

INSTITUTO DE PESQUISAS TECNOLÓGICAS DO ESTADO DE SÃO PAULO

HOVANÊS ABGARIAN EMIN

Avaliação da distribuição do escoamento de reagentes, através de um leito de material inerte, na entrada de um reator de leito fixo, usando-se CFD

São Paulo

2006

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Hovanês Abgarian Emin

Avaliação da distribuição do escoamento de reagentes, através de um leito de material inerte, na entrada de um reator de leito fixo, usando-se CFD

Hovanês Abgarian Emin

Avaliação da distribuição do escoamento de reagentes, através de um leito de material inerte, na entrada de um reator de leito fixo, usando-se CFD

Dissertação apresentada ao Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo - IPT, para obtenção do título de Mestre em Processos Industriais

Área de concentração: Desenvolvimento e Otimização de Processos Industriais

Orientador: Dr. Marcelo M. Seckler

São Paulo

2006

## RESUMO

Reatores de leito fixo normalmente possuem um leito de material inerte na região de entrada, com o objetivo de distribuir uniformemente o escoamento dos reagentes pela seção transversal do reator, o que é importante para maximizar a vida útil do catalisador. Por não existirem critérios de projeto, o leito de material inerte costuma ser especificado de forma empírica, e sua eficácia é desconhecida.

Usando-se Fluidodinâmica Computacional, foi avaliado como o escoamento se desenvolve em diversos tipos de material inerte, na região de entrada de um reator de alquilação de uma indústria petroquímica. Reatores de geometria diferentes também foram estudados. O modelo de escoamento em meio poroso usado no programa baseia-se na equação de Ergun.

O leito de material inerte mostrou-se eficaz no papel de distribuição do escoamento, pois o fluido se espalha radialmente assim que adentra o reator, sem recirculações. O escoamento torna-se totalmente desenvolvido numa distância equivalente a 20% do diâmetro do reator estudado.

Verificou-se também que o perfil de velocidades em meio poroso depende apenas do número de Reynolds, e pode ser previsto matematicamente em função deste, e também em função da distância percorrida.

As diferenças observadas em reatores com geometrias diferentes são pequenas. Reatores com fundo arredondado tendem a dissipar mais lentamente o jato formado no bocal de entrada, em comparação com reatores de fundo plano.

**Palavras-chave:** leito poroso, CFD, hidrodinâmica, escoamento.

## ABSTRACT

Fixed bed reactors usually have an inert material bed in the inlet region, with the objective of uniformly distribute the flow of reactants on the transversal section of the reactor, which is important to maximize the catalyst life. Because there is no design criteria, the inert material bed usually is specified empirically, and its effectiveness is unknown.

Using Computational Fluid Dynamics, the development of the flow was evaluated in several types of inert material, in the inlet region of an alkylation reactor of a petrochemical industry. Reactors with different geometries were also studied. The model of flow in porous media used in the software is based on Ergun equation.

The inert material bed proved to be effective in the role of flow distribution, because the fluid spreads radially as soon as it enters the reactor, with no recirculation. The flow becomes totally developed in a distance equivalent to 20% of the reactor diameter.

Another conclusion was that the velocities profile in porous media depends only of the Reynolds number, and it can be mathematically predicted in function of it, and also in function of the distance run by the flow.

The differences observed in reactors with different geometries are small. Round bottom reactors tend to dissipate more slowly the jet formed in the inlet nozzle, compared to flat bottom reactors.

**Keywords:** porous media, CFD, hydrodynamics, flow.

## Lista de Figuras

Figura 1: Esquema simplificado do reator, mostrando as entradas, a saída e os leitos .....	11
Figura 2: Bocal de entrada do reator .....	12
Figura 3: Experimento de Darcy (SCHEIDEGGER, 1960).....	14
Figura 4: Fator de atrito modificado versus número de Reynolds (FROMENT e BISCHOFF, 1990).....	18
Figura 5: Fator de atrito de acordo com várias correlações para um leito de porosidade média = 0,4 (IORDANIDIS, 2002).....	18
Figura 6: Fração de vazios em tubos preenchidos com vários materiais, para várias razões de aspecto (LEVA, 1959).....	24
Figura 7: Vista frontal da parte inferior do reator.....	28
Figura 8: Vista isométrica da parte inferior do reator.....	29
Figura 9: Malha de elementos tetraédricos na região de entrada do reator.....	29
Figura 10: Malha de elementos tetraédricos no pescoço do bocal de entrada.....	30
Figura 11: Detalhe da malha no pescoço do bocal de entrada.....	30
Figura 12: Malha hexaédrica 2D.....	31
Figura 13: Velocidades na região de entrada do reator (1ª simulação).....	35
Figura 14: Vetores de velocidade na região de entrada do reator (1ª simulação).....	36
Figura 15: Velocidades no pescoço do bocal de entrada do reator (2ª simulação).....	37
Figura 16: Velocidades no pescoço do bocal de entrada do reator (2ª simulação), com maior detalhe na região acima da placa perfurada.....	38
Figura 17: Vetores de velocidade no pescoço do bocal de entrada do reator (2ª simulação).....	39
Figura 18: Distribuição de velocidades no bocal de entrada (vista superior).....	39
Figura 19: Vetores de velocidade no plano do bocal de entrada do reator.....	40
Figura 20: Perfil de velocidades no bocal de entrada do reator.....	40
Figura 21: Distribuição da pressão na região da placa perfurada.....	41
Figura 22: Iso-superfície de pressão = 0.....	41
Figura 23: Iso-superfície de pressão = 1E-03 bar.....	41
Figura 24: Linhas de corrente no pescoço.....	42
Figura 25: Linhas de corrente no pescoço.....	42
Figura 26: Planos vertical e horizontal usados para exibir vetores de velocidade.....	42
Figura 27: Vetores de velocidade em plano horizontal.....	43
Figura 28: Vetores de velocidade em plano vertical.....	43
Figura 29: Contorno de velocidades para britas 1 e 2.....	44

Figura 30: Contorno de pressões para britas 1 e 2.....	44
Figura 31: Linhas de corrente para brita 1 e 2.....	45
Figura 32: Perfil de velocidades na região cilíndrica ocupada por brita 1.....	46
Figura 33: Perfil de velocidades em leito de brita 1.....	48
Figura 34: Perfil de velocidades em leito de brita 2.....	48
Figura 35: Perfil de velocidades em leito de esferas de 3 mm.....	48
Figura 36: Perfil de velocidades em leito de esferas de 75 mm.....	48
Figura 37: Perfil de velocidades em leito de cilindros.....	49
Figura 38: Índice de velocidade em função do diâmetro das esferas.....	51
Figura 39: Índice de velocidade em função do número de Reynolds.....	52
Figura 40: Índice de velocidade em função do número de Reynolds, incluindo escoamento de outros fluidos.....	53
Figura 41: Curva da equação obtida para o índice de velocidade em função de $Re_p$ .....	54
Figura 42: Linhas de corrente em vaso de fundo plano para $Re_p = 20$ .....	55
Figura 43: Vetores de velocidade junto à parede, na parte inferior do vaso.....	56
Figura 44: Índice de velocidade em função de Y em reator de fundo plano.....	56
Figura 45: Índice de velocidade em função de Y para fundo plano e fundo hemisférico.....	58
Figura 46: Comparação do perfil de velocidades entre vasos com diferentes diâmetros de bocal.....	59

## Lista de Tabelas

Tabela 1: Valores de $\alpha$ e $\beta$ para a equação de Ergun.....	16
Tabela 2: Determinação das características físicas dos leitos de partículas.....	23
Tabela 3: Valores medidos e corrigidos da fração de vazios.....	24
Tabela 4: Coeficientes de permeabilidade e de perda para brita 1 e 2.....	26
Tabela 5: Resultados de perda de carga em tubo reto, pela equação de Ergun e por CFD.....	33
Tabela 6: Propriedades dos leitos de esferas e cilindros.....	47
Tabela 7: Velocidade no centro do reator nas 3 cotas.....	49
Tabela 8: Perdas de cargas em diferentes leitos.....	49
Tabela 9: Propriedades dos leitos e velocidades na cota 0 para esferas de 0,2 a 275 mm.....	50
Tabela 10: Termos viscoso e cinético da equação de Ergun para leitos de esferas.....	51
Tabela 11: Números de Reynolds para as diferentes partículas.....	52
Tabela 12: Simulações envolvendo outros fluidos (a 25 °C e 1 atm).....	53

## Lista de Símbolos

$A$ :	área da seção transversal de escoamento	[m <sup>2</sup> ]
$C_1$ :	fator de conversão de unidades	----
$C_{\varepsilon 1}$ :	constante empírica da equação da taxa de dissipação de energia	----
$C_{\varepsilon 2}$ :	constante empírica da equação da taxa de dissipação de energia	----
$C_\mu$ :	constante empírica da equação da viscosidade turbulenta	----
$d_c$ :	diâmetro do cilindro	[m]
$d_p$ :	diâmetro equivalente	[m]
$D$ :	diâmetro do reator	[m]
$\bar{D}_v$ :	diâmetro da esfera com o mesmo volume médio das partículas	[m]
$f$ :	fator de atrito	----
$f_m$ :	fator de atrito modificado	----
$G$ :	fluxo mássico	[kg/m <sup>2</sup> s]
$g$ :	aceleração da gravidade	[m/s <sup>2</sup> ]
$h$ :	altura estática	[m]
$K$ :	permeabilidade	[m <sup>3</sup> s/kg]
$K'$ :	permeabilidade específica	[m <sup>2</sup> ]
$K_{perm}$ :	permeabilidade específica	[m <sup>2</sup> ]
$K_{loss}$ :	coeficiente de perda	[m <sup>-1</sup> ]
$k$ :	energia cinética turbulenta	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$L$ :	comprimento	[m]
$N$ :	razão de aspecto	----
$n$ :	fator de exponenciação da equação de Leva	----
$p$ :	pressão	[Pa]
$Q$ :	vazão volumétrica	[m <sup>3</sup> /s]
$Re$ :	número de Reynolds	----
$Re_T$ :	número de Reynolds turbulento	----
$S_p$ :	esfericidade	----
$t$ :	tempo	[s]
$\bar{u}$ :	velocidade média do escoamento	[m/s]
$u'$ :	velocidade flutuante	[m/s]

$v$ :	velocidade superficial	[m/s]
$y$ :	distância percorrida pelo fluido dentro do reator	[m]
$Y$ :	distância adimensional	-----

*Letras gregas:*

$\alpha$ :	constante do termo viscoso da Equação de Ergun	-----
$\beta$ :	constante do termo cinético da Equação de Ergun	-----
$\varepsilon$ :	porosidade, ou fração de vazios	-----
$\varepsilon$ :	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta	[m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]
$\mu$ :	viscosidade	[kg/m s]
$\nu$ :	viscosidade cinemática	[m <sup>2</sup> /s]
$\nu_t$ :	viscosidade cinemática turbulenta	[m <sup>2</sup> /s]
$\rho$ :	densidade	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\sigma_\varepsilon$ :	constante empírica da equação da taxa de dissipação de energia	-----
$\sigma_k$ :	constante empírica da equação da energia cinética turbulenta	-----

## SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	10
1.1 Descrição do processo.....	11
1.2 Justificativa.....	13
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	14
2.1 escoamento em leito poroso.....	14
2.2 Fluidodinâmica computacional.....	19
2.3 CFD em leito poroso.....	20
3 OBJETIVOS.....	22
4 METODOLOGIA.....	23
4.1 Características físicas dos leitos de partículas.....	23
4.2 Modelagem do sistema.....	25
4.2.1 Modelagem do escoamento (cálculo da perda de carga).....	25
4.2.2. Modelo de turbulência e modelagem do escoamento próximo à parede.....	26
4.2.3 Geometria do reator e malha de volumes finitos.....	28
4.2.4 Condições de contorno.....	32
4.3 Verificação da consistência do modelo matemático.....	33
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	34
5.1 Nomenclatura.....	34
5.2 Simulação de toda a região de entrada do reator.....	35
5.3 Simulação da região do pescoço do bocal de entrada.....	37
5.4 Simulações 2D.....	44
5.4.1 Simulação com britas 1 e 2.....	44
5.4.2 Simulações com outros meios porosos.....	47
5.4.3 Simulações em tubo de fundo plano.....	54
5.4.4 Simulações em tubo de fundo plano com bocais de diâmetro diferente.....	58
6 CONCLUSÕES.....	60
7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	61

## 1 INTRODUÇÃO

Processos que utilizam leito fixo são largamente encontrados nos diversos ramos da indústria. Nesses processos são usados equipamentos (vasos) que contêm partículas sólidas em seu interior, formando um leito poroso único, ou diversos leitos apoiados em suportes adequados dentro do mesmo vaso. São amplamente aplicados em processos de tratamento de correntes fluidas, como leitos de adsorção ou de troca iônica, sendo que nas indústrias química e petroquímica os vasos de leito fixo encontram também grande aplicação como reatores químicos. Nestes casos, o leito é constituído por um catalisador que promove a reação entre a mistura de reagentes fluidos que o atravessa.

Os vasos de leito fixo operam de modo contínuo, com fluxo ascendente ou descendente, com fluidos gasosos, líquidos ou bifásicos.

Um aspecto importante dos vasos de leito fixo é a fluidodinâmica, pois dela dependem a perda de carga, o transporte de massa e de calor, etc. Por possuírem um diâmetro bem maior do que as tubulações que os alimentam, esses vasos apresentam efeitos de entrada indesejáveis, isto é, uma distribuição inadequada do escoamento através da seção transversal do vaso. No interior do vaso, dependendo do processo em questão, podem ocorrer outros fenômenos, como mistura de reagentes ou redistribuição de líquido. Esses efeitos de entrada, essas misturas de reagentes e etc. precisam ser levados em conta no projeto do vaso (incluindo seus acessórios), pois influenciam fortemente o desempenho do processo. A preocupação está em garantir a distribuição adequada do fluxo pelo leito fixo e a homogeneidade de misturas.

No presente trabalho, a distribuição do escoamento de reagentes em um reator contínuo de leito fixo é avaliada. Para isso, foi usada a técnica de Fluidodinâmica Computacional (CFD). O estudo foi baseado em um reator de alquilação de uma indústria petroquímica.

## 1.1 Descrição do processo

O reator avaliado (Figura 1) tem 2,75 m de diâmetro e 17 m de altura. Possui 3 leitos catalíticos, separados por suportes do tipo bandeja. A distribuição e a homogeneização nesse reator são feitas pela passagem do escoamento em leitos de material inerte (pedra britada, ou brita). O fluxo é ascendente, e os leitos de catalisador são apoiados diretamente sobre os leitos de brita.

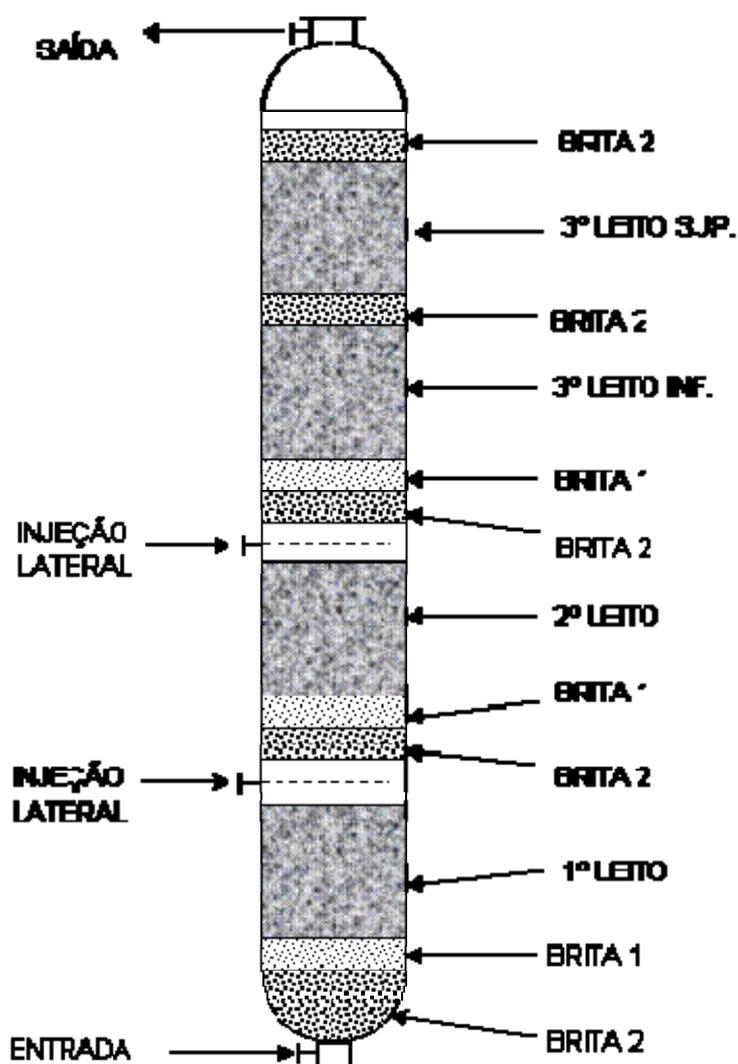
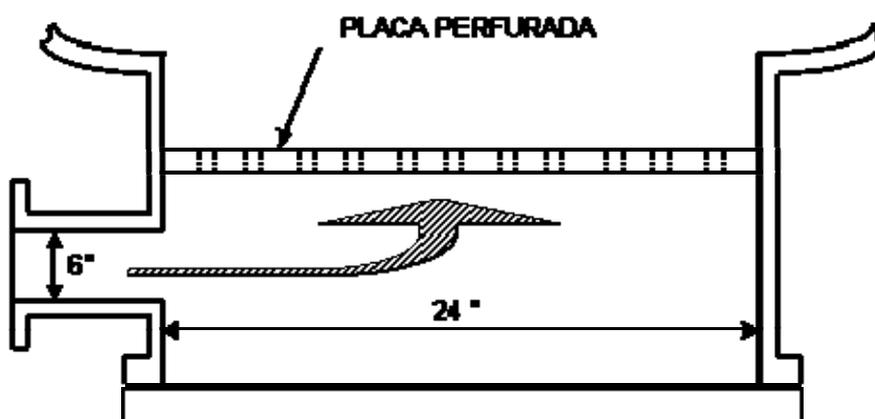


Figura 1: Esquema simplificado do reator, mostrando as entradas, a saída e os leitos.

Após o primeiro e após o segundo leitos de catalisador, existe entrada adicional de reagente por meio de um tubo perfurado, chamado de lança. Antes de chegar ao leito catalítico subsequente, a mistura de reagentes passa novamente por um leito de brita, desta vez para promover a mistura do reagente adicionado.

Na entrada no fundo do reator, a mistura já chega homogênea, e passa por um primeiro leito de brita a fim de distribuir o fluxo, ou seja, a fim de eliminar os efeitos de entrada antes de passar pelo primeiro leito catalítico. O leito de brita está apoiado numa placa perfurada, no bocal de entrada do reator, que também possui função de distribuição.

O bocal de entrada, localizado bem no fundo do reator, tem diâmetro de 0,6096 m (24 polegadas). A mistura reagente, proveniente da descarga de uma bomba centrífuga, chega ao bocal de entrada do reator por uma linha de 0,1524 m de diâmetro (6 polegadas), e junta-se perpendicularmente ao pescoço desse bocal. Desse modo, o fluido faz uma curva de 90° ao chegar à entrada do reator (Figura 2). Essa mistura reagente é composta de benzeno, propileno e propano, a 3,8 MPa e 463 K. Nessas condições ela é totalmente líquida.



**Figura 2:** Bocal de entrada do reator.

O fundo do reator é composto de um tampo hemisférico, no qual é depositada uma primeira camada de brita nº 2, que se eleva até a linha de tangência, ou seja, até o início do corpo cilíndrico do reator. A placa perfurada existente no bocal de entrada possui furos de 0,0127 m (½ polegada) e de 0,0254 m (1 polegada) de diâmetro, e é coberta por uma tela metálica, que impede que as pedras colocadas no fundo do reator caiam pelos furos. Sobre a camada de brita 2 é colocada uma camada de 0,150 m de altura de brita nº 1, e sobre essa vem o primeiro leito de catalisador, com 2,40 m de altura. O catalisador tem a forma de *pellets* de aproximadamente 0,010 m de comprimento e 0,005 m de diâmetro.

Camadas de brita 2 e de brita 1 são também depositadas sobre os suportes do segundo e terceiro leitos. O catalisador é despejado diretamente sobre essas camadas de brita. As lanças de injeção, situadas no espaço vazio entre leitos, adicionam uma mistura de propileno (reagente) e propano (diluente), na pressão do reator e à temperatura ambiente (portanto líquida), e são desenhadas de forma a prover um bom espalhamento do líquido injetado dentro do espaço entre leitos. Constam de 3 tubos paralelos, com diversos furos distribuídos ao longo dos mesmos.

## 1.2 Justificativa

Uma boa distribuição da mistura reagente no leito catalítico, que garante uma “molhabilidade” uniforme ao redor da seção transversal do reator, é importante para maximizar a vida útil do catalisador. Um perfil de velocidade não uniforme, ou caminhos preferenciais, podem levar ao desgaste prematuro de determinadas partes do leito catalítico, gerando formação de coque em certos locais, devido a alterações no tempo de contato entre os reagentes e o catalisador. Essas regiões coqueadas, além de perderem totalmente a atividade catalítica, causam aumento da perda de carga no reator, o que pode representar uma limitação operacional e levar ao fim prematuro da vida útil do lote de catalisador.

Dispositivos distribuidores, como placas perfuradas e leitos de material inerte, normalmente são especificados de forma empírica, e sua eficácia geralmente não é avaliada na prática, em escala industrial. O projeto de distribuidores leva em conta apenas o comportamento do fluxo no distribuidor (PERRY; GREEN, 1984, p. 5-48), e não considera o que ocorre depois que um fluido foi adicionado a outro. Existem algumas técnicas de campo, como laser-Doppler, ressonância magnética e outras, porém elas são muito limitadas (DIXON; NIJEMEISLAND, 2001) e de custo elevado. Essas técnicas normalmente são empregadas no campo quando há suspeita de uma deficiência grave na distribuição de líquido no equipamento, e não são adequadas para a fase de projeto ou para otimização do processo.

A Fluidodinâmica Computacional vem ganhando espaço no projeto dos mais diversos equipamentos, e se apresenta como uma ferramenta confiável, mesmo que não seja de forma quantitativa, mas que permite a comparação qualitativa de diferentes opções de desenho dos dispositivos analisados. Também possibilita a avaliação da performance de equipamentos existentes, e permite explorar alternativas na busca de otimização do desempenho, como é o caso deste trabalho.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 Escoamento em leito poroso

Scheidegger (1960) reuniu extensa bibliografia a respeito de escoamento em leito poroso, dando origem ao livro *The Physics of Flow through Porous Media*. De acordo com esse autor, escoamento em leito poroso foi estudado inicialmente por Darcy em 1856. A teoria de fluxo laminar através de meio poroso é baseada num experimento clássico originalmente realizado por esse pesquisador. Nesse experimento, um leito poroso de altura  $L$  é percolado por um fluido incompressível, e tubos manométricos abertos medem a pressão nos limites superior e inferior do leito (Figura 3). Variando-se as diversas quantidades envolvidas, deduz-se a seguinte relação:

$$Q = -\frac{KA(h_2 - h_1)}{L} \quad (1)$$

Aqui,  $Q$  é o volume total de fluido percolado por unidade de tempo, e  $K$  é uma constante que depende das propriedades do fluido e do meio poroso. Essa relação é conhecida como *Lei de Darcy*. O sinal de menos indica que o fluxo se dá na direção oposta ao aumento de pressão.

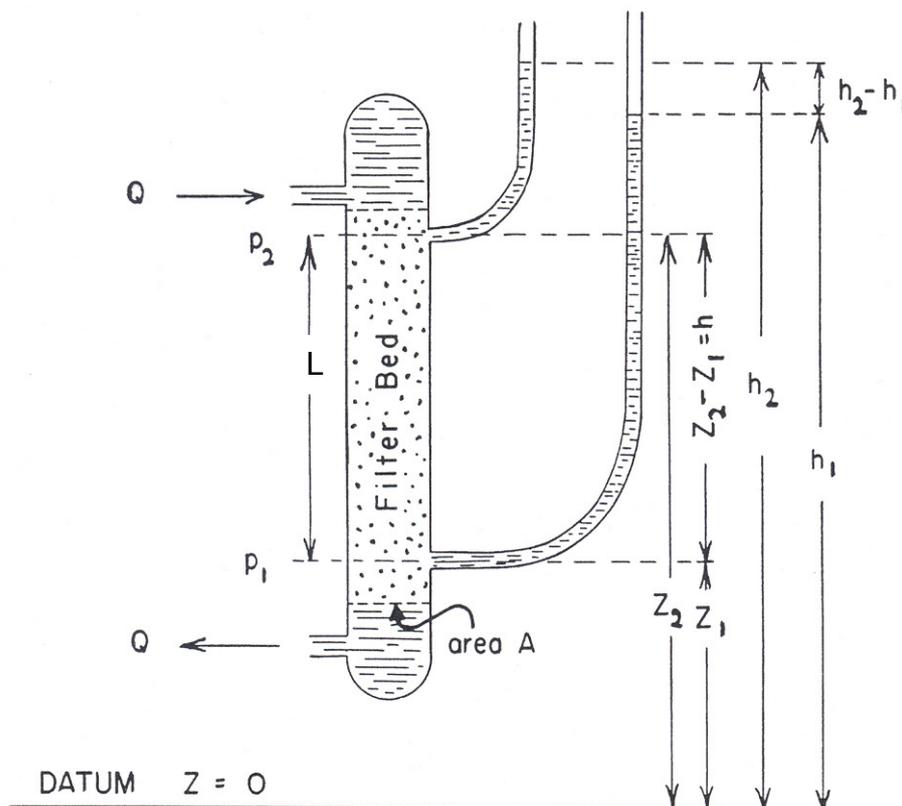


Figura 3: Experimento de Darcy (SCHEIDEGGER, 1960).

Para o caso de escoamento forçado (não gravitacional), e considerando apenas perda de carga dinâmica, essa relação equivale a:

$$Q = -\frac{KA\Delta p}{L} \quad (2)$$

Colocando-se na forma diferencial:

$$Q = -\frac{KA dp}{dL} \quad (3)$$

Darcy usou apenas água em seus experimentos. Usando-se outros fluidos, nota-se que a vazão é inversamente proporcional à viscosidade:

$$Q = -\frac{K' A dp}{\mu dL} \quad (4)$$

Nesta equação,  $K'$  depende somente das propriedades do meio poroso, enquanto que na equação original de Darcy,  $K$  depende tanto do meio poroso, quanto do fluido. Por isso o termo  $K'$  é muito mais interessante, e é conhecido por “permeabilidade específica”. Possui dimensões de comprimento ao quadrado ( $m^2$ ).

Mais tarde notou-se que a Lei de Darcy era apenas válida para “baixas vazões” (fluxo laminar). Em vista disso, Forchheimer <sup>(1)</sup>, em 1901, sugeriu que a Lei de Darcy fosse modificada para altas velocidades, introduzindo um termo de segunda ordem:

$$\Delta p / L = av + bv^2 \quad (5)$$

onde  $a$  e  $b$  são constantes.

De acordo com Scheidegger (1960), muitos trabalhos foram realizados para identificar a faixa do número de Reynolds para a qual a Lei de Darcy é válida, mas há grande discrepância entre os resultados de diversos autores, que utilizaram diferentes partículas e fluidos. Em leito poroso, não existe um certo número de Reynolds universal que caracterize a passagem de fluxo laminar para turbulento, como existe em tubos retos. A transição ocorre numa faixa de Reynolds bastante larga, devido ao surgimento de efeitos de inércia nos caminhos tortuosos do fluido.

---

(1) FORCHHEIMER, P. **Z. Ver. Deuts. Ing.**, v. 45, p. 1782, 1901.

Em 1949, Ergun e Orning <sup>(1)</sup>, considerando o meio poroso como um conjunto de capilares, partiram de uma equação postulada por Reynolds <sup>(2)</sup> para o fluxo em tubos lineares, onde a resistência oferecida pelo atrito ao movimento do fluido é representada como a soma de dois termos, proporcionais respectivamente à primeira potência da velocidade  $v$  do fluido, e ao produto da densidade  $\rho$  do fluido com a segunda potência de sua velocidade:

$$dp/dx = av + b\rho v^2 \quad (6)$$

Esses autores interpretaram os termos dessa soma como representando perdas de energia viscosa e cinética, respectivamente, sendo que as perdas de energia viscosa correspondem à Lei de Darcy, e as perdas de energia cinética devem-se à turbulência. De acordo com essa teoria, a primeira parcela corresponde à contribuição na região laminar, e a segunda parcela corresponde à contribuição na região turbulenta.

Seguindo essa teoria, em 1952 Ergun <sup>(3)</sup> propôs uma equação para perda de carga em leitos porosos, a qual vem sendo preferida há anos (RASE, 1990):

$$-C_1 \frac{dp}{dx} = \left[ \alpha \frac{(1-\varepsilon)^2 \mu}{\varepsilon^3 d_p^2} \right] v + \left[ \beta \frac{(1-\varepsilon) \rho}{\varepsilon^3 d_p} \right] v^2 \quad (7)$$

onde  $\varepsilon$  é a fração de vazios ou porosidade do leito,  $d_p$  é o diâmetro equivalente da partícula e  $C_1$  é um fator de conversão de unidades, sendo que no sistema cgs  $C_1$  vale 980,67 g.cm/(s<sup>2</sup>.gf). Os valores de  $\alpha$  e  $\beta$  inicialmente utilizados eram 150 e 1,75, respectivamente.

Mais tarde, MacDonald e colaboradores (1979) propuseram valores separados de  $\alpha$  e  $\beta$  para partículas lisas e rugosas:

**Tabela 1:** Valores de  $\alpha$  e  $\beta$  para a equação de Ergun

	$\alpha$	$\beta$
Partículas lisas	180	1,8
Partículas rugosas	180	4,0

(1) ERGUN,S.; ORNING, A.A. **Ind. Eng. Chem.**, v. 41, p. 1179, 1949.

(2) REYNOLDS, O. **Papers on mechanical and physical subjects**, Londres: Cambridge University Press, 1900.

(3) ERGUN, S. **Chem. Eng. Progr.**, v. 48, p. 89, 1952.

A equação de Ergun pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{fG^2}{C_1 d_p \rho} \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \quad (8)$$

onde  $G = \rho v$ , e  $f$ , conhecido como fator de atrito, vale:

$$f = \beta + \alpha \left( \frac{1-\varepsilon}{d_p G / \mu} \right) \quad (9)$$

Hicks (1970) revisou diversas equações para perda de carga, e concluiu que a equação de Ergun é limitada para  $Re/(1-\varepsilon) < 500$ . Esse autor propõe uma equação para leito de esferas:

$$f = 6,8 \frac{(1-\varepsilon)^{1,2}}{\varepsilon^3} Re^{-0,2} \quad (10)$$

que representa bem valores experimentais para  $Re/(1-\varepsilon)$  até 60.000.

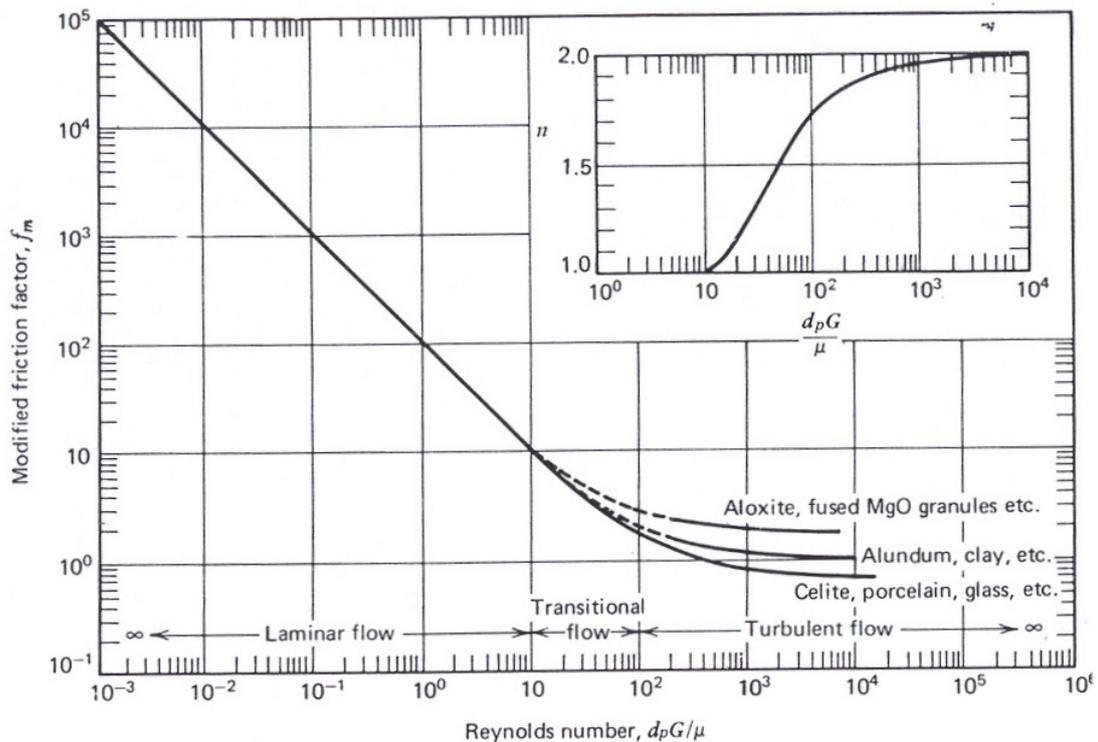
Froment e Bischoff (1990) apresentam também várias equações para perda de carga em leito poroso. Uma delas é a de Leva <sup>(1)</sup>, válida tanto para escoamento laminar, como turbulento, e para partículas de diversos formatos:

$$\frac{dp}{dz} + \frac{2f_m G^2 (1-\varepsilon)^{3-n}}{d_p g \rho S_p^{3-n} \varepsilon^3} = 0 \quad (11)$$

onde o fator de atrito modificado  $f_m$  e o expoente  $n$  são tirados da Figura 4, em função do número de Reynolds definido como  $Re_p = \rho v d_p / \mu$ .

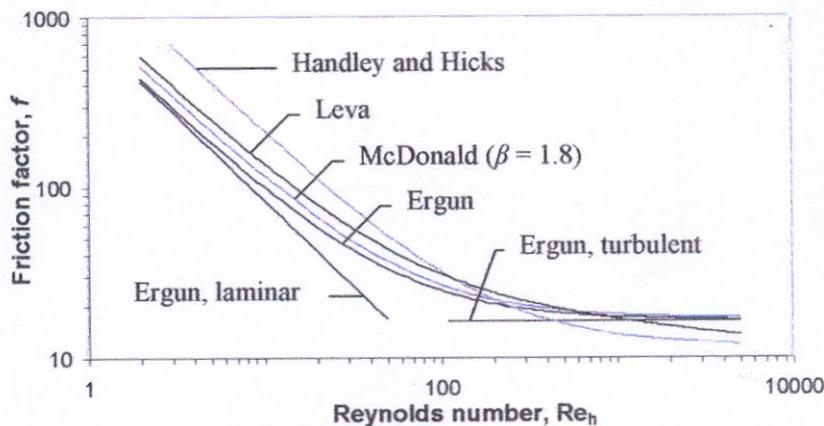
---

(1) LEVA, M. **Chem. Eng.**, v. 56, p. 115, 1949



**Figura 4:** Fator de atrito modificado versus número de Reynolds (extraído de FROMENT E BISCHOFF, 1990)

Iordanidis (2002) compara várias correlações para fatores de atrito para leito fixo com porosidade média de 0,4 (Figura 5). Vê-se que a transição de fluxo laminar para turbulento em leitos fixos ocorre numa larga faixa de números de Reynolds, variando de 10 a 1000. A soma das contribuições (viscosa e cinética) é normalmente usada para cálculos de perda de carga na região de transição. As duas linhas indicadas como "laminar" e "turbulent" correspondem às contribuições laminar e turbulenta na equação de Ergun (a parcela proporcional a  $v$ , e a parcela proporcional a  $v^2$ , respectivamente).



**Figura 5:** Fator de atrito de acordo com várias correlações para um leito de porosidade média = 0,4 (extraído de IORDANIDIS, 2002).

## 2.2 Fluidodinâmica computacional

O termo Fluidodinâmica Computacional é uma tradução literal do inglês “Computational Fluid Dynamics” (CFD), e abrange modelagem matemática por métodos numéricos de todos os processos físicos ou físico-químicos que apresentam escoamento. A predição dos campos de concentração, velocidades, pressão, temperaturas e propriedades turbulentas é efetuada através de modelos diferenciais baseados nos princípios gerais de conservação de massa, energia e quantidade de movimento, no domínio do espaço e do tempo (MARQUES, 2004).

A equação geral de conservação de massa, ou equação da continuidade, é definida como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (12)$$

A equação para conservação de momento na direção x (equação de Navier-Stokes), para fluidos incompressíveis, é dada por:

$$\underbrace{\rho \left( \frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)}_{\text{A}} = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial x} + \rho g_x + S_x}_{\text{C}} + \underbrace{\mu \left( \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right)}_{\text{D}} \quad (13)$$

e analogamente nas direções y e z. Nesta equação, os termos A, B, C e D representam, respectivamente, o acúmulo, o fluxo convectivo, a geração e o fluxo molecular de momento. O termo  $S_x$  representa outros termos-fonte além da gravidade, por exemplo, as forças exercidas por um leito poroso sobre o fluido.

Como essas equações não podem ser resolvidas analiticamente, os balanços são resolvidos numericamente, em geral por meio do método dos volumes finitos. Para isso, divide-se o domínio num certo número de volumes, e ao conjunto desses volumes dá-se o nome de malha. Os elementos dessa malha possuem uma geometria onde seja fácil resolver os balanços, como tetraedros ou prismas, e assim gera-se um sistema de n equações lineares com n incógnitas, onde n é o número de elementos da malha. Quanto maior o valor de n, mais preciso é o resultado obtido, porém mais tempo e capacidade de processamento computacional são necessários.

### 2.3 CFD em leito poroso

Muitos trabalhos já foram realizados usando-se CFD para simular escoamento em leito poroso. Na maioria deles foi estudado fluxo em leito de partículas esféricas, com a malha preenchendo os espaços vazios entre as esferas. Além disso, esses trabalhos caracterizam-se principalmente por dois atributos:

- a) envolvem escoamento já desenvolvido;
- b) preocupam-se com baixas razões de aspecto, ou seja, baixas relações entre o diâmetro do leito e o diâmetro das partículas.

Logtemberg, Nijemeisland e Dixon (1999) usaram o programa ANSYS 5.3 para simular um leito contendo 10 esferas, com razão de aspecto  $N = 2,43$ . Geraram uma malha tetraédrica não-estruturada nos espaços vazios entre as esferas, e obtiveram perfis de velocidades no leito, para vários valores de  $Re$ , entre 42 e 3344. Não fizeram comparações com resultados experimentais ou de literatura.

Taylor e colaboradores (1999), usando o programa PHOENICS, adotaram um modelo pseudo-homogêneo para fazerem simulações em duas dimensões de um leito de esferas, porém incluíram na simulação uma expressão que definia uma porosidade maior junto à parede (o que acontece em leitos com baixa razão de aspecto). Como fluido, usaram ar nas suas simulações. Na entrada do leito, o perfil de velocidades junto à parede foi definido segundo a lei logarítmica. Os autores introduziram a perda de carga como um termo fonte na equação axial de momento, calculado a partir da equação de Ergun. Obtiveram velocidades maiores junto à parede, devido à maior porosidade local. Os resultados obtidos foram comparados com resultados experimentais, com boa concordância.

Jiang e colaboradores (2000) usaram CFD para comparar resultados de perfis de velocidades obtidos via modelo de célula discreta (DCM), bem como resultados experimentais, para fluxo de gases e de líquidos em meio poroso. Seu objetivo era validar o DCM. O leito consistia de partículas esféricas de 3 mm de diâmetro. Obtiveram resultados satisfatórios usando a equação de Ergun com  $\alpha = 150$  e  $\beta = 1,75$  (valores tradicionalmente usados para partículas esféricas). Trabalharam com  $Re$  entre 5 e 171.

Tobis (2000) simulou fluxo de ar em leito de esferas com empacotamento cúbico simples, usando o pacote FLUENT. Utilizou uma malha 2D não-estruturada nos espaços vazios entre as esferas. Nas suas simulações, inseriu promotores de turbulência de diferentes formatos nos espaços vazios. Trabalhou com  $Re = 1800$ . Testou 3 modelos de turbulência:  $k-\epsilon$ , Spalart-Allmaras (modelo de uma equação, escrita em termos da viscosidade turbulenta) e Reynolds Stress. Porém não discutiu as diferenças nos resultados. Mostrou as linhas de corrente obtidas para os diferentes casos. Comparou os fatores de atrito obtidos com resultados experimentais, com boa concordância. Finalmente, testou valores de  $Re$  maiores para ver o comportamento do fator de atrito em cada caso, obtendo comportamentos diferentes para promotores de turbulência diferentes.

Calis e colaboradores (2001) fizeram simulações em 3D de leitos com

seção transversal quadrada, contendo esferas, com  $N$  variando entre 1 e 2. Usando o pacote CFX 5.3, geraram uma malha tetraédrica nos espaços vazios entre as esferas, e compararam os resultados de perda de carga com a equação de Ergun e com valores experimentais. Obtiveram os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  que se ajustassem à equação de Ergun em cada caso. Também compararam perfis de velocidades com valores experimentais, com boa concordância. Trabalharam numa faixa de  $Re$  muito larga, entre 0,01 e 50.000.

Zeiser e colaboradores (2001) usaram o método de rede Boltzmann para simular um leito 3D de esferas, com  $N = 5$  e  $N = 6$ . Trabalharam com  $Re = 5$ . Obtiveram perfis de velocidade compatíveis com a distribuição radial de porosidade.

Freund e colaboradores (2003) também usaram o método de rede Boltzmann para simular um leito 3D de esferas, com  $N = 3$ . Obtiveram resultados de perda de carga compatíveis com a equação de Ergun, e perfis de velocidades dependentes da porosidade local. Trabalharam com  $Re$  entre 0,3 e 100. Fizeram comparações dos perfis de velocidades obtidos com dados de literatura.

Magnico (2003) simulou leitos 3D de esferas, com  $N = 5,96$  e  $N = 7,8$ . Trabalhou com  $Re$  entre 7 e 200. Usou uma malha estruturada nos espaços vazios entre esferas. Utilizou arranjos de esferas estruturados e randômicos. Comparou seus resultados de perda de carga e perfis de velocidades com dados experimentais de outros autores, e com a equação de Ergun, com boa concordância.

Guardo e colaboradores (2004) também utilizaram o programa FLUENT para simular o fluxo de ar num leito 3D de partículas esféricas, com empacotamento irregular. Avaliaram os perfis de velocidades nos interstícios. Quanto aos modelos de turbulência, fizeram simulações usando  $k-\epsilon$ , Spalart-Allmaras, e sem usar modelo de turbulência. Os resultados de perda de carga obtidos foram próximos nos 3 casos, e compatíveis com a equação de Ergun.

Gunjal, Ranade e Chaudhari (2005) utilizaram o método da célula unitária, que simula apenas algumas partículas do leito. Utilizando o programa FLUENT, simularam leitos de esferas com diferentes arranjos de empacotamento, e usaram uma malha tetraédrica não-estruturada nos espaços vazios entre as esferas. Trabalharam com  $Re$  entre 0,001 e 2000. Compararam os perfis de velocidades com perfis obtidos experimentalmente por outros autores. Compararam os resultados de coeficiente de arraste com o obtido pelo método de rede Boltzmann por outros autores. Compararam também o fator de atrito obtido com a equação de Ergun. Obtiveram bons resultados em todas as comparações.

Ao contrário dos demais, no presente trabalho, o escoamento não está desenvolvido. O que se pretende é justamente avaliar como esse escoamento se desenvolve numa região transitória, de diâmetro variável, entre a entrada do reator e a seção cilíndrica deste. E o reator estudado possui uma razão de aspecto bastante elevada: reator com diâmetro de 2,75 m e partículas com dimensões de poucos centímetros. A fração de vazios de um leito de partículas tende a ser maior próximo à parede. Esse fato é relevante em reatores com razões de aspecto muito baixas, pois isso altera o perfil de velocidades. Esse efeito pode ser desprezado no presente caso, onde o leito é tratado como pseudo-homogêneo, cujas propriedades como porosidade e permeabilidade são conhecidas. Ou seja, nossa preocupação é com o que ocorre na escala do próprio leito, e não na escala de poucas partículas ou na escala das passagens estreitas e tortuosas entre elas.

### 3 OBJETIVOS

O objetivo deste trabalho foi de verificar a influência de leitos porosos inertes no desenvolvimento do escoamento numa região de diâmetro variável, correspondente à zona de entrada de um reator contínuo de leito fixo, bem como na distribuição do escoamento na seção transversal do reator.

Com o estudo envolvendo diversas variáveis, como forma e tamanho de partículas, diferentes regimes de escoamento, fluidos com diferentes propriedades físicas, e reatores com diversas geometrias, pretendeu-se estabelecer critérios de projeto para leitos de material inerte, com a finalidade de se obter uma distribuição homogênea do escoamento ao longo da seção transversal do reator.

O trabalho foi realizado com uso de Fluidodinâmica Computacional.

## 4 METODOLOGIA

### 4.1 Características físicas dos leitos de partículas

Foi realizado um levantamento das características físicas das partículas do leito fixo. Para isso, foi utilizado um método empírico que consistiu de colocar-se um número conhecido de partículas dentro de um frasco, e medir-se o volume de água que preenche os vazios do leito.

De acordo com Rase (1990), o diâmetro equivalente de partículas de formato irregular é igual ao produto da esfericidade ( $S_p$ ) pelo diâmetro da esfera com mesmo volume médio das partículas ( $\overline{D_V}$ ), ou seja,  $d_p = S_p \overline{D_V}$ . A esfericidade  $S_p$  é definida como a razão entre a superfície da esfera equivalente e a superfície da partícula. Ainda segundo Rase, para partículas irregulares,  $S_p = 0,5$  a  $0,7$ , e usa-se o valor menor para superfícies mais rugosas.

Conforme essa definição de  $S_p$ , um cubo qualquer tem esfericidade igual a  $0,8$ , e um paralelepípedo com dimensões  $1 \times 2 \times 4$  tem esfericidade igual a  $0,69$ . Assim sendo, como a brita 2 tem formato mais regular, foi arbitrado um valor de  $S_p = 0,7$ . Para a brita 1, que tem formato mais irregular, foi adotado um valor de  $S_p = 0,6$ . A tabela abaixo apresenta os números obtidos:

**Tabela 2:** Determinação das características físicas dos leitos de partículas.

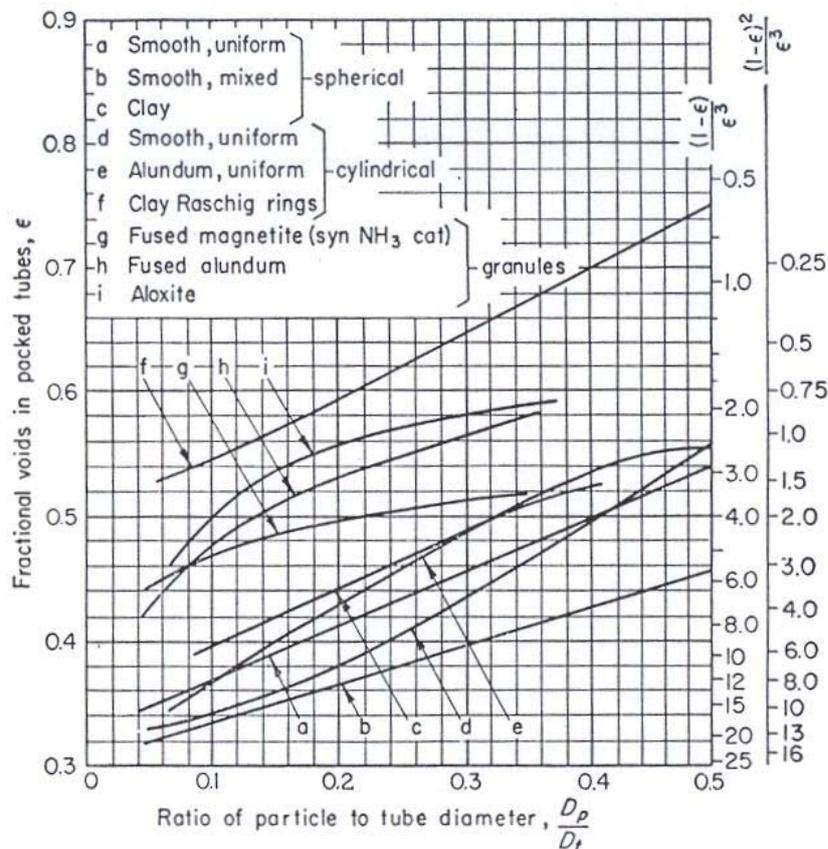
	<b>Brita 1</b>	<b>Brita 2</b>
Volume do leito (litros)	3,0	2,0
Volume de água (litros)	1,457	1,094
Número de partículas	2.030	187
Porosidade calculada	0,486	0,547
Volume médio da partícula (m <sup>3</sup> )	7,60E-03	4,84E-06
Diâmetro da esfera equivalente - $\overline{D_V}$ (m)	0,01132	0,02099
Esfericidade - $S_p$	0,6	0,7
Diâmetro equivalente - $d_p$ (m)	0,00679	0,0147

Cuidado especial deve ser tomado na medição da fração de vazios do leito, já que este termo tem uma influência significativa na equação de perda de carga de Ergun (eq. 7). Como o frasco utilizado na medição tem diâmetro muito menor que o reator, a razão de aspecto é muito diferente num caso e no outro, o que influi na porosidade. Para corrigir esse efeito, foi usado um gráfico apresentado por Leva (1959), mostrado na Figura 6. Nessa figura, partículas granulares são

representadas pelas curvas *g*, *h* e *i*. Os valores obtidos para brita 1 e 2 situam-se um pouco acima da curva *i* (aloxita). Vemos que essas três curvas têm um decaimento conforme a razão de aspecto se aproxima de zero, como é o caso do reator em estudo. Rase (1990) recomenda o valor de 0,42 para partículas irregulares. Admitindo que o comportamento da curva para a brita se assemelhe ao de outras partículas granulares, foi adotado neste trabalho o valor de 0,40 para a porosidade, tanto para a brita 1, como para a brita 2. Vale salientar que a fração de vazios depende muito mais do formato da partícula, do que de sua dimensão. Resumindo, temos:

**Tabela 3:** Valores medidos e corrigidos da fração de vazios.

$\epsilon$	Brita 1	Brita 2
Valores medidos	0,486	0,547
Valores corrigidos	0,40	0,40



**Figura 6:** Fração de vazios em tubos preenchidos com vários materiais, para várias razões de aspecto (LEVA, 1959).

## 4.2 Modelagem do sistema

Este trabalho foi desenvolvido em computador tipo PC, com o *software* CFX , versões 5.7.1 e 10.0, da Ansys Inc.

### 4.2.1 Modelagem do escoamento (cálculo da perda de carga)

O modelo aqui utilizado trata o leito poroso como pseudo-homogêneo. Isso quer dizer que o leito é considerado como um meio contínuo, cujas propriedades físicas – permeabilidade e resistência ao escoamento – são constantes por todo o domínio ocupado por ele (isotrópico). Não é feita a distinção entre os espaços ocupados pelas partículas e os espaços vazios. As velocidades são calculadas como uma velocidade superficial média em cada ponto, e não como a velocidade real num determinado canal. Esse modelo é bastante útil em casos com grande número de partículas, e partículas irregulares, onde seria impossível descrever matematicamente cada pequeno espaço do leito. Por outro lado, ele também tem suas limitações, pois considera todas as partículas iguais, e também não representa adequadamente o limite do leito junto à parede.

No programa CFX, o modelo de escoamento em meio poroso emprega a equação de Ergun para a perda de carga na seguinte forma:

$$S_x = \frac{\mu}{K_{perm}} v + K_{loss} \frac{\rho}{2} v^2 \quad (14)$$

onde  $v$  é a velocidade superficial,  $K_{perm}$  é a permeabilidade do leito, e  $K_{loss}$  é o coeficiente de perda. A perda de carga  $S_x$  é o termo-fonte utilizado na equação 13.

Por analogia com a equação de Ergun, teremos:

$$K_{perm} = \frac{\varepsilon^3 d_p^2}{\alpha(1-\varepsilon)^2} \quad (15)$$

$$K_{loss} = \frac{2\beta(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3 d_p} \quad (16)$$

Usando  $\alpha = 180$  e  $\beta = 4$ , conforme sugerido na seção 2.1, resultam os valores da Tabela 4:

**Tabela 4:** Coeficientes de permeabilidade e de perda para brita 1 e 2.

	$K_{perm}$	$K_{loss}$
Brita 1	4,55E-08 m <sup>2</sup>	11046 m <sup>-1</sup>
Brita 2	2,134E-07 m <sup>2</sup>	5102 m <sup>-1</sup>

Estas são as duas grandezas utilizadas para caracterizar o meio poroso.

#### 4.2.2 Modelo de turbulência e modelagem do escoamento próximo à parede

Para descrever com precisão o escoamento e calcular o perfil completo de velocidades, é necessário um modelo que caracterize a turbulência. Para modelagem da turbulência, foi adotado neste trabalho o modelo  $k-\varepsilon$ . Trata-se de um modelo que utiliza duas equações, uma para a energia cinética turbulenta ( $k$ ), e outra para a taxa de dissipação de energia ( $\varepsilon$ ). Por energia cinética turbulenta entende-se a variância das flutuações na velocidade, e por dissipação de energia, a taxa com a qual as flutuações na velocidade se dissipam.

As equações que caracterizam este modelo são, conforme apresentado por Wilcox (2000), as seguintes:

- Energia cinética turbulenta:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j k}) = -\overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] - \varepsilon \quad (17)$$

- Taxa de dissipação de energia:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j \varepsilon}) = -C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (18)$$

onde  $\nu_t$  é a viscosidade turbulenta, e vale:

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (19)$$

e  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $C_{\mu}$ ,  $\sigma_k$  e  $\sigma_{\varepsilon}$  são constantes empíricas, e valem:

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

O modelo  $k$ - $\varepsilon$  é um dos mais utilizados, já que oferece um bom compromisso entre complexidade numérica e precisão computacional. Por isso vem sendo considerado padrão em CFD.

Conforme explicado por White (1991), o modelo  $k$ - $\varepsilon$  deve ser usado para números de Reynolds turbulentos elevados. O número de Reynolds turbulento é dado por:

$$Re_{\tau} = \frac{k^2}{\varepsilon \nu} \quad (20)$$

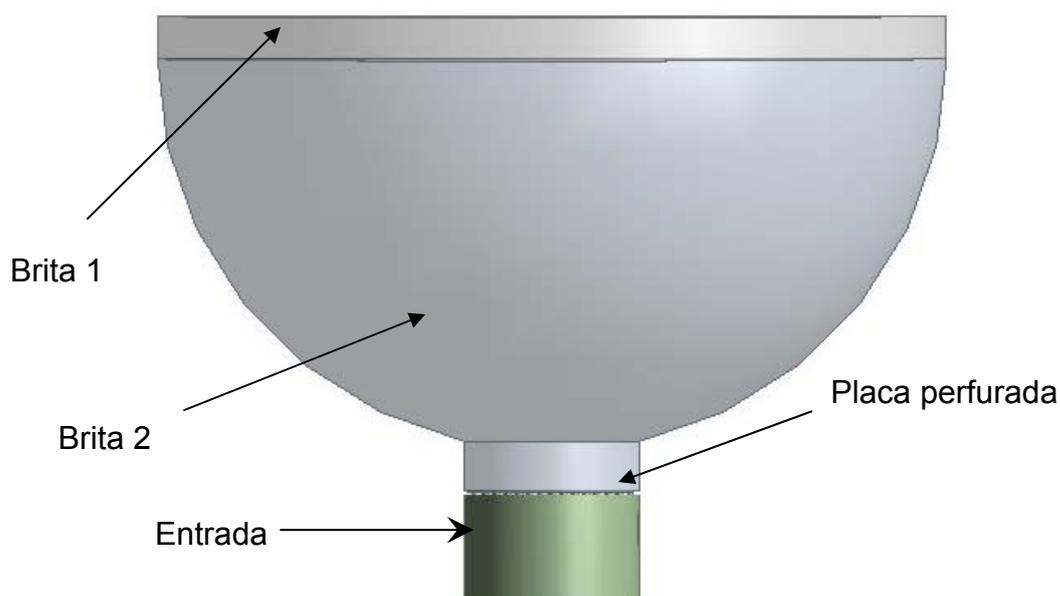
e se aproxima de zero na sub-camada viscosa. Portanto esse modelo não é adequado para modelagem do escoamento próximo à parede. Por esta razão, o programa de CFD utilizado faz uso automaticamente de funções de parede, que consideram que a distribuição de velocidades próximo à parede tem um perfil logarítmico (lei logarítmica). Desse modo podem-se calcular numericamente as tensões de cisalhamento como função da velocidade a uma dada distância da parede.

A grande vantagem do método de função de parede é que o alto gradiente de tensões próximo à parede pode ser modelado com malhas relativamente grosseiras, reduzindo substancialmente o tempo de processamento.

Não estamos interessados neste trabalho em conhecer os detalhes da sub-camada viscosa. O diâmetro do reator é bastante elevado, e o interesse aqui é determinar o perfil de velocidades ao longo de toda a seção transversal do mesmo. Além do mais, o modelo de meio poroso aqui adotado considera o leito como pseudo-homogêneo, e reflete os resultados na escala do próprio leito. Ao analisarmos o problema na escala das partículas, estas, ao encostarem na parede do reator, interferem na sub-camada viscosa, e isso não seria reproduzido no modelo adotado. Para atingir os objetivos desejados, o uso de função de parede é suficientemente adequado. O uso de um modelo de turbulência mais apropriado para capturar os altos gradientes próximo à parede exigiria uma malha muito mais refinada, bem como aumentaria muito o tempo de processamento, sem acrescentar informações úteis para o objetivo proposto.

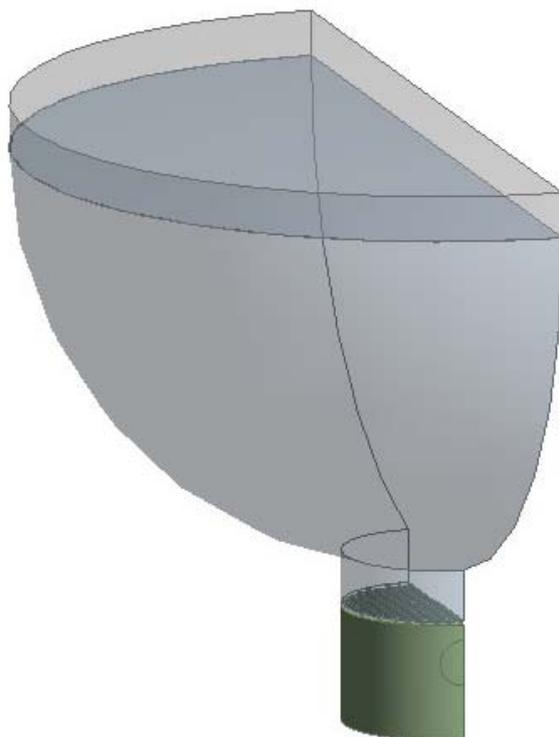
#### 4.2.3 Geometria do reator e malha de volumes finitos

A geometria do reator foi desenhada usando-se o *software* Design Modeler. A geometria avaliada compreende desde o bocal de 6 polegadas na entrada do reator, até o término do primeiro leito de brita 1, onde se inicia o leito de catalisador (Figura 7). No bocal de entrada, o escoamento já é desenvolvido, e na saída do primeiro leito de brita 1 é justamente onde desejamos conhecer o perfil de velocidades e determinar se o escoamento já se encontra novamente desenvolvido ou não, ou seja, se os efeitos de entrada no reator já foram eliminados.



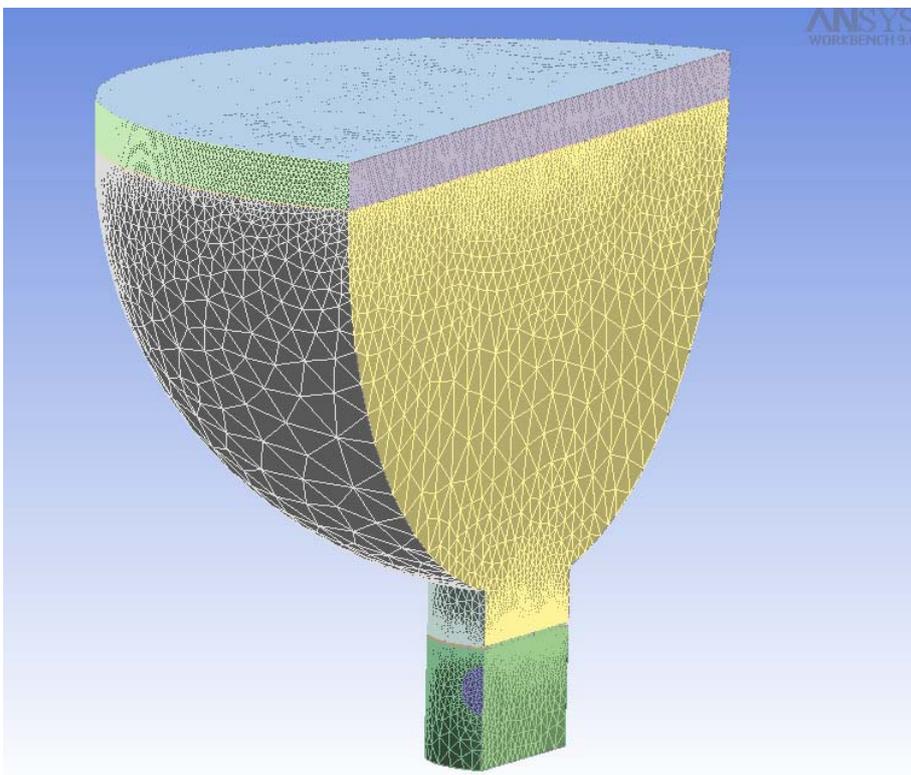
**Figura 7:** Vista frontal da parte inferior do reator. O desenho corresponde à parte interna do reator, ou seja, aos espaços vazios. Por isso, em vez de uma placa perfurada, vêem-se os furos preenchidos. Sobre a camada de brita 1 se inicia o primeiro leito de catalisador.

Devido à existência de um plano de simetria no reator, foi desenhada apenas metade da geometria real (Figura 8), o que reduz o tempo de processamento da simulação, bem como a memória requerida do computador. Essa redução é muito importante, já que cada simulação pode chegar a várias horas de processamento.



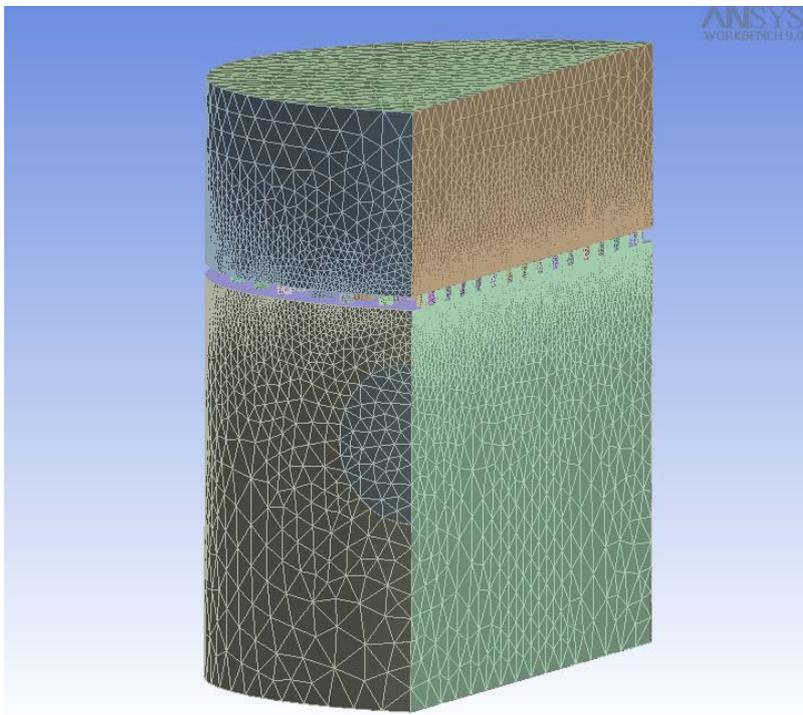
**Figura 8:** Vista isométrica da parte inferior do reator.

Para esta geometria, foi gerada uma malha através do *software* CFX-Mesh. A malha é do tipo tetraédrica, e contém 1.250.969 tetraedros (Figura 9).



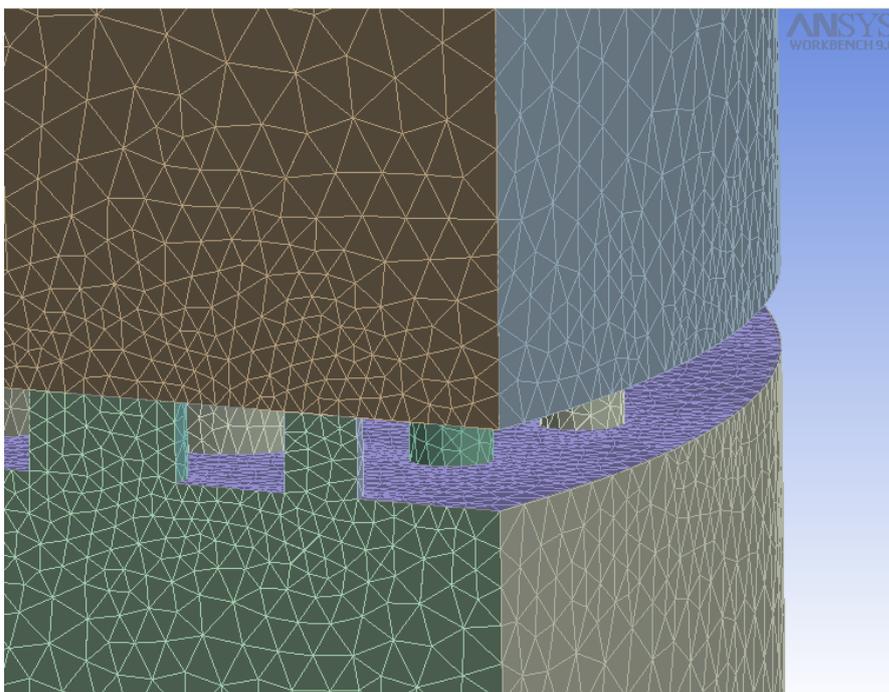
**Figura 9:** Malha de elementos tetraédricos na região de entrada do reator.

Simulações com o objetivo de avaliar mais precisamente o escoamento no pescoço do bocal de entrada foram realizadas na malha mostrada na Figura 10. Essa malha possui 985.732 tetraedros.



**Figura 10:** Malha de elementos tetraédricos no pescoço do bocal de entrada.

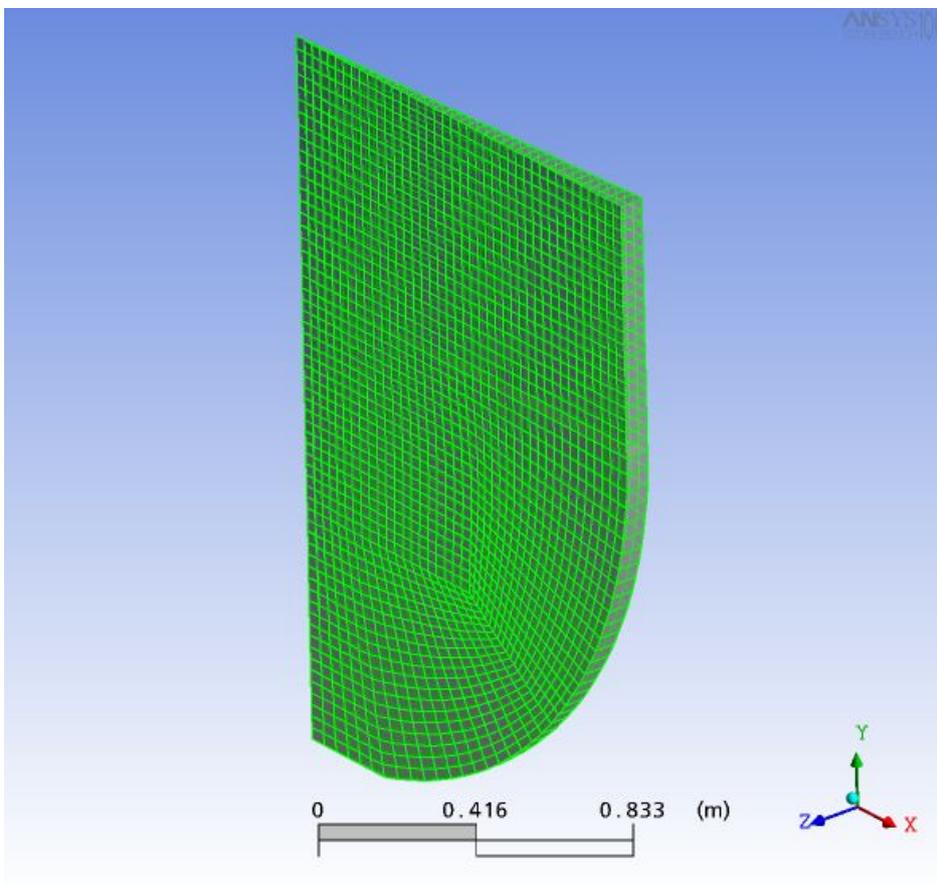
A Figura 11 mostra detalhes da malha na região da placa perfurada.



**Figura 11:** Detalhe da malha no pescoço do bocal de entrada.

A dimensão dos furos da placa perfurada, em comparação com o diâmetro do reator, bem como a quantidade de furos, levaram a uma especial preocupação com o compromisso entre refinamento (precisão do cálculo) e número de elementos (limitação de *hardware*). Para atingir esse compromisso, foi necessário criar uma malha mais grosseira nas regiões de menor gradiente de velocidade.

Simulações com o objetivo de avaliar o comportamento do escoamento em relação a alterações em variáveis como velocidade, porosidade e diâmetro de partículas foram realizadas numa malha 2D de elementos hexaédricos, gerada no programa ICM, e mostrada na Figura 12. A geometria corresponde somente à calota hemisférica e a um trecho cilíndrico do reator, sem o pescoço do bocal de entrada. A “fatia” 2D possui um ângulo de 3 graus, e a malha compreende 60 cunhas e 1940 hexaedros.



**Figura 12:** Malha hexaédrica 2D.

Por fim, foram realizadas simulações numa geometria fictícia, a qual se tratava de uma região cilíndrica com o mesmo diâmetro do reator avaliado, porém com fundo plano, e bocais de diferentes diâmetros.

#### 4.2.4 Condições de contorno

Foram utilizadas as seguintes condições de contorno nas simulações:

- Entrada: foi definida a velocidade do escoamento na entrada, normal à superfície. A intensidade da turbulência foi definida como média (5%), valor *default* quando não se têm informações sobre a intensidade da turbulência.
- Saída: o programa CFX possui duas alternativas para definição da pressão: pressão estática igual a 0, e pressão estática média igual a 0 (relativa). As primeiras simulações foram feitas usando-se pressão estática média igual a 0, pois teoricamente é a condição mais correta, haja vista que não se pode dizer que a pressão seja exatamente a mesma em toda a superfície que representa a saída do modelo, pois trata-se de uma seção transversal dentro do reator. Entretanto algumas simulações subseqüentes apresentaram perfis de velocidade inconsistentes, e o problema foi corrigido usando-se a condição de pressão estática igual a 0 (em toda a superfície).
- Parede: velocidade igual a 0, e parede lisa (a altura da rugosidade é desprezível em relação ao diâmetro do reator).

### 4.3 Verificação da consistência do modelo matemático

Como ponto de partida, foi simulado o fluxo da mistura reacional num tubo de dimensões semelhantes às do domínio em estudo, preenchido por brita 1 e por brita 2, e a perda de carga obtida foi comparada com a calculada pela equação de Ergun. As propriedades físicas do fluido são:

densidade: 571 kg/m<sup>3</sup>

viscosidade: 7,758E-05 kg/m.s

Foi simulado um tubo de 1,0 m de comprimento e 2,75 m de diâmetro, numa malha tetraédrica, e com o fluido na mesma velocidade superficial do reator: 0,00397 m/s. Os resultados obtidos foram:

**Tabela 5:** Resultados de perda de carga em tubo reto, pela equação de Ergun e por CFD.

Correlação	Perda de carga (Pa)	
	Brita 1	Brita 2
Ergun ( $\alpha = 180$ e $\beta = 4$ )	127,0	54,4
CFD	126,9	54,4

Vê-se que a perda de carga obtida por CFD é praticamente idêntica à calculada pela equação de Ergun, com os valores de  $\alpha$  e  $\beta$  recomendados para partículas rugosas. Os resultados obtidos via CFD estão de acordo com o esperado.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

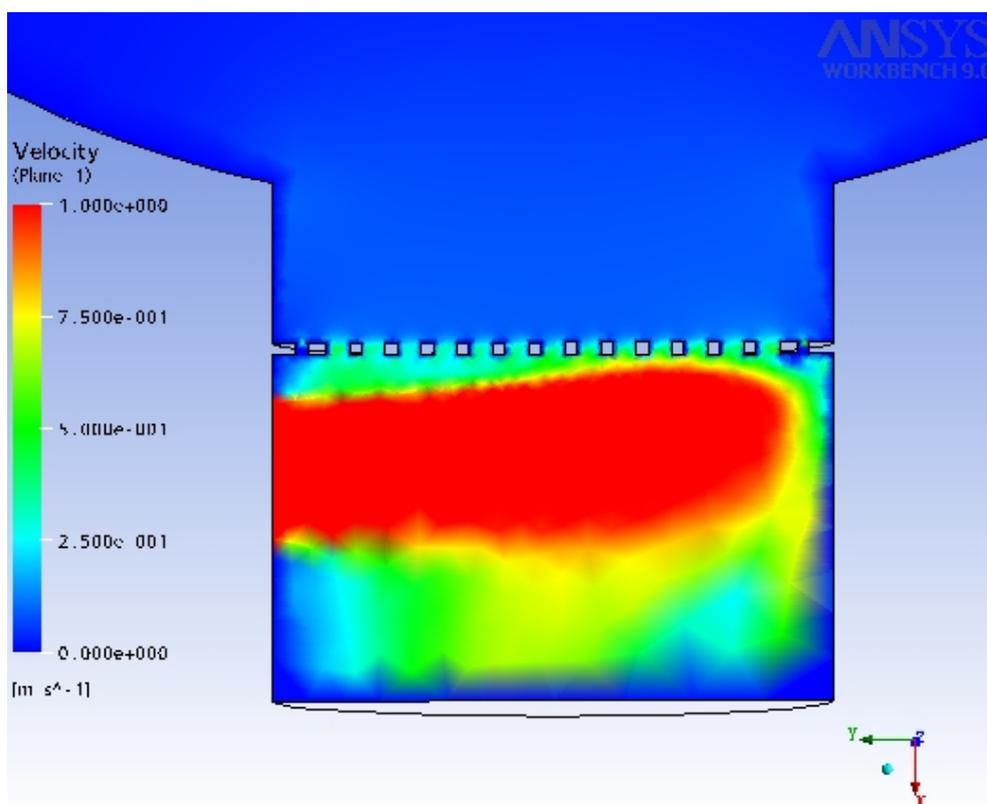
### 5.1 Nomenclatura

Na discussão a seguir, será usada a seguinte nomenclatura para definir cada parte do reator:

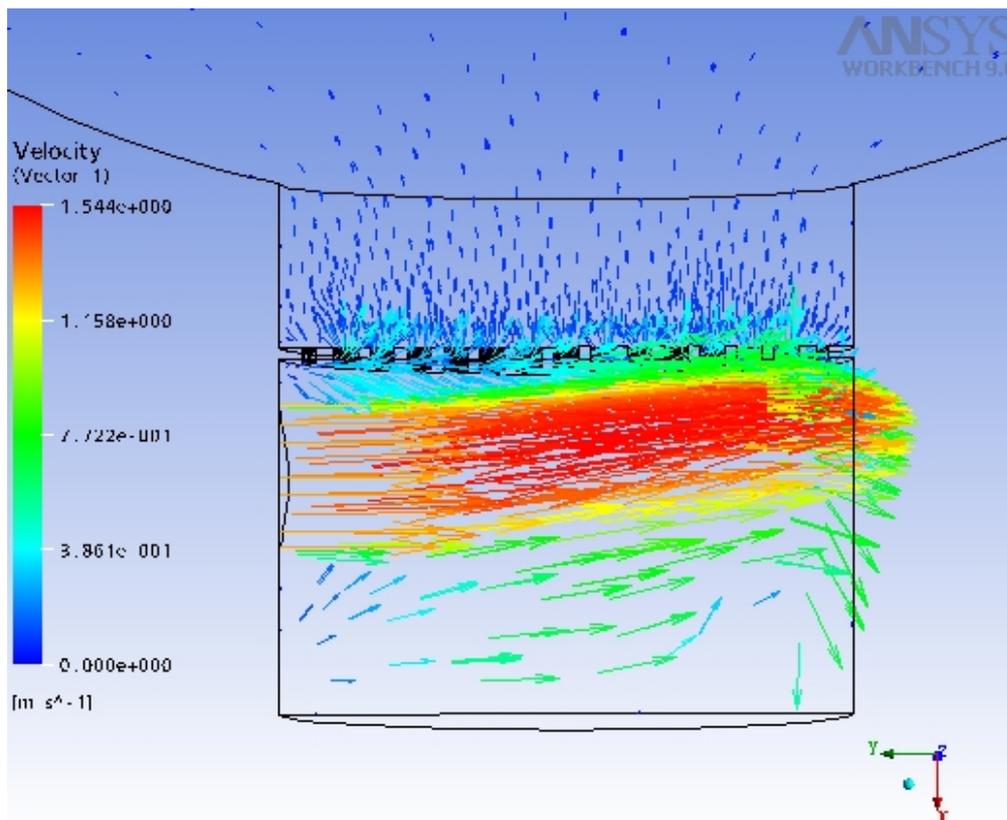
- Bocal de entrada do reator: abertura de 0,609 m (24") de diâmetro no fundo da calota hemisférica.
- Pescoço do bocal: parte cilíndrica de 0,609 m (24") de diâmetro que se estende para baixo a partir do bocal de entrada do reator, dentro da qual se encontra a placa perfurada.
- Orifício de entrada: abertura de 0,1524 m (6") de diâmetro no pescoço do bocal, por onde entra a mistura reacional.
- Tampo do bocal: flange cego que tampa a abertura inferior do pescoço do bocal.

## 5.2 Simulação de toda a região de entrada do reator

Foi simulado o escoamento na região do fundo do reator, desde o orifício de entrada dos reagentes, passando pela placa perfurada, até o término do leito de brita 1. Como se pode ver na Figura 13, a placa perfurada e os primeiros centímetros de brita no pescoço do bocal do reator praticamente eliminam o efeito da entrada a 90° do líquido. A Figura 14 mostra como os vetores de velocidade se alinham após a passagem pela placa perfurada, de forma que o fluido entra verticalmente na calota hemisférica do reator.



**Figura 13:** Velocidades na região de entrada do reator (1ª simulação).



**Figura 14:** Vetores de velocidade na região de entrada do reator (1ª simulação).

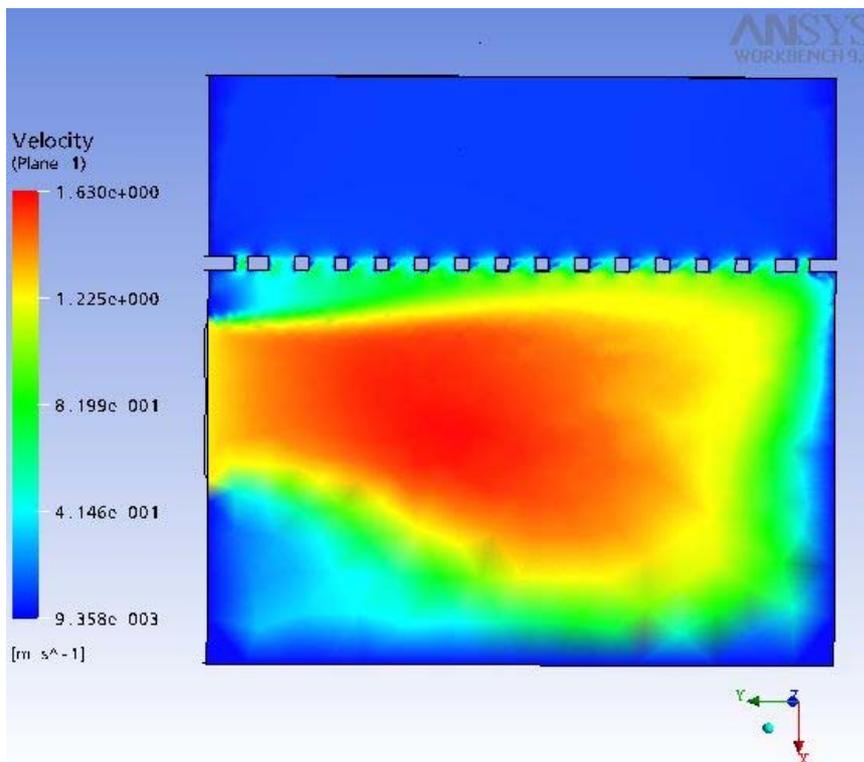
Esta constatação permitiu que outras simulações fossem feitas compreendendo somente a região de fluxo ascendente dentro do reator, eliminando-se a simulação da região do pescoço do bocal, e possibilitando simulações em malhas 2D, devido à simetria axi-simétrica do reator. Isso ampliou o leque de possibilidades de simulações, pois reduziu bastante o tamanho da malha e o tempo de processamento de cada simulação.

A fim de confirmar a possibilidade desta simplificação, foi feita uma simulação com uma malha mais refinada somente da região do pescoço do bocal de entrada.

### 5.3 Simulação da região do pescoço do bocal de entrada

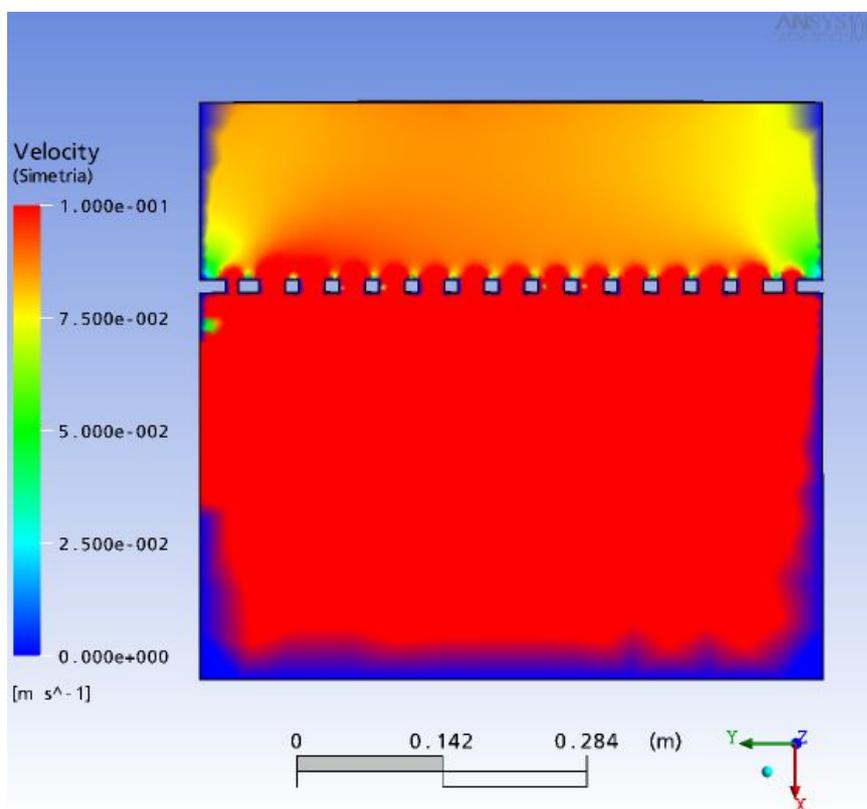
A malha mostrada na Figura 10 foi utilizada para simular com maior precisão a região do pescoço do bocal de entrada do reator, a fim de confirmar a conclusão advinda da primeira simulação: a velocidade na entrada do reator é normal à superfície do bocal, e tem módulo aproximadamente constante em toda a seção transversal do bocal.

A Figura 15 mostra a faixa de velocidades no plano vertical central. Vê-se que o resultado é semelhante ao da Figura 13.



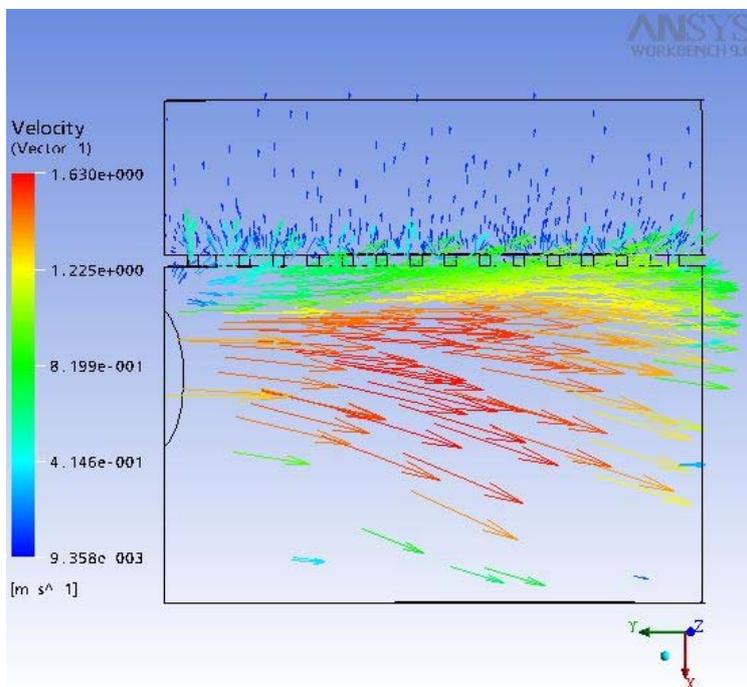
**Figura 15:** Velocidades no pescoço do bocal de entrada do reator (2<sup>a</sup> simulação).

A Figura 16 também mostra as velocidades no plano vertical central, porém numa escala que permite observação mais detalhada da região acima da placa perfurada. Pode-se notar uma distribuição uniforme de velocidade nessa região.



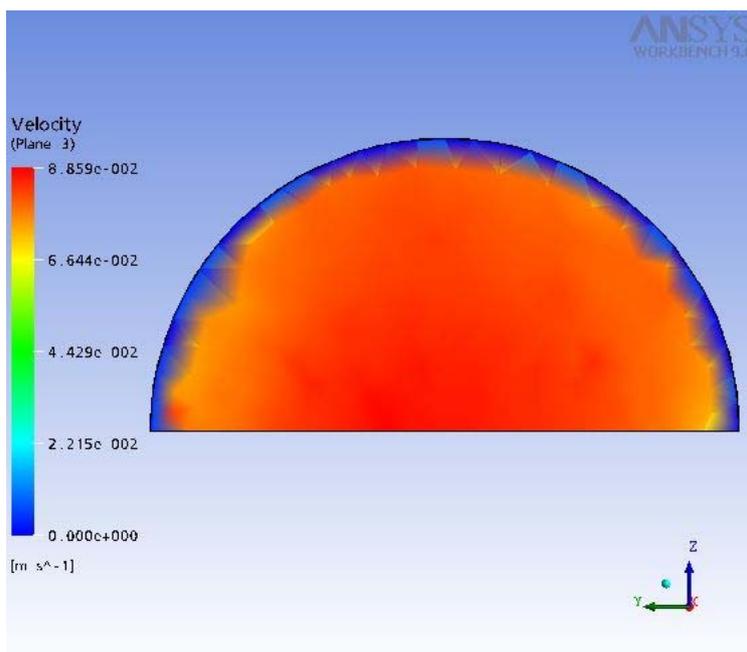
**Figura 16:** Velocidades no pescoço do bocal de entrada do reator (2ª simulação), com maior detalhe na região acima da placa perfurada.

A Figura 17 apresenta os vetores de velocidade no mesmo plano. Vê-se que o resultado é similar ao da primeira simulação (Figura 14), isto é, os vetores se alinham verticalmente após a passagem pela placa perfurada .



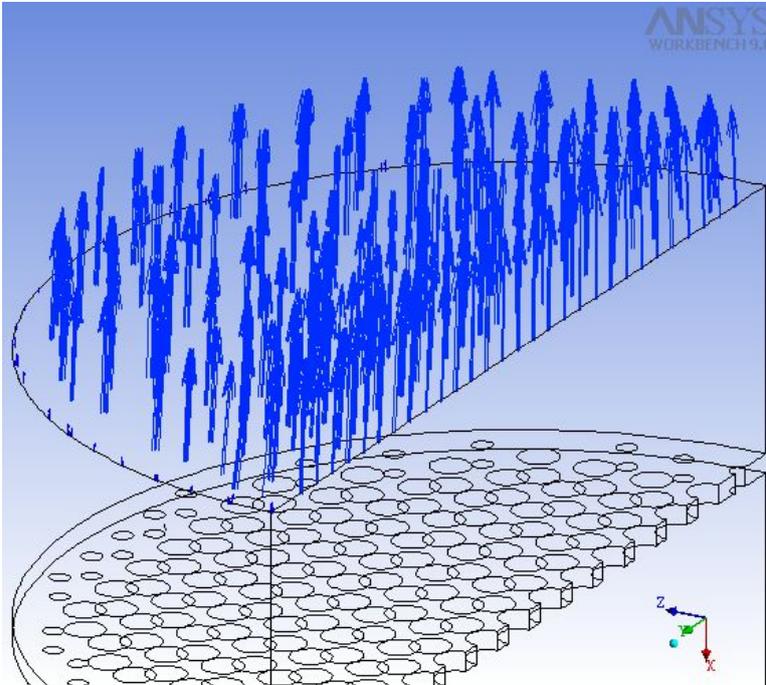
**Figura 17:** Vetores de velocidade no pescoço do bocal de entrada do reator (2ª simulação).

A Figura 18 mostra a distribuição de velocidade no plano do bocal de entrada no reator (vista de topo). Mais uma vez, nota-se uma distribuição uniforme ao longo da seção.



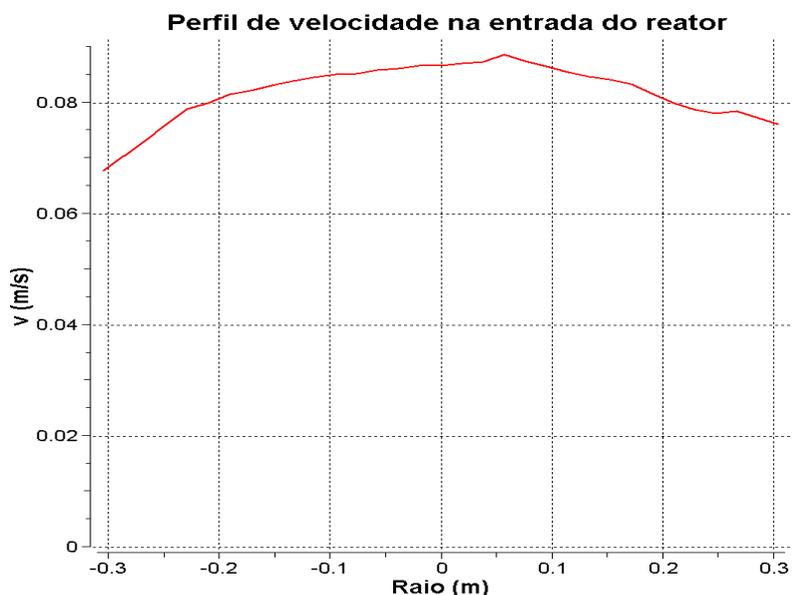
**Figura 18:** Distribuição de velocidades no bocal de entrada (vista superior).

A Figura 19 mostra os vetores de velocidade no plano do bocal de entrada do reator. Nota-se que eles são praticamente ortogonais a esse plano, e o módulo da velocidade é praticamente o mesmo ao longo de toda a seção, o que é indicado pela cor e comprimento uniformes dos vetores.



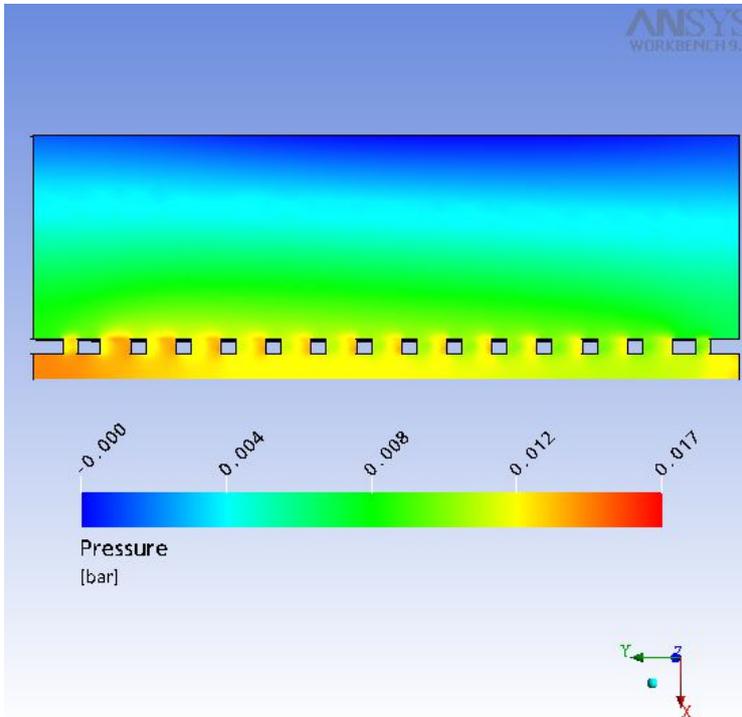
**Figura 19:** Vetores de velocidade no plano do bocal de entrada do reator.

Na Figura 20 temos o perfil de velocidades nesse bocal, o qual se apresenta como um perfil praticamente pistonado (não é apresentada a sub-camada viscosa). Nota-se também que o tipo de malha usado na simulação leva a uma certa imprecisão numérica no resultado.



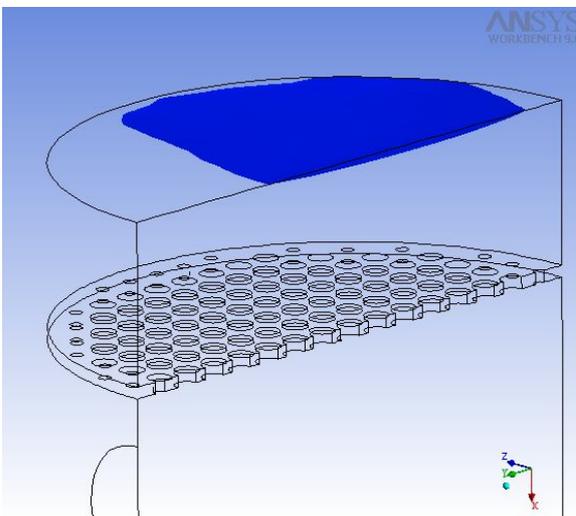
**Figura 20:** Perfil de velocidades no bocal de entrada do reator.

Com relação à pressão, vemos na Figura 21 o detalhe da região da placa perfurada e o espaço acima desta. Observa-se que a pressão é um pouco maior no lado por onde entra o fluido (lado esquerdo), porém, acima da placa perfurada, a pressão se distribui uniformemente ao longo da seção, diminuindo gradativamente até a parte superior do pescoço do bocal.

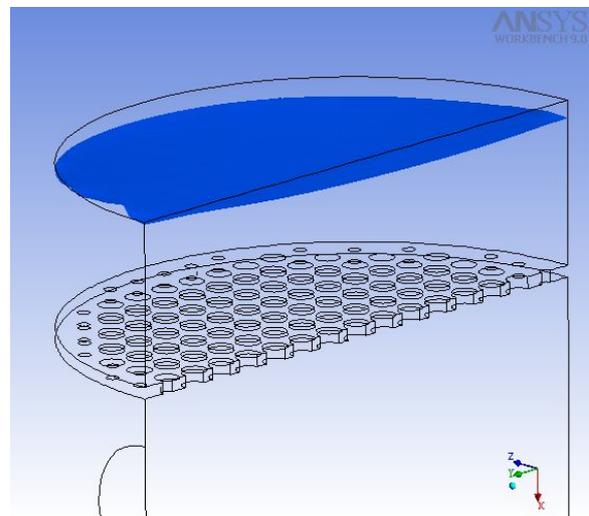


**Figura 21:** Distribuição da pressão na região da placa perfurada.

A condição de contorno usada na saída do domínio foi pressão média igual a zero. A Figura 22 mostra que em torno de 2/3 da região da saída a pressão é realmente igual a zero, e a Figura 23 evidencia que a iso-superfície de pressão igual a  $1E-03$  bar ocupa uma área que quase equivale à seção de saída do domínio.

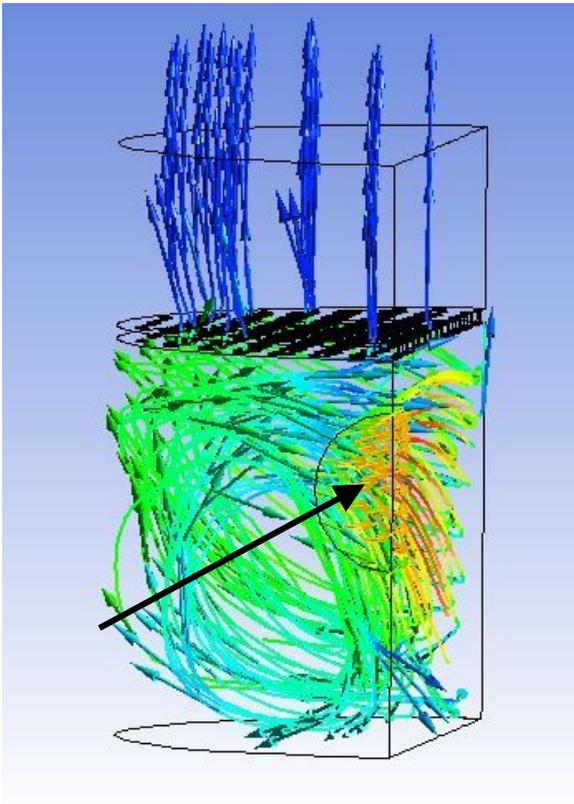


**Figura 22:** Iso-superfície de pressão = 0.

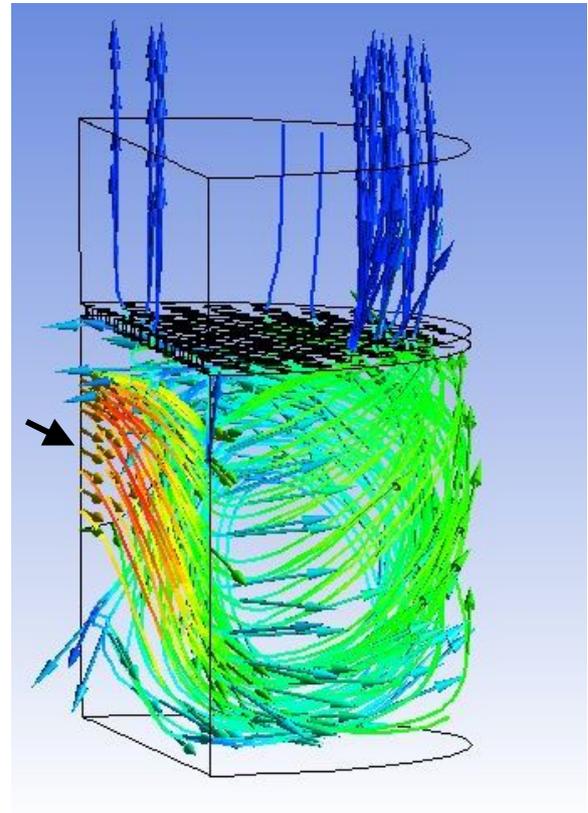


**Figura 23:** Iso-superfície de pressão =  $1E-03$  bar.

As Figuras 24 e 25 apresentam as linhas de corrente do escoamento em todo o domínio da simulação. As setas indicam o orifício de entrada do escoamento.

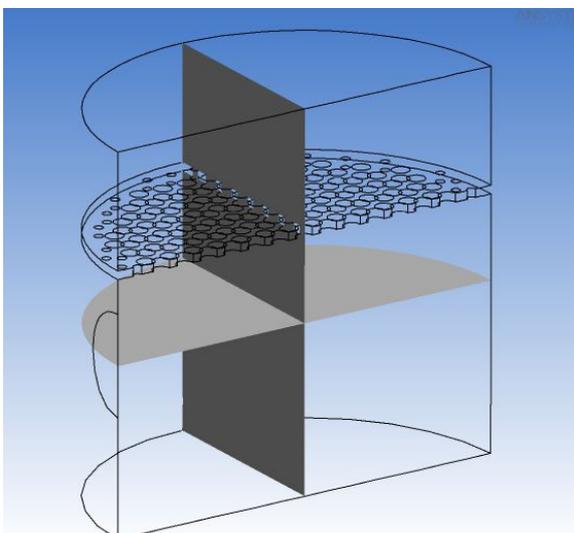


**Figura 24:** Linhas de corrente no pescoço.

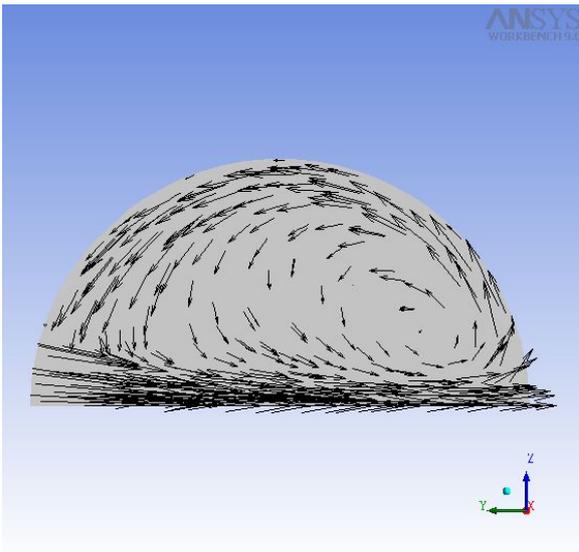


**Figura 25:** Linhas de corrente no pescoço.

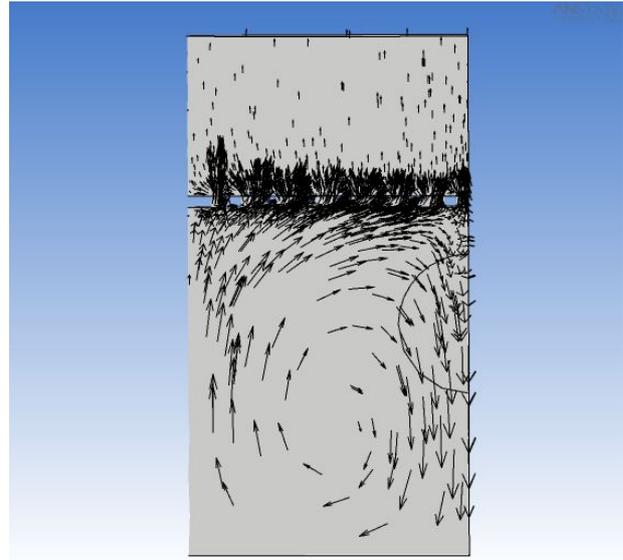
A Figura 26 apresenta dois planos, que são usados nas Figuras 27 e 28 para mostrar vetores de velocidade. O primeiro é um plano horizontal, na altura da linha de centro do orifício de entrada. O segundo é um plano vertical, na linha de centro do pescoço do bocal, paralelo ao orifício de entrada.



**Figura 26:** Planos vertical e horizontal usados para exibir vetores de velocidade.



**Figura 27:** Vetores de velocidade em plano horizontal.



**Figura 28:** Vetores de velocidade em plano vertical.

A partir das Figuras 24, 25, 27 e 28, observa-se que o fluido, após entrar no pescoço do bocal, dirige-se rapidamente à parede oposta deste, e ao mesmo tempo direciona-se para baixo. Ao atingir a parede oposta, inicia uma recirculação lateral, tangenciando a parede, enquanto que ao atingir o tampo no fundo do pescoço, diverge-se para os lados, e inicia uma ascensão próximo à parede. Ao subir, o fluido encontra a placa perfurada de forma tangencial, porém, após atravessá-la, o escoamento se alinha verticalmente.

Diante de todos os resultados dessa simulação, conclui-se que o escoamento na entrada do reator pode ser aproximado como normal à superfície de entrada, e considerado uniformemente distribuído por toda a seção. Dessa forma, pode-se adotar uma simplificação para as simulações subseqüentes, que podem ser realizadas sem o pescoço do bocal e a placa perfurada, o que também possibilita que as simulações sejam feitas em apenas duas dimensões, devido à simetria axial do reator.

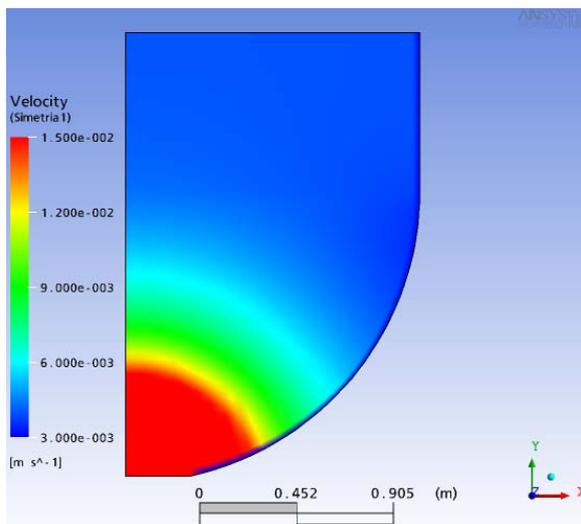
## 5.4 Simulações 2D

A malha 2D mostrada na Figura 12 foi utilizada para simular o escoamento dentro do reator, a partir do bocal de entrada, numa região que compreende a calota hemisférica inferior mais 0,75 m da parte cilíndrica.

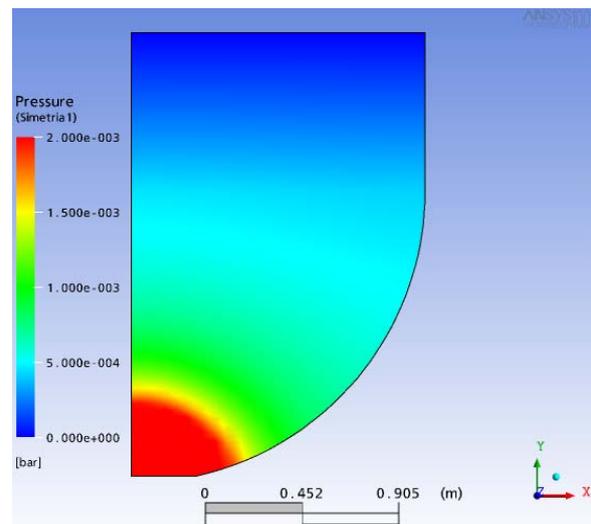
### 5.4.1 Simulação com britas 1 e 2

Foi simulado o escoamento no leito do reator industrial, que consta de brita 2 até o início da parte cilíndrica, e de uma camada de brita 1 acima da brita 2. Embora a camada de brita 1 tenha 0,15 m de altura, foi simulada uma altura total de 0,75 m de brita 1, a fim de constatar a evolução do perfil de velocidades nesse material. A velocidade na entrada do reator é igual a 0,0807 m/s, e a velocidade superficial média no trecho cilíndrico é de 0,0394 m/s.

Nas Figuras 29 e 30 são mostrados os contornos de velocidade e de pressão. Observa-se a redução gradativa das duas variáveis, e que o gradiente de velocidade acompanha o gradiente de pressão. Embora o aumento de diâmetro leve a um aumento na pressão estática, a alta perda de carga imposta pelo meio poroso faz com que a pressão total diminua.

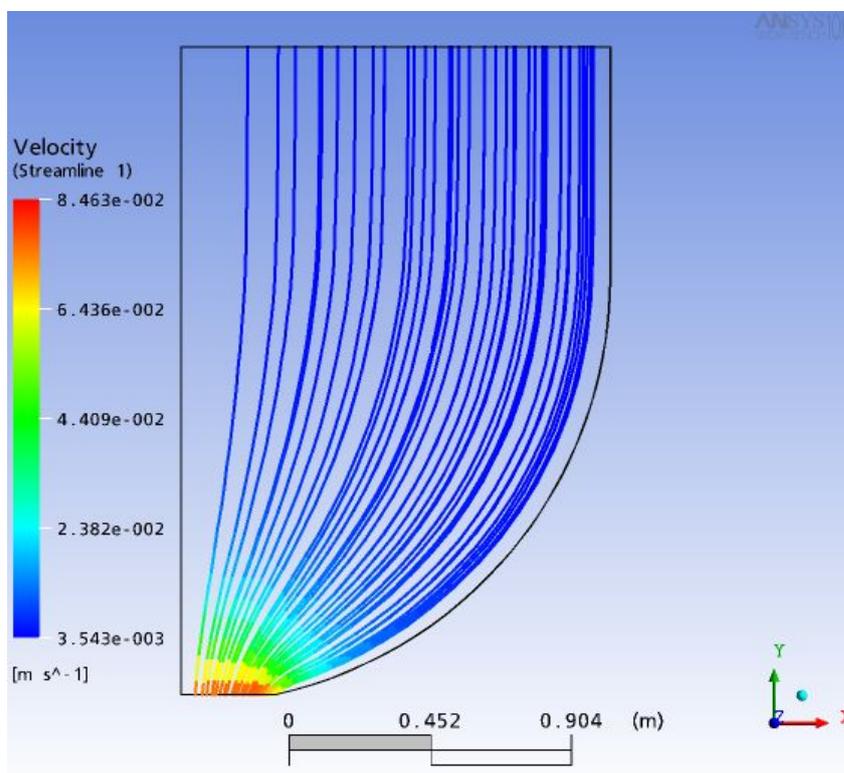


**Figura 29:** Contorno de velocidades para britas 1 e 2.



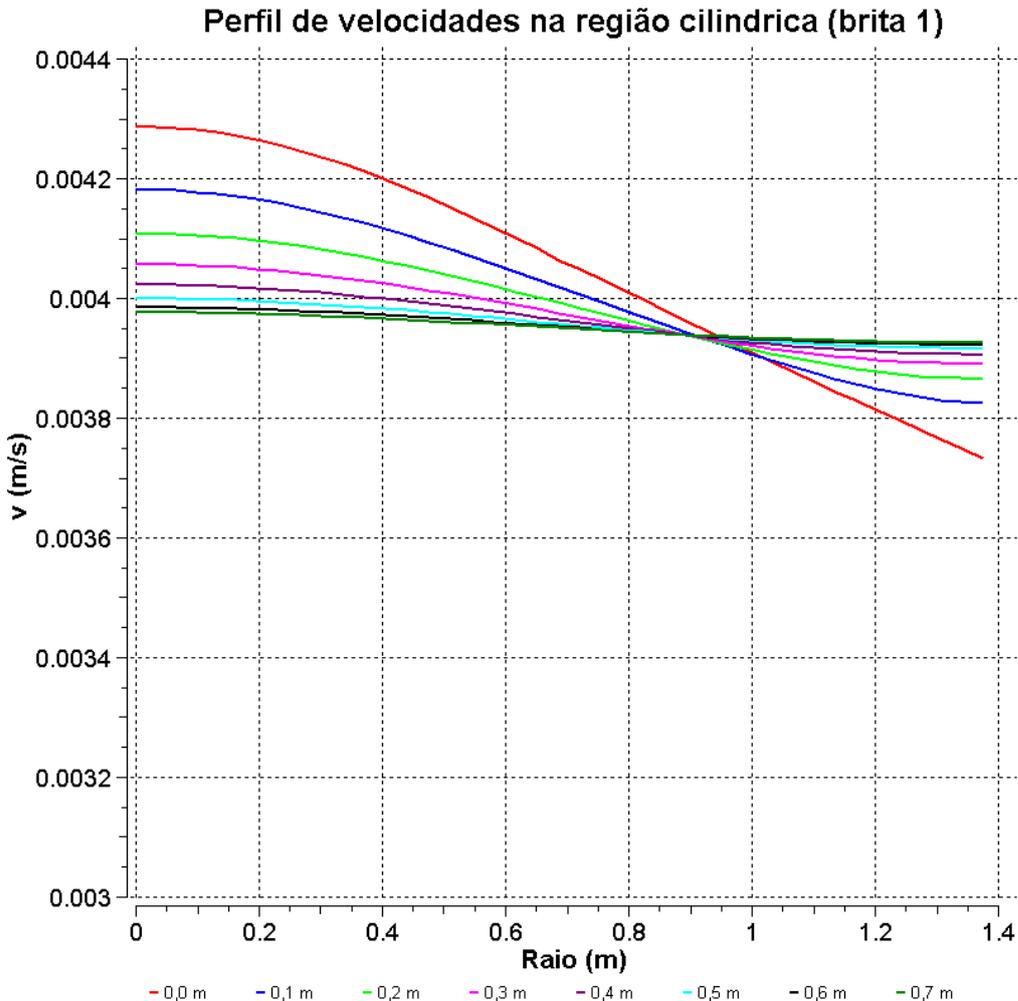
**Figura 30:** Contorno de pressões para britas 1 e 2

A Figura 31 apresenta as linhas de corrente. Nota-se que a primeira camada de brita 2 já espalha transversalmente o escoamento, e que não há recirculações.



**Figura 31:** Linhas de corrente para brita 1 e 2.

Na Figura 32 vê-se o perfil de velocidades em diferentes cotas na região cilíndrica. Não é mostrada nesse perfil a velocidade na sub-camada laminar próxima à parede, por razões explicadas anteriormente. As linhas mostradas no gráfico representam a velocidade no seio do fluido, desde o centro do reator até o limite da sub-camada viscosa.



**Figura 32:** Perfil de velocidades na região cilíndrica ocupada por brita 1.

Na cota 0, que representa o início da região cilíndrica, observa-se que a velocidade tem o valor mínimo de 0,00373 m/s próximo à parede, e valor máximo de 0,00429 m/s no centro do reator, uma variação de 15%. A relação entre a velocidade média e a velocidade máxima é de 92%, o que já é suficiente para considerar-se o escoamento como pistonado. Entretanto o perfil de velocidades continua se achatando até uma altura aproximadamente de 0,6 m, a partir da qual o perfil de velocidades não se altera mais de forma significativa. Deste ponto em diante pode-se considerar o escoamento desenvolvido.

Como a camada real de brita 1 no reator possui 0,15 m de altura, ao atingir o leito de catalisador (logo acima da brita) o escoamento ainda não está desenvolvido, porém o perfil de velocidades já é suficientemente achatado para se concluir que não existe má distribuição de reagentes no leito catalítico.

#### 5.4.2 Simulações com outros meios porosos

Na mesma malha 2D, foram feitas simulações com meios porosos formados por outras partículas, a saber:

- Um leito só com brita 1;
- Um leito só com brita 2;
- Um leito de esferas de 0,003 m de diâmetro (diâmetro mínimo comercial para esferas inertes normalmente usadas como suporte de leitos catalíticos);
- Um leito de esferas de 0,075 m de diâmetro (diâmetro máximo comercial para as esferas descritas acima).
- Um leito com partículas cilíndricas, com 0,005 m de diâmetro e 0,010 m de comprimento (dimensões semelhantes às dos *pellets* de catalisador usados no reator em estudo).

A velocidade usada nestas simulações é igual à da simulação do item 5.4.1. As características físicas dos leitos porosos de partículas esféricas e cilíndricas são:

a) Fração de vazios: a fração de vazios adotada foi, conforme sugerido por Rase (1990), igual a 0,40 para esferas, e 0,46 para cilindros (*long extrudates*).

b) Diâmetro equivalente dos cilindros: calculado conforme fórmula indicada por Rase (1990):

$$d_p = \frac{6d_c}{4 + 2d_c/L} \quad (21)$$

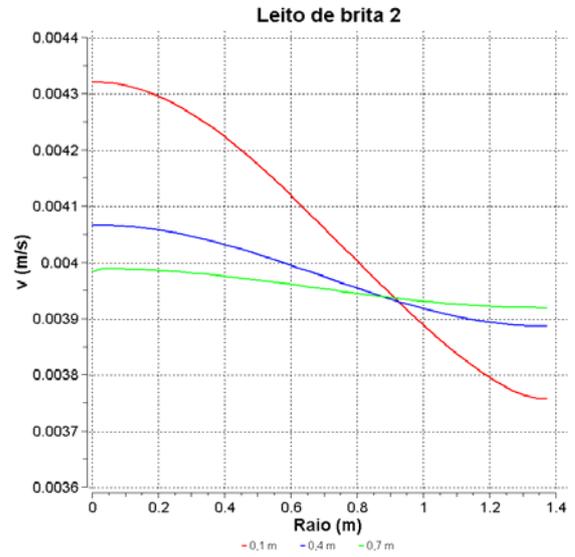
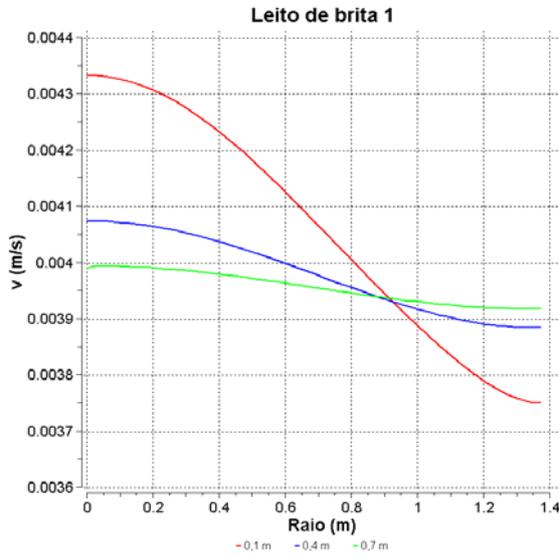
sendo  $d_c$  o diâmetro do cilindro, e  $L$  o comprimento.

A Tabela 6 resume as propriedades dos novos leitos introduzidos.

**Tabela 6:** Propriedades dos leitos de esferas e cilindros.

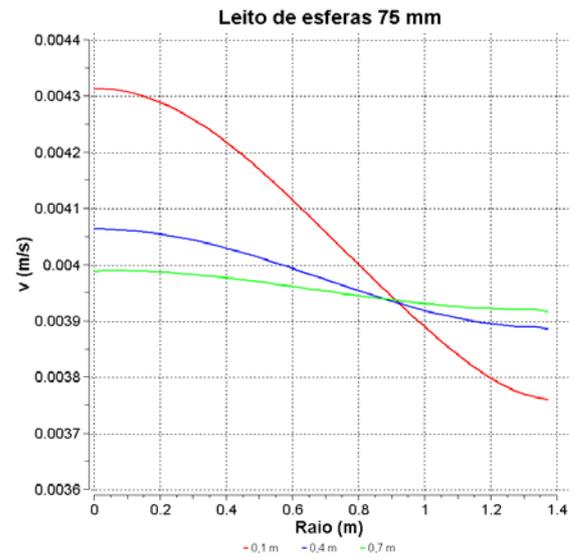
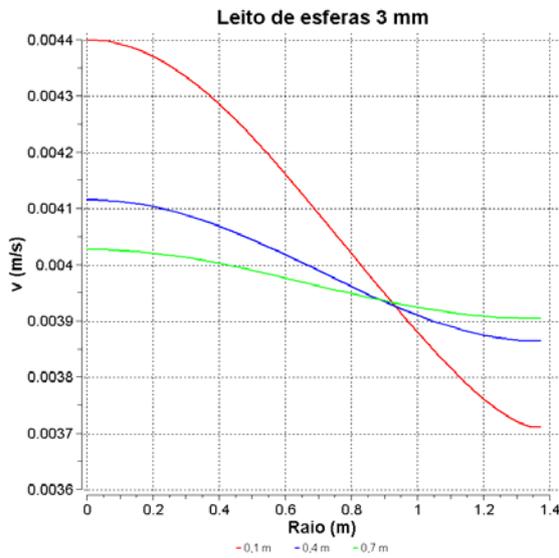
Partícula	$\epsilon$	$d_p$	$K_{perm}$	$K_{loss}$
Esferas 3 mm	0,40	0,003 m	8,89E-09 m <sup>2</sup>	11250 m <sup>-1</sup>
Esferas 75 mm	0,40	0,075 m	5,56E-06 m <sup>2</sup>	450 m <sup>-1</sup>
Cilindros	0,46	0,006 m	6,68E-08 m <sup>2</sup>	3329 m <sup>-1</sup>

As Figuras 33 a 37 apresentam os perfis de velocidade de cada simulação nas cotas 0,1 m, 0,4 m e 0,7 m da região cilíndrica do reator.



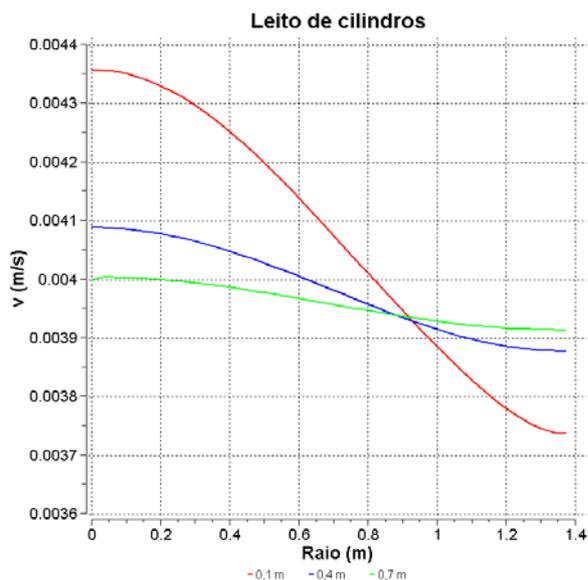
**Figura 33:** Perfil de velocidades em leito de brita 1

**Figura 34:** Perfil de velocidades em leito de brita 2



**Figura 35:** Perfil de velocidades em leito de esferas 3 mm

**Figura 36:** Perfil de velocidades em leito de esferas 75 mm



**Figura 37:** Perfil de velocidades em leito de cilindros

Nota-se que em todas elas o perfil é bastante parecido. As diferenças são mínimas. A Tabela 7 mostra a velocidade no centro do reator para as 3 cotas.

**Tabela 7:** Velocidade no centro do reator nas 3 cotas

Partícula	Velocidade (m/s)		
	0,1 m	0,4 m	0,7 m
Brita 1	0,00434	0,00407	0,00399
Brita 2	0,00432	0,00407	0,00399
Esferas 3 mm	0,00440	0,00412	0,00403
Esferas 75 mm	0,00431	0,00406	0,00399
Cilindros	0,00436	0,00409	0,00400

Isso aconteceu a despeito da perda de carga ter sido bem diferente em cada caso, conforme mostrado na Tabela 8.

**Tabela 8:** Perdas de cargas em diferentes leitos

Partícula	Perda de carga (Pa/m)
Brita 1	55,7
Brita 2	24,08
Esferas 3 mm	84,4
Esferas 75 mm	2,05
Cilindros	19,36

A fim de investigar se há ou não diferença significativa no perfil de velocidades para diferentes partículas, foram feitas diversas simulações de leitos de esferas, com uma grande variação nos diâmetros. Tomou-se o cuidado para não tomar uma partícula pequena demais, que chegasse a uma condição de fluidização do leito na velocidade estudada.

Para calcular a velocidade mínima de fluidização, Seckler (1994) usou uma equação derivada da equação empírica de Carman-Kozeny <sup>(1)</sup>:

$$\frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^{0,8}} = 130 \frac{v^{1,2} (\mu / \rho_f)^{0,8}}{g \cdot d_p^{1,8}} \frac{\rho_f}{\rho_p - \rho_f} \quad (22)$$

onde  $\rho_f$  é a densidade do fluido e  $\rho_p$  é a densidade da partícula. Esse autor obteve boa concordância com resultados para experimentos de fluidização de leitos de partículas. Portanto essa equação foi usada aqui para estimar o diâmetro mínimo da partícula, dada a velocidade.

Supondo que as esferas sejam de alumina com densidade  $\rho_p = 3900$  kg/m<sup>3</sup>, a menor partícula que não fluidiza na velocidade do estudo (0,00394 m/s) tem diâmetro igual a 1,28E-04 m. Então, o diâmetro das esferas estudadas variou de 2E-04 a 0,275 m (um décimo do diâmetro do reator, de modo a manter a razão de aspecto não menor do que 10).

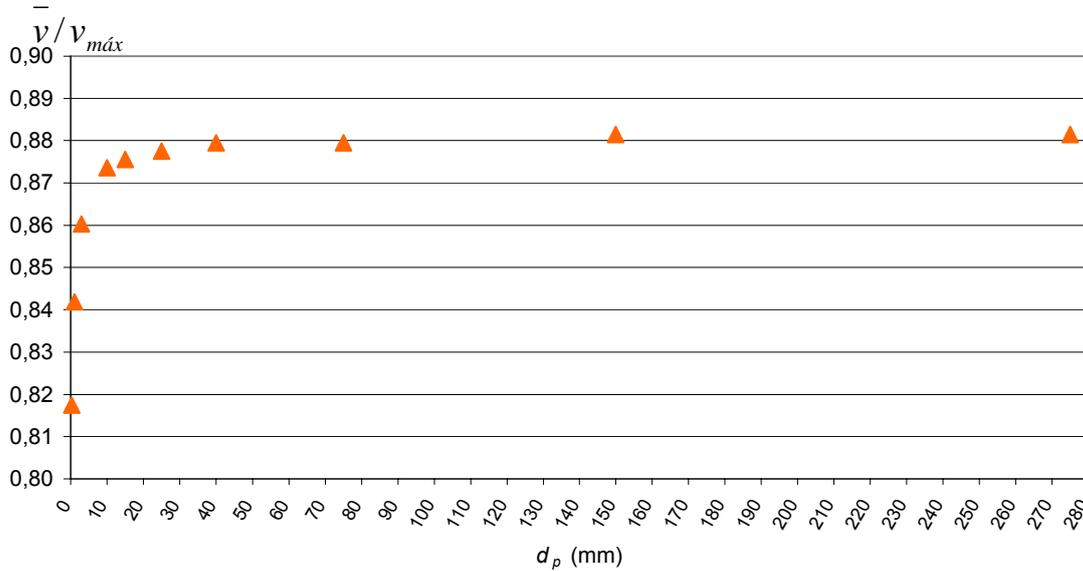
Para cada caso, calculou-se a velocidade máxima na cota 0 (início da parte cilíndrica), e dividiu-se a velocidade média pela velocidade máxima, obtendo-se o índice de velocidade  $\bar{v}/v_{m\acute{a}x}$ , que pode ser usado para se avaliar o grau de achatamento do perfil de velocidades. A Tabela 9 resume os resultados.

**Tabela 9:** Propriedades dos leitos e velocidades na cota 0 para esferas de 0,2 a 275 mm.

Partículas	$K_{perm}$ (m <sup>2</sup> )	$K_{loss}$ (m <sup>-1</sup> )	$\bar{v}$ (m/s)	$v_{m\acute{a}x}$ (m/s)	$\bar{v}/v_{m\acute{a}x}$
Esferas 0,2 mm	3,95E-11	168750	0,00394	0,00482	81,7%
Esferas 1 mm	9,88E-10	33750	0,00394	0,00468	84,2%
Esferas 3 mm	8,89E-09	11250	0,00394	0,00458	86,0%
Esferas 10 mm	9,88E-08	3375	0,00394	0,00451	87,4%
Esferas 15 mm	2,222E-07	2250	0,00394	0,00450	87,6%
Esferas 25 mm	6,17E-07	1350	0,00394	0,00449	87,8%
Esferas 40 mm	1,580E-06	844	0,00394	0,00448	87,9%
Esferas 75 mm	5,56E-06	450	0,00394	0,00448	87,9%
Esferas 150 mm	2,22E-05	225	0,00394	0,00447	88,1%
Esferas 275 mm	7,47E-05	123	0,00394	0,00447	88,1%

(1) VAN DIJK, J. C., WILMS, D. A. **J. Water S. R. T. – Aqua**, v. 49 (5), p. 263-280, 1991.

O resultado do índice  $\bar{v}/v_{m\acute{a}x}$  é apresentado na Figura 38.



**Figura 38:** Índice de velocidade em função do diâmetro das esferas.

Na equação de Ergun, usada para modelar o escoamento em leito poroso, a perda de carga é dada pela soma de dois termos, um referente à perda de energia viscosa (contribuição laminar), e outro referente à perda de energia cinética (contribuição turbulenta). Calculando-se o dois termos para cada leito de esferas, temos:

**Tabela 10:** Termos viscoso e cinético da equação de Ergun para leitos de esferas.

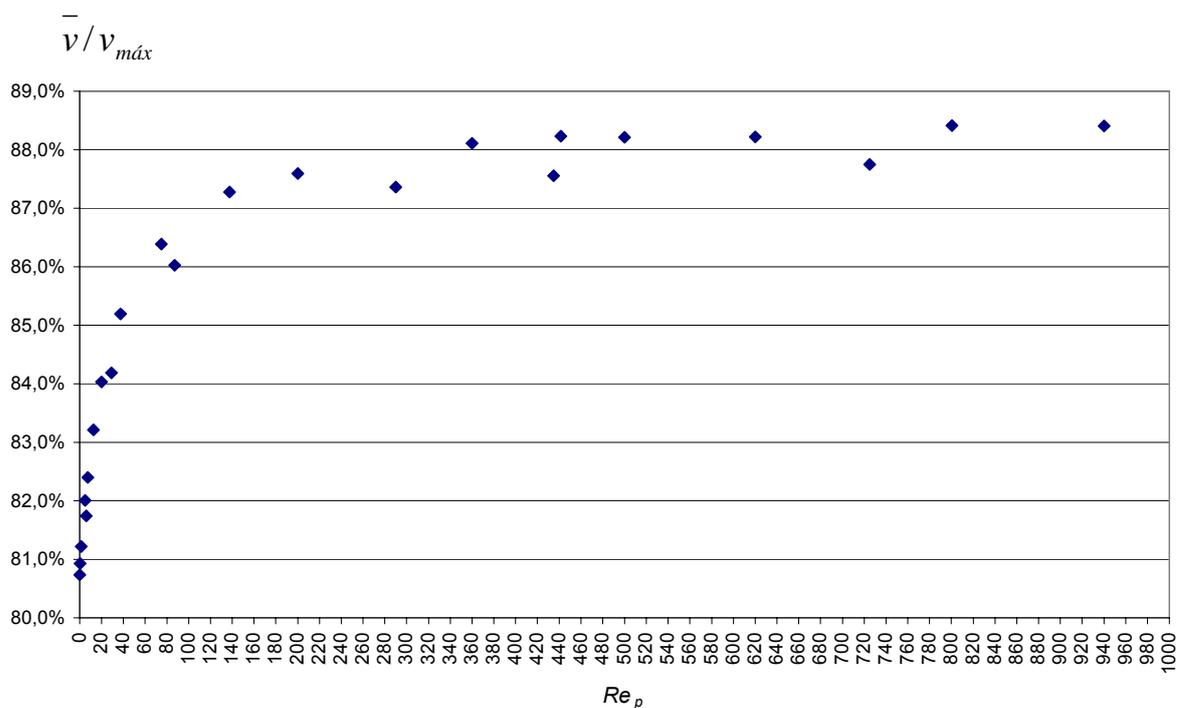
Partículas	Termo 1 (viscoso)	Termo 2 (cinético)	Soma	Termo 1 %	Termo 2 %
Esferas 0,2 mm	7738	748	8486	91,2%	8,8%
Esferas 1 mm	309	149,6	459	67,4%	32,6%
Esferas 3 mm	34,4	49,9	84,2	40,8%	59,2%
Esferas 10 mm	3,09	14,96	18,05	17,1%	82,9%
Esferas 15 mm	1,376	9,97	11,35	12,1%	87,9%
Esferas 25 mm	0,495	5,98	6,48	7,6%	92,4%
Esferas 40 mm	0,1935	3,74	3,93	4,9%	95,1%
Esferas 75 mm	0,0550	1,994	2,049	2,7%	97,3%
Esferas 150 mm	0,0138	0,997	1,011	1,4%	98,6%
Esferas 275 mm	0,00409	0,545	0,549	0,7%	99,3%

A partir da Figura 38 e da Tabela 10, observa-se uma tendência de alongamento do perfil de velocidades relacionada ao diâmetro da partícula e a uma maior contribuição da resistência viscosa na perda de carga. Dada esta tendência, calculou-se o número de Reynolds para cada caso. Se admitirmos como zona de transição a região para  $Re_p$  entre 10 e 1000, temos:

**Tabela 11:** Números de Reynolds para as diferentes partículas.

Partículas	$\bar{v}$ (m/s)	$Re_p$	Regime
Esferas 0,2 mm	0,00394	6	laminar
Esferas 1 mm	0,00394	29	transição
Esferas 3 mm	0,00394	87	transição
Esferas 10 mm	0,00394	290	transição
Esferas 15 mm	0,00394	435	transição
Esferas 25 mm	0,00394	725	transição
Esferas 40 mm	0,00394	1160	turbulento
Esferas 75 mm	0,00394	2175	turbulento
Esferas 150 mm	0,00394	4350	turbulento
Esferas 275 mm	0,00394	7975	turbulento

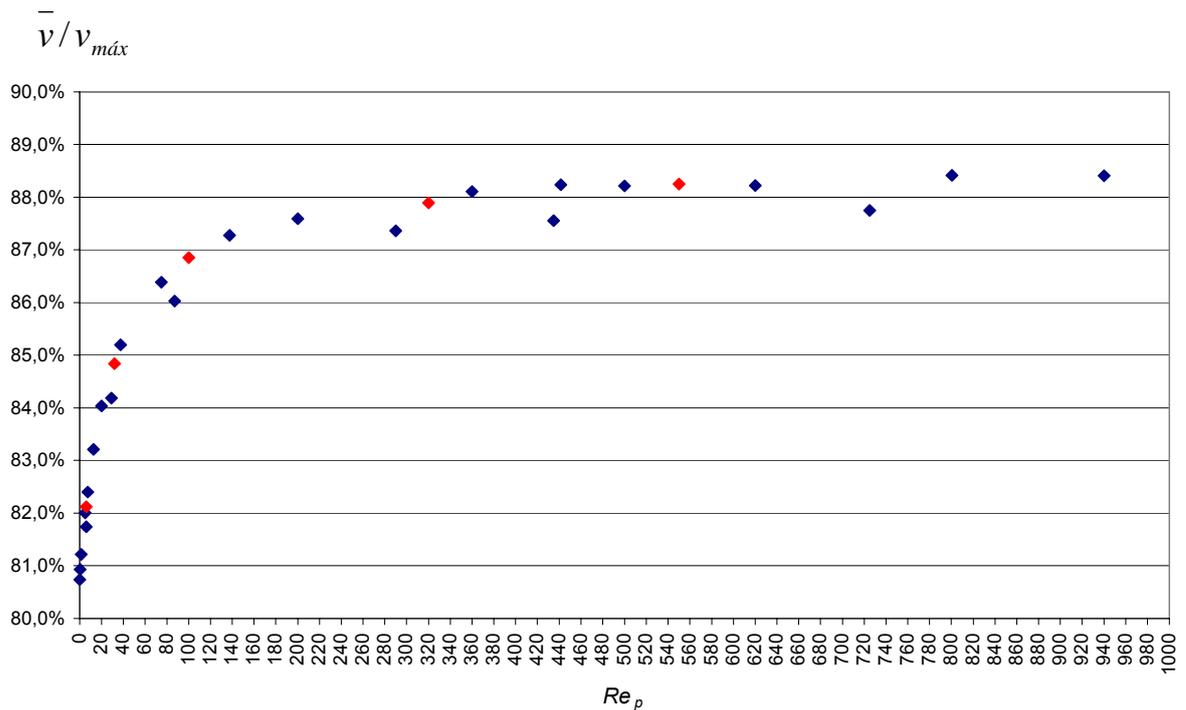
Confrontando esse resultado com a Figura 38, nota-se que o índice  $\bar{v}/v_{m\acute{a}x}$  independe do diâmetro das partículas para escoamento turbulento, porém diminui quando o escoamento passa pela zona de transição e quando é laminar. Para confirmar essa tendência, os mesmos leitos foram simulados em diferentes números de Reynolds, mantendo-se o mesmo fluido (mesmas densidade e viscosidade), porém variando a velocidade. Os resultados são apresentados na Figura 39.

**Figura 39:** Índice de velocidade em função do número de Reynolds.

Para exibir o comportamento dos pontos para baixos números de Reynolds, não foram mostrados na Figura 39 os resultados para  $Re_p > 1000$ , pois o índice de velocidade tende a ficar constante. Vê-se aqui que há mesmo uma tendência de diminuição do índice de velocidade para baixos números de Reynolds. A seguir foram feitas algumas simulações usando-se líquidos diferentes, de modo a variar o número de Reynolds através também de variações nas propriedades físicas do fluido, conforme mostrado na Tabela 12. Na Figura 40, os novos pontos (em vermelho) foram acrescentados aos obtidos anteriormente.

**Tabela 12:** Simulações envolvendo outros fluidos (a 25 °C e 1 atm).

Fluido	densidade kg/m <sup>3</sup>	viscosidade kg/m s	$d_p$ m	$Re_p$	$v$ m/s	$v_{máx}$ m/s	$\bar{v}/v_{máx}$
glicerina	1262	1,495	0,150	6	0,0474	0,0577	0,821
etanol	789	0,001197	0,015	32	0,00324	0,003815	0,848
acetona	780	0,000324	0,025	100	0,001662	0,001913	0,869
água	997	0,000890	0,010	320	0,02857	0,0325	0,879
metanol	791	0,000594	0,075	550	0,00551	0,00624	0,883



**Figura 40:** Índice de velocidade em função do número de Reynolds, incluindo escoamento de outros fluidos.

Uma observação a ser incluída é que os casos de regime laminar ( $Re_p < 10$ ) foram simulados de duas maneiras: com o modelo de turbulência  $k-\epsilon$ , e com modelo laminar. Nas duas situações, os resultados foram idênticos.

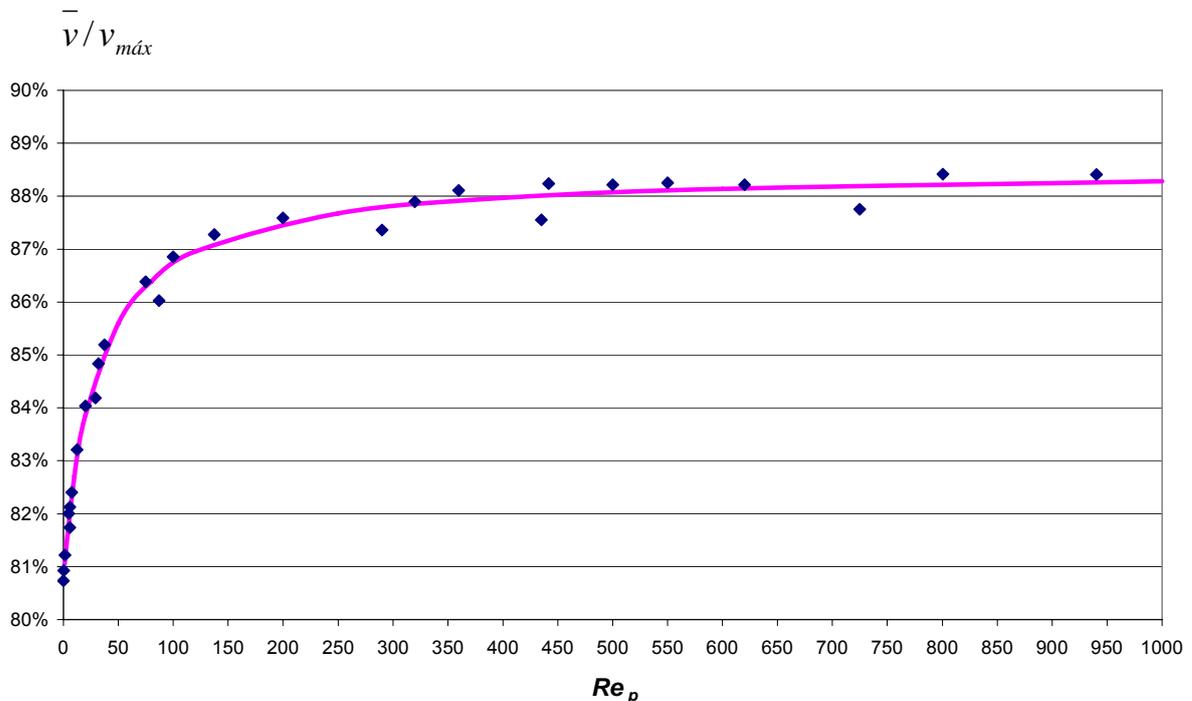
Como se vê, o índice de velocidade obtido com outros fluidos apresenta a mesma tendência já observada com a carga do reator. Isso indica que o

comportamento do escoamento em meio poroso independe da natureza do fluido e do tipo de partículas do meio poroso, e pode ser caracterizado com base nas propriedades de ambos, através apenas do número de Reynolds.

Os pontos da Figura 40 podem ser ajustados pela seguinte equação:

$$\frac{\bar{v}}{v_{m\acute{a}x}} = \frac{0,808 + 0,02919 Re_p}{1 + 0,03298 Re_p} \quad (23)$$

Esta curva é plotada na Figura 41 juntamente com os pontos da Figura 40. A equação 23 permite prever o grau de achatamento do perfil de velocidades no início da região cilíndrica do vaso a partir apenas no número de Reynolds, para qualquer líquido, em qualquer meio poroso, bastando-se conhecerem as propriedades destes.



**Figura 41:** Curva da equação obtida para o índice de velocidade em função de  $Re_p$ .

Os resultados mostram que o perfil de velocidades na cota examinada é mais achatado para escoamentos turbulentos. Conforme o escoamento tende para laminar, o perfil tende a ficar mais parabólico. Ou seja, quando o escoamento é turbulento, o jato formado pela passagem do fluido no bocal de entrada é dissipado mais rapidamente.

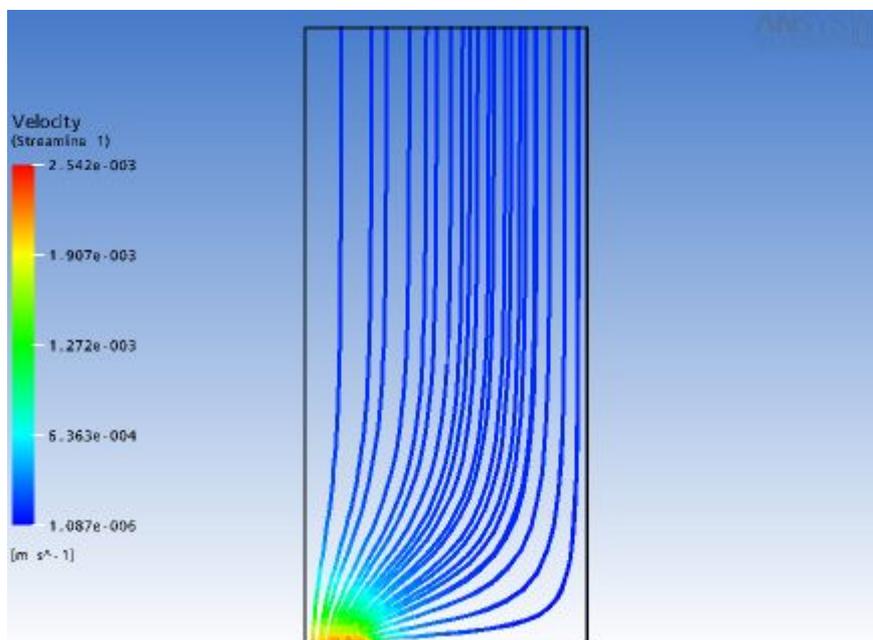
### 5.4.3 Simulações em tubo de fundo plano

Vasos com fundos hemisféricos não são os mais comuns na indústria. Vasos de alta pressão, fabricados segundo o código ASME, normalmente são feitos com fundos torisféricos, e vasos que operam em pressões menos elevadas também podem ser fabricados com tampos planos (flanges). Para que o desenvolvimento do escoamento pudesse ser avaliado sem os efeitos da geometria do fundo do vaso, foram feitas simulações num vaso de fundo plano.

Uma vez concluído que não há dependência do perfil de velocidades com a natureza do fluido ou do leito poroso, bastando-se conhecer o valor de  $Re_p$ , as simulações em fundo plano foram feitas sempre com o mesmo fluido (carga do reator) e mesmo tipo de partícula (esferas de 0,025 m de diâmetro), variando-se apenas a velocidade.

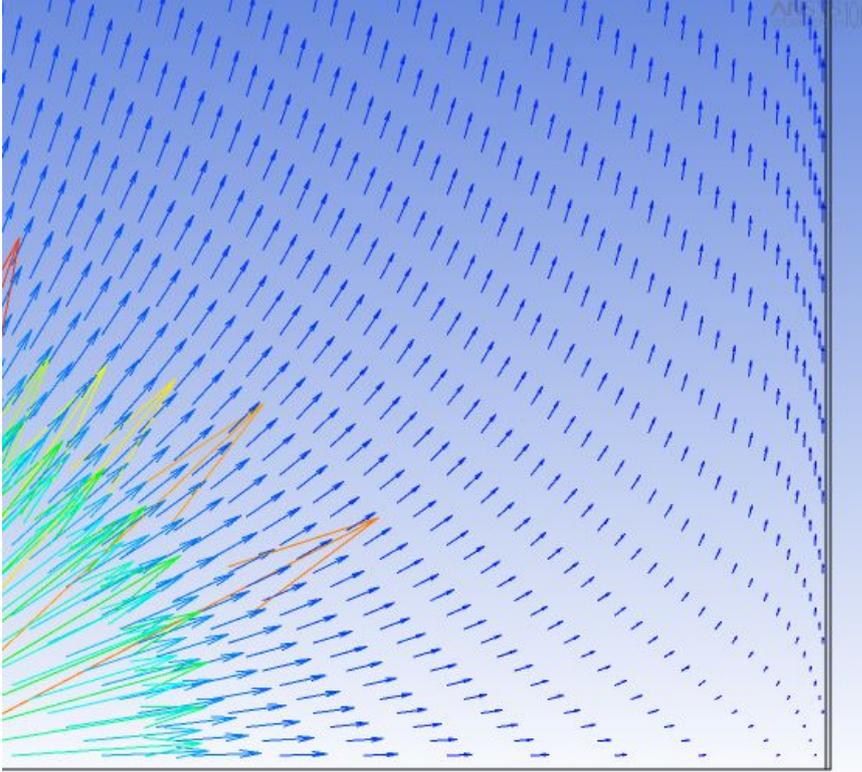
As simulações de escoamento feitas em tubo de fundo plano tiveram como objetivo avaliar o desenvolvimento do escoamento em função da distância percorrida, para vários números de  $Re_p$ . Novamente o parâmetro utilizado para essa avaliação foi o índice de velocidade  $\bar{v}/v_{máx}$ .

A geometria escolhida para essas simulações compreendeu um tubo do mesmo diâmetro do reator estudado (2,75 m), e também com um bocal de entrada de 0,6096 m (24 polegadas). As linhas de corrente típicas para escoamento nesse tipo de geometria são mostradas na Figura 42 para  $Re_p = 20$ , como exemplo.



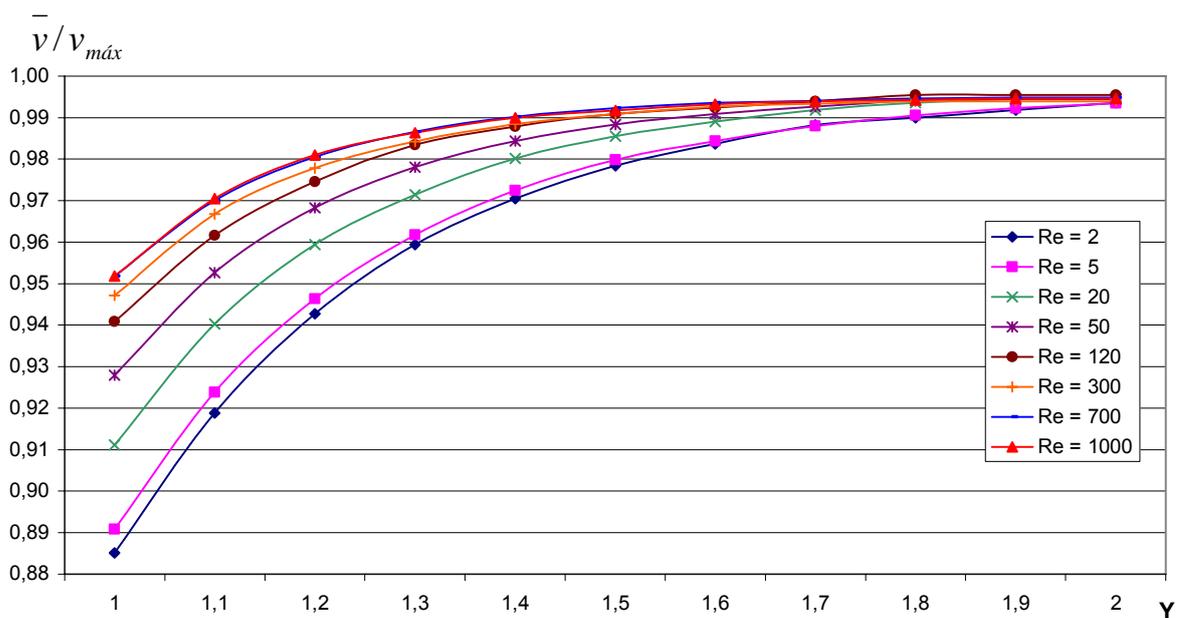
**Figura 42:** Linhas de corrente em vaso de fundo plano para  $Re_p = 20$ .

Logo na entrada do vaso o fluido já se distribui radialmente, e em seguida o escoamento se alinha verticalmente. Na Figura 43 mostram-se os vetores de velocidade em detalhe junto à parede do vaso, próximo à entrada, onde se vê que não há recirculação.



**Figura 43:** Vetores de velocidade junto à parede, na parte inferior do vaso.

A Figura 44 mostra o índice  $\bar{v}/v_{m\acute{a}x}$  em função da distância adimensional  $Y$ , que é igual a  $y/(D/2)$ , sendo  $y$  a distância percorrida e  $D$  o diâmetro do reator. São plotadas várias curvas, para diferentes números de  $Re_p$ .



**Figura 44:** Índice de velocidade em função de  $Y$  em reator de fundo plano.

Em primeiro lugar, observa-se um comportamento semelhante ao encontrado nas simulações em fundo hemisférico no que se refere ao número de Reynolds, ou seja, para uma mesma cota na parte inicial do vaso, o perfil de velocidades é mais achatado para números de Reynolds maiores. Em segundo lugar, vê-se que a uma distância igual a um diâmetro ( $Y = 2$ ) o escoamento já está desenvolvido, qualquer que seja o número de Reynolds. E o perfil do escoamento desenvolvido praticamente independe do número de Reynolds. Para qualquer valor de  $Re_p$ , o perfil de velocidades é praticamente plano, com  $\bar{v}/v_{m\acute{a}x}$  em torno de 0,995. Um leito poroso que impõe uma perda de carga maior que outro não promove uma melhor distribuição do escoamento. Qualquer que seja o meio poroso, a perda de carga já é muito maior do que a resistência imposta pela parede do tubo. Porém, um leito poroso que implique num escoamento turbulento elimina mais rapidamente o efeito de jato formado pela passagem do fluido no bocal de entrada.

Analisando matematicamente, para cada cota, o índice  $\bar{v}/v_{m\acute{a}x}$  também se relaciona com  $Re_p$  segundo uma função da forma da equação 23:

$$\frac{\bar{v}}{v_{m\acute{a}x}} = \frac{a + b Re_p}{1 + c Re_p} \quad (24)$$

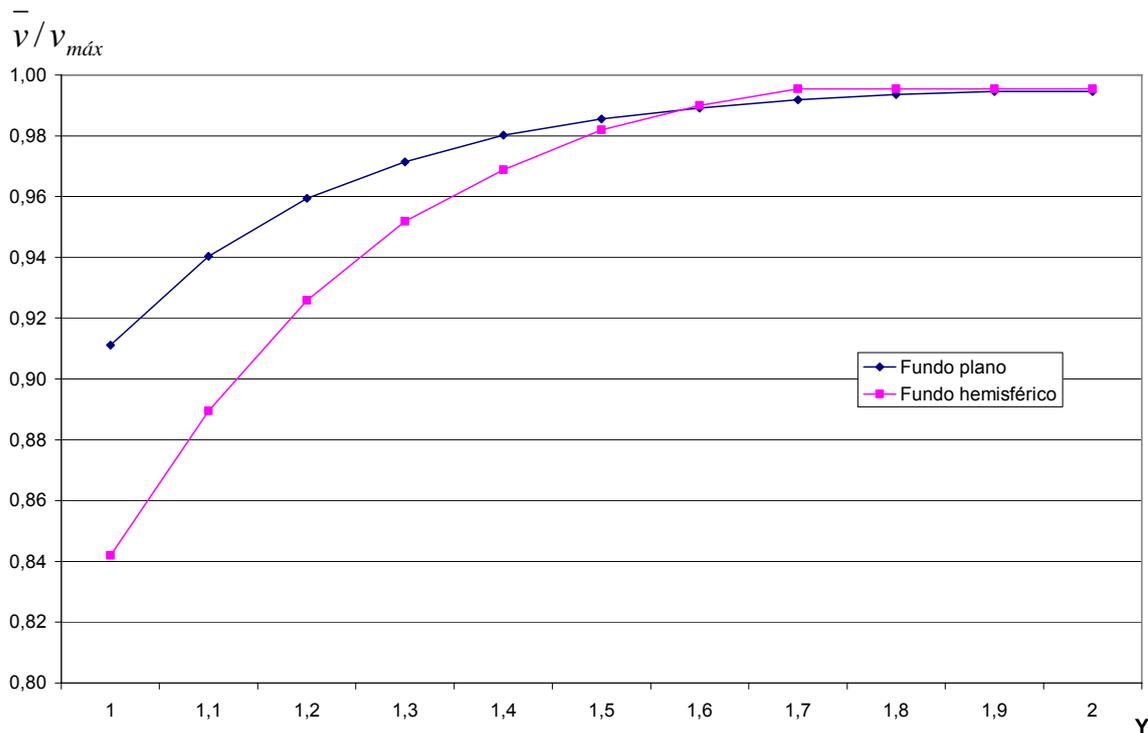
sendo que os parâmetros a, b e c podem ser expressos em função da distância y:

$$a = -0,2836 y^2 + 0,9012 y + 0,2641 \quad (25)$$

$$b = 0,0479 y^2 - 0,0629 y + 0,0501 \quad (26)$$

$$c = 0,0529 y^2 - 0,0778 y + 0,0616 \quad (27)$$

Para comparação do escoamento em vaso de fundo plano com o de fundo hemisférico, o índice de velocidade em função de Y foi plotado na Figura 45 para  $Re_p = 20$  (tomado arbitrariamente).



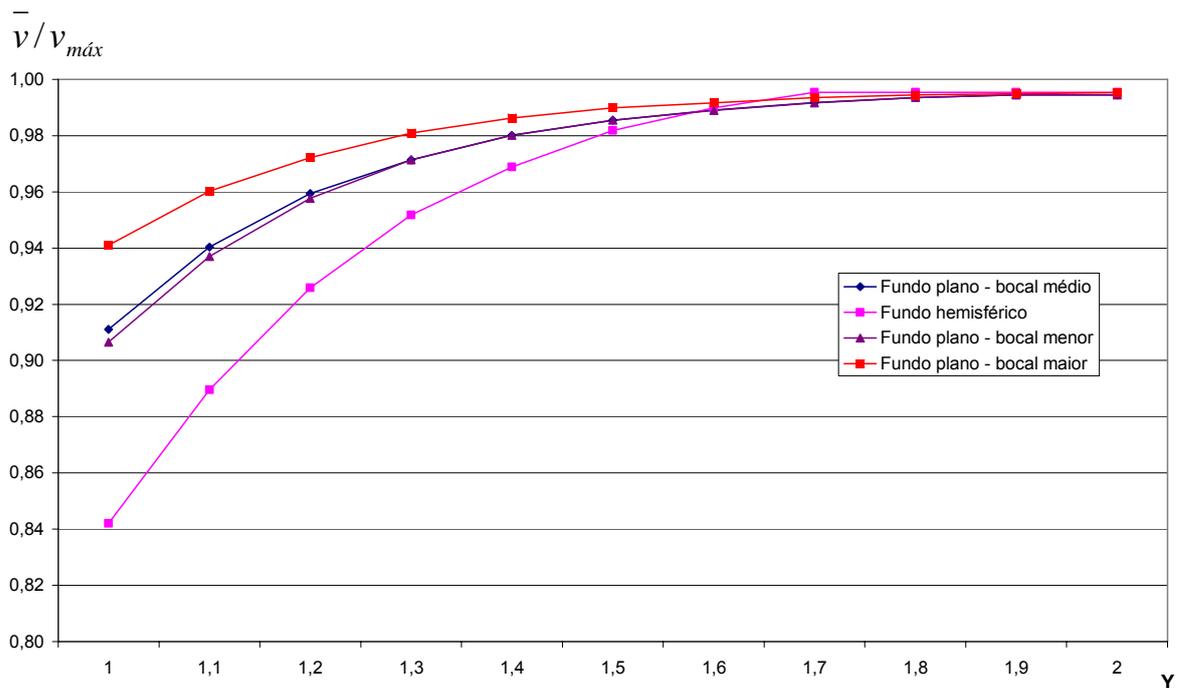
**Figura 45:** Índice de velocidade em função de Y para fundo plano e fundo hemisférico.

Para o vaso de fundo hemisférico, a cota  $Y = 1$  corresponde ao início da seção cilíndrica, e equivale à cota 0 das seções anteriores.

O que se observa nesta comparação é que, em vaso de fundo hemisférico, o escoamento tende a manter no início um perfil mais próximo da forma de jato, porque o diâmetro na parte inferior do vaso é menor. Já no vaso de fundo plano, onde a área de escoamento já é máxima desde o início, o perfil de velocidades perde mais rapidamente a característica de jato, e tende a ficar mais achatado nas cotas inferiores. Entretanto, numa distância correspondente a um raio e meio, o perfil de velocidades nos dois casos já é praticamente idêntico.

#### 5.4.4 Simulações em tubo de fundo plano com bocais de diâmetro diferente

No item anterior demonstrou-se que o perfil de velocidades, na região transitória onde o escoamento se desenvolve, depende da geometria da entrada do vaso. É também intuitivo esperar que o perfil dependa da relação entre o diâmetro da entrada e o diâmetro do vaso. No reator estudado, essa relação é de 0,22. Para avaliar essa dependência, foram simulados vasos de fundo plano com relação de diâmetros de 0,10 e 0,50. Novamente, o fluido utilizado foi a carga do reator, as partículas do leito foram esferas de 0,025 m, e o número de Reynolds foi igual a 20. A Figura 46 compara o perfil de velocidades em função de Y destas duas simulações com a do vaso de fundo hemisférico e com a de fundo plano com bocal de diâmetro intermediário.



**Figura 46:** Comparação do perfil de velocidades entre vasos com diferentes diâmetros de bocal.

No vaso com bocal maior, o perfil de velocidades é mais achatado que os demais na região que vai até  $Y = 1,6$ . No vaso com bocal menor, o perfil é menos achatado do que aqueles com o bocal médio e com o bocal maior. Este resultado está dentro do esperado, já que a velocidade do jato na entrada é maior quanto menor for o diâmetro do bocal. E mesmo o perfil de velocidades no vaso com bocal menor se mostrou bem mais achatado do que o do vaso com fundo hemisférico. Nota-se aí uma grande influência desse tipo de geometria no desenvolvimento do escoamento, porém esta influência só existe numa cota até  $Y = 1,6$ . A partir daí todos os perfis de velocidade coincidem.

## 6 CONCLUSÕES

Com o uso da Fluidodinâmica Computacional, foi possível entender o comportamento do escoamento através de um meio poroso, sem necessidade de nenhum aparato experimental. Pôde-se observar que o escoamento se distribui pela seção transversal do vaso sem recirculação, zonas mortas ou caminhos preferenciais.

O leito poroso constituído de um material inerte como brita, assentado na parte inferior de um reator de fluxo ascendente, é eficiente em promover a distribuição da carga de reagentes ao longo de toda a seção transversal do reator. Elimina os efeitos de entrada, e numa distância curta comparada ao comprimento total do reator, faz com que o escoamento esteja totalmente desenvolvido.

No reator estudado, poucos centímetros de brita no pescoço do bocal, logo acima da placa perfurada, são suficientes para tornar o escoamento normal à superfície do bocal, e com perfil de velocidades pistonado. Para esse reator, de fundo hemisférico, no início da região cilíndrica a relação entre a velocidade média e a velocidade máxima já é de 92%, o que é suficiente para se considerar o escoamento como pistonado. Após uma distância equivalente a 20% do diâmetro, aproximadamente, percorrida na região cilíndrica, não há mais alteração significativa no perfil de velocidades. A camada de brita de 0,15 m de altura, existente nesse reator, já proporciona um perfil de velocidades suficientemente achatado, de modo que se pode dizer que não existe má distribuição de reagentes no leito catalítico.

Determinou-se uma relação matemática entre o grau de achatamento do perfil de velocidades e o número de Reynolds, definido em função do diâmetro da partícula. O modelo prevê que um leito poroso submetido a escoamento turbulento elimina mais rapidamente o efeito de jato formado pela passagem do fluido no bocal de entrada do vaso. O diâmetro da partícula, usado no número de Reynolds, é uma medida indireta do diâmetro dos canais entre as partículas. Quanto menor o diâmetro, menor o número de Reynolds, e o escoamento tende a ficar laminar, pois as forças viscosas passam a superar as forças cinéticas. Por isso ocorre um fenômeno semelhante ao que acontece em tubos retos: em escoamento laminar, o perfil de velocidades é mais parabólico.

Este modelo foi empregado para estabelecer um critério de projeto para leitos de material inerte com função de distribuição em vasos de leito fixo. Generalizando, pode-se afirmar que, para vasos de qualquer geometria, qualquer tipo e tamanho de partícula (desde que a razão de aspecto seja maior ou igual a 10), qualquer líquido e qualquer velocidade de escoamento, um leito de comprimento igual a um diâmetro é suficiente para proporcionar boa distribuição e eliminar efeitos de entrada.

Outra conclusão interessante é que a distribuição do escoamento não depende da perda de carga imposta pelo meio poroso, já que a perda de carga deste será sempre muito maior do que o atrito provocado pela parede do tubo.

## 7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CALIS, H. P. A. *et al.* CFD Modelling and Experimental Validation of Pressure Drop and Flow Profile in a Novel Structured Catalytic Reactor Packing. **Chemical Engineering Science**, v. 56, p. 1713-1720, 2001.

DIXON, A. G.; NIJEMEISLAND, M. CFD as a Design Tool for Fixed-Bed Reactors. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 40, No. 23, p. 5246-5254, 2001.

FREUND, H. *et al.* Numerical Simulations of Single Phase Reacting Flows in Randomly Packed Fixed-Bed Reactors and Experimental Validation. **Chemical Engineering Science**, v. 58, p. 903-910, 2003.

FROMENT, G. F.; BISCHOFF, K. B. **Chemical Reactor Analysis and Design**. John Wiley & Sons, 1990.

GUARDO, A. *et al.* CFD Flow and Heat Transfer in Nonregular Packings for Fixed Bed Equipment Design. **Ind. Eng. Chem.** v. 43, p. 7049-7056, 2004.

GUNJAL, P. R.; RANADE, V. V.; CHAUDHARI, R. V. Computational Study of a Single-Phase Flow in Packed Beds of Spheres. **AIChE Journal**, v. 51, No. 2, p. 365-378, 2005.

HICKS, R. E. Pressure Drop in Packed Beds of Spheres. **Ind. Eng. Chem. Fundam.**, v. 9, p. 500-502, 1970.

IORDANIDIS, A. A. **Mathematical Modeling of Catalytic Fixed Bed Reactors**. 2002, 204 p. Ph.D. thesis, University of Twente, Holanda.

JIANG, Y. *et al.* Single Phase Flow Modeling in Packed Beds: Discrete Cell Approach Revisited. **Chemical Engineering Science**, v. 55, p. 1829-1844, 2000.

LEVA, M. **Fluidization**. New York: McGraw-Hill, 1959.

LOGTENBERG, S. A.; NIJEMEISLAND, M.; DIXON, A. G. Computational fluid dynamics simulations of fluid flow and heat transfer at the wall-particle contact points in a fixed bed reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 2433-2439, 1999.

MacDONALD, I. F. *et al.* Flow through porous media – the Ergun equation revised. **Ind. Eng. Chem. Fundam.**, v. 18, p. 199-208, 1979.

MAGNICO, P. Hydrodynamic and Transport Properties of Packed Beds in Small Tube-to-Sphere Diameter Ratio: Pore Scale Simulation Using an Eulerian and a Lagrangian Approach. **Chemical Engineering Science**, v. 58, p. 5005-5024, 2003.

MARQUES F<sup>o</sup>, J. **Estudo da Fase Térmica do Processo Claus utilizando Fluidodinâmica Computacional**. 2004, 103 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W. **Perry's Chemical Engineer's Handbook**, 6<sup>a</sup> ed. New York: Mc Graw-Hill, 1984.

RASE, H. F. **Fixed-Bed Reactor Design and Diagnostics – Gas-Phase Reactions**. Stoneham, MA: Butterworth Publishers, 1990.

SCHEIDEGGER, A. E. **The Physics of Flow through Porous Media**. Toronto: University of Toronto Press, 1960.

SECKLER, M. M., **Calcium phosphate precipitation in a fluidized bed**. 1994, 184 p. Tese de doutorado, Delft University of Technology, Holanda.

TAYLOR, K. *et al.* The Prediction of Pressure Drop and Flow Distribution in Packed Bed Filters. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON CFD IN THE MINERALS AND PROCESS INDUSTRIES, 2., 1999, Melbourne, Australia. **Proceedings...** Disponível em <[http://www.cfd.com.au/cfd\\_conf99/papers/071TAYL.PDF](http://www.cfd.com.au/cfd_conf99/papers/071TAYL.PDF)> Acesso em: 02 fev. 2006.

TOBIS, J. Influence of Bed Geometry on its Frictional Resistance under Turbulent Flow Conditions. **Chemical Engineering Science**, v. 55. p. 5359-5366, 2000.

WHITE, F. M. **Viscous Fluid Flow**. McGraw Hill, 1991.

WILCOX, D. C. **Turbulence Modeling for CFD**. DCW Industries, 2<sup>nd</sup> ed., 2000.

ZEISER, T. *et al.* CFD-calculation of flow, dispersion and reaction in a catalyst filled tube by the lattice Boltzmann method. **Chemical Engineering Science**, v. 56, p. 1697-1704, 2001.

**Material adicional consultado**

JOSHI, J. B., RANADE, V. V. Computational Fluid Dynamics for Designing Process Equipment: Expectations, Current Status, and Path Forward. **Ind. Eng. Chem. Res.** v. 42, p. 115-1128, 2003.

PETRE, C. F. *et al.* Pressure Drop through Structured Packings: Breakdown into the Contributing Mechanisms by CFD Modeling. **Chemical Engineering Science**, v. 58, p. 163-177, 2003.

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)