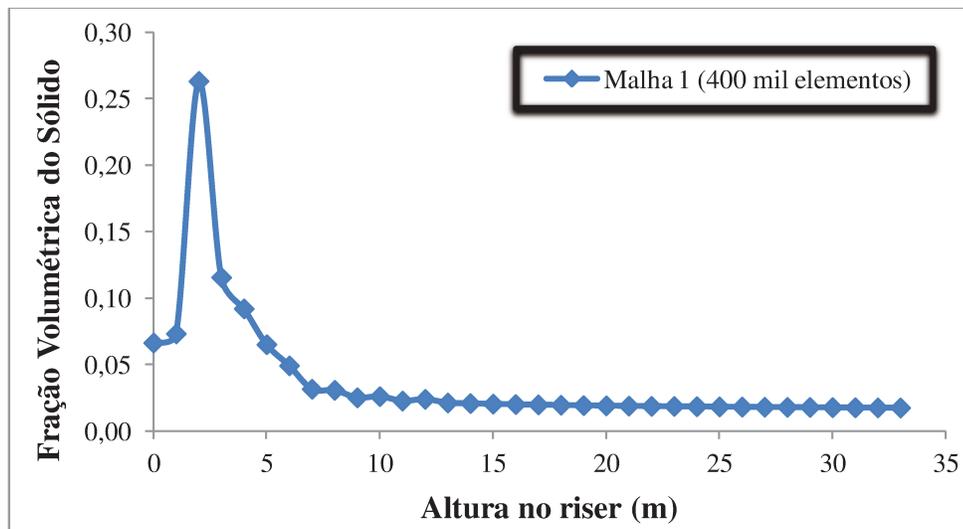


Figura 36 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

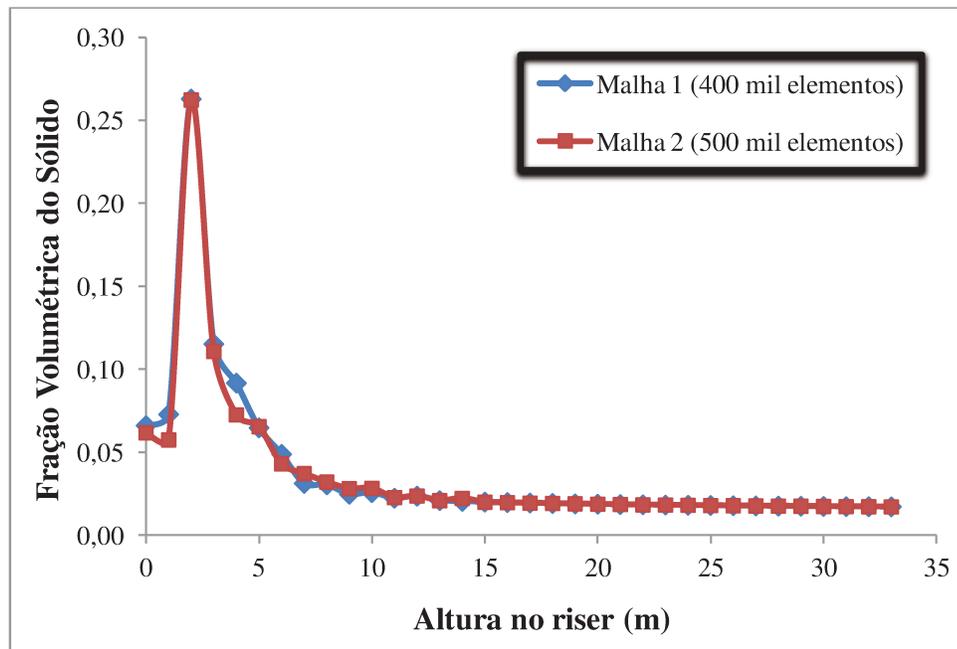


Figura 37 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil e 500 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

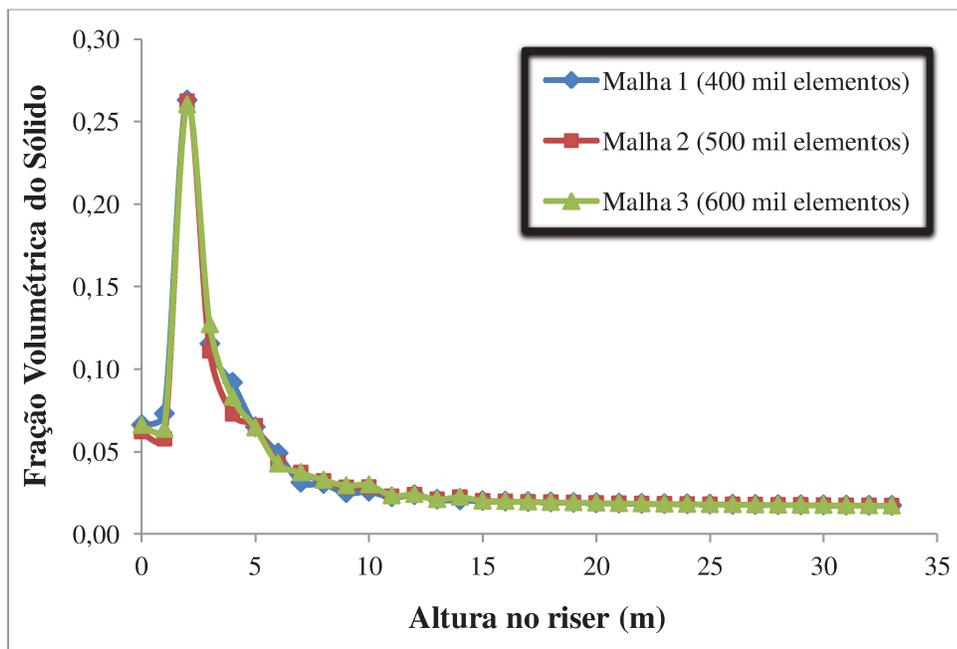


Figura 38 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil e 600 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

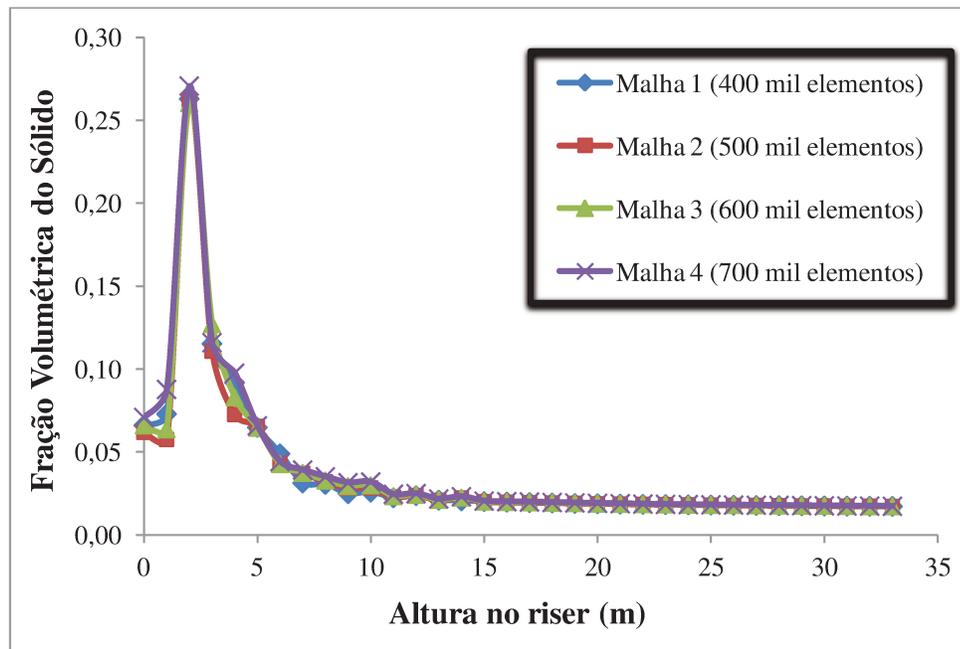


Figura 39 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil e 700 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

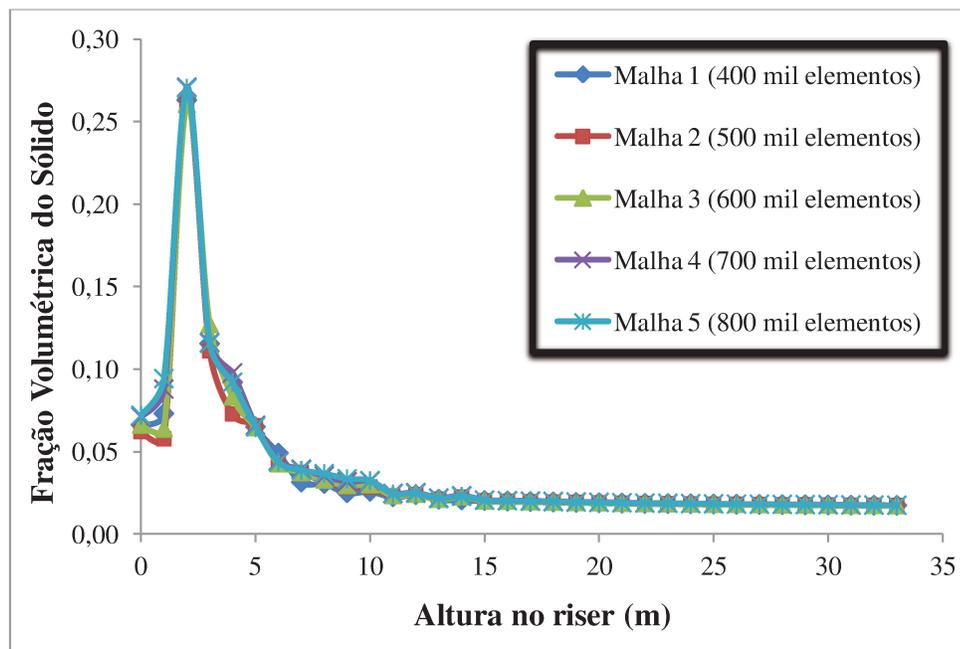


Figura 40 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil e 800 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

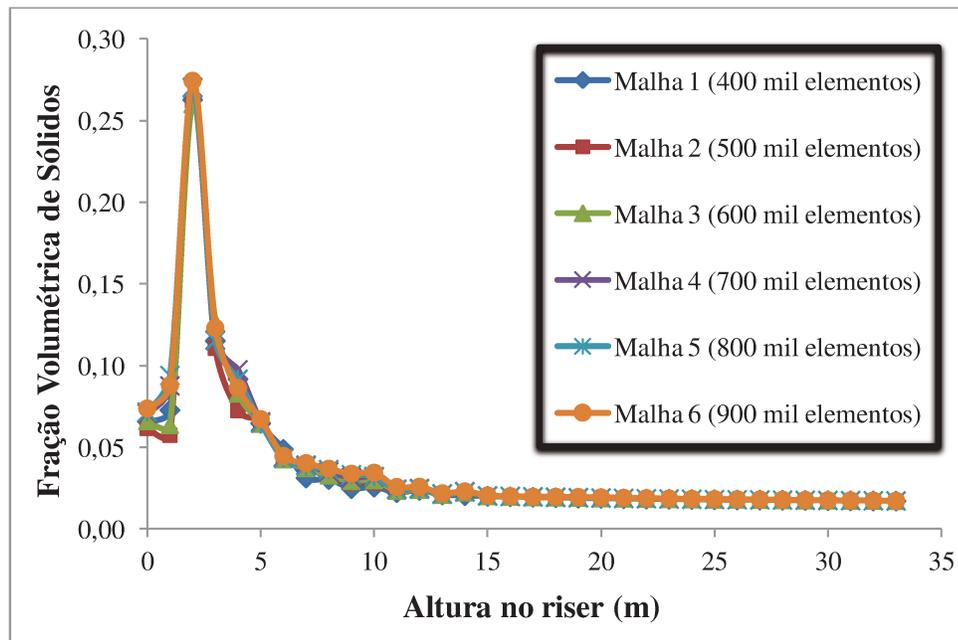


Figura 41 – Perfil de fração volumétrica de sólidos ao longo do riser com defletores para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil, 800 mil e 900 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

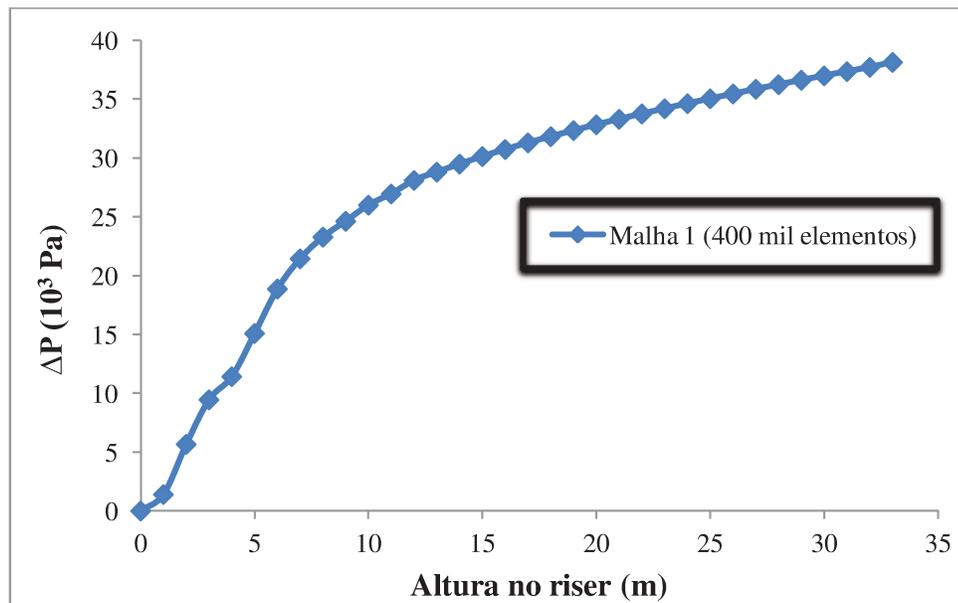


Figura 42 – Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser para malha numérica da ordem de 400 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

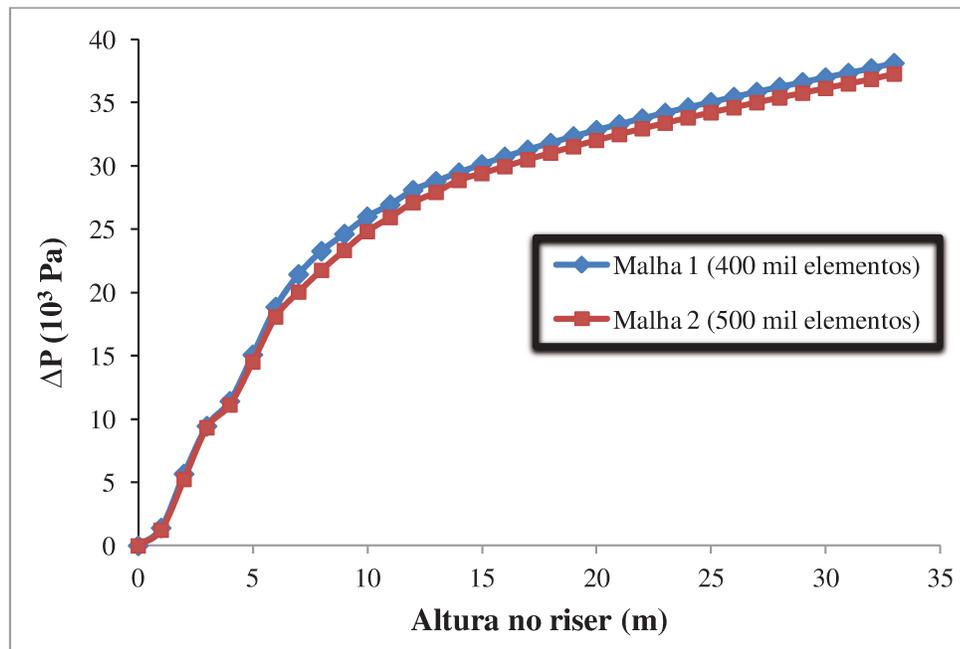


Figura 43 – Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser para malha numérica da ordem de 400 mil e 500 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

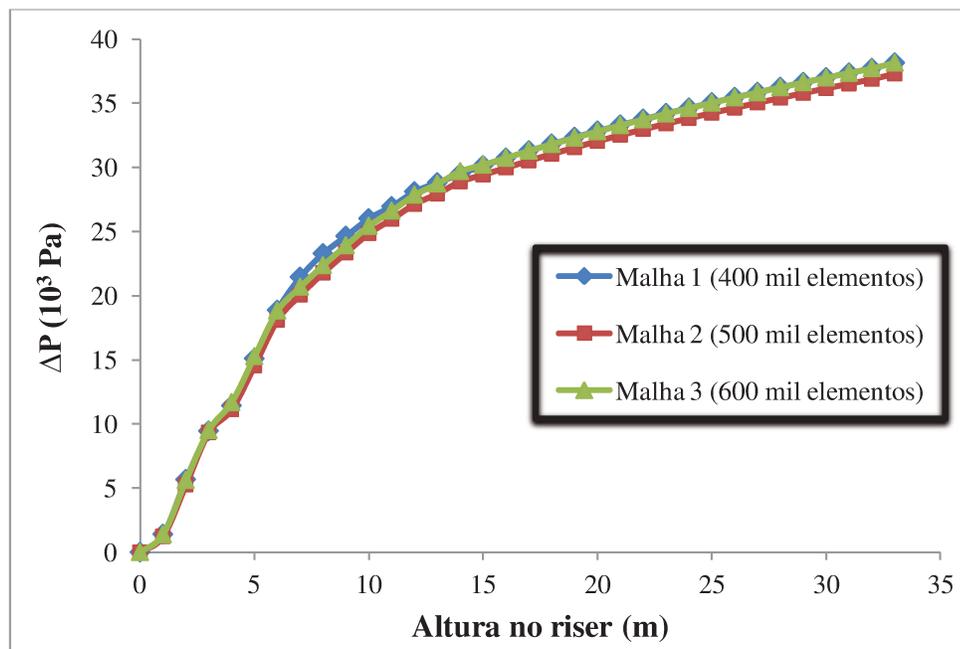


Figura 44 – Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil e 600 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

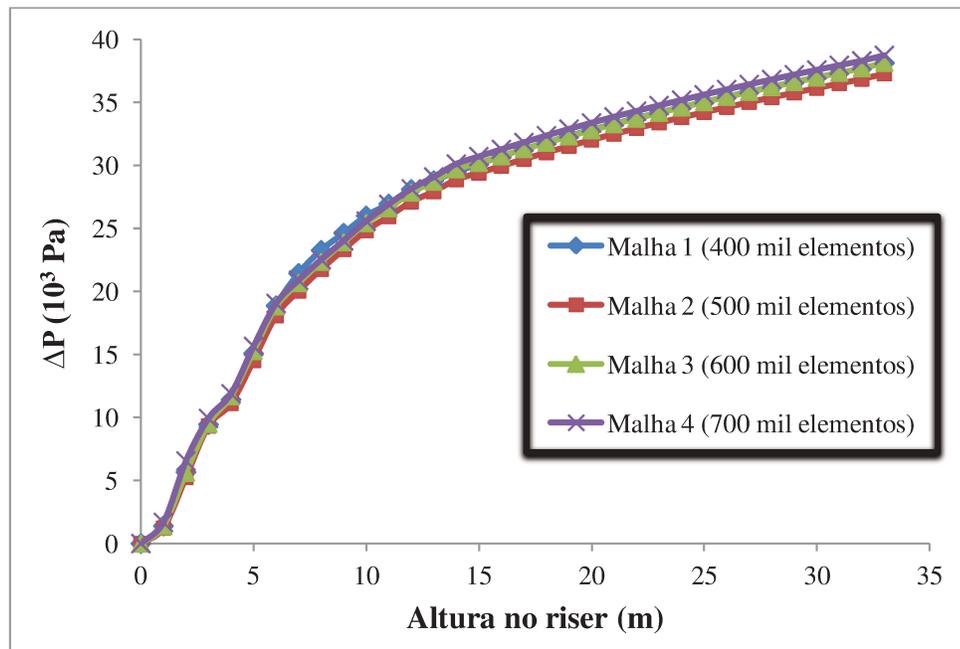


Figura 45 – Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil e 700 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

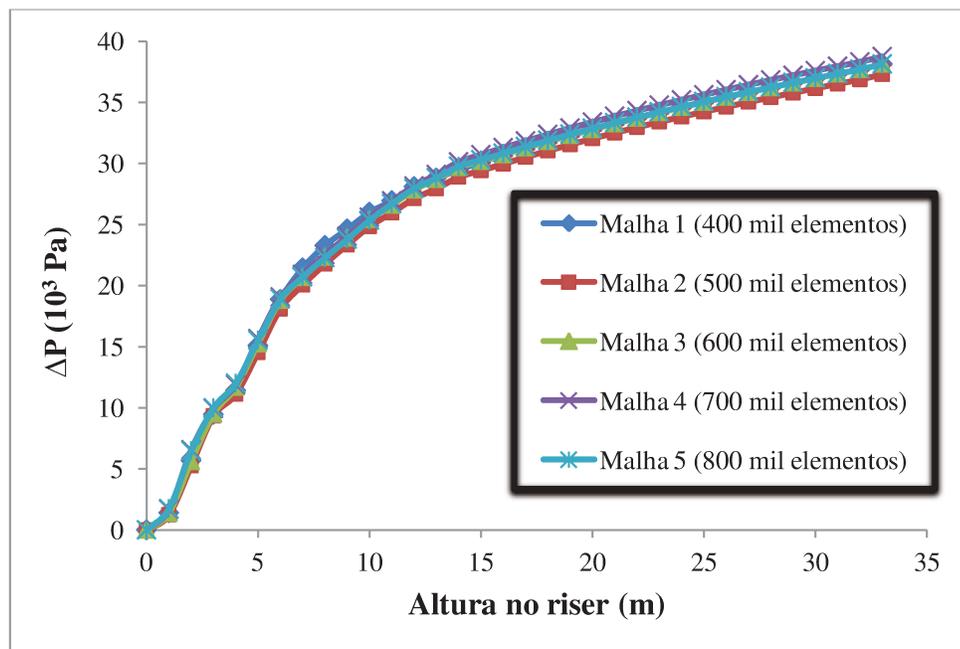


Figura 46 – Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil e 800 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

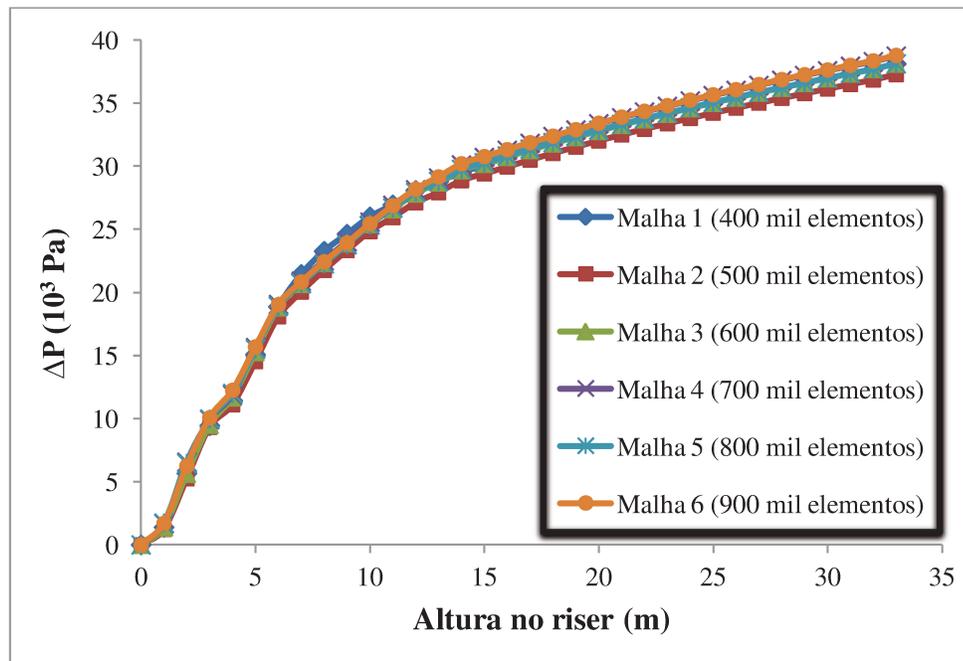


Figura 47 – Perfil de queda de pressão (ΔP) ao longo do riser para malha numérica da ordem de 400 mil, 500 mil, 600 mil, 700 mil, 800 mil e 900 mil volumes de controles.

Fonte: PRÓPRIA.

Analisando os perfis de fração volumétrica de sólidos obtidos (Figuras 36 à 41), nota-se que, a independência de malha para o riser com 3 defletores é obtida a partir da malha de 700 mil elementos, o que corrobora com a independência de malha obtido para o riser sem defletor. Sabendo que os demais casos a serem simulados sofrem pouca variação na forma geométrica do riser, o mesmo refino de malha no qual foi obtida a independência de malha, poderá ser utilizada para os demais casos de risers com defletores, pois considera-se que o refino de malha de 700 mil volumes de controle produz resultados estáveis quanto à fração volumétrica dentro do riser.

Em contrapartida, ao observar os gráficos referentes aos perfis de queda de pressão (Figuras 42 à 47), nota-se que os resultados não se estabilizam. Nesse caso, mais refinamentos de malha seriam necessários até se atingir a independência de malha e garantir resultados confiáveis para a queda de pressão. É importante salientar também que dependendo da quantidade e da configuração geométrica do defletor, é possível que ocorra aumento ou redução da queda de pressão no riser. Portanto, seriam necessários realizar testes de independência de malha para todos os casos propostos da matriz de planejamento definida para este trabalho. Para não fugir do

escopo deste trabalho e em virtude do tempo e do custo computacional, estudos mais detalhados sobre a queda de pressão em risers com defletores serão sugeridos para trabalhos futuros.

A Tabela 12 apresenta os resultados obtidos do teste de malha para a fração volumétrica de sólidos, queda de pressão e fração mássica de gasolina na saída do riser com 3 defletores.

Tabela 12 – Resultados do teste de malha na saída do riser com 3 defletores.

Volumes de controles	Fração Volumétrica de sólidos (10^{-2})	Queda de Pressão (10^3 Pa)	Fração Mássica de Gasolina (% em massa)
400	1,95	42,76	42,0
500	1,96	42,56	42,1
600	1,96	42,46	42,0
700	1,97	43,03	41,9
800	1,97	43,33	41,9
900	1,97	44,03	41,8

Fonte: PRÓPRIA.

5.3 ANÁLISE DOS DEFLETORES

Como mencionado na metodologia deste trabalho, uma matriz de planejamento completa de 3^3 foi projetada, onde as variáveis escolhidas foram: altura do interno (H), estrangulamento (E) e quantidade de defletores ao longo do riser (Z). A escolha dos níveis para a variável estrangulamento (E) foi baseada em estudos da literatura que indicam que estrangulamentos superiores a 10% causam queda de pressão acentuada no riser e estrangulamento menores que 5% não são o suficiente para apresentar mudanças no escoamento (ZHU; SALAH; ZHOU, 1997; WELLS, 1998; BU; ZHU; KOVES, 2000; DRIES, 2003). Sendo assim, foram utilizados variações de estrangulamento entre 5 a 10%.

A localização para a inserção do primeiro defletor (Z_1) foi de 10 metros em relação ao fundo do riser. Essa altura foi definida através de resultados da simulação do riser sem a presença

de defletores, onde foi possível detectar que a carga se uniformiza no riser após sua máxima dispersão injetada através do bico, porém o catalisador tende a se acumular na parede do riser provocando pouca interação com a fase gasosa e, conseqüentemente, diminuindo a conversão dos produtos.

Para definir a localização do segundo defletor (Z_2), foi realizado uma média da posição no riser onde as partículas de catalisador se acumulavam novamente na parede após a passagem do primeiro defletor. Baseado nessa análise, o segundo defletor foi inserido a 2 metros acima do primeiro defletor e o terceiro defletor (Z_3) foi posicionado a 2 metros acima do segundo defletor. A Figura 48 indica a localização dos defletores no riser.

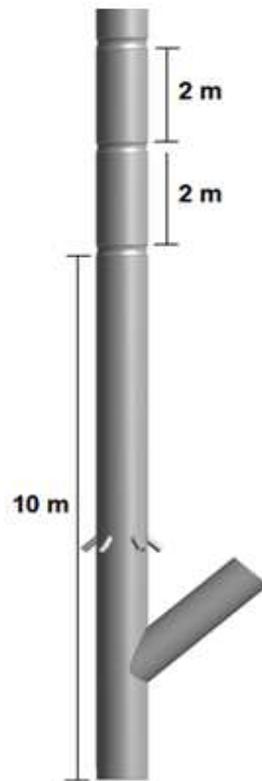


Figura 48 – Definição da altura dos defletores no riser.

Fonte: PRÓPRIA.

A Tabela 13 a seguir apresentam os resultados extraídos na saída do reator após o término de todas as simulações da matriz de planejamento. Para efeito de comparação, o caso 0 representa os resultados obtidos para o riser sem defletores.

Tabela 13 – Resultados obtidos na saída do riser para cada caso simulado.

Caso	ΔP (KPa)	Gasolina (% massa)	Coque (% massa)	LFO (% massa)	HFO (% massa)	Conversão (% massa)
0	42,99	41,70	5,19	20,39	18,58	69,81
1	43,37	41,44	5,10	20,39	19,17	69,45
2	43,70	41,78	5,18	20,43	18,50	69,93
3	43,12	41,36	5,11	20,34	19,27	69,32
4	42,84	41,97	5,17	20,55	18,21	70,24
5	42,79	41,75	5,09	20,53	18,77	69,88
6	43,36	41,71	5,13	20,46	18,74	69,82
7	43,51	41,97	5,20	20,51	18,18	70,22
8	43,29	41,72	5,08	20,55	18,83	69,85
9	43,16	41,91	5,10	20,58	18,49	70,12
10	43,23	41,82	5,19	20,43	18,45	69,97
11	43,12	41,77	5,15	20,45	18,62	69,89
12	42,70	41,37	5,06	20,42	19,39	69,33
13	43,77	41,87	5,13	20,54	18,50	70,06
14	43,45	41,89	5,15	20,51	18,41	70,08
15	42,94	41,81	5,11	20,50	18,65	69,94
16	43,56	42,07	5,14	20,59	18,19	70,33
17	43,10	41,78	5,18	20,43	18,50	69,93
18	43,28	41,81	5,10	20,53	18,66	69,94
19	43,20	41,73	5,14	20,46	18,67	69,86
20	43,25	41,98	5,21	20,46	18,15	70,21
21	42,80	41,57	5,12	20,43	18,96	69,63
22	43,44	41,85	5,11	20,56	18,56	70,03
23	43,68	41,96	5,16	20,53	18,31	70,18
24	42,78	41,49	5,03	20,50	19,30	69,49
25	43,03	41,90	5,10	20,57	18,54	70,08
26	43,36	41,72	5,09	20,54	18,79	69,85
27	43,50	41,85	5,10	20,57	18,58	70,03

Legenda: LFO = Al, Pl, Ni, Cal (Frações leves); HFO = Ah, Ph, Nh, Cah (Frações pesadas).

Fonte: PRÓPRIA.

Conforme apresentado na Tabela 13, os resultados diferem entre si, indicando uma clara influência da presença dos defletores sobre o escoamento gás-sólido do riser de FCC. Para verificar o comportamento da fluidodinâmica e cinética, optou-se por plotar os perfis de queda de pressão, gasolina, coque, LFO, HFO e conversão para diferentes alturas do reator, obtendo assim os perfis ao longo do riser. Todavia, como há muitos casos simulados, torna-se inviável plotar os perfis para cada caso e compará-los entre si. Sendo assim, priorizou-se por plotar os perfis apenas para o caso que apresentou melhor resultado e para o caso que apresentou pior resultado entre os casos simulados, comparando-os com os perfis referentes ao caso 0 (riser sem defletor).

A Figura 49 a seguir apresenta o perfil de queda de pressão obtido ao longo do riser para o caso 0, caso 12 e caso 13.

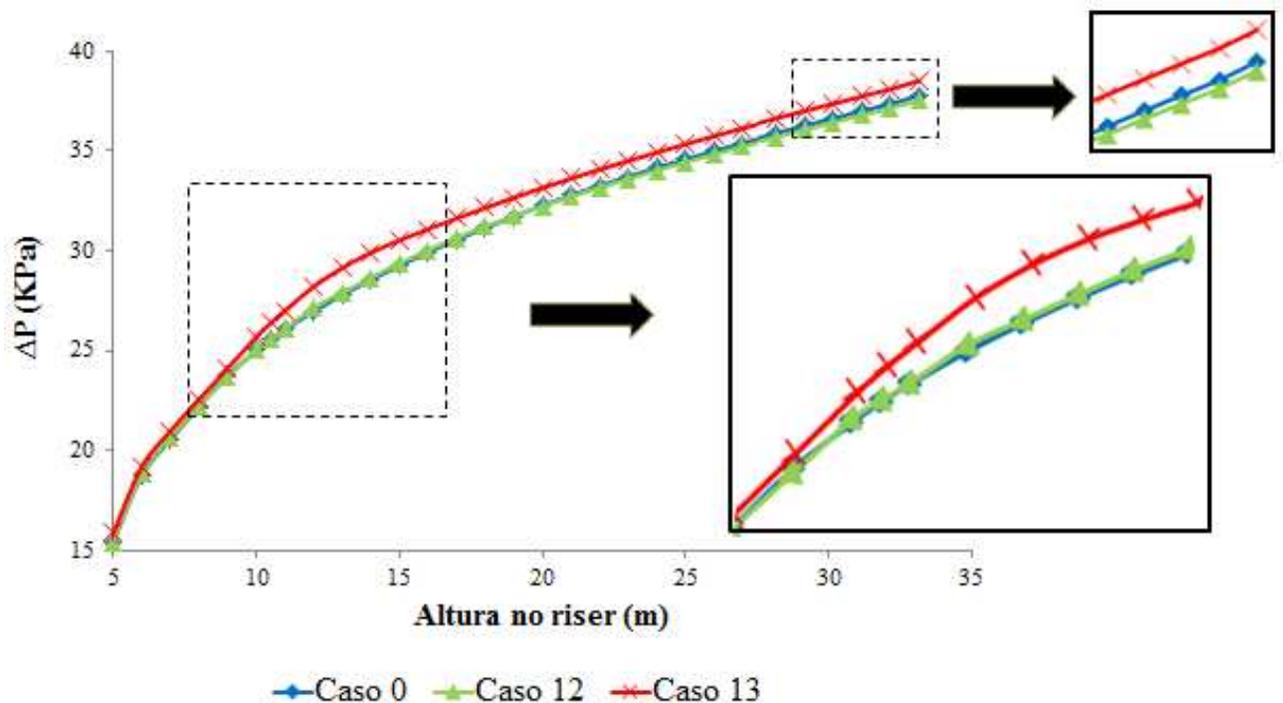


Figura 49 – Perfil da queda de pressão ao longo do riser para o caso 0, caso 12 e caso 13.

Fonte: PRÓPRIA.

Apesar da análise de queda de pressão não ser confiável em virtude do refino de malha utilizada nas simulações não garantir a independência da mesma para resultados de perda de carga, é interessante avaliar os erros que esse tipo de análise pode acometer. Conforme mostra a

Figura 49, o caso 12 apresenta o perfil com menor queda de pressão ao longo do riser e o caso 13 apresenta o perfil com maior queda de pressão. Nota-se que, para o caso 13 simulado, o perfil de queda de pressão aumenta na região onde se encontra o primeiro defletor (10 metros de altura do riser), enquanto o caso 12 não apresentou aumento de queda de pressão nesta região. A configuração geométrica do defletor do caso 13 apresenta um estrangulamento maior que o caso 12.

Reporta-se na literatura que, dependendo da configuração geométrica do defletor, é possível reduzir ou aumentar a queda de pressão em um riser de FCC. Sabendo disso, não seria difícil pensar que, neste trabalho, os resultados obtidos para a queda de pressão fossem característicos da influência da configuração geométrica do defletor utilizado em cada caso. Entretanto, essa variação dos resultados onde há casos simulados em que ocorre um aumento da queda de pressão e outros casos simulados onde há redução da mesma, pode ser devido apenas à utilização de uma malha não adequada onde os resultados obtidos para a queda de pressão são instáveis.

Estudos apontam que quanto mais suave é a curva do anel defletor, menor seria a queda de pressão; e quanto maior o estrangulamento da área do riser, maior seria a queda de pressão (ANDERSON JR, 2015; ARMELLINI, 2015). Em contrapartida, quanto mais suave a curva do anel defletor, esse pode não ser suficiente para apresentar mudança no escoamento e conseqüentemente não redirecionar as partículas de catalisador da parede, ocasionando queda de pressão devido à perda de carga. Portanto, considerando que os resultados obtidos não tivessem influência da densidade da malha, tais fatores poderiam explicar o porquê de alguns casos apresentarem aumento na perda de pressão e outros casos cuja queda de pressão foi reduzida.

Por não apresentar alto impacto na mudança do escoamento, o caso 12 foi o que apresentou menor queda de pressão, mas não foi eficiente em aumentar o rendimento do processo nas condições operacionais utilizadas. Todavia, ao diminuir a queda de pressão, é possível adicionar maior carga no riser e, possivelmente, aumentar o rendimento do processo. Há muitas variáveis e condições a se analisar, inclusive análise econômica; porém, fugiria ao objetivo deste trabalho e, portanto, tais estudos seguirão como sugestão para trabalhos futuros. Vale lembrar

também que os resultados obtidos neste trabalho para queda de pressão não são confiáveis e, portanto, toda a análise feita aqui foi baseada em suposições caso os resultados fossem válidos.

Sabe-se que o fenômeno conhecido como *core-annulus* é característico por apresentar grande concentração de catalisador na parede, dificultando a interação da fase sólida com a fase gasosa que escoar pelo centro do riser. Como a fase sólida é arrastada ao longo do riser pela fase gasosa, as partículas de catalisador próximo à parede tendem a perder velocidade pela não interação efetiva com a fase gasosa, podendo ocasionar até mesmo um refluxo de partículas. Essa perda de carga é uma das causas de queda de pressão em riser de FCC.

Quando o escoamento passa pelo defletor, a velocidade superficial do gás aumenta, pois há uma redução da área do riser. Entretanto, posteriormente, o gás se expande novamente para a direção axial completa do riser, causando queda na sua velocidade e conseqüentemente queda de pressão, o que poderia justificar o aumento na queda de pressão para o caso 13, caso os resultados fossem confiáveis. Entretanto, há vários outros fatores também que devem ser levados em consideração.

A Figura 50 a seguir mostra que o defletor consegue aumentar a velocidade de sólidos e suavizar a diferença entre a velocidade no centro do riser e a velocidade na região próxima à parede, diminuindo assim a queda de pressão, como ocorre com o caso 12. Entretanto, observando o caso 13, nota-se que, apesar de o defletor ter aumentado a velocidade de sólidos próximo à parede, não foi eficiente em reduzir a diferença de velocidade ao longo de toda a região radial.

Em todos os casos simulados, os defletores foram capazes de quebrar o *annulus*. A finalidade do defletor é de promover a quebra do *annulus* e distribuir o catalisador acumulado na parede para o centro do riser proporcionando uma maior interação da fase sólida com a fase gasosa e maior conversão da carga. Porém, o ideal é que o defletor seja capaz de promover uma maior mistura entre as fases sem que haja um aumento da queda de pressão ou até mesmo a redução de ΔP .

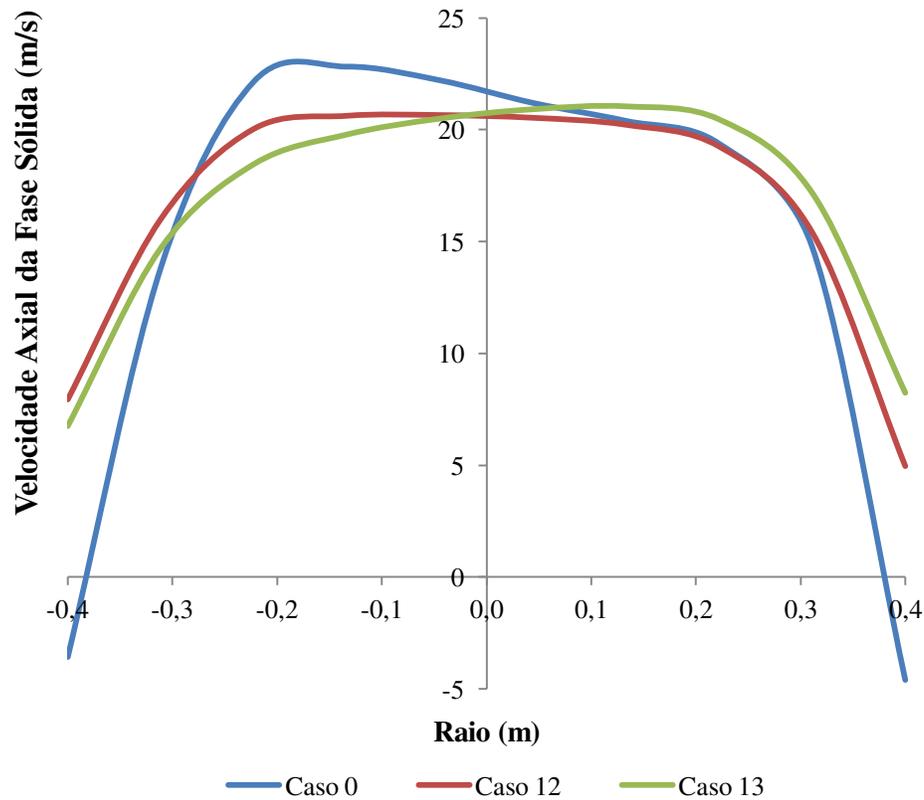


Figura 50 – Perfil radial de velocidade da fase sólida para o caso 0, caso 12 e caso 13.

Fonte: PRÓPRIA.

Optou-se também por plotar os perfis de queda de pressão ao longo do riser para o caso 3 e caso 16, conforme mostra a Figura 51, pois foram os casos que apontaram menor e maior rendimento para a gasolina, LFO e conversão, respectivamente. A análise do perfil de queda de pressão para o caso 3 e 16 foi motivada com o intuito de avaliar a influência de queda de pressão na produção de gasolina, frações leves (LFO) e na conversão de produtos no processo de craqueamento catalítico fluidizado em um riser de FCC.

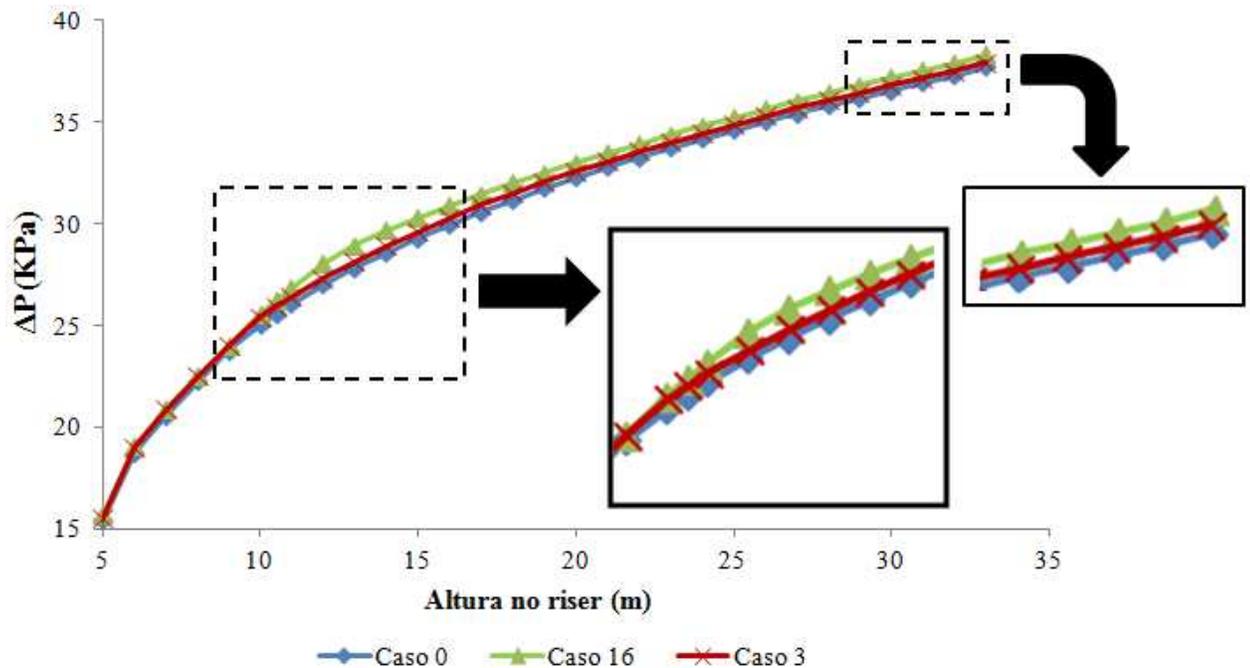


Figura 51 – Perfil de queda de pressão ao longo do riser para o caso 0, caso 16 e caso 3.

Fonte: PRÓPRIA.

Observa-se na Figura 51 que, para o caso 3 e caso 16, a queda de pressão aumenta levemente após a passagem pelo primeiro defletor (localizado à 10 metros de altura no riser) em comparação ao caso 0 (riser sem defletor). Esse aumento na queda de pressão já era esperado devido ao estrangulamento do defletor. O caso 16 refere-se a um riser com defletor cujo estrangulamento é maior que o caso 3 e, por isso, neste gráfico da Figura 51 apresentou maior queda de pressão. Todavia, vale ressaltar que o caso 16 foi o que apontou maior produção de gasolina, frações leves (LFO) e maior conversão de produtos, o que pode torná-lo promissor se considerarmos que o aumento da queda de pressão foi relativamente pequena, não causando grandes prejuízos no processo.

A Figura 52 a seguir apresenta o perfil de rendimento de gasolina obtido ao longo do riser para o caso simulado sem a presença de defletor interno (caso 0), para o caso que apresentou maior rendimento (caso 16) e para o caso que apresentou menor rendimento (caso 3). O gráfico apresenta o perfil de produção de gasolina a partir de 5 metros de altura, pois na geometria base definida para as simulações, o bico injetor (onde é inserido a carga de gásóleo) está localizado a 5 metros de altura em relação ao fundo do riser.

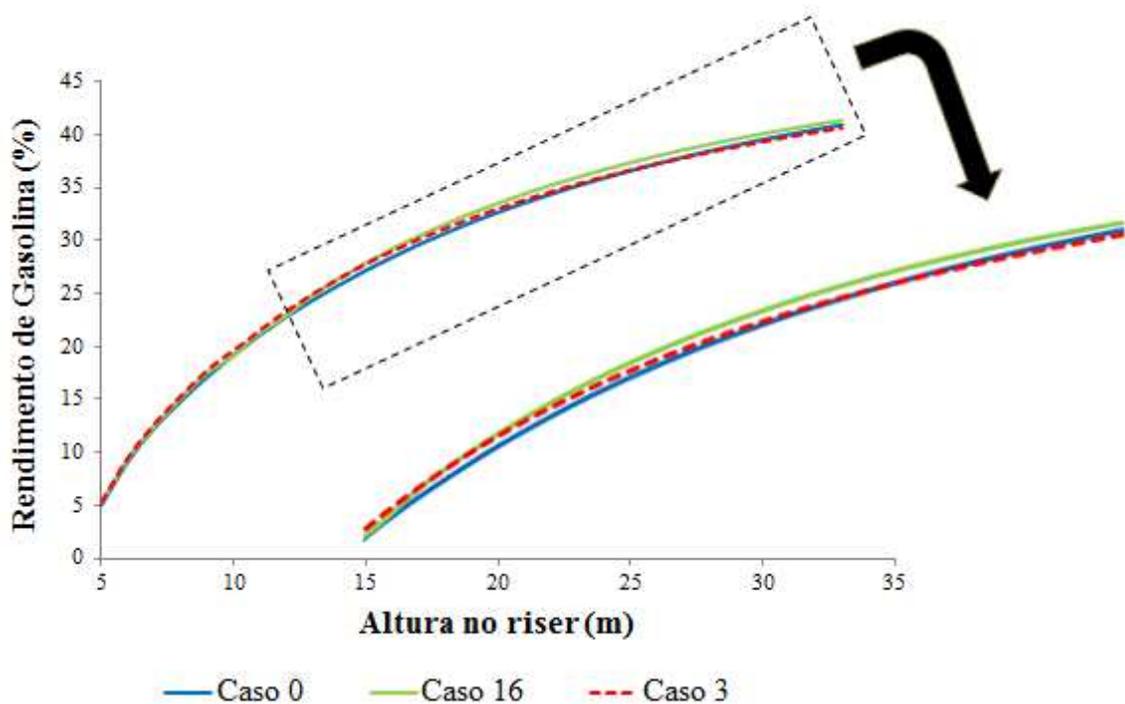


Figura 52 – Perfil de produção de gasolina ao longo do riser para o caso 0, caso 3 e caso 16.

Fonte: PRÓPRIA.

Sabe-se que as reações de craqueamento dão início a partir do contato do gásóleo com o catalisador quente. Ao misturar o gásóleo com o catalisador quente, a carga é vaporizada quase que instantaneamente, gerando produtos como a gasolina. Nota-se na Figura 52 que a produção de gasolina aumenta ao longo do riser, embora, sua produção não seja linear, pois à medida que as reações ocorrem, a atividade do catalisador diminui devido à formação de coque sobre a superfície das partículas de catalisador, causando a inativação de sítios ativos e reduzindo a taxa de reação.

Observa-se também que, apesar de o caso com apenas um defletor (caso 3) apresentar um rendimento menor na saída do reator como mostra a Tabela 13, o seu comportamento ao longo do riser apresenta mudanças. Inicialmente o caso 3 apresenta um perfil crescente e inclusive ultrapassa o rendimento do caso sem defletor (caso 0), contudo, na parte superior do riser ocorre uma queda na taxa de produção de gasolina quando comparado com o caso 0 e o caso 16, esses por sua vez, apresentam perfis crescentes no rendimento da gasolina ao longo de todo o riser.

Isso se deve ao fato de o defletor conseguir ocasionar maior interação entre as fases sólida e gasosa, porém, é possível que apenas 1 defletor com as configurações específicas para o caso 3 não seja o suficiente para manter essa interação entre as fases ao longo de todo o riser e, conseqüentemente, a fase particulada se acumula novamente na parede do riser, acarretando em menor conversão dos produtos. O caso simulado de número 16, que corresponde a um riser com 2 defletores, apontou melhora no rendimento da gasolina quando comparado ao riser sem defletores (caso 0) e ao riser com apenas 1 defletor interno (caso 3) indicando assim que a quantidade de defletores pode ter influência sobre o processo.

A Figura 53 a seguir, exibe o perfil de coque obtido ao longo do riser para o caso 0, caso 7 e caso 12. O caso 0 é sempre usado como comparativo por se tratar do riser sem defletor. O caso 7 foi escolhido por ter apresentado maior produção de coque na saída do riser e o caso 12 foi selecionado por ter indicado menor produção de coque.

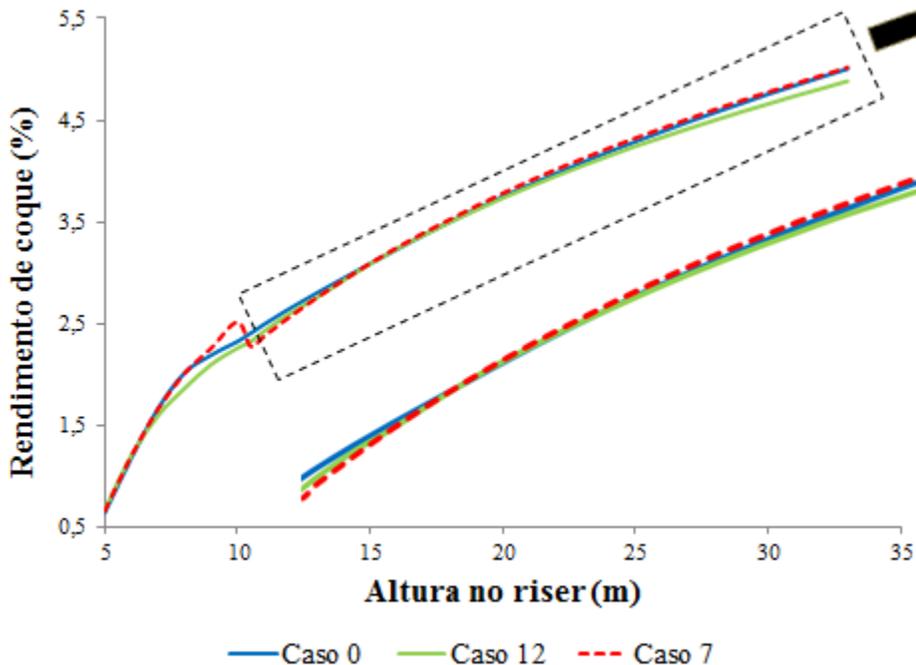


Figura 53 – Perfil de produção de coque ao longo do riser para o caso 0, caso 7 e caso 8.

Fonte: PRÓPRIA.

Ao examinar o gráfico da Figura 53, percebe-se que na altura onde está localizado o defletor interno (10 metros), a produção do coque é afetada, ocasionando uma queda e

posteriormente retomando a sua produtividade crescente. Apesar de no caso 7 ter ocorrido uma maior quebra na produção de coque ao passar pelo defletor, posteriormente esse praticamente se igualou ao caso 0 quanto ao rendimento obtido na saída do reator, conforme também demonstra a Tabela 13. Todavia, nota-se pela Figura 52 que, por alguns metros, a produção de coque para o caso 7 torna-se menor que o rendimento do coque no riser sem defletor, o que pode justificar a maior produção de gasolina captada na saída do riser em comparação ao caso 0.

A Figura 54 denota o rendimento das frações pesadas (HFO) e frações leves (LFO) ao longo do riser, sendo que as frações pesadas diminuem ao longo do riser, pois estão sendo quebradas em frações leves, por conseguinte, esta última aumenta ao longo do riser. Percebe-se também que na altura de 10 metros (onde há defletor), ocorre um leve desvio do perfil padrão. O caso 16 foi o apresentou maior desvio ocasionando posteriormente o aumento da quebra de frações pesadas e ampliando o rendimento de frações leves.

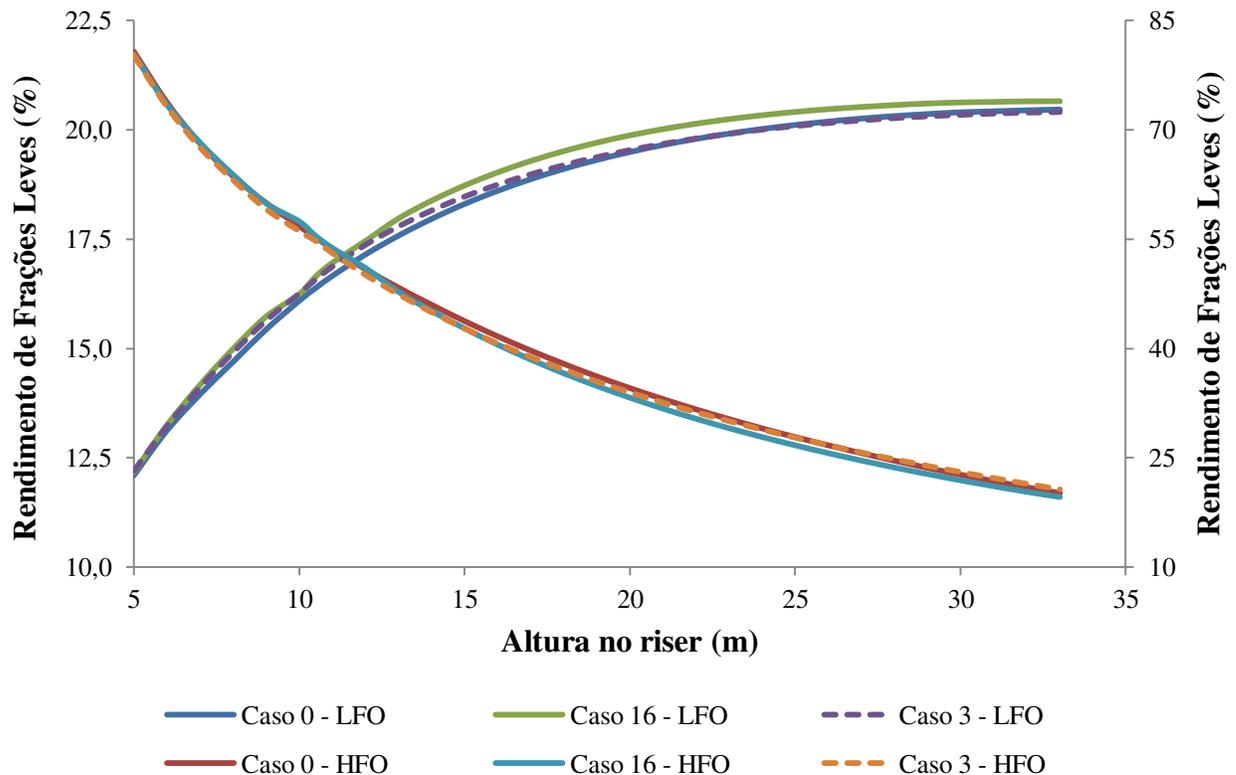


Figura 54 – Perfil de rendimento de LFO e HFO ao longo do riser para o caso 0, caso 3 e caso 16.

Fonte: PRÓPRIA.

E finalmente, a Figura 55 a seguir exibe o caso que houve maior conversão total (caso 16) e o que houve menor conversão total (caso 3) dos produtos, equiparando com o caso cujo riser não possui defletor interno (caso 0).

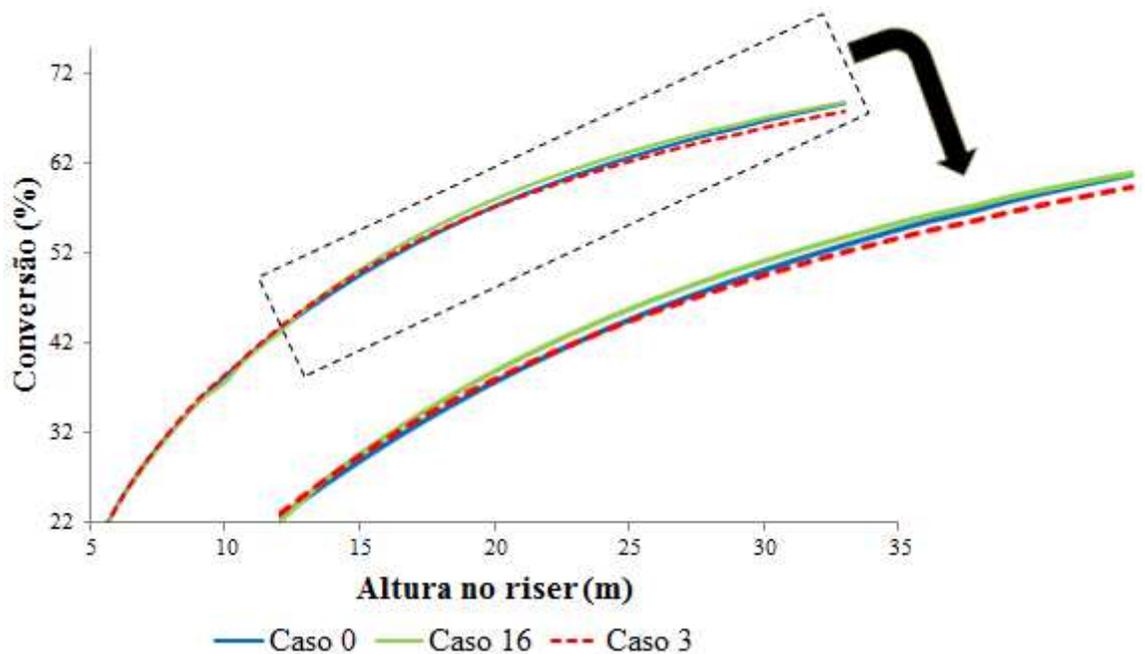


Figura 55 – Conversão da carga ao longo do riser para o caso 0, caso 3 e caso 16.

Fonte: PRÓPRIA.

Constata-se que a conversão aumenta ao longo do riser para todos os casos. O caso 16 com defletor além de ter apresentado a maior conversão dos produtos, é o caso que também foi mais eficiente em produzir gasolina, assim como o caso 3 foi o que apresentou menor conversão entre todos os casos analisados e também o que menos produziu gasolina. A Figura 56 ilustra as mudanças ocorridas na fluidodinâmica da fração volumétrica de sólidos e o perfil radial da fração volumétrica de sólidos a 9,5 m e 10,5 m de altura do riser, ambos para o caso 3 e o caso 16.

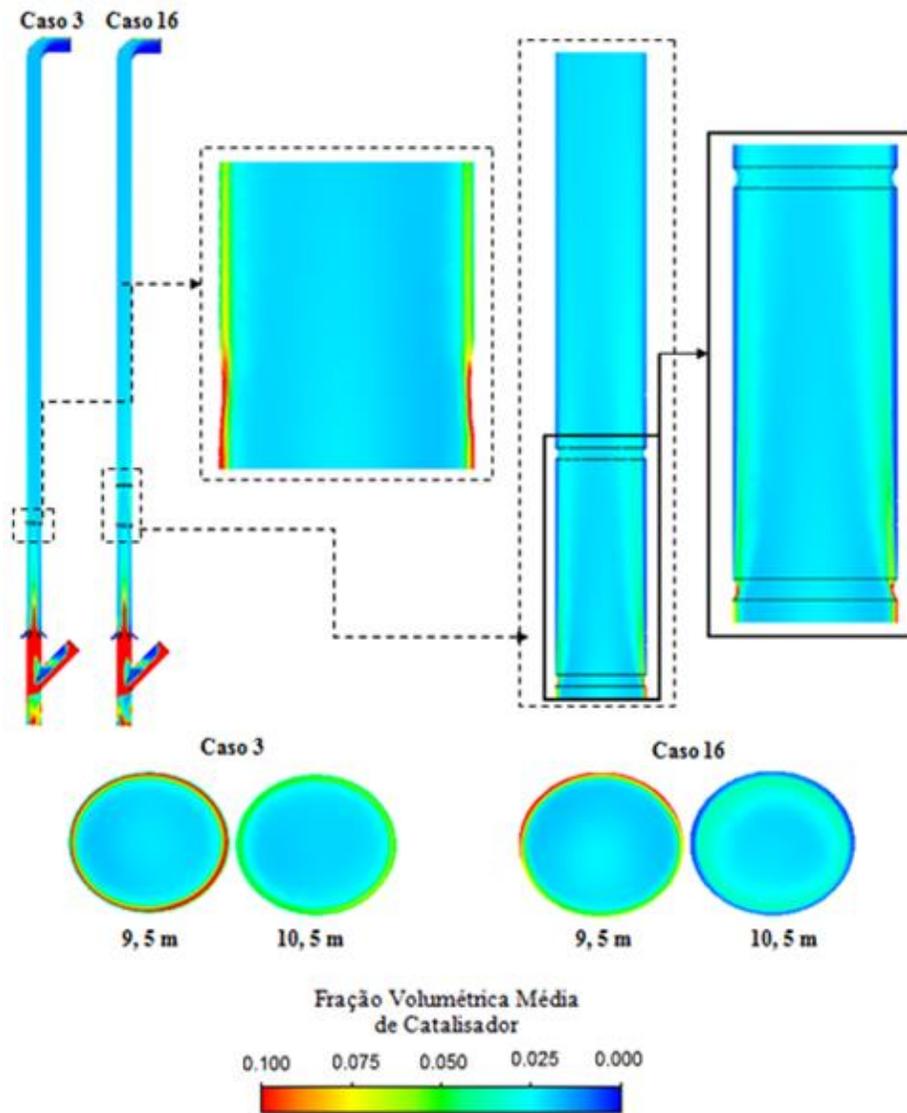


Figura 56 – Perfil de fração volumétrica de sólidos após a passagem pelo defletor e perfil radial de fração volumétrica de sólidos a 9,5 m e 10,5 m de altura no riser; caso 3 e caso 16.

Fonte: PRÓPRIA.

A configuração do defletor do caso 3 foi de $H = 0,3$ m e $E = 5\%$, essa configuração é a combinação entre as variáveis H e E que menos causou impacto na mudança do escoamento, o que pode justificar a menor conversão obtida na saída do riser. A configuração do defletor para o caso 16 ($H = 0,1$ m e $E = 10\%$) foi a combinação entre H e E que mais gerou impacto na mudança do escoamento e, conseqüentemente, proporcionou melhor homogeneização no sistema, conferindo maior interação entre as fases e gerando maior conversão dos produtos.

Além disso, o caso 3 se refere a um riser com apenas 1 defletor enquanto que o caso 16 se refere a um riser com 2 defletores, o que pode indicar também que a quantidade de defletores no riser pode influenciar no rendimento do processo. Entretanto, vale ressaltar que a influência dos parâmetros H, E e Z só poderão ser avaliados significativamente por meio de análise estatística.

5.4 ANÁLISE ESTATÍSTICA

Qualquer determinação experimental ou numérica é afetada, em maior ou menor grau, por erros aleatórios. É muito comum em análises experimentais utilizarmos ferramentas estatísticas para avaliar os erros e a influência significativa dos parâmetros estudados, mas não é muito comum ainda o uso da estatística em experimentações numéricas. Todavia, assim como nos sistemas reais, a maioria das grandezas presentes em modelos matemáticos representativos de sistemas dinâmicos possui incertezas, as quais devem ser caracterizadas estatisticamente. Portanto, para se obter conclusões sensatas, foram realizadas análises estatísticas para cada resposta obtida pelos modelos através das simulações executadas neste trabalho. As análises foram feitas com o auxílio do software Statistica 8.0.

5.4.1 Influência Significativa das Variáveis

Para constatar se as variáveis escolhidas na matriz de planejamento tiveram influência significativa ou não na variável resposta, é preciso avaliar os efeitos dos fatores (variáveis e interações entre as variáveis). A determinação da significância estatística de um efeito está diretamente associada ao nível de confiança escolhido. Dependendo do nível de confiança escolhido, pode-se obter diferentes respostas quanto à significância dos efeitos. A maioria dos trabalhos usa 95% de confiança, mas em alguns casos este valor não é adequado. Uma técnica que pode auxiliar na escolha do nível de confiança é a análise por gráficos normais, já que esta técnica permite distinguir os efeitos significativos sem precisar definir o nível de confiança.

As Figuras 57 à 62 apresentam os gráficos normais dos efeitos plotados pelo Statistica 8.0 com reta de inclinação 1 passando pela origem ($y = x$). Os pontos que se ajustam à reta não tem

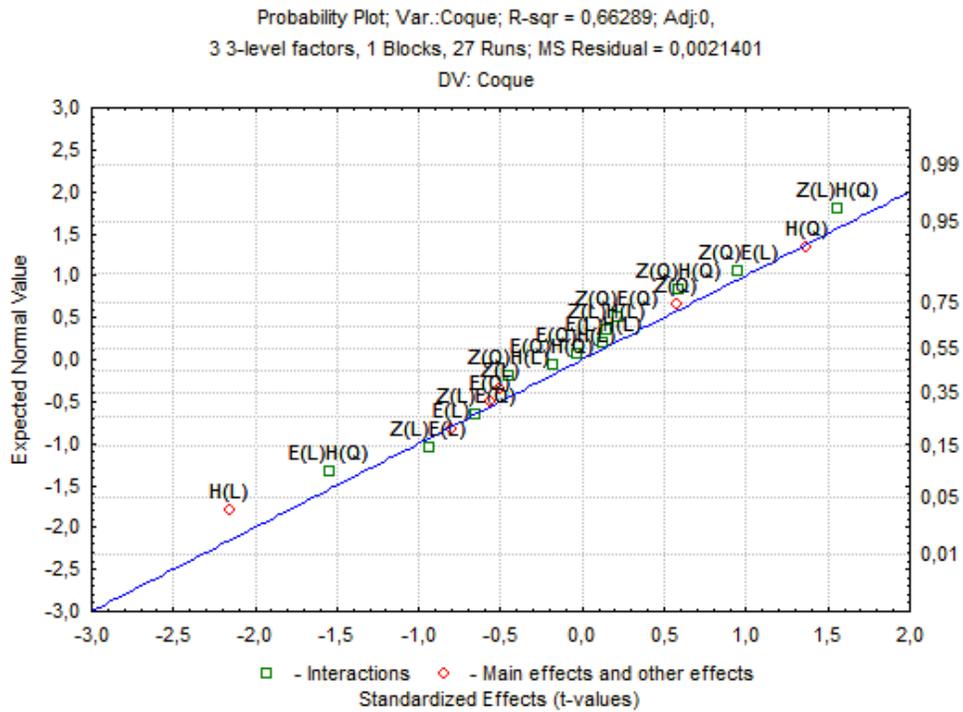


Figura 58 – Gráfico normal dos efeitos para o coque.

Fonte: PRÓPRIA.

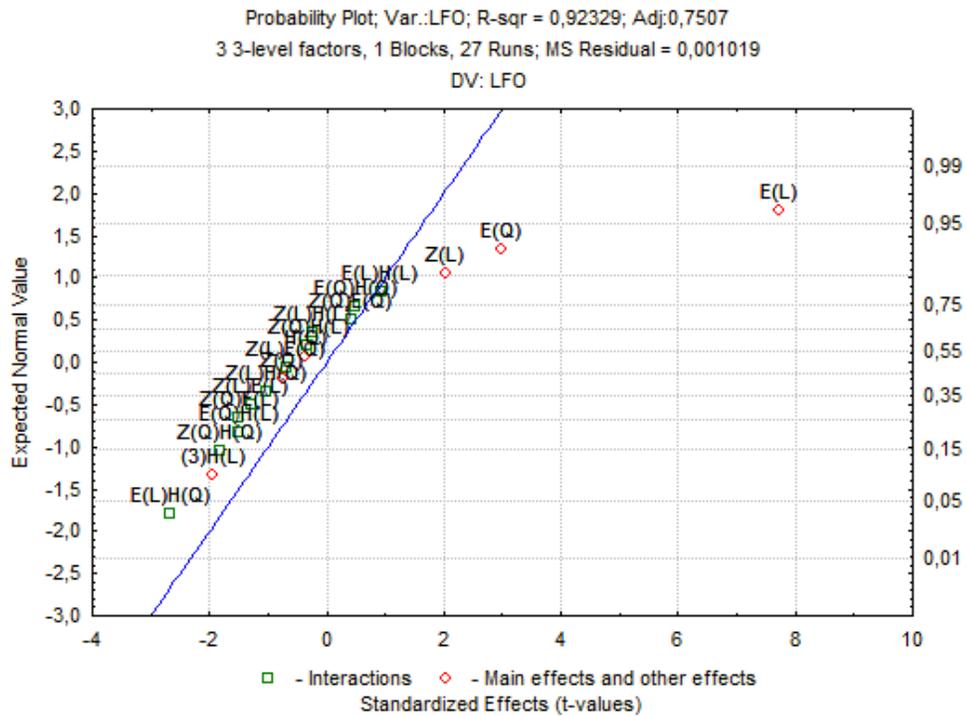


Figura 59 – Gráfico normal dos efeitos para LFO.

Fonte: PRÓPRIA.

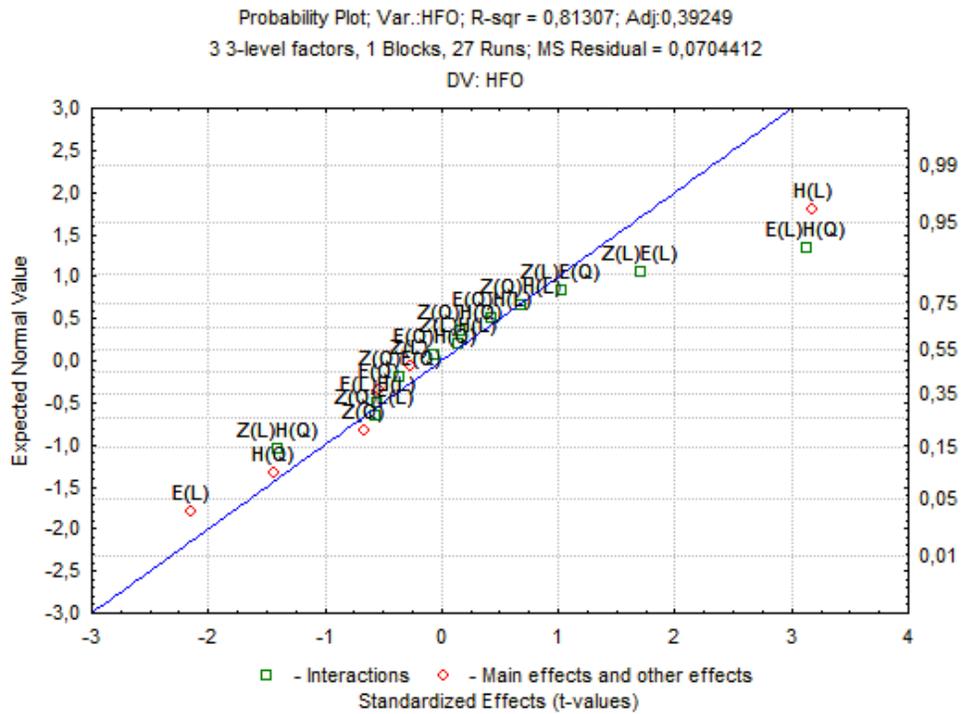


Figura 60 – Gráfico normal dos efeitos para HFO.

Fonte: PRÓPRIA.

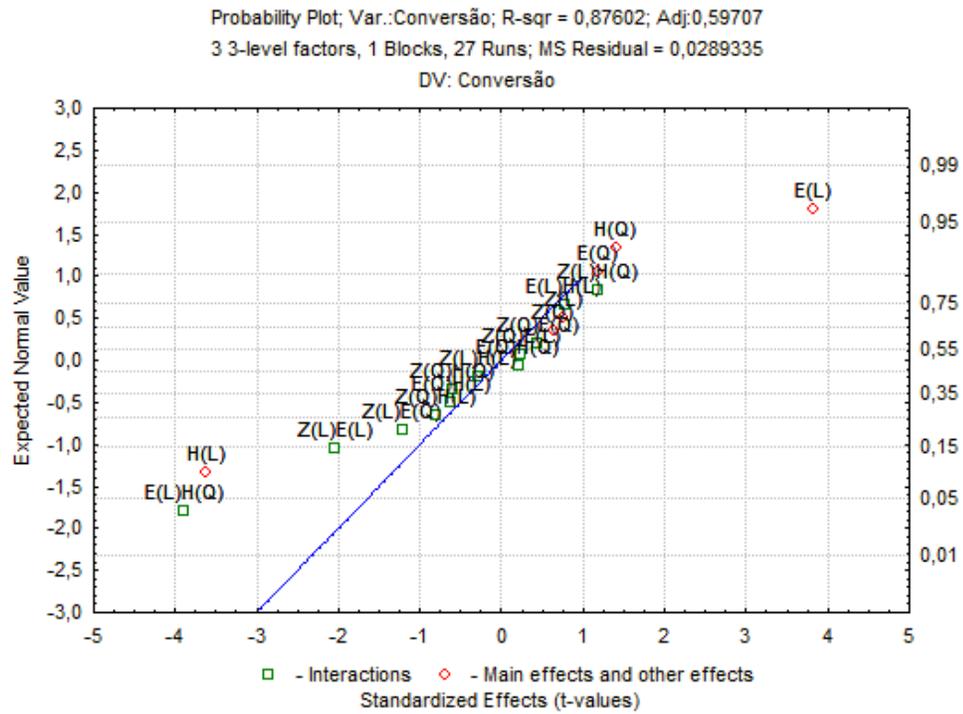


Figura 61 – Gráfico normal dos efeitos para conversão.

Fonte: PRÓPRIA.

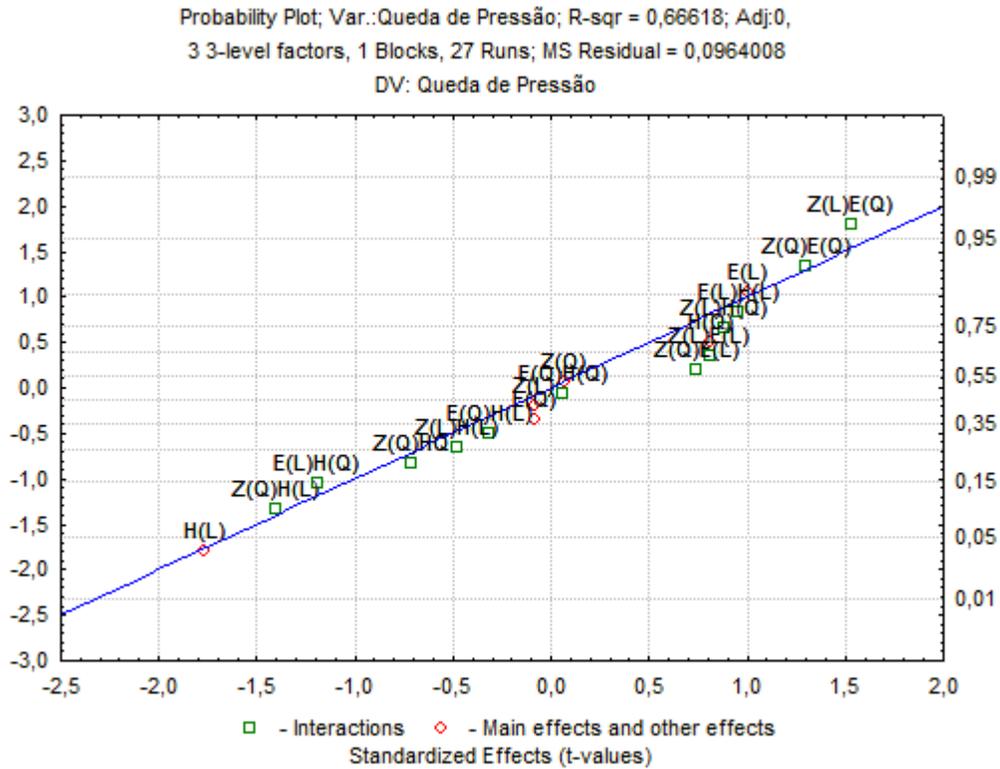


Figura 62 – Gráfico normal dos efeitos para a queda de pressão.

Fonte: PRÓPRIA.

A Tabela 15 lista os efeitos e interações que são significativos para cada resposta através da análise dos gráficos nomais plotados anteriormente.

Tabela 15 – Interações e efeitos significativos pela análise por gráficos normais.

Resposta	Efeitos significativos
Gasolina	E(L)H(Q), H(L), E(L)
Coque	-
LFO	E(Q), E(L)
HFO	E(L)H(Q), H(L)
Conversão	E(L)H(Q), H(L), E(L)
Queda de pressão	-

Fonte: PRÓPRIA.

Para obter um modelo que descreva as variáveis em estudo (estrangulamento, altura e quantidade de defletores) em função da resposta requerida (queda de pressão, gasolina, coque, LFO, HFO e conversão), é preciso definir o nível de intervalo de confiança adequado para se trabalhar. Como citado anteriormente, a maioria dos trabalhos reportados na literatura utilizam em análises estatísticas um nível de confiança de 95%, embora nem sempre esse seja o nível de confiança adequado para se trabalhar.

Para averiguar o intervalo de confiança adequado a ser usado na análise estatística deste trabalho, foi gerado no software Statistica 8.0 a tabela dos efeitos utilizando um intervalo de 95% de confiança. Se os mesmos efeitos considerados significativos pelo gráfico normal também for os mesmos efeitos significativos considerados pela tabela dos efeitos gerada pelo software Statistica utilizando o mesmo intervalo de confiança, então o nível de 95% de confiança é adequado. Todavia, se na análise comparativa, o nível de confiança de 95% não for adequado, um novo intervalo de confiança será estimado e comparado com o gráfico normal até que os efeitos considerados significativos pela tabela de efeitos sejam os mesmos indicados pelo gráfico normal.

A Tabela 16 a seguir indica os níveis de significância adequados definidos para cada resposta após a análise comparativa entre os gráficos normais e a tabela dos efeitos.

Tabela 16 – Níveis de confiança definidos para cada resposta.

Resposta	Nível de confiança adequado
Gasolina	95%
Coque	95%
LFO	98%
HFO	95%
Conversão	95%
Queda de pressão	90%

Fonte: PRÓPRIA.

O software Statistica 8.0 permite plotar o diagrama de pareto dos efeitos baseado no nível de confiança escolhido para cada resposta. Através desse recurso, é possível ordenar a significância dos efeitos. A linha tracejada na vertical é uma linha de referência que determina se os efeitos são estatisticamente significativos através de uma limiar de significância estabelecido através do nível de confiança. Todos os efeitos e interações que ultrapassam a linha vertical tracejada são considerados significativos e os demais efeitos e interações que não interceptam a linha tracejada não apresentam significância estatística. As Figuras 63 à 68 apresentam os diagramas de pareto dos efeitos de cada variável dependente (resposta).

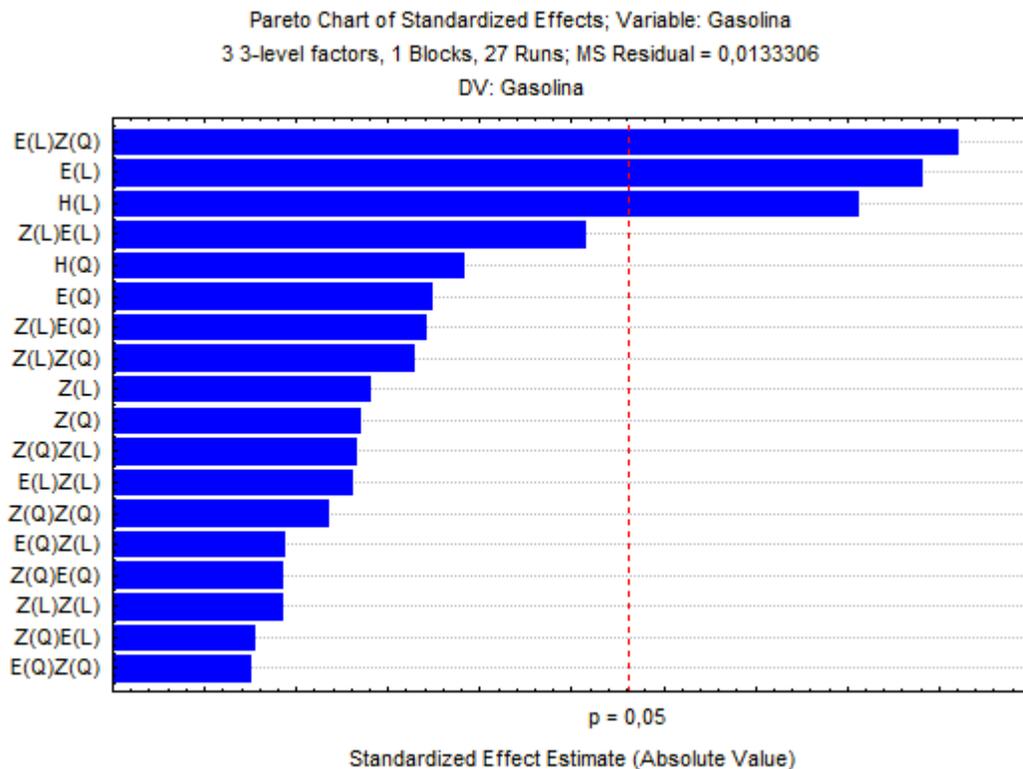


Figura 63 – Diagrama de pareto dos efeitos para a gasolina.

Fonte: PRÓPRIA.

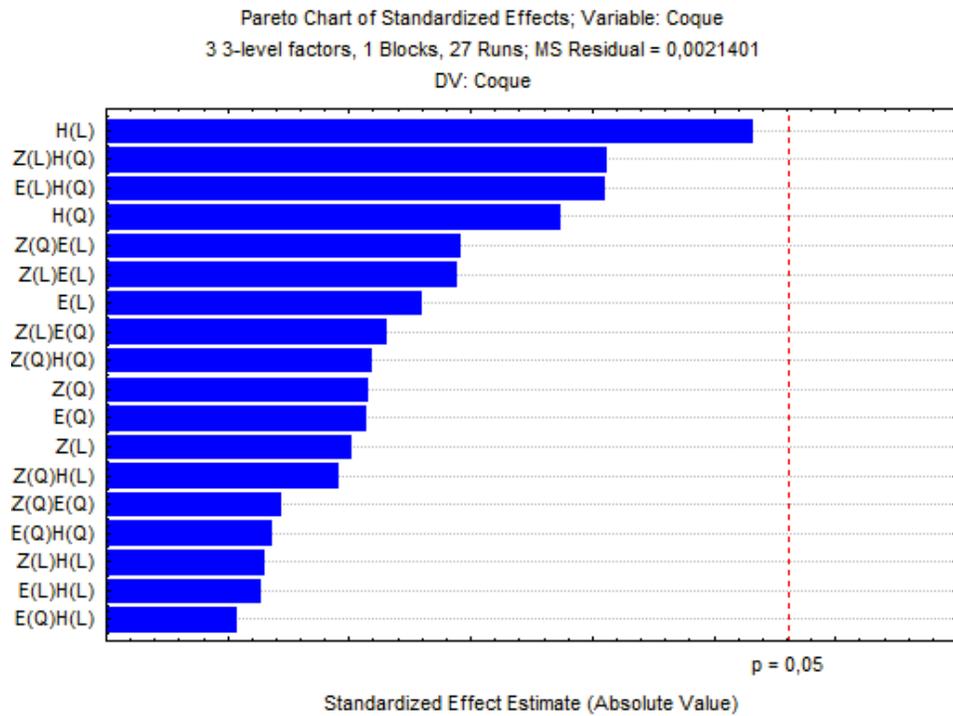


Figura 64 – Diagrama de pareto dos efeitos para o coque.

Fonte: PRÓPRIA.

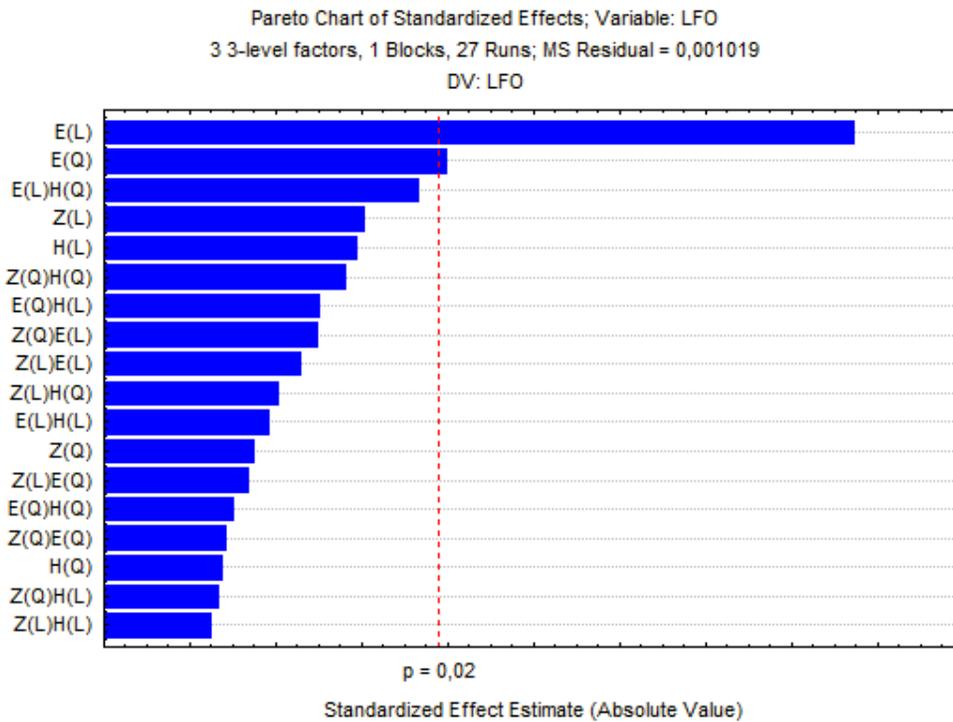


Figura 65 – Diagrama de pareto dos efeitos para LFO.

Fonte: PRÓPRIA.

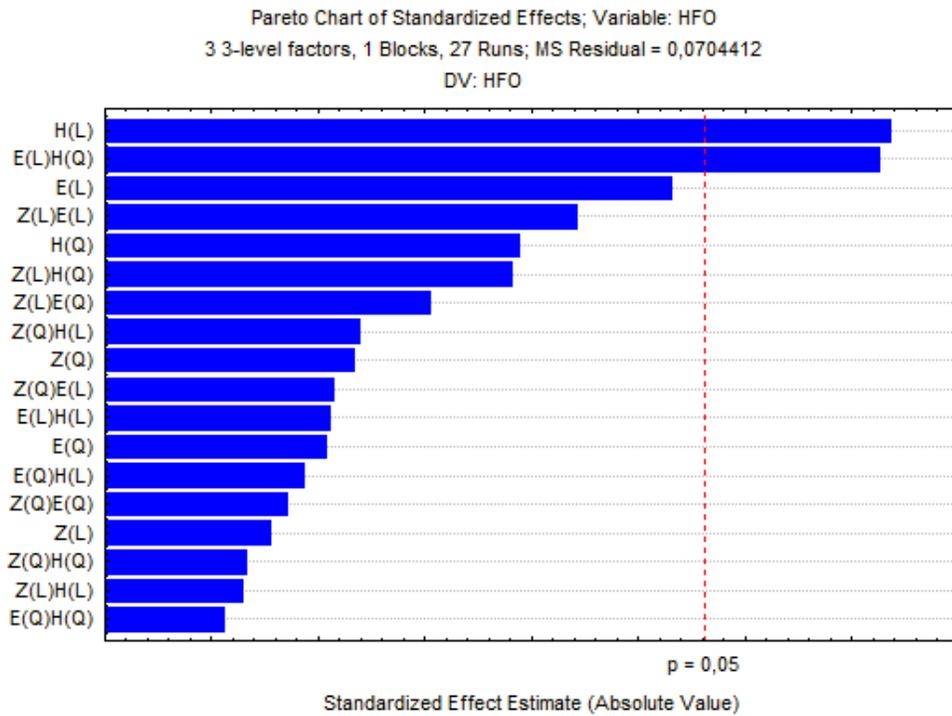


Figura 66 – Diagrama de pareto dos efeitos para HFO.

Fonte: PRÓPRIA.

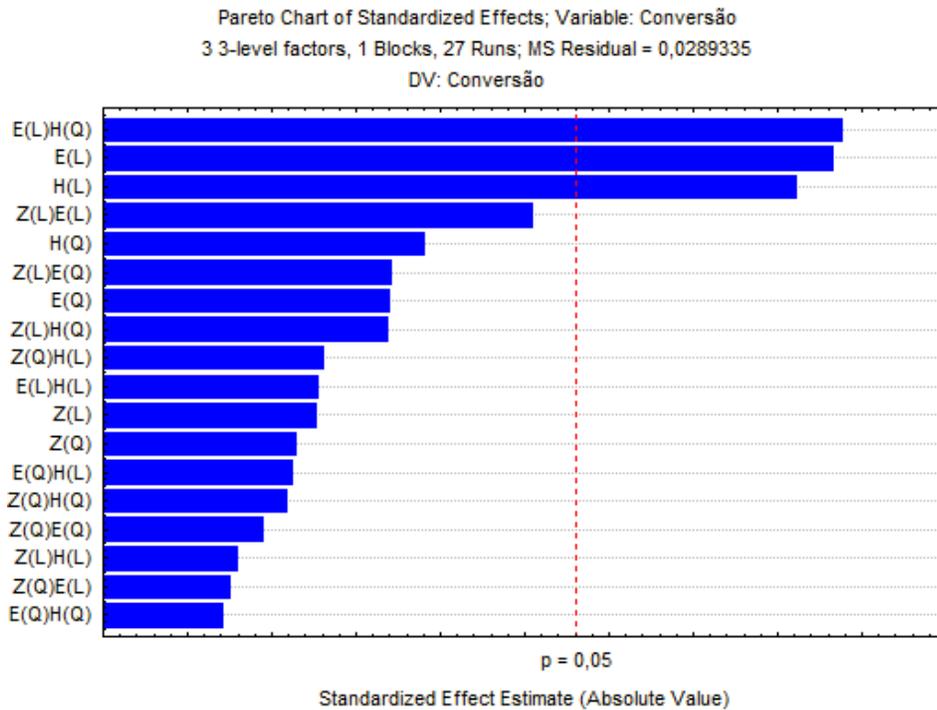


Figura 67 – Diagrama de pareto dos efeitos para a conversão.

Fonte: PRÓPRIA.

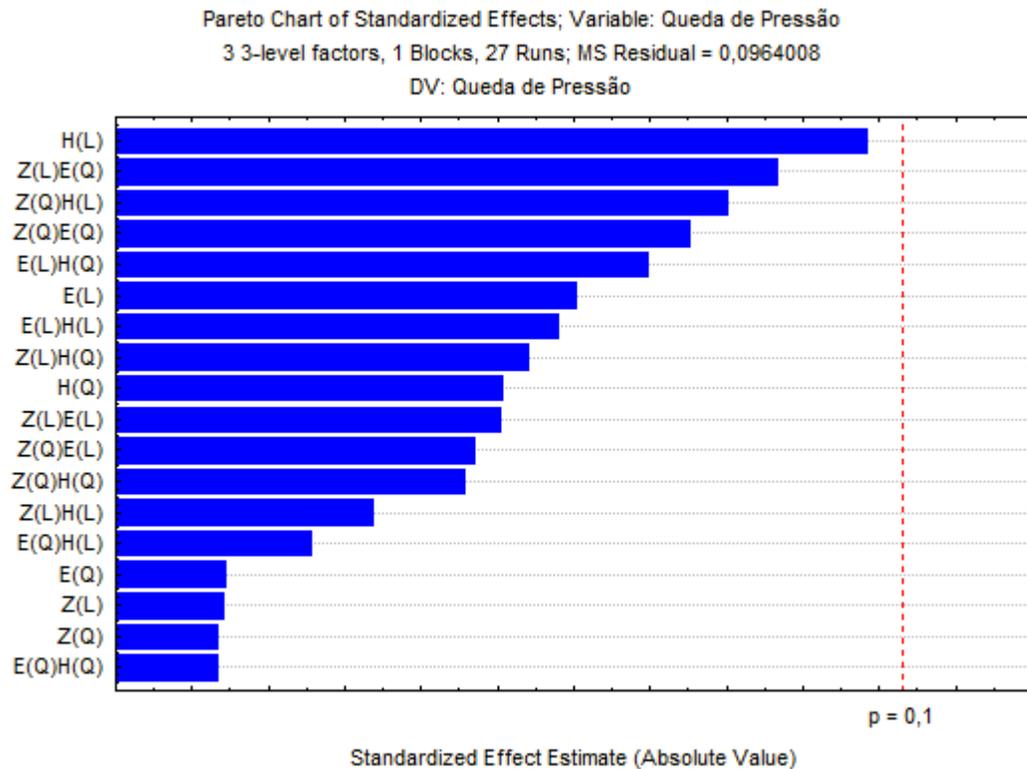


Figura 68 – Diagrama de pareto dos efeitos para a queda de pressão.

Fonte: PRÓPRIA.

5.4.2 Ajuste e significância estatística dos modelos

Após a constatação da significância dos efeitos sobre a variável resposta, é preciso verificar também se o modelo é significativo, se descreve bem os resultados das simulações. Esta análise pode ser feita avaliando os valores do coeficiente de correlação R^2 ajustado. Sabe-se que, se o valor de R^2 ajustado for baixo, indica que o modelo está mal ajustado e, portanto, não representa bem os dados. Para avaliar o ajuste do modelo, é necessário ir eliminando os fatores do menos significativo para o mais significativo e comparar com o novo valor de R^2 ajustado obtido. Esse procedimento deve ser feito até que o valor de R^2 ajustado pare de aumentar com as eliminações dos fatores.

✓ Variável resposta: Gasolina

Modelo completo ($R^2 = 0,88093$ e R^2 ajustado = $0,61303$):

$$\begin{aligned} \text{Gasolina (Z, E, H)} = & 41,77222 + 0,02444 (Z) + 0,02000 (Z)^2 + 0,10611 (E) + 0,02917 \\ & (E)^2 - 0,09667 (H) + 0,03333 (H)^2 - 0,06917 (Z)(E) - 0,03458 (Z)(E)^2 + 0,00792 (Z)^2(E) + \\ & 0,01062 (Z)^2(E)^2 - 0,01417 (Z)(H) + 0,03292 (Z)(H)^2 - 0,02375 (Z)^2(H) - 0,01687 (Z)^2(H)^2 + \\ & 0,02667 (E)(H) - 0,11833 (E)(H)^2 - 0,01250 (E)^2(H) + 0,00625 (E)^2(H)^2 \end{aligned}$$

Modelo simplificado ($R^2 = 0,8544$ e R^2 ajustado = $0,747563$):

$$\begin{aligned} \text{Gasolina (Z, E, H)} = & 41,77222 + 0,02444 (Z) + 0,02000 (Z)^2 + 0,10611 (E) + 0,02917 \\ & (E)^2 - 0,09667 (H) + 0,03333 (H)^2 - 0,06917 (Z)(E) - 0,03458 (Z)(E) + 0,03292 (Z)(H)^2 - \\ & 0,02375 (Z)^2(H) - 0,11833 (E)(H)^2 \end{aligned}$$

O valor de R^2 sempre será maior no modelo que contém mais termos, mesmo que estes termos não tenham influência na variável dependente (resposta). Desta forma, o modelo completo sempre vai aparentar ser o melhor modelo se avaliar apenas o valor de R^2 . Em contrapartida, o valor de R^2 ajustado só é maior quando os termos presentes no modelo contribuem essencialmente para descrever a resposta. Sendo assim, a análise do valor de R^2 ajustado é uma técnica que auxilia na escolha entre modelos.

No caso da variável gasolina, o valor de R^2 diminuiu pouco e o valor de R^2 ajustado aumentou bastante após ter retirado alguns termos do modelo completo, o que torna este novo modelo com menos termos o modelo mais preditivo, ou seja, mais representativo. Para averiguar a significância estatística dos modelos, o método mais usado para avaliar numericamente a qualidade do ajuste é a análise de variância (ANOVA) através do teste de Fisher, conhecido também como teste F em análises estatísticas. As Tabelas 17 e 18 apresentam os resultados da análise realizada com o auxílio do software Statística 8.0.

Tabela 17 – ANOVA calculada para o modelo completo referente à gasolina.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade.	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	0,7789023	18	0,043834
Resíduo (r)	0,106644	8	0,013331
Total	0,895667	26	

Teste F:

$$F_{\text{calculado}} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{18,8 \text{ calculado}} = 3,288125$$

$$F_{18,8 \text{ tabelado}} = 3,173317$$

Tabela 18 – ANOVA calculada para o modelo simplificado referente à gasolina.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade.	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	0,765261	11	0,069569
Resíduo (r)	0,130406	15	0,008694
Total	0,895667	26	

Teste F:

$$F_{\text{calculado}} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{11,15 \text{ calculado}} = 8,001955$$

$$F_{11,15 \text{ tabelado}} = 2,506806$$

Para que o modelo seja significativo, o $F_{\text{calculado}}$ deve ser maior que o valor de F_{tabelado} . Neste caso, ambos os modelos (completo e simplificado) obtiveram valores de $F_{\text{calculado}}$ maior que o valor de F_{tabelado} . Sendo assim, ambos são considerados modelos significativos, porém o modelo simplificado apresenta uma diferença maior entre o $F_{\text{calculado}}$ e o F_{tabelado} , e quanto maior o valor

do $F_{\text{calculado}}$ com relação ao F_{tabelado} , mais preditivo é o modelo e conseqüentemente mais representativo. Portanto, o modelo simplificado é o modelo mais significativo e mais preditivo para a variável resposta gasolina.

De modo a não tornar a leitura fadigante, a Tabela 19 apresenta de forma sucinta os resultados da referente análise para cada variável resposta em estudo. Mais detalhes como a descrição dos modelos completos e simplificados, bem como o cálculo da ANOVA se encontram na seção anexos deste trabalho. A seguir consta-se apenas a discussão da análise dos resultados.

Tabela 19 – Resumo dos resultados das análises de R^2 ajustado e do Teste F.

Variável	Modelo Completo				Modelo Simplificado			
	R^2	R^2_{ajustado}	$F_{\text{calculado}}$	F_{tabelado}	R^2	R^2_{ajustado}	$F_{\text{calculado}}$	F_{tabelado}
Coque	0,66289	0	0,873931	3,173317	0,57897	0,42385	3,734222	2,543534
LFO	0,92329	0,7507	5,349417	3,173317	0,90658	0,83807	13,22961	2,506806
HFO	0,81307	0,39249	1,933192	3,173317	0,76021	0,67187	8,605198	2,543534
Conversão	0,87602	0,59707	3,140462	3,173317	0,83417	0,74638	9,502223	2,494291
ΔP	0,66618	0	0,886929	3,173317	0,60768	0,36247	2,478262	2,493513

Fonte: PRÓPRIA.

✓ Variável resposta: Coque

No caso do coque, o valor de R^2 ajustado no modelo simplificado aumentou bastante em relação ao modelo completo, indicando ser o modelo mais preditivo, todavia, tem-se que levar em conta que mesmo com o ajuste, o valor de R^2 ajustado continua sendo um valor baixo. O $F_{\text{calculado}}$ do modelo completo não é maior que o F_{tabelado} , portanto, o modelo não é significativo e não deve ser usado. Isso já se era esperado devido ao valor de R^2 ajustado do modelo ser igual a zero. Com o ajuste do modelo, o valor de R^2 ajustado aumentou, isso permitiu com que o modelo, a partir da eliminação de alguns termos, se tornasse significativo, pois o $F_{\text{calculado}}$ passou a ser maior que o F_{tabelado} . Sendo assim, o modelo simplificado é considerado significativo.

✓ Variável resposta: LFO

Observa-se na Tabela 19 que, ambos os modelos apresentam valores de R^2 relativamente altos, indicando a forte correlação que as variáveis Z, E e H tem em função da variável resposta LFO. Apesar de o modelo completo já apresentar um valor de correlação R^2 alto, foi aplicado um ajuste no modelo para torná-lo mais preditivo. O ajuste foi feito eliminando alguns termos que não influenciavam na obtenção da variável resposta. O modelo simplificado apresentou um valor de R^2 um pouco menor, mais ainda bastante satisfatório. A diminuição do valor de R^2 já era esperada devido à eliminação dos termos. Em compensação, o valor de R^2 ajustado aumentou de 0,7507 para 0,83807, mostrando que ainda poderiam ser feito ajustes no modelo e torná-lo muito mais representativo.

Como já era de se esperar, ambos os modelos (completo e simplificado) são significativos, todavia, o modelo simplificado é mais significativo que o modelo completo, pois o seu valor de $F_{\text{calculado}}$ é bem maior que o F_{tabelado} quando comparado ao modelo completo. Portanto, o modelo simplificado é o modelo mais significativo e mais representativo.

✓ Variável resposta: HFO

Em relação à variável HFO, nota-se que o valor de R^2 diminuiu pouco do modelo completo para o modelo simplificado e o valor de R^2 ajustado aumentou bastante, o que torna o modelo simplificado o modelo mais preditivo. Sabe-se que o $F_{\text{calculado}}$ deve ser maior que o valor de F_{tabelado} para que o modelo seja significativo. O valor de $F_{\text{calculado}}$ do modelo completo não é maior que o valor de F_{tabelado} . Sendo assim, o modelo não é significativo e, portanto, não deve ser usado. Com o ajuste do modelo, o valor de R^2 ajustado aumentou, isso permitiu com que o modelo simplificado passasse a ser significativo, pois o $F_{\text{calculado}}$ passou a ser maior que o F_{tabelado} e, portanto, o modelo simplificado pode ser usado.

✓ Variável resposta: Conversão

Para a variável conversão, a Tabela 19 aponta que, após o ajuste do modelo, o valor de R^2 diminuiu um pouco devido à retirada de alguns termos, mas o valor de R^2 ajustado aumentou bastante, indicando melhorias no ajuste do modelo. O modelo completo não é considerado significativo, pois o valor de $F_{\text{calculado}}$ não é maior que o valor de F_{tabelado} , portanto, o modelo completo não deve ser usado. Já o modelo simplificado é significativo, pois o valor de $F_{\text{calculado}}$ é maior que o valor de F_{tabelado} e, portanto, o modelo simplificado é representativo e pode ser usado.

✓ Variável resposta: Queda de Pressão

Para a queda de pressão, a Tabela 19 mostra que o valor de R^2 diminuiu pouco e o valor de R^2 ajustado aumentou bastante após ter retirado alguns termos do modelo completo, o que torna este novo modelo com menos termos o modelo mais preditivo, ou seja, mais representativo. Todavia, tem-se que levar em conta que mesmo com o ajuste, o valor de R^2 ajustado continua sendo um valor baixo.

Na análise do modelo simplificado os valores de $F_{\text{calculado}}$ e F_{tabelado} quase se igualam, mas ainda assim o valor de $F_{\text{calculado}}$ é menor que o F_{tabelado} e, portanto, não é um modelo significativo e não deve ser usado. É importante ressaltar que, apesar do valor de R^2 ajustado ser maior no modelo simplificado quando comparado ao modelo completo, o seu valor máximo obtido ainda é baixo, o que explica o fato do modelo simplificado também não ser considerado significativo.

Além disso, o resultado desta análise elucidada com a análise do teste de independência de malha, onde os resultados para a queda de pressão não se estabilizaram e geraram valores aleatórios, portanto, era esperado que na análise estatística não apontasse relação entre as variáveis de estudo e a queda de pressão. É importante citar que se este trabalho tivesse atingido a independência de malha para a queda de pressão, pode ser que houvesse alguma relação estatística entre as variáveis estudadas e a queda de pressão. Portanto, estudos adequados são requeridos para avaliar a real relação entre defletores em risers de FCC e a queda de pressão.

A partir da análise da significância dos modelos completos e simplificados, alguns efeitos e interações que antes não eram significativos nos modelos completos, passaram a ser significativos nos modelos ajustados. Finalmente, a Tabela 20 apresenta, de forma resumida, os efeitos e interações significativos para cada resposta a partir dos modelos que foram considerados significativos.

Tabela 20 – Interações e efeitos com significância estatística para os modelos que foram considerados significativos ou mais significativos.

Resposta	Interações e Efeitos Significativos					
	E(L)	E(Q)	H(L)	E(L)H(Q)	Z(L)E(L)	Z(L)H(Q)
Gasolina	X		X	X	X	
Coque			X	X		X
LFO	X	X		X		
HFO	X		X	X	X	
Conversão				X	X	
Queda de Pressão	-	-	-	-	-	-

Fonte: PRÓPRIA.

De modo geral, observa-se na Tabela 20 que todos os parâmetros estudados, seja individualmente ou em interação com outros parâmetros, foram influentes no processo de craqueamento catalítico fluidizado. Alguns parâmetros e interações contribuem mais e outros contribuem menos, seja de forma positiva e/ou negativa, de acordo com o modelo estatístico determinado e em relação a cada variável dependente (resposta). Sendo assim, a influência dos defletores em riser de FCC é mais complexa do que aparentava antes da análise estatística. Não cabe a este trabalho determinar a condição ótima, pois há muitas variáveis e condições que devem ser levadas em consideração, inclusive análise econômica. Portanto, através deste trabalho foi possível coletar informações importantes a cerca do uso de defletores em riser de FCC e direcionar possíveis caminhos para estudos mais profundos e específicos.

6 CONCLUSÕES

Através do corrente trabalho foi possível avaliar a importância da validação dos modelos que são utilizados para as simulações numéricas, a fim de representar a realidade do sistema em estudo e a não produzir resultados enganosos. Os modelos aplicados neste trabalho basearam-se na modelagem utilizada por Armellini (2015), o qual obteve resultados numéricos aproximados dos resultados experimentais.

O teste de independência de malha mostrou-se fundamental para avaliar as distorções que uma malha não adequada pode acometer nos resultados via simulação computacional, portanto, deve-se tomar muito cuidado para não produzir resultados que não representem a realidade do processo. As malhas numéricas testadas garantiram sua independência para a fração volumétrica de sólidos, mas não garantiram a sua independência para os resultados de queda de pressão e, portanto, os resultados para queda de pressão não podem ser considerados confiáveis.

As simulações numéricas entre o riser sem defletor e os risers com defletores, revelaram que estruturas defletoras em riser de FCC podem ocasionar mudanças no escoamento gás-sólido, provocando a quebra do padrão *annulus* na parede do riser e causando maior interação entre a fase particulada e a fase gasosa. Todos os casos simulados com defletores promoveram a quebra do *annulus*, porém alguns casos foram capazes de desprender mais catalisador da parede que outros casos, gerando diferentes resultados de conversão da carga e rendimento dos produtos.

Os resultados obtidos por simulação numérica se diferenciaram entre os casos simulados, indicando que os parâmetros escolhidos para estudo dos defletores em riser causam influência no processo. Para avaliar a influência significativa, realizou-se uma análise estatística pelo software Statistica 8.0.

Através de ferramentas estatísticas foi possível plotar gráficos normais para cada variável dependente (resposta) que auxiliou na escolha do intervalo de confiança mais adequado a ser utilizado para análises estatísticas de cada resposta. O diagrama de pareto dos efeitos, baseado no

intervalo de confiança determinado, apontou os efeitos e interações dos parâmetros por ordem de significância.

Mediante a análise estatística, foi possível também determinar a correlação estatística (modelo estatístico) entre os parâmetros dos defletores e o rendimento de cada produto. Os modelos estatísticos também foram avaliados quanto a sua significância, obtendo ao final os efeitos e interações dos parâmetros que mais foram influentes significativamente para cada modelo considerado significativo.

Finalmente, conclui-se através dos resultados obtidos neste trabalho que, a presença de defletores em risers de FCC são capazes de promover maior distribuição da carga no interior do riser, garantir maior interação entre as fases sólida e gasosa, e mitigar o acúmulo da concentração de catalisador próximo à parede.

6.1 SUGESTÕES

Este trabalho contribuiu com informações importantes, todavia, muitos estudos ainda se fazem necessários. Sabe-se, por exemplo, que os modelos matemáticos existentes ainda são muito limitados em reproduzir a realidade complexa dos fenômenos dentro de um riser de FCC, portanto, há a necessidade do desenvolvimento de uma modelagem matemática mais completa e específica para o uso de risers de FCC com defletores.

Sugere-se também estudos mais detalhados quanto à queda de pressão que não foi possível ser avaliada neste trabalho em virtude do tempo e custo computacional. Esse estudo é importante para avaliar até onde o uso de defletores seria benéfico sem causar queda de pressão. Además, ainda há poucos estudos relacionados a este tema e não há consenso dos autores quanto à redução ou aumento da queda de pressão com o uso de defletores.

Por fim, estudos relacionados à análise econômica também são sugeridos para avaliar se o investimento no uso de defletores em risers de FCC é compensatório.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGRAWAL, K.; LOEZOS, P. N.; SYAMLAL, M. SUNDARESAN, S. The role of meso-scale structures in rapid gas-solid flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 445, p. 151-185, 2001.

ANDERSON JR., J. E. **Fundamentos de Engenharia Aeronáutica: introdução ao voo**. 7. ed. São Paulo: McGraw-Hill LLC, p. 925, 2015.

ALI, H.; ROHANI, S.; CORRIOU, J. P. Modeling and control of a riser type fluid catalytic cracking (FCC) unit. **Chemical Engineering Research and Design**, v.75, p.401-412, 1997.

ARBEL, A.; HUANG, Z.; RINARD, I. H.; SHINNAR, R.; SAPRE, A. V. Dynamic and control of fluidized catalytic crackers. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v.34, p.1228-1243, 1995.

ARMELLINI, V. A. de D. **Estudo computacional da influência de bicos injectores e internos em risers industriais de FCC**. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2015.

ALVAREZ-CASTRO, H. C.; MATOS, E.; M, MORI; M., MARTIGNONI, W. 3D CFD mesh configurations and turbulence models studies and their influence on the industrial risers of fluid catalytic cracking. **AIChE annual meeting**. USA, 2012.

ALVAREZ-CASTRO, H. C. **Análise de variáveis de processo via CFD visando aperfeiçoamento de performance em riser de FCC**. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2014.

AZEVEDO, V. W. F de. **Simulação do escoamento multifásico no interior de bombas de cavidades progressivas metálicas**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Centro de Tecnologia. Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Natal, 2012.

BANNACH, N. **Characterizing the flow and choosing the right interface**. 2014. Disponível em: <<https://www.comsol.com/blogs/characterizing-flow-choosing-right-interface/>>. Acesso em 28 ago. 2016.

BARBOSA, A. C. **Simulação de reações de craqueamento catalítico e térmico em um riser industrial**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2012.

BARBOSA, I. V. B.; PINTO, J. C.; NOGUEIRA, E. S. Simulações multifásicas por fluidodinâmica computacional como suporte ao planejamento de emergências com agentes químicos. **Revista Virtual de Química**, v. 6 , p. 795-814, 2014.

BASSANEZI, R. C. **Ensino-aprendizagem com modelagem matemática**. 3. ed. São Paulo: Ed. Contexto, 2011.

BEHJAT, Y.; SHAHHOSSEINI, S.; MARVAST, M. A. Simulation study of droplet vaporization effects on gas–solid fluidized bed. **Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers**, v. 42, p. 419–427, 2010.

BERRUTI, F.; KALOGERAKIS, N. Modeling the internal flow structure of circulating fluidized beds. **Canadian Journal Chemical Engineering**, v. 67, p. 1010-1014, 1989.

BOLLAS, G. M.; LAPPAS, A. A.; IATRIDIS, D. K.; VASALOS, I. A. Five-lump kinetic model with selective catalyst deactivation for the prediction of the product selectivity in the fluid catalytic cracking process. **Catalysis Today**, v.127, p.31-43, 2007.

BUCHANAN, J. S. Analysis of heating and vaporization of feed droplets in fluidized catalytic cracking risers. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 33, p. 3104, 1994.

BU, J.; ZHU, J. Influence of ring-type internals on axial pressure distribution in circulating fluidized bed. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 77, p. 26–34, 1999.

CAVALCANTI, E. P. **Notas de dinâmica de fluidos**. 2001. Disponível em: <<http://www.dca.ufcg.edu.br/download/apostilas/DinaFluidos.pdf>>. Acesso em: 05 out. 2016.

CHEN, Y. M. Recent advances in FCC technology. **Powder Technology**, v. 163, p. 2-8, 2006.

COKLJAT, D.; SLACK, M.; VASQUEZ, S. A. Reynolds-stress model for Eulerian multiphase. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, v. 6, p. 168-178, 2006.

CÓSTOLA, D.; ALUCCI, M. P. Aplicação de CFD para o cálculo de coeficientes de pressão externos nas aberturas de um edifício. **Ambiente Construído**, v. 11, p. 145-158, 2011.

DRIES, H. W. A. **Reactor riser of a fluidized-bed catalytic cracking plant**. United States patent US 6596242 B1, 2003.

ENWALD, H.; PEIRANO, E.; ALMSTEDT, A. E.; LECKNER, B. Simulation of the fluid dynamics of a bubbling fluidized bed. Experimental validation of the two-fluid model and evaluation of a parallel multiblock solver. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 311-328, 1999.

FRANÇA, F de A. **Modelagem de escoamentos multifásicos**. 2008. Disponível em: <http://www.fem.unicamp.br/~ffranca/MultiPhase_2008_01.pdf>. Acesso em: 04 set. 2015.

FELIPE, C. A. S. **Identificação e monitoramento de regime fluidodinâmico em leitos fluidizados gás-sólido**. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2004.

GAO, J.; CHANG, J.; XU, C.; LAN, X.; YANG, Y. CFD simulation of gas solid flow in FCC strippers. **Chemical Engineering Science**, v. 63, p. 1827-1841, 2008.

GEORG, I. C. **Modelagem e simulação numérica tridimensional transiente do escoamento gás-sólido em um reator de craqueamento catalítico em leito fluidizado**. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica). Universidade Federal de Santa Catarina. Florianópolis, 2005.

GIDASPOW, D. **Multiphase flow and fluidization: Continuum and kinetic theory descriptions**. Academic Press, San Diego, 1994.

GRACE, J. R. High-velocity fluidized bed reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 45, p. 1953-1966, 1990.

HARRIS, A. T.; DAVIDSON, J. F.; THORPE, R. B. The prediction of particle cluster properties in the near wall region of a vertical riser. **Powder Technology**, v. 127, p. 128-143, 2002.

HODAPP, J. M. **Modelagem e simulação de um leito fluidizado: um estudo comparativo**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2009.

JACKSON, R. The mechanics of fluidized beds. **Transactions of the Institution of Chemical Engineers**, v. 41, p. 13-28, 1963.

JACOB, S. M.; GROSS, B.; WEEKMAN, V. M. A. Lumping and reaction scheme for catalytic cracking. **AIChE Journal**, v.22, p.701-703, 1976.

JAMERSON, A. **Computational fluid dynamics past, present and future**. 2012. Notas de aula da Universidade de Stanford, Califórnia, EUA. Disponível em: <http://aero-comlab.stanford.edu/Papers/NASA_Presentation_20121030.pdf>. Acesso em: 17 ago. 2016.

JIANG, P.; BI H.; JEAN, R. Baffle effects on performance of catalytic circulating fluidized bed reactor. **AIChE Journal**, v. 37, p. 1392-1400, 1991.

JIN, Y.; WEI, F.; WANG, Y. Effect of internal tubes and baffles. In: YANG, W. C. **Handbook of fluidization and fluid-particle systems**. New York: Marcel Decker, 2003.

JOHNSON, D. R.; DAVYDOV, L. **Baffles for improving riser hydrodynamics**. United States patent US8877132B2, 2014.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. Bubbling bed model. Model for flow of gas through a fluidized bed. **Industrial and Engineering Chemistry**, v. 7, p. 446–452, 1968.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. **Fluidization Engineering**. New York: John Wiley & Sons, 1969.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. **Fluidization Engineering**. 2. ed. Boston: Butterworth-Heinemann, 1991.

LAN, X. Y.; XU, C. M.; WANG, G.; WU, L.; GAO, J. S. CFD modeling of gas-solid flow and cracking reaction in two-stage riser FCC reactors. **Chemical Engineering Science.**, v. 64, p. 3847-3858, 2009.

LEVENSPIEL, O. **Engenharia das reações químicas**. 3. ed. São Paulo: Edgard Blucher, 2000.

LI, J.; CHEN, A.; YAN, Z.; XU, G.; ZHANG, X. Particle-fluid contacting in circulating fluidized beds. In: AVIDAN, A. A. Preprint of the **Fourth International Conference on Circulating Fluidized Beds**, Hidden Valley, p. 49-54, 1993.

LI, J.; KWAIK, M. Exploring complex systems in chemical engineering – the multi-scale methodology. **Chemical Engineering Science.**, v. 58, p. 521-535, 2003.

LIMA, R. C. F. **Avaliação de modelos de turbulência na previsão do desempenho de ejetores**. Dissertação (Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica). Faculdade de Engenharia. Universidade do Porto. Porto, 2013.

LOPES, G. C.; ROSA, L. M.; MORI, M.; NUNHEZ, J. R.; MARTIGNONI, W. P. CFD study of industrial FCC risers: the effect of outlet configurations on hydrodynamics and reactions. **International Journal of Chemical Engineering**, 2012.

LOPES, G. C.; ROSA, L. M.; MORI, M.; NUNHEZ, J. P.; MARTIGNONI, W. P. The importance of using three-phase 3-D model in the simulation of industrial FCC risers. **Chemical Engineering Transactions**, v.24, p.1417-1422, 2011.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2. ed. rev. ampl. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora, 2004.

MARTINS, C. A.; MIRANDA, T.; PARISE, M. R.; BEHAINNE, J. J. R. Caracterização fluidodinâmica a frio de um leito fluidizado circulante. Anais do **XIV Congresso Nacional de Engenharia Mecânica e Industrial**. Salvador – BA, setembro de 2014.

MASSAH, H.; OSHINOWO, L. Advanced gas-solid multiphase flow models offer significant offer significant process improvements. **JA 112 Journal Articles by Fluent Software Users**, p. 1-6, 2011.

MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. **AIAA Journal**, v. 32, p. 1598-1605, 1994.

MILIOLI, F. E.; SANTOS, F. L. P dos. Simulação numérica euleriana de escoamentos gás-sólido em colunas ascendentes de LFC com dimensões reduzidas aplicando malhas refinadas. Anais da **10ª Conferência Brasileira de Dinâmica, Controle e Aplicações**. Águas de Lindóia – SP, agosto de 2011.

MILLER, A. E.; GIDASPOW, D. Dense, vertical gas-solid flow in a pipe. **AIChE Journal**, v. 38, p. 180-185, 1992.

MINETO, A. T. **Simulação numérica de escoamento gás-sólido em leito fluidizado borbulhante utilizando a teoria cinética dos escoamentos granulares.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Faculdade de Engenharia de Bauru. Universidade Estadual Paulista Júlio Mesquita Filho. Bauru, 2009.

MOREIRA, F. S. **A integração refino petroquímica como alternativa para atendimento do crescente mercado de petroquímicos.** Dissertação (Mestrado em Ciências). Escola de Química. Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2008.

MORITA, E. S. **Estudo experimental das emissões de NOx na combustão de carvão mineral brasileiro em leito fluidizado rápido.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Faculdade de Engenharia Mecânica. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2009.

MOURA, P. J.; GAMA, P.; CARDIM, G. **Fundamentos da combustão de biomassa em leito fluidizado circulante.** 2011. Artigo em Hypertexto. Disponível em: <http://www.infobibos.com/Artigos/2011_2/FundamentosCombustao/index.htm>. Acesso em: 6 out 2015.

MURRAY, J. D. On the mathematics – part I: fundamental equations and wave propagation. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 22, p.57-80, 1965.

NAYAK, S.V.; JOSHI, S.L.; RENADE, V. V. Modeling of vaporization and cracking of liquid oil injected in a gas-solid riser. **Chemical Engineering Science**, v.60, p. 6049-6066, 2005.

NERI, A.; GIDASPOW, D. Riser hydrodynamics: simulation using kinetic theory. **AIChE Journal**, v. 46, p. 52-67, 2000.

NITZ, M.; GUARDANI, R. **Fluidização gás-sólido - Fundamentos e avanços.** 2008. Disponível em: <<http://maua.br/files/artigos/artigo-fluidizacao-gas-solido-prof-nitz.pdf>>. Acesso em: 17 fev. 2016.

NUNHEZ, J. R.; SPOGIS, N. **Que é Fluidodinâmica Computacional**. 2002. Disponível em: <<http://www.feq.unicamp.br/~nunhez/historico.html>>. Acesso em: 18 ago. 2016.

OLIVEIRA, A. G.; SILVA, G. P da.; GERALDELLI, W de.; ROPELATO, K. O crescimento do uso de fluidodinâmica computacional (CFD) nas tecnologias de destilação, FCC e coqueamento retardado na engenharia básica de abastecimento da Petrobras. **Revista Petro & Química**, ed. 343, 2012.

PAIVA, T. A. **Aplicação de técnicas ultra-sônicas para análise de escoamentos multifásicos do tipo líquido-sólido e líquido-sólido-gás**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Instituto de Engenharia Mecânica. Universidade Federal de Itajubá. Itajubá, 2011.

PÄRSSINEN J. H.; Zhu J. X. Axial and radial solids distribution in a long and high-flux CFB riser, **AIChE Journal**, v. 47, p. 2197-2205, 2001.

PELISSARI, D. C.; ALVAREZ-CASTRO, H. C.; MORI, M.; MARTIGNONI, W. Efeito da configuração dos injetores na homogeneização do catalisador no reator riser FCC. Anais do **XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química**. Florianópolis-SC, outubro de 2014.

PELISSARI, D. C. **Estudo da influência dos bicos injetores sobre o escoamento gás-sólido e as reações em um riser de FCC via CFD**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2015.

PERRY, R.H.; GREEN, D.W., **Perry's Chemical Engineers' Handbook**, 8. ed. Nova York: McGraw Hill, 2008.

PITAUULT, I.; NEVICATO, D.; FORISSIER, M; BERNARD, J. Kinetic model based on a molecular description for catalytic cracking of vacuum gas oil. **Chemical Engineering Science**, v.49, p.4249-4262, 1994.

RAMOS, D. A. **Introdução ao movimento dos fluidos**. 2007. Disponível em: <http://www.joinville.udesc.br/portal/professores/doalcey/materiais/Cap_3_Cinematica_dos_fluidos_e_4_Equacoes_fundamentais.pdf>. Acesso em: 04 out. 2016.

RANZ, W. E.; MARSHALL, J.; W. R. Evaporation from drops, Part I. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, p. 141-146, 1952a.

RANZ, W. E.; MARSHALL, J.; W. R. Evaporation from drops, Part II. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, p. 173-180, 1952b.

RODRIGUEZ, O. M. H. **Introdução aos fluidos em movimento**. 2015. Disponível em: <<http://www2.eesc.usp.br/netef/Oscar/Aula6.pdf>>. Acesso em: 04 out. 2016.

ROSA, E. S. **Cinemática**. 2016. Disponível em: <http://www.fem.unicamp.br/~im250/SITE%20IM250/AULAS/Aula-2-CINEMATICA/im250_Cinematica.pdf>. Acesso em: 04 out. 2016.

ROSA, L. M. **Simulação de reações químicas e consumo de calor em reatores riser**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2002.

ROSSBACH, V.; DECKER, R. K.; NORILER, D.; UTZIG, J.; MEIER, H. F. Análise numérica do uso de anéis defletores internos sobre o escoamento gás-sólido em risers de FCC. **Anais do XXXVII Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados**. São Carlos-SP, outubro de 2015.

RUMPFKEIL, M. P. **Computational fluid dynamics (CFD)**. 2014. Universidade de Dayton. Disponível em: <<http://academic.udayton.edu/markusrumpfkeil/cfdcourse/intropresentation.pdf>>. Acesso em: 17 ago. 2016.

SANTOS, F. P. dos; MEDRONHO, R. A. Simulação numérica da fluidodinâmica de um riser de craqueamento catalítico. **Anais do IV Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás**. Campinas-SP, outubro de 2007.

SANTOS, M. M. **Simulação numérica de escoamento bifásico óleo-água em tubos**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Universidade Federal de Itajubá. Itajubá, 2010.

SOUZA, V. L.; JÚNIOR, P. S.; PAGLIUSO, D. J. Análise dos regimes de escoamento gás-sólido em um reator de leito fluidizado borbulhante. **Anais do XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**. Águas de Lindóia-SP, novembro de 1999.

SOUZA, V. C de. **Bicos dispersores da indústria do petróleo – análise bidimensional aplicando à fluidodinâmica computacional**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2001.

SOUZA, J. F. A de.; OLIVEIRA, L. R de.; AZEVEDO, J. L. L de.; SOARES, I. D.; MATA, M. M. Uma revisão sobre turbulência e sua modelagem. **Revista Brasileira de Geofísica**. v. 29. p.21-41, 2011.

THEOLOGOS, K. N.; MARKATOS, N.C. Advanced Modeling os fluid catalytic cracking riser-type reactors. **AIChE Journal**, v. 39, p. 1007-1017, 1993.

THEOLOGOS, K.N; NIKOU, I.D; LYGEROS, A.I; MARKATOS, N.C. Simulation and design of fluid catalytic cracking riser-type reactors. **Computers & Chemical Engineering**, v.20, p. 757-762, 1997.

TSUO, Y. P.; GIDASPOW, D. Computation of flow patterns in circulating fluidized beds. **AIChE Journal**, v. 36, p. 885-896, 1990.

VEGENDLA, S. P.; HEYNDERICKX, G. J.; MARIN, G. B. Probability density function simulation of turbulent reactive gas-solid flow in a FCC riser. **AIChE Journal**, v. 58, p. 268-284, 2012.

WEEKMAN, V. W.; NACE, D. M. Kinetics of catalytic cracking selectivity in fixed, moving, and fluid bed reactors. **AIChE Journal**, v.16, p.397-404, 1970.

WELLS, J. W. **Process and apparatus for fluidized catalytic cracking of a hydrocarbon feed**. United States patent US 5851380, 1998.

WEN, Y. C.; YU, Y. H. Mechanics of fluidization. The **Chemical Engineering Progress Symposium Series**, v. 62, p. 100-111, 1966.

YANG, Y.H.; REESE, J.M. Gas turbulence modulation in a two-fluid model for gas–solid flows. **AIChE Journal**, v. 49, p. 3048–3065, 2003.

ZHANG, W.; TUNG, Y.; JOHNSON, F. Radial voidage profiles in fast fluidized beds of different diameters. **Chemical Engineering Science**, v. 46, p. 3045-3052, 1991.

ZHU, J. X.; SALAH, M.; ZHOU, Y. M. Radial and axial voidage distributions in circulating fluidized bed with ring-type internals. **Japanese Journal of Chemical Engineering**, v. 30, p. 928-937, 1997.

ANEXOS

✓ Variável resposta: Coque

Modelo completo ($R^2 = 0,66289$ e R^2 ajustado = 0):

$$\begin{aligned} \text{Coque (Z, E, H)} = & 5,127111 - 0,005500 (Z) + 0,005417 (Z)^2 - 0,008667 (E) - 0,005333 \\ & (E)^2 - 0,023500 (H) + 0,012917 (H)^2 - 0,012500 (Z)(E) - 0,007500 (Z)(E)^2 + 0,011000 (Z)^2(E) + \\ & 0,002125 (Z)^2(E)^2 + 0,002000 (Z)(H) + 0,018000 (Z)(H)^2 - 0,005250 (Z)^2(H) + 0,005875 \\ & (Z)^2(H)^2 + 0,001750 (E)(H) - 0,017875 (E)(H)^2 - 0,000375 (E)^2(H) - 0,001812 (E)^2(H)^2 \end{aligned}$$

Modelo simplificado ($R^2 = 0,57897$ e R^2 ajustado = 0,42385):

$$\begin{aligned} \text{Coque (Z, E, H)} = & 5,127111 - 0,008667 (E) - 0,023500 (H) + 0,012917 (H)^2 - 0,012500 \\ & (Z)(E) + 0,011000 (Z)^2(E) + 0,018000 (Z)(H)^2 - 0,017875 (E)(H)^2 \end{aligned}$$

Tabela 21 – ANOVA calculada para o modelo completo referente ao coque.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	0,033666	18	0,0018703
Resíduo (r)	0,017121	8	0,0021401
Total	0,050787	26	

Teste F:

$$F_{\text{calculado}} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{18,8 \text{ calculado}} = 0,873931$$

$$F_{18,8 \text{ tabelado}} = 3,173317$$

Tabela 22 – ANOVA calculada para o modelo simplificado referente ao coque.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	0,029404	7	0,004201
Resíduo (r)	0,021383	19	0,001125
Total	0,050787	26	

Teste F:

$$F_{\text{calculado}} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{7,19 \text{ calculado}} = 3,734222$$

$$F_{7,19 \text{ tabelado}} = 2,543534$$

✓ Variável resposta: LFO

Modelo completo ($R^2 = 0,92329$ e R^2 ajustado = 0,7507):

$$\begin{aligned} \mathbf{LFO (Z, E, H)} = & 20,49448 + 0,01528 (Z) - 0,00486 (Z)^2 + 0,05800 (E) + 0,01939 (E)^2 - \\ & 0,01461 (H) - 0,00236 (H)^2 - 0,01192 (Z)(E) - 0,00546 (Z)(E)^2 - 0,01187 (Z)^2(E) + 0,00290 \\ & (Z)^2(E)^2 - 0,00225 (Z)(H) - 0,00821(Z)(H)^2 - 0,00254 (Z)^2(H) - 0,01248 (Z)^2(H)^2 + 0,00850 \\ & (E)(H) - 0,02125 (E)(H)^2 - 0,01192 (E)^2(H) - 0,00346 (E)^2(H)^2 \end{aligned}$$

Modelo simplificado ($R^2 = 0,90658$ e R^2 ajustado = 0,83807):

$$\begin{aligned} \mathbf{LFO (Z, E, H)} = & 20,49448 + 0,01528 (Z) + 0,05800 (E) + 0,01939 (E)^2 - 0,01461 (H) - \\ & 0,01192 (Z)(E) - 0,01187 (Z)^2(E) - 0,00821(Z)(H)^2 - 0,01248 (Z)^2(H)^2 + 0,00850 (E)(H) - \\ & 0,02125 (E)(H)^2 - 0,01192 (E)^2(H) \end{aligned}$$

Tabela 23 – ANOVA calculada para o modelo completo referente à LFO.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	0,098119	18	5,451056
Resíduo (r)	0,008152	8	0,001019
Total	0,106271	26	

Teste F:

$$F_{calculado} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{18,8 calculado} = 5,349417$$

$$F_{18,8 tabelado} = 3,173317$$

Tabela 24 – ANOVA calculada para o modelo simplificado referente à LFO.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	0,096343	11	0,008758
Resíduo (r)	0,009928	15	0,000662
Total	0,106271	26	

Teste F:

$$F_{\text{calculado}} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{11,15 \text{ calculado}} = 13,229607$$

$$F_{11,15 \text{ tabelado}} = 2,506806$$

✓ Variável resposta: HFO

Modelo completo ($R^2 = 0,81307$ e R^2 ajustado = $0,39249$):

$$\begin{aligned} \mathbf{HFO (Z, E, H)} = & 18,64315 - 0,01706 (Z) - 0,03603 (Z)^2 - 0,13467 (E) - 0,02894 (E)^2 + \\ & 0,19900 (H) - 0,07794 (H)^2 + 0,13075 (Z)(E) + 0,06804 (Z)(E)^2 - 0,03788 (Z)^2(E) - 0,02035 \\ & (Z)^2(E)^2 + 0,01100 (Z)(H) - 0,09308 (Z)(H)^2 + 0,04575 (Z)^2(H) + 0,00908 (Z)^2(H)^2 - 0,04200 \\ & (E)(H) + 0,20750 (E)(H)^2 + 0,02850 (E)^2(H) - 0,00317 (E)^2(H)^2 \end{aligned}$$

Modelo simplificado ($R^2 = 0,76021$ e R^2 ajustado = $0,67187$):

$$\begin{aligned} \mathbf{HFO (Z, E, H)} = & 18,64315 - 0,13467 (E) - 0,02894 (E)^2 + 0,19900 (H) - 0,07794 (H)^2 + \\ & 0,13075 (Z)(E) + 0,06804 (Z)(E)^2 - 0,09308 (Z)(H)^2 + 0,20750 (E)(H)^2 \end{aligned}$$

Tabela 25 – ANOVA calculada para o modelo completo referente à HFO.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	2,451176	18	0,136176
Resíduo (r)	0,563529	8	0,070441
Total	3,014705	26	

Teste F:

$$F_{calculado} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{18,8 \text{ calculado}} = 1,933192$$

$$F_{18,8 \text{ tabelado}} = 3,173317$$

Tabela 26 – ANOVA calculada para o modelo simplificado referente à HFO.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	2,291811	7	0,327402
Resíduo (r)	0,722894	19	0,038047
Total	3,014705	26	

Teste F:

$$F_{\text{calculado}} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{7,19 \text{ calculado}} = 8,605198$$

$$F_{7,19 \text{ tabelado}} = 2,543534$$

✓ Variável resposta: Conversão

Modelo completo ($R^2 = 0,87602$ e R^2 ajustado = $0,59707$):

$$\text{Conversão (Z, E, H)} = 69,91367 + 0,03047 (Z) + 0,02229 (Z)^2 + 0,15329 (E) + 0,04138 (E)^2 - 0,14480 (H) + 0,04871 (H)^2 - 0,10026 (Z)(E) - 0,05147 (Z)(E)^2 + 0,01050 (Z)^2(E) + 0,01627 (Z)^2(E)^2 - 0,01419 (Z)(H) + 0,05042 (Z)(H)^2 - 0,03433 (Z)^2(H) - 0,02179 (Z)^2(H)^2 + 0,03788 (E)(H) - 0,16516 (E)(H)^2 - 0,02635 (E)^2(H) + 0,00755 (E)^2(H)^2$$

Modelo simplificado ($R^2 = 0,83417$ e R^2 ajustado = $0,74638$):

$$\text{Conversão (Z, E, H)} = 69,91367 + 0,15329 (E) + 0,04138 (E)^2 - 0,14480 (H) + 0,04871 (H)^2 - 0,10026 (Z)(E) - 0,05147 (Z)(E)^2 + 0,05042 (Z)(H)^2 - 0,03433 (Z)^2(H) - 0,16516 (E)(H)^2$$

Tabela 25 – ANOVA calculada para o modelo completo referente à conversão.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	1,635539	18	0,090863
Resíduo (r)	0,231468	8	0,028933
Total	1,867007	26	

Teste F:

$$F_{\text{calculado}} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{18,8 \text{ calculado}} = 3,140462$$

$$F_{18,8 \text{ tabelado}} = 3,173317$$

Tabela 27 – ANOVA calculada para o modelo simplificado referente à conversão.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	1,557407	9	0,173045
Resíduo (r)	0,309600	17	0,018211
Total	1,867007	26	

Teste F:

$$F_{\text{calculado}} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{9,17 \text{ calculado}} = 9,502223$$

$$F_{9,17 \text{ tabelado}} = 2,494291$$

✓ Variável resposta: Queda de pressão

Modelo completo ($R^2 = 0,66618$ e R^2 ajustado = 0):

$$\Delta P (\mathbf{Z}, \mathbf{E}, \mathbf{H}) = 43,23502 - 0,00612 (\mathbf{Z}) + 0,00417 (\mathbf{Z})^2 + 0,07341 (\mathbf{E}) - 0,00547 (\mathbf{E})^2 - 0,12932 (\mathbf{H}) + 0,05154 (\mathbf{H})^2 + 0,07257 (\mathbf{Z})(\mathbf{E}) + 0,11876 (\mathbf{Z})(\mathbf{E})^2 + 0,05752 (\mathbf{Z})^2(\mathbf{E}) + 0,08746 (\mathbf{Z})^2(\mathbf{E})^2 - 0,04249 (\mathbf{Z})(\mathbf{H}) + 0,06838 (\mathbf{Z})(\mathbf{H})^2 - 0,10876 (\mathbf{Z})^2(\mathbf{H}) - 0,04789 (\mathbf{Z})^2(\mathbf{H})^2 + 0,08595 (\mathbf{E})(\mathbf{H}) - 0,09266 (\mathbf{E})(\mathbf{H})^2 - 0,02427 (\mathbf{E})^2(\mathbf{H}) + 0,00433 (\mathbf{E})^2(\mathbf{H})^2$$

Modelo simplificado ($R^2 = 0,60768$ e R^2 ajustado = 0,36247):

$$\Delta P (\mathbf{Z}, \mathbf{E}, \mathbf{H}) = 43,23502 + 0,07341 (\mathbf{E}) - 0,12932 (\mathbf{H}) + 0,05154 (\mathbf{H})^2 + 0,07257 (\mathbf{Z})(\mathbf{E}) + 0,11876 (\mathbf{Z})(\mathbf{E})^2 + 0,08746 (\mathbf{Z})^2(\mathbf{E})^2 - 0,04249 (\mathbf{Z})(\mathbf{H}) - 0,10876 (\mathbf{Z})^2(\mathbf{H}) + 0,08595 (\mathbf{E})(\mathbf{H}) - 0,09266 (\mathbf{E})(\mathbf{H})^2$$

Tabela 28 – ANOVA calculada para o modelo completo referente à queda de pressão.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade.	Média Quadrática (MQ)
Regressão (R)	1,539032	18	0,00855
Resíduo (r)	0,771206	8	0,00964
Total	2,310238	26	

Teste F:

$$F_{\text{calculado}} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{18,8 \text{ calculado}} = 0,886929$$

$$F_{18,8 \text{ tabelado}} = 3,173317$$

Tabela 29 – ANOVA calculada para o modelo simplificado referente à queda de pressão.

Fonte de variação	Soma Quadrática	Nº. de graus de liberdade.	Média Quadrática
Regressão (R)	1,403876	10	0,1403876
Resíduo (r)	0,906362	16	0,0566476
Total	2,310238	26	

Teste F:

$$F_{\text{calculado}} = \frac{MQ_R}{MQ_r}$$

$$F_{10,16 \text{ calculado}} = 2,478262$$

$$F_{10,16 \text{ tabelado}} = 2,493513$$