UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE OPERAÇÕES E PROJETOS INDUSTRIAIS

# Software de modelagem e simulação dinâmica de deposição em trocadores de calor

Nome: *Pedro Henrique de Farias Machado*

Disciplina: *Aplicações Computacionais em Engenharia de Processos*
Professores: *André Hemerly e André Nahes*
Data: *24 de Janeiro de 2023*

## Proposta

Desenvolver um programa capaz de prever os impactos da deposição em um trocador de calor casco e tubo ao longo do tempo, dado os seguintes dados de entrada:

- Dados geométricos do trocador de calor
- Dados de campo das correntes quente e fria ao longo do tempo
- Tempo total desde a partida para estimação das temperaturas de saída, do coeficiente global de transferência de calor e da carga térmica do equipamento ao longo do tempo (opcional)

Tomar como modelo de ajuste do fator de sujeira (*fouling factor*) a seguinte função exponencial:

$$R_{ft} = \widehat{R}_{ft}^{\infty} - (\widehat{R}_{ft}^{\infty} - \widehat{R}_{ft}^{0})e^{-\widehat{S}t} \tag{1}$$

O resultado deve conter:

- Os parâmetros ajustados ($\widehat{R}_{ft}^{\infty}$, $\widehat{R}_{ft}^{0}$ e $\widehat{S}$) a partir dos dados de campo
- Um gráfico do fator de sujeira obtido pelo modelo ajustado e pelos dados de campo, junto com o valor da métrica adotada para o ajuste apresentada junto ao gráfico
- Se o tempo total for fornecido, gráficos contendo os perfils das temperaturas de saída das correntes, do coeficiente global de transferência de calor e da carga térmica do equipamento ao longo do tempo

## Modelagem

O fator de sujeira total pode ser determinado da seguinte forma:

$$R_{f,T} = \frac{1}{U_d} - \frac{1}{U_c} \tag{2}$$

Onde $U_d$ e $U_c$ são, respectivamente, o coeficiente global de transferência de calor sujo (com deposição, *dirty*) e limpo (sem deposição, *clean*).

O $U_c$ pode ser determinado da seguinte forma, tomando como base a área externa:

$$U_c = \frac{1}{\frac{1}{h_i}\frac{D_{t,e}}{D_{t,i}} + \frac{D_{t,e}\ln(D_{t,e}/D_{t,i})}{2k_{tube}} + \frac{1}{h_e}} \tag{3}$$

Onde:

- $h_i$ e $h_e$ são, respectivamente, o coeficiente de convecção do lado dos tubos e do lado do casco
- $D_{t,i}$ e $D_{t,e}$ são, respectivamente, o diâmetro interno e externo dos tubos
- $k_{tube}$ é a condutividade térmica dos tubos

Para o $h_i$ utilizaremos o modelo de Dittus-Boelter, onde n = 0.4 foi usado para aquecimento e n = 0.3 para resfriamento:

$$h_i = 0.023Re^{0.8}Pr^n \tag{4}$$

Sabendo que:

$$Re = \frac{Dv\rho}{\mu} \tag{5}$$

e:

$$Pr = \frac{Cp\mu}{k} \tag{6}$$

Já para o $h_e$ utilizaremos o modelo de Kern, onde desconsideraremos a diferença entre a viscosidade média e a viscosidade na parede ($\mu = \mu_w$):

$$h_e = 0.36Re^{0.55}Pr^{1/3}(\mu/\mu_w)^{0.14} \tag{7}$$

Para o cálculo do número de Reynolds, é necessário definir o diâmetro equivalente associado ao escoamento do lado do casco, onde $f$ = 4 para o arranjo quadrado e $f$ = 3.46 para o arranjo triangular:

$$D_{eq} = \frac{fL_{tp}^2}{\pi D_{t,e}} - D_{t,e} \tag{8}$$

E também a área da seção transversal, para o cálculo da velocidade de escoamento:

$$A_c = \frac{D_s(L_{tp} - D_{t,e})L_{bc}}{L_{tp}} \tag{9}$$

Já o $U_d$ pode ser obtido diretamente pelos dados de campo e dados geométricos do trocador, calculando primeiro a carga térmica:

$$Q = m_h Cp_h(T_{hi} - T_{ho}) \tag{10}$$

E então o $U_d$:

$$U_d = \frac{Q}{A_T \Delta T_{LM} F_{corr}} \tag{11}$$

Onde a área total é

$$A_T = N_{tt}\,\pi\,D_{t,e}\,L_{tube} \tag{12}$$

a diferença de temperatura média logarítmica é

$$\Delta T_{LM} = \frac{\theta_2 - \theta_1}{\ln\left(\frac{\theta_2}{\theta_1}\right)} \quad p/ \quad \theta = T_h - T_c \tag{13}$$

e o fator de correção é:

$$F_{corr} = \begin{cases} \dfrac{(R^2+1)^{0.5}\ln\left(\frac{1-P}{1-RP}\right)}{(R-1)\ln\left\{\frac{2-P[R+1-(R^2+1)^{0.5}]}{2-P[R+1+(R^2+1)^{0.5}]}\right\}}, & \text{se } R \neq 1 \\ \dfrac{2^{0.5}P}{(1-P)\ln\left[\frac{2-P(2-2^{0.5})}{2-P(2+2^{0.5})}\right]}, & \text{se } R = 1 \end{cases} \tag{14}$$

Para:

$$R = \frac{Thi - Tho}{Tco - Tci} \quad e \quad P = \frac{Tco - Tci}{Thi - Tci} \tag{15}$$

Com isso podemos calcular o fator de sujeira pela equação 2. Fazendo isso para cada dado de campo fornecido, podemos estimar os parâmetros da equação 1 ao minimizarmos a soma dos quadrados da diferença entre o $R_{f,t}$ de "campo" e o do modelo exponencial, normalizados pelo dado de campo:

$$\sum_{t=0}^{\#\,of\ given\ days} \left[ \frac{\left(R_{f,given}(t) - R_{f,fitted}(t, \widehat{R}_{ft}^{\infty}, \widehat{R}_{ft}^{0}, \widehat{S})\right)^2}{R_{f,given}(t)} \right] \to 0 \tag{16}$$

## Resultados

Os resultados foram obtidos para o problema teste fornecido junto à proposta do trabalho, e se encontram na mesma pasta que este documento, sob o nome de *resultados.jpeg*. Também é possível gerar os mesmos resultados apenas executando o arquivo *program.py*, assumindo que todos os arquivos não sofreram modificação.

## Validação

A validação foi feita majoritariamente analisando o resultado da estimação, ou seja, se o ajuste aos dados experimentais estava razoável. Além disso, o arquivo *program.py* foi debugado, adicionando *breakpoints* ao final de cálculos específicos e analisando os valores obtidos para variáveis como $h_i$, $h_e$, $U_c$, $U_d$, entre outros.