



TEORIA DAS CÉLULAS CÚBICAS APLICADA NA QUANTIFICAÇÃO DE INSUMOS PARA REATORES

Noemia Elaine Godoi Fermoselli (independente)

Av. Carlos de A. Gobbi, 444 – Vila S.Bento - CEP: 13034-670 – Campinas/SP

noemiafer@yahoo.com

RESUMO

A Indústria Química trabalha com grandes volumes de catalisadores e outros insumos carregados em reatores e outros equipamentos. O objetivo deste trabalho foi apresentar uma maneira prática e simples para estimar a densidade aparente dos leitos desses insumos, ou seja, a densidade considerando os espaços vazios entre as partículas, quando estas são esféricas, a partir da teoria de Células Cúbicas. Os modelos de empacotamento Cúbico Simples e Cúbico de Face Centrada foram utilizados para estabelecer uma proporção a partir da qual se desenvolveu uma equação para calcular a densidade aparente média. Os resultados podem ser aplicados para insumos esféricos de qualquer tamanho, inclusive pós, cujas esferas não são visíveis a olho nu, englobando uma grande variedade de catalisadores de leito fluidizado, bolas de alumina e elementos estruturados. O planejamento preciso para carregamento desses insumos reduz sobras, simplifica a logística e minimiza estoque, gerando economia significativa para a indústria.

Palavras-chave: CATALISADOR EM PÓ, ESFERAS DE CERÂMICA, DENSIDADE APARENTE, CRAQUEAMENTO E REFORMA CATALÍTICA, HIDROTRATAMENTO.

INTRODUÇÃO

A Indústria Química trabalha com grandes volumes de catalisadores e outros insumos para a reação de compostos, como explica TAFETE (2023) [1]. Calcular precisamente a compra para partida operacional de unidades e reposição desses insumos em paradas de manutenção é um desafio constante. O objetivo deste trabalho é apresentar uma maneira prática e simples para estimar a densidade

aparente de catalisadores em pó e bolas de cerâmica, ou seja, calcular a quantidade de insumos que cabem dentro de um equipamento, considerando os espaços vazios que permanecem entre as partículas. Diversos equipamentos industriais, tais como reatores, filtros cilíndricos e vasos adsorvedores, que recebem carregamentos de partículas esféricas, podem se beneficiar destes cálculos. A Figura 1 mostra fotos com exemplos desses insumos.

Figura 1. Pequenos Insumos Esféricos Empilhados.

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA, 2024.



Partículas de catalisadores com formatos especiais, geralmente são vendidos com densidades aparentes definidas. Contudo, quando o catalisador é em pó, como catalisadores de leitos fluidizados, muitas vezes se utilizam testes de bancada imprecisos para definição da densidade aparente.

Estudando-se a teoria das Células Cúbicas explicada por KURI (2002), reconheceu-se que ela é válida para esferas de qualquer tamanho, desde bolas de boliche até átomos [2]. Logo, também pode ser utilizada para catalisadores extremamente pequenos, que visualmente parecem pó, desde que as partículas sejam esféricas. É o caso dos catalisadores utilizados em certas Unidades de Reforma Catalítica e de Craqueamento Catalítico Fluidizado na Indústria do Petróleo. Ainda, constatou-se que essa teoria pode ser utilizada para definir a densidade aparente de leitos de bolas de cerâmica, muito utilizados em reatores de Hidrotratamento de diesel

ou gasolina. Formados por camadas de esferas rígidas e inertes, contendo alumina, essas esferas servem como suporte de catalisadores de diversos formatos ou como topo do leito de catalisadores, para mantê-los imóveis dentro do reator, evitando a formação de caminhos preferenciais que elevariam a perda de carga do processo.

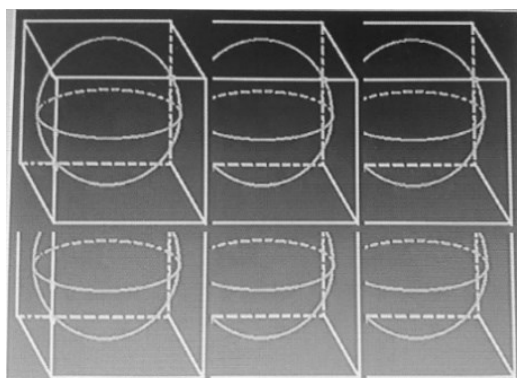
MATERIAIS E MÉTODOS

A metodologia consiste em utilizar teoria já conhecida da Engenharia de Materiais, a Teoria das Células Cúbicas, para aplicação na Área de Engenharia Química, mais especificamente reatores, filtros e vasos. Essa teoria costuma ser utilizada para definir posicionamento de átomos de Ferro e Carbono em estruturas de aço e prever a cristalização de metais.

Segundo esse conceito, o empacotamento é composto pela repetição de células unitárias, que é o menor agrupamento de átomos representativo de uma determinada estrutura cristalina específica, representando a simetria da estrutura cristalina, ou seja, célula unitária é cada pequeno volume que se repete na estrutura.

O empacotamento mínimo refere-se a todas as esferas empilhadas perfeitamente umas sobre as outras, como se elas estivessem dentro de cubos. Essa configuração, conhecida como Cúbico Simples (CS), apresenta o maior volume de espaços vazios e portanto, a menor densidade. A Figura 2 mostra essa configuração.

Figura 2. Esferas na Configuração de Empacotamento Cúbico Simples (CS).

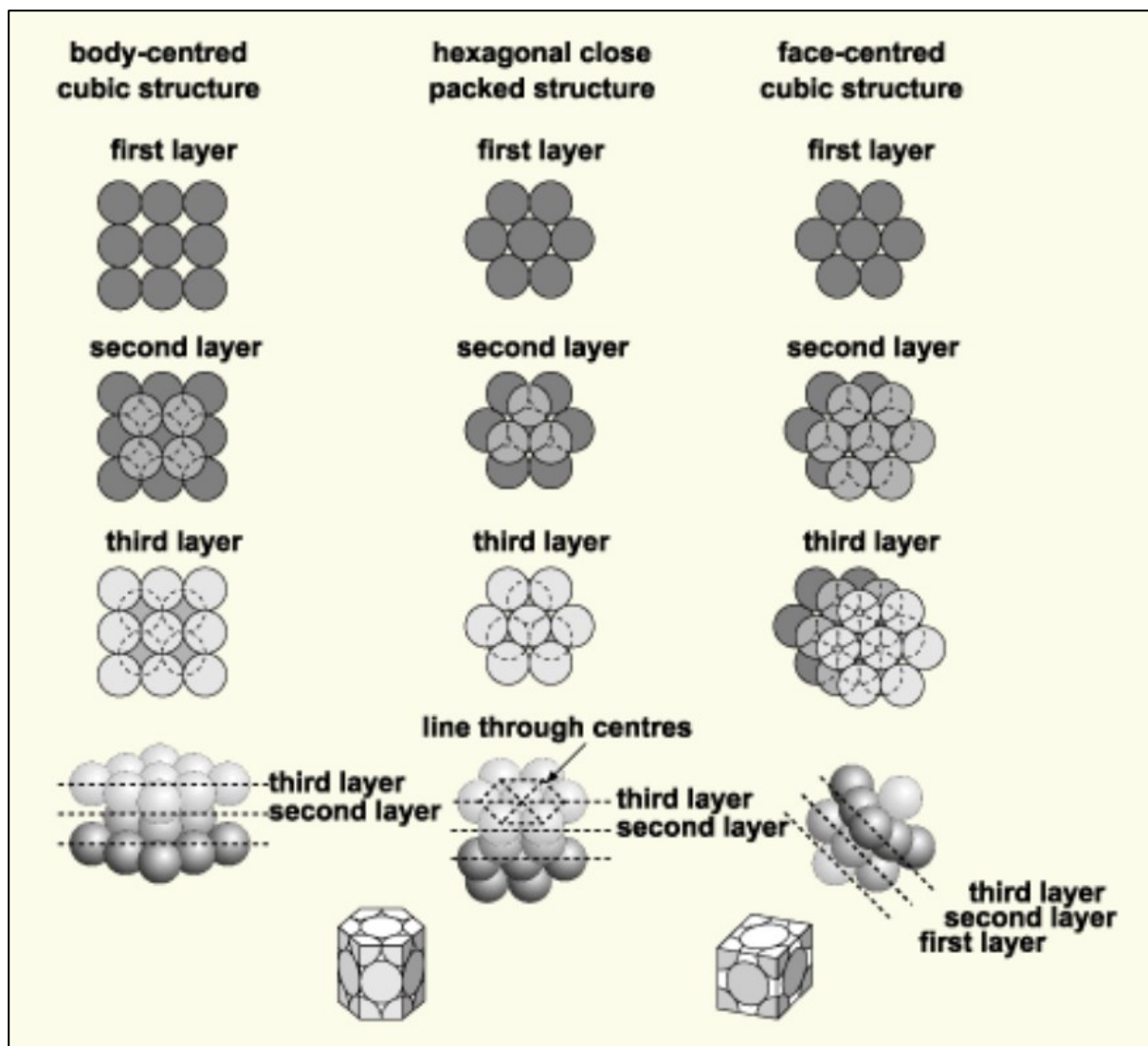


Outros empacotamentos que podem ocorrer são: Estrutura Cúbica de Face Centrada (CFC), Cúbica de Corpo Centrado (CCC), Hexagonal Simples (HS),

Hexagonal Compacto (HC), que consistem em formas variadas de arranjo de um conjunto de esferas em um cubo ou em um poliedro hexagonal.

A Figura 3 mostra alguns tipos de empacotamento mais densos de esferas a partir da Teoria das Células Cúbicas. TARR (2024) lembra que há outras estruturas possíveis, mas que estas aparecem mais na literatura por serem as formas cristalinas encontradas em metais utilizados com propósitos de engenharia [3].

Figura 3. Estruturas Cristalinas Comuns. Fonte: TARR, 2024 [3].



A disposição de maior empacotamento em uma camada não é necessariamente a que confere maior empacotamento em várias camadas sobrepostas. Em princípio, o formato Hexagonal Compacto consegue manter as esferas mais próximas, porém somente em um plano. Quando se empilha vários

planos de esferas, o maior empacotamento possível passa a ser o Cúbico de Face Centrada (CFC). Por isso, o modelo Cúbico de Face Centrada foi considerado como o maior empacotamento, já que se mantém mais denso para diversas camadas de esferas sobrepostas e este artigo foca em equipamentos industriais, contendo grandes volumes.

Cálculos da Teoria das Células Cúbicas já consolidados, que incluem número de átomos por células unitárias e relações entre arestas e raios, obtiveram como resultados fatores de empacotamento para cada tipo de empilhamento. Esses fatores são números adimensionais que podem ser multiplicados pela densidade da esfera para se prever a porcentagem de espaços vazios e a porcentagem de espaços ocupados pelas esferas naquela determinada configuração de empilhamento.

A configuração Hexagonal tem fator de empacotamento 0,9069 em um plano, mas quando esses planos se empilham, o fator fica menor que o fator do empacotamento Cúbico de Face Centrada, que é 0,74048. Assim, selecionou-se o empacotamento CFC para representar a densidade máxima.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O empacotamento Cúbico Simples apresenta o maior volume de espaços vazios e portanto, foi utilizado para se calcular a densidade aparente mínima. Devido à movimentação de cada partícula durante sua distribuição no carregamento do leito, o empacotamento Cúbico Simples é mais provável que ocorra com as esferas encostadas nas paredes do reator.

Quando se empilha vários planos de esferas, o maior empacotamento possível passa a ser o Cúbico de Face Centrada, que foi o arranjo utilizado para definir a densidade aparente máxima. Esse arranjo é mais provável de aparecer longe das paredes do reator.

Uma vez calculadas as densidades aparentes mínima e máxima, criou-se uma equação para estimar a densidade média do leito de partículas esféricas.

A sequência da Equação 1 até a Equação 11 apresenta o passo a passo para se calcular a densidade aparente desejada. A Legenda das variáveis utilizadas é descrita ao final do artigo.

$$Vesfera (cm^3) = 4/3 \times \pi \times [DiâmetroEsfera(cm) / 2]^3 \quad (1)$$

$$DensEsfera (g/cm^3) = Massaesfera(g) / Vesfera(cm^3) \quad (2)$$

A densidade mínima do leite é aquela em que as esferas ficam perfeitamente empilhadas, umas sobre as outras, como se estivessem dentro de cubos perfeitos:

$$Vcubo (cm^3) = DiâmetroEsfera(cm)^3 \quad (3)$$

$$Dens.mín.leito (g/cm^3) = Massaesfera(g) / Vcubo (cm^3) \quad (4)$$

A densidade máxima do leite é aquela em que ocorre o maior empacotamento possível, ou seja a formação CFC (Cúbico de Face Centrada), cujo fator de empacotamento é 0,74048.

$$Dens.máx.leito (g/cm^3) = FempacCFC \times DensEsfera(g/cm^3) \quad (5)$$

$$\text{Onde: } FempacCFC = 0,74048 \quad (6)$$

Uma vez calculadas as densidades aparentes mínima e máxima, criou-se uma equação para estimar a densidade média do leite, em função da proporção entre esferas encostadas nas paredes e as esferas circundadas por outras esferas dentro do reator. Assim, a densidade esperada do leite, ou densidade aparente, que considera a inclusão dos espaços vazios, é uma proporção entre a densidade mínima e a densidade máxima. A Equação 7 apresenta a proporção obtida como mais próxima da realidade para grandes equipamentos.

$$Dens.esp.leito (g/cm^3) = 4/15 \times Dens.mín.leito + 11/15 \times Dens.máx.leito \quad (7)$$

A Equação 7 foi verificada para grandes equipamentos, com diâmetro maior que 2 metros.

Quanto menor o diâmetro do equipamento e maior a esfera, maior é o efeito da parede, de modo que a densidade mínima tenderá a aumentar levemente sua

representatividade na equação para equipamentos menores e/ou esferas maiores, conforme Equação 8 ou Equação 9.

$$\text{Dens.esp.leito (g/cm}^3\text{)} = 5/15 \times \text{Dens.mín.leito} + 10/15 \times \text{Dens.máx.leito} \quad (8)$$

ou simplificando:

$$\text{Dens.esp.leito (g/cm}^3\text{)} = 1/3 \times \text{Dens.mín.leito} + 2/3 \times \text{Dens.máx.leito} \quad (9)$$

Em geral, os materiais esféricos na indústria são caracterizados por medidas em polegadas, se visíveis, ou micrômetros, se em pó. Deve-se atentar na conversão dessas medidas para centímetros, antes de se utilizar as equações apresentadas.

$$\text{DiâmetroEsfera(cm)} = \text{Diâmetro(in)} \times 2,54 \quad (10)$$

ou

$$\text{DiâmetroEsfera(cm)} = \text{Diâmetro(}\mu\text{m)} / 10000 \quad (11)$$

Tabela 1. Exemplo para esfera de cerâmica: ¼ de polegada; Massa = 0,244g.

Eq.10: $\text{DiâmetroEsfera(cm)} = 1/4 \text{ (in)} \times 2,54 \text{ (cm/in)} = 0,635 \text{ cm}$
Eq.1: $\text{Vesfera (cm}^3\text{)} = 4/3 \times 3,1416 \times (0,635 / 2)^3 = 0,134 \text{ cm}^3$
Eq.2: $\text{DensEsfera (g/cm}^3\text{)} = 0,244\text{(g)} / 0,134 \text{ (cm}^3\text{)} = 1,82 \text{ g/cm}^3$
Eq.3: $\text{Vcubo (cm}^3\text{)} = 0,635\text{(cm)}^3 = 0,256 \text{ cm}^3$
Eq.4: $\text{Dens.mín.leito (g/cm}^3\text{)} = 0,244\text{(g)} / 0,256 \text{ (cm}^3\text{)} = 0,953 \text{ g/cm}^3$
Eq.5 e 6: $\text{Dens.máx.leito (g/cm}^3\text{)} = 0,74048 \times 1,82 = 1,35 \text{ g/cm}^3$
Eq.7: $\text{Dens.esp.leito (g/cm}^3\text{)} = 4/15 \times 0,953 + 11/15 \times 1,35 = 1,24 \text{ g/cm}^3$
ou Eq.9: $\text{Dens.esp.leito (g/cm}^3\text{)} = 1/3 \times 0,953 + 2/3 \times 1,35 = 1,22 \text{ g/cm}^3$

O desenvolvimento descrito também pode ser utilizado para catalisadores extremamente pequenos, que visualmente parecem pó, desde que as partículas sejam esféricas, pois as proporções esféricas continuam válidas. É o caso do catalisador de algumas Unidades de Reforma Catalítica e de Craqueamento Catalítico

Fluidizado. A Tabela 2 apresenta um exemplo quando se trabalha com esferas bem pequenas.

Tabela 2. Exemplo para catalisador em pó: 500 μ m; Massa = 0,0000547g.

$$\text{Eq. 11: DiâmetroEsfera(cm)} = 500\mu\text{m} / 10000 \text{ (cm}/\mu\text{m)} = 0,0500 \text{ cm}$$

$$\text{Eq.1: } V_{\text{sfera}} \text{ (cm}^3\text{)} = \frac{4}{3} \times 3,1416 \times (0,0500 / 2)^3 = 0,0000654 \text{ cm}^3$$

$$\text{Eq.2: } \text{DensEsfera (g/cm}^3\text{)} = 0,0000547\text{(g)} / 0,0000654 \text{ (cm}^3\text{)} = 0,836 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{Eq.3: } V_{\text{cubo}} \text{ (cm}^3\text{)} = 0,0500\text{(cm)}^3 = 0,000125 \text{ cm}^3$$

$$\text{Eq.4: } \text{Dens.mín.leito (g/cm}^3\text{)} = 0,0000547\text{(g)} / 0,000125 \text{ (cm}^3\text{)} = 0,438 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{Eq.5 e 6: } \text{Dens.máx.leito (g/cm}^3\text{)} = 0,74048 \times 0,836 = 0,619 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{Eq.7: } \text{Dens.esp.leito (g/cm}^3\text{)} = \frac{4}{15} \times 0,438 + \frac{11}{15} \times 0,619 = 0,571 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{ou Eq.9: } \text{Dens.esp.leito (g/cm}^3\text{)} = \frac{1}{3} \times 0,438 + \frac{2}{3} \times 0,619 = 0,559 \text{ g/cm}^3$$

CONCLUSÃO

A Teoria das Células Cúbicas, muito utilizada para definir posicionamento de átomos de Ferro e Carbono em estruturas de aço e prever a cristalização de metais pela Ciência dos Materiais, pode também ser utilizada para definir o empacotamento de bolas de alumina, adsorvedores e catalisadores esféricos, mesmo em pó. Isto porque essa teoria independe do tamanho da esfera, inclusive para esferas não percebidas a olho nu.

Concluiu-se que o objetivo deste trabalho foi atingido. A partir da densidade da esfera, foi possível calcular o empacotamento máximo e o mínimo com precisão e obter uma equação simplificada para o cálculo da densidade aparente média, que pode ser aplicada para uma grande variedade de insumos esféricos carregados em equipamentos industriais.

O resultado da equação obtida facilita o planejamento com precisão, aumenta a confiabilidade no carregamento, reduz sobras com a otimização de compras dos insumos, simplifica a logística e minimiza estoque, gerando redução de custos de grande valor para a Indústria Química.

LEGENDA

DensEsfera = densidade da esfera

Dens.esp.leito = densidade esperada do leito

Dens.máx.leito = densidade máxima do leito

Dens.mín.leito = densidade mínima do leito

DiâmetroEsfera = diâmetro da esfera

FempacCFC = fator de empacotamento Cúbico de Face Centrada adimensional

Massaesfera = massa da esfera

Vcubo = volume do cubo no qual 1 esfera está inserida

Vesfera = volume da esfera

Π = Número Pi = 3,1416

AGRADECIMENTOS

À minha filha Nicole.

REFERÊNCIAS

- [1] TAFETE, Gedefaw Asmare, HABTU, Nigus Gabbiye. **Reactor configuration, operations and structural catalyst design in process intensification of catalytic reactors: A review**. Chemical Engineering and Processing - Process Intensification. Volume 184. Ethiopia: Elsevier, 2023.
- [2] KURI, Sebastião Elias. **Materiais para a Indústria Química**. Material de Estudo da Disciplina do 8º Período do Curso de Graduação em Engenharia Química da UFSCar. São Carlos: UFSCar, 2002.
- [3] TARR, Martin. **Metal Basics**. Disponível em: <https://www.mem50212.com/MDME/focus/materials/enmat/LECTURES/Lecture-04-Metal-Crystals/webpages/metal-basics-ami-ac-uk.html>. Acesso em: 07 set. 2024.

CUBIC CELL MODEL APPLIED TO REACTOR LOADING WITH SPHERICAL PARTICLES

Noemia Elaine Godoi Fermoselli

noemiafer@yahoo.com

ABSTRACT

The Chemical Industry works with large volumes of catalysts and other particles loaded into reactors and other equipment. The objective of this work was to present a practical and effortless way to estimate the bulk density of these beds, what means, the density considering the empty spaces among the particles, since they are spherical, based on the theory of Cubic Cell Structures. This paper evaluated the Simple Cubic and the Face Centered Cubic models to establish a proportion between both and developed an equation to calculate the average bulk density. The results can apply to spherical raw material particles of any size, even those not visible or powders, including a wide variety of fluidized bed catalysts, alumina spheres, and other structured elements. Accurate planning for loading these inputs into equipment reduces waste, simplifies Logistics, and minimize inventory, given significant savings for Industry.

Keywords: POWDER CATALYST, ALUMINA SPHERES, BULK DENSITY, CATALYTIC CRACKING AND REFORMING, HYDROTREATING.