



APLICAÇÃO DA TEORIA CINÉTICA GRANULAR EM RISERS DE FCC

Vítor Lopes Pereira

Projeto Final de Curso

Orientadores

Prof^o Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Fábio Pereira dos Santos, M.Sc.

Outubro de 2010

APLICAÇÃO DA TEORIA CINÉTICA GRANULAR EM RISERS DE FCC

Vítor Lopes Pereira

Projeto Final de curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

Luiz Fernando Lopes R. Silva, D.Sc.

Karolline Ropelato, D.Sc.

Raphael David A. Bacchi, M.Sc.

Orientado por:

Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Fábio Pereira dos Santos, M.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Outubro de 2010

Pereira, Vítor Lopes.

Aplicação da Teoria Cinética Granular em Risers de FCC/Vítor Lopes Pereira.

Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2005.

ix, 65; il.

(Projeto Final) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química. 2010.

Orientadores: Ricardo de Andrade Medronho e Fábio Pereira dos Santos.

1. Fluidodinâmica computacional. 2. Riser, FCC. 3. Teoria Cinética Granular. 4. Projeto Final (Graduação – UFRJ/EQ).

Dedico este trabalho a todas as pessoas que estiveram ou ainda estão presentes na minha vida, por me proporcionarem as vivências responsáveis pelo meu desenvolvimento acadêmico, profissional e social. Este trabalho é a “integral” de todas essas contribuições.

Podemos optar por nos regozijar na vida,
ou podemos optar por sermos mal humorados.
A tristeza é uma emoção válida.
Ao optar pela alegria,
não estamos negando a existência ou o valor do sofrimento.
Estamos apenas optando por não habitarmos nele emocionalmente.
A alegria é mais do que a felicidade.
A felicidade é dependente de circunstâncias externas.
A alegria se enraíza no interior.
A alegria está na convicção de que a vida é boa,
que você é bom e que ambos possuem a capacidade de melhorar.
Opte pela alegria hoje.
Opte pela alegria sempre.

Autor Desconhecido

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, **Rosana e Luiz**, por me proporcionarem a vida e a alegria de viver. Por transparecerem apoio e confiança onde havia luta e incerteza. Por estarem ao meu lado incondicionalmente.

Agradeço ao meu irmão, **Rodrigo**, por vivenciar diariamente os momentos de conquistas e dificuldades. Pelo apoio mútuo e pelo desafio naturalmente imposto de ser uma pessoa cada vez melhor para que tenha um bom exemplo.

Agradeço à minha companheira, **Sthephani**, por tornar minha vida fantástica. Por aceitar o desafio de unir dois mundos tão distintos, porém tão conexos. Por acreditar neste sonho e me doar o prazer ímpar da sua companhia ao longo desses mais de 6 anos.

Ao professor **Ricardo Medronho**, pela orientação e pelo fomento do interesse pela pesquisa científica. Por me apresentar ao tensor de Reynolds, abrindo as portas da técnica de CFD para o meu mundo.

Ao meu amigo **Fábio Santos**, mais que um co-orientador, um exemplo de engenheiro e de pessoa. Sua dignidade, honestidade e comprometimento para com as suas aspirações guiarão a minha vida.

Ao professor **José Carlos Pinto**, por propiciar meus primeiros passos na Engenharia Química e me mostrar como esta carreira é fabulosa. Por me acolher não somente como seu aluno, mas como seu amigo.

Agradeço aos grandes professores que tive na Escola de Química, em especial: **Frederico Tavares, Luiz Fernando Silva, Fernando Pellegrini, Pedro Wagner, Silvia Maria Cruzeiro, Carlos Russo, Marcio Nele, Príamo Melo, Eduardo Mach, Ofélia**.

Agradeço à **Escola de Química** por me propiciar uma excelente formação acadêmica.

Agradeço aos grandes amigos que formei na escola de química, em especial: **Thiago (JAPONÊS), Matheus, André (GEPETO), Juliana (FELIZ), Marianne (MARRY), Rafael (GOMES), Tainá, Marcus, Lucilla (LUCILLE`S), Antônio (SAAAMEL`s), Andressa (MASCOTE) e Clarissa (CLAAAARISSE)**.

Agradeço aos meus companheiros de trabalho: **Phantom, Daniel Bruno (DB), Douglas (DOUGLUXO), Raphael (RAF`S), Victor (KANE`s), Rodrigo Dias (VITOR & LEO), Karolline (KAROLS), Igor (IGÃO), Sara (SARATIONS), Amanda (AMANDITA), Lucas, Hugo, Jean Paul, Maira, Carlos, Maurício, João, Felipe, Paulo, Guilherme, Phelipe, Ivan, Adriano, André (ROSSAS), Cristiano, Pilato, Vinicius, Daniel, Alexandre (ALEXPEC) e Ricardo** pelo excelente ambiente de trabalho, companheirismo, crescimento profissional e pessoal. Agradeço, em especial, o imenso apoio do Engenheiro **Jairo Zago**, de vital importância para o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço ao Engenheiro da Petrobras **Waldir Martignoni**, pelo conjunto de informações sobre o processo e a modelagem.

Resumo do Projeto Final apresentado a Escola de Química como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

APLICAÇÃO DA TEORIA CINÉTICA GRANULAR EM RISERS DE FCC

Vítor Lopes Pereira

Outubro, 2010.

Orientadores: Ricardo de Andrade Medronho, Ph. D.

Fábio Pereira dos Santos, M.Sc.

O craqueamento em leito catalítico fluidizado (FCC) visa à conversão de frações pesadas de óleo, provenientes da destilação do petróleo (gasóleo e resíduos), em produtos com maior valor agregado (gasolina e GLP). Sabe-se, atualmente, que a maioria das reações de craqueamento ocorre efetivamente no riser. Portanto, é importante se conhecer o perfil de distribuição do catalisador ao longo do mesmo. Outro aspecto de interesse neste tipo de escoamento é a determinação dos pontos mais suscetíveis à erosão, pois, devido à sua interação com os demais equipamentos, o arranjo da unidade torna-se limitado e a própria conformação do riser acaba por facilitar o agravamento do processo erosivo. CFD (Computational Fluid Dynamics) é o conjunto de ferramentas numéricas e computacionais utilizadas para resolver, visualizar e interpretar a solução das equações de balanço de *momentum*, massa e energia. Tais ferramentas lançam mão de técnicas numéricas avançadas para solucionar problemas complexos da engenharia, uma vez que esse tipo de simulação computacional é capaz de predizer fenômenos físicos e físico-químicos que ocorrem em um dado escoamento. Este trabalho teve por objetivo simular, utilizando o software FLUENT da ANSYS, o escoamento gás-sólido vertical ao longo de um riser de uma determinada unidade de FCC. Para tal, foi utilizada uma abordagem euleriana- euleriana para descrever o comportamento das fases, bem como o modelo de turbulência $k-\varepsilon$ para a fase contínua e a teoria cinética granular para a fase dispersa. Os resultados obtidos demonstram que a metodologia adotada foi capaz de capturar de maneira qualitativa os efeitos importantes para este tipo de escoamento (distribuição de sólidos, pontos de erosão, etc).

ÍNDICE

1.	INTRODUÇÃO	1
1.1.	Motivação.....	1
1.2.	Objetivo.....	1
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	2
3.	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	7
3.1.	Descrição do Processo	7
3.2.	Esquema de Refino	9
3.3.	Teoria da Fluidização.....	10
3.4.	Comportamento Pseudo-Fluido.....	15
3.5.	Fluidodinâmica Computacional	16
3.5.1.	Geração de geometria e malha.....	17
3.5.2.	Módulo de pré-processamento.....	18
3.5.3.	Solver	18
3.5.4.	Módulo de pós-processamento	19
4.	MODELAGEM MATEMÁTICA.....	20
4.1.	Equações governantes.....	21
4.2.	Turbulência	23
4.2.1.	Escala de Turbulência	24
4.2.2.	Modelagem Turbulenta	25
4.3.	Teoria Cinética granular	32
4.4.	Termos fonte	37
5.	SIMULAÇÃO	41
5.1.	Geometria.....	41

5.2.	Malha	43
5.3.	Simulação	52
5.3.1.	Parâmetros gerais	53
5.3.2.	Simulações 2D – Teste de Modelagem	54
5.3.3.	Simulação 3D	57
6.	RESULTADOS E DISCUSSÕES	60
6.1.	Convergência de Malha	60
6.2.	Estudo de Modelagem	63
6.2.1.	Tipo de modelo κ - ϵ	63
6.2.2.	Modelo de Arraste / Coeficiente de Restituição	65
6.2.3.	Viscosidade Friccional	66
6.2.4.	Coeficiente de Especularidade.....	69
6.3.	Critério de Convergência	70
6.4.	Simulação 3D.....	71
7.	CONCLUSÕES GERAIS.....	79
8.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	81

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Esquema do processo de craqueamento catalítico (SOUZA, 2004).	7
Figura 2: Esquema típico de uma refinaria.	10
Figura 3: Esquema de um leito fluidizado.	11
Figura 4: Regimes de leito fluidizado (Kunii e Levenspiel, 1990).	14
Figura 5: Seqüência com que os processos em CFD são encaminhados.	17
Figura 6: Configurações geométricas 2D e 3D do riser.	42
Figura 7: Identificação dos sub-domínios gerados.	44
Figura 8: Detalhes da malha 2D #1.	47
Figura 9: Detalhes da malha 2D #2.	47
Figura 10: Detalhes da malha 2D #3.	48
Figura 11: Detalhes da malha 2D #4.	48
Figura 12: Detalhes da malha 2D #5.	49
Figura 13: Detalhes da malha 2D #6.	49
Figura 14: Detalhes da malha 3D.	50
Figura 15: Corte central da malha 3D.	51
Figura 16: Transição entre elementos Hexa e Tetra na malha 3D.	51
Figura 17: Transição de elementos da camada de prisma na malha 3D.	52
Figura 18: Distribuição das condições de contorno ao longo do equipamento	56
Figura 19: Resposta das diferentes malhas 2D estudadas.	61
Figura 20: Resposta das diferentes malhas 2D estudadas com filtro nas malhas #1 e #2.	62
Figura 21: Diferenças observadas entre as abordagens Dispersa e Por Fase.	64
Figura 22: Diferenças observadas entre os modelos de arraste e valores para coeficientes de restituição.	65

Figura 23: Curvas de distribuição média de catalisador para diferentes.....	67
Figura 24: Tensão cisalhante média da fase dispersa prevista na parede 2D.....	68
Figura 25: Diferenças observadas para diferentes valores de coeficientes de especularidade.....	69
Figura 26: Critério de Convergência 3D #1 – Queda de pressão média.....	70
Figura 27: Critério de Convergência 3D #2 – Fração volumétrica média de catalisador.....	71
Figura 28: Contornos de fração y^+ para a fase contínua.....	72
Figura 29: Contornos de fração volumétrica média de catalisador em planos situados em diferentes alturas do equipamento.....	73
Figura 30: Distribuição radial de fração volumétrica média da fase dispersa ao longo do riser.....	74
Figura 31: Contornos da componente Y (direção axial) para a velocidade média da fase contínua ao longo do equipamento.....	75
Figura 32: Distribuição radial de velocidade média da fase dispersa ao longo do riser.....	76
Figura 33: Queda de Pressão Média ao longo do Riser.....	77
Figura 34: Contornos de Tensão Cisalhante Média da Fase Dispersa na Parede – Erosão.....	78

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1: Operação para máxima produção de GLP.	9
Tabela 2: Operação para o máximo de GASOLINA.	9
Tabela 3: Valor das constantes para as extensões multifásicas do modelo κ - ϵ	31
Tabela 4: Configuração das malhas 2D para teste.	45
Tabela 5: Configuração final da malha 3D empregada.	50
Tabela 6: Parâmetros comuns a todas as simulações (2D e 3D).	53
Tabela 7: Ordem de avaliações 2D do teste de modelagem.	55
Tabela 8: Condições de operação do equipamento para as simulações 2D.	57
Tabela 9: Condições de operação do equipamento para a simulação 3D.	57
Tabela 10: Escolhas de modelagem empregadas na simulação 3D.	58

NOMENCLATURA

LETRAS LATINAS

r_i	Fração volumétrica da fase i
U_i	Velocidade na fase i
p_i	Pressão da fase i
h_i	Entalpia específica na fase i
k_i	Energia cinética turbulenta da fase i
M	Transferência de <i>momentum</i> entre as fases
K_i	Condutividade térmica da fase i
q_i	Fluxo de calor na fase i
a	Aceleração da gravidade
C_μ	Parâmetro do modelo k- ε
$C_{1\varepsilon}$	Parâmetro do modelo k- ε
$C_{2\varepsilon}$	Parâmetro do modelo k- ε
C_{kg}	Parâmetro do modelo k- ε
$C_{3\varepsilon}$	Constante de Fechamento
g_0	Função de distribuição radial
d_s	Diâmetro de partícula, microm
e	Coefficiente de restituição
Re	Número de Reynold
T	Temperatura
G_{kg}	Produção de energia cinética turbulenta na fase gasosa
C_d	Coefficiente de arraste

LETRAS GREGAS

ρ_i	Massa específica da fase i
μ_i	Viscosidade da fase i
τ_i	Tensor tensão na fase i
λ_s	Viscosidade bulk
ε_i	Dissipação de energia cinética turbulenta na fase i
σ_k	Parâmetro do modelo k- ε .
σ_ε	Parâmetro do modelo k- ε .
Π	Termo de influência particular na fase gasosa
β	Força de arraste entre as fases
θ_s	Temperatura Granular da fase sólida
θ	Angulo entre as velocidades médias da partícula e relativa
φ	Angulo de fricção interna

SUBSCRITOS

g	Fase contínua
s	Fase dispersa
max	Máximo empacotamento
col	Efeito colisional
kin	Efeito cinemático
fr	Efeito friccional

OPERADORES

$\nabla \cdot ()$ Operador divergente

$\nabla ()$ Operador gradiente

$()^T$ Operador transposta

$\bar{()}$ Grandeza média

$\int_a^b ()$ Operador integral

$\partial () / \partial ()$ Derivada

SIGLAS

CFD Computational Fluid Dynamics

FCC Fluid Catalytic Cracking

DPM Discrete Phase Model

DDPM Dense Discrete Phase Model

1. Introdução

1.1. Motivação

O craqueamento em leito catalítico fluidizado (FCC) visa à conversão de frações pesadas de óleo, provenientes da destilação do petróleo (gasóleo e resíduos), em produtos com maior valor agregado (gasolina e GLP). Sabe-se, atualmente, que a maioria das reações de craqueamento ocorre efetivamente no riser. Portanto, é importante se conhecer o perfil de distribuição do catalisador ao longo do mesmo. Outro aspecto de interesse neste tipo escoamento é a determinação dos pontos mais suscetíveis à erosão, pois, devido à sua interação com os demais equipamentos, o arranjo da unidade torna-se limitado e a própria conformação do riser acaba por facilitar o agravamento do processo erosivo.

1.2. Objetivo

Este trabalho teve por objetivo o desenvolvimento de uma metodologia adequada para simular (utilizando o software FLUENT 12.1 da ANSYS) o escoamento gás-sólido ao longo de um riser de uma determinada unidade de FCC e capturar os efeitos erosivos sofridos pelo equipamento. Para tal, foi utilizada uma abordagem euleriana-euleriana para descrever o comportamento das fases, bem como o modelo de turbulência k- ϵ para a fase contínua e a teoria cinética granular para a fase dispersa.

2. Revisão Bibliográfica

O craqueamento em leito catalítico fluidizado (FCC - *Fluid Catalytic Cracking*) é um processo que visa à conversão de cortes pesados do óleo, provenientes da destilação do petróleo (gasóleo e resíduos), em produtos com maior valor agregado (gasolina e GLP). Em países como o Brasil, que dispõem, em seu território, de petróleos pesados de cadeia longa, a unidade de FCC é fundamental para o sucesso econômico de uma refinaria, já que esta suplementa a diferença entre a demanda por hidrocarbonetos leves e a quantidade produzida destes a partir do fracionamento do petróleo.

Na disposição de uma unidade de FCC, encontramos diversos equipamentos, tais como: regeneradores, ciclones, risers, etc. Dado que a maioria das reações de craqueamento ocorre efetivamente no riser, o entendimento do perfil de distribuição do catalisador ao longo do mesmo é muito importante na compreensão dos parâmetros úteis para a otimização da eficiência do equipamento (Rosa e Mori, 2002).

A configuração geométrica mais comum em risers geralmente apresenta duas regiões de entrada e região de saída. Na entrada inferior, a carga composta por vapor d'água e gotículas de gasóleo entra no reator. Já na entrada lateral, o catalisador é introduzido no reator, com temperatura elevada. O nome riser é dado a característica ascendente do seu escoamento interno e, portanto, é na região superior (saída) onde os gases craqueados deixam o equipamento. Um conhecimento mais detalhado do escoamento na região de contato entre catalisador e gasóleo é fundamental para o entendimento dos fenômenos que ocorrem no riser. Variáveis de processo, como, por exemplo, perda de carga, são afetadas dependendo da forma como esse contato é realizado.

Adicionalmente, esta região de contato apresenta os maiores gradientes de pressão, temperatura e concentração, já que as cargas alimentadas em cada entrada apresentam vazões, temperaturas e composições distintas (Rosa e Mori, 2002). Consequentemente, a região

trifásica é muito importante para determinar como ocorre a conversão de gásóleo, mesmo que esta leve apenas 0,1s em média para a maioria das transformações (transferências de *momentum*, massa e mudança de fase) nos primeiros metros (Souza, 2004). Ao longo dos primeiros metros do riser, as partículas quentes (em torno de 700°K) transferem energia para as outras duas fases, até que as gotículas são evaporadas, enquanto que, concomitantemente, a reação de craqueamento se inicia.

O entendimento do escoamento real é possível por técnicas experimentais modernas, como por exemplo, perfil de velocidade de catalisador e sua dependência com outros parâmetros operacionais. Parssinen e Zhu (2001) demonstraram que o perfil de velocidade é extremamente dependente da geometria e da vazão de catalisador, e verificaram que o escorregamento das partículas na parede não ocorre em todas as condições operacionais. Subseqüentemente ao trabalho de Parssinen e Zhu, outros pesquisadores concluíram que outros parâmetros afetavam o escoamento, como distribuição de partícula, e diferença de densidade entre as fases (Vivek V.Ranade, 1999).

Em geral, duas abordagens são utilizadas para modelar escoamentos multifásicos: a Lagrangeana e a Euleriana. Na abordagem Lagrangeana as partículas são tratadas individualmente, isto é, as equações de equilíbrio são resolvidas para cada partícula e dispõe-se de dois métodos de solução: Trajetória (*Particle Tracking*) e Modelo de Fase Discreta (*Discrete Phase Model - DPM*).

O primeiro método computa a trajetória executada por uma partícula. No entanto, negligência os termos de interação partícula partícula. Consequentemente, esta metodologia tem sua utilização restrita a sistemas diluídos (< 1% em fração volumétrica de sólidos).

Para sistemas ainda diluídos, mas que apresentam contribuição volumétrica de sólidos maior que 1%, os efeitos de colisão partícula partícula se tornam intensos e acabam por dominar o transporte e a dispersão de *momentum*. Em situações como esta, recomenda-se que

seja utilizada a modelagem DPM, uma vez que ela contabiliza as alterações nas trajetórias das partículas acarretadas pelos choques.

Ainda assim, o manual do software utilizado (*FLUENT 12.1 Solver Theory*, 2010) recomenda que esta metodologia não seja empregada quando a fração volumétrica de sólidos extrapolar o valor de 10% em qualquer ponto do domínio discretizado. Fundamentalmente, a abordagem Lagrangeana parte da hipótese de que a fase dispersa está suficientemente diluída tal que, tanto as interações entre as partículas, como os efeitos das mesmas sobre a fase contínua são negligenciáveis. Este é um fator limitante para o emprego desta abordagem na resolução de escoamentos gás-sólido densos.

Pelas limitações da modelagem Lagrangeana acima apresentadas, a abordagem Euleriana é muito empregada na simulação de risers. A sua formulação para um escoamento gás-sólido considera que tanto a fase gás quanto a fase granular são contínuas interpenetrantes. As equações utilizadas neste caso são generalizações da equação de Navier-Stokes para meios interativos. Diferentemente da abordagem Lagrangeana, onde é possível trabalhar com uma distribuição de tamanhos de partícula, o escoamento Euleriano considera que a fase sólida possui um único diâmetro e uma única densidade representativos. Ou seja, para inserir uma distribuição de partículas via Euler, deve-se inserir diversos pseudo-fluidos representando cada classe de tamanho de partícula desejada, utilizando a equação de balanço populacional.

Sinclair et al. (1989) propuseram uma modelagem tridimensional e bifásica para o escoamento gás-sólido em linhas verticais, utilizando abordagem euleriana. Diversos autores como Pita et al. (1993), Nieuwland et al. (1996) e Samuelsberg et al. (1996) estenderam este trabalho e investigaram o escoamento gás-sólido em risers. No entanto, todos os estudos acima mencionados foram baseados em modelos laminares para a fase particulada.

Gao et al. (1999) realizaram um estudo considerando o escoamento turbulento das partículas, adaptando o modelo de turbulência κ - ϵ para a fase granular. A idéia apresentada foi inserir um termo κ_p que representasse a energia cinética turbulenta das partículas. Os resultados obtidos eram promissores, entretanto, a modelagem não era capaz de computar efeitos de colisão das partículas que estão diretamente relacionados com a recirculação das partículas na parede.

Na mesma década, surgia o conceito de teoria cinética granular desenvolvido por Gidaspow (1994). De todas as tentativas realizadas até então para formular o escoamento da fase particulada, a teoria cinética granular é a que apresenta o maior sucesso e amplitude de aplicações. A TCG é basicamente uma extensão para o escoamento granular denso da teoria clássica de cinética dos gases descrita por Chapman et al. (1970).

Ao modelar a energia cinética turbulenta da fase particulada, κ_p , através da TCG, é possível contabilizar os efeitos gerados pelas colisões partícula-partícula. A partir de equações que são funções da flutuação da velocidade e da fração volumétrica da fase dispersa, diversas propriedades inerentes a fluidos são calculadas para a fase sólida, tais como: viscosidade, pressão (semelhante a uma equação de estado) e temperatura granular.

Em 1999, Vivek V.RANADE propôs simular o escoamento bifásico, utilizando a teoria cinética granular para cálculo da viscosidade dinâmica das partículas. Com o interesse apenas de avaliar a relação da velocidade gás de arraste e densidade de sólidos, o autor excluiu efeitos geométricos ao realizar as suas simulações em um domínio bidimensional. Embora os resultados indicassem boa previsão da influência do diâmetro das partículas e da diferença de densidade entre as fases, esta abordagem não foi capaz de captar o fluxo descendente das partículas para alto fluxo de catalisador.

Uma descrição com mais de um tamanho de partícula aplicando a teoria cinética foi proposta por Jenkins e Mancini (Gidaspow apud Jenkins e Mancini) e muito

utilizada subsequentemente. Mathiense, Solberg, e Hjertager (2000) estudaram a hidrodinâmica do escoamento, utilizando vários tamanhos de partícula. Em 2003, Huilin e Gidaspow propuseram um novo modelo fluidodinâmico com temperatura granular para cada fase. Essa modelagem conseguiu prever adequadamente a existência de um regime core-annular, a recirculação de partículas e a distribuição de sólidos ao longo do reator.

3. Fundamentação Teórica

3.1. Descrição do Processo

O craqueamento em leito catalítico fluidizado (FCC - *Fluid Catalytic Cracking*) é um processo que visa à conversão de cortes pesados do óleo, provenientes da destilação do petróleo (gasóleo e resíduos), em produtos com maior valor agregado (gasolina e GLP). Em países como o Brasil, que dispõem, em seu território, de petróleos pesados de cadeia longa, a unidade de FCC é fundamental para o sucesso econômico de uma refinaria, já que esta suplementa a diferença entre a demanda por hidrocarbonetos leves e a quantidade produzida destes a partir do fracionamento do petróleo. A Figura 1 mostra um esquema do processo de craqueamento catalítico.

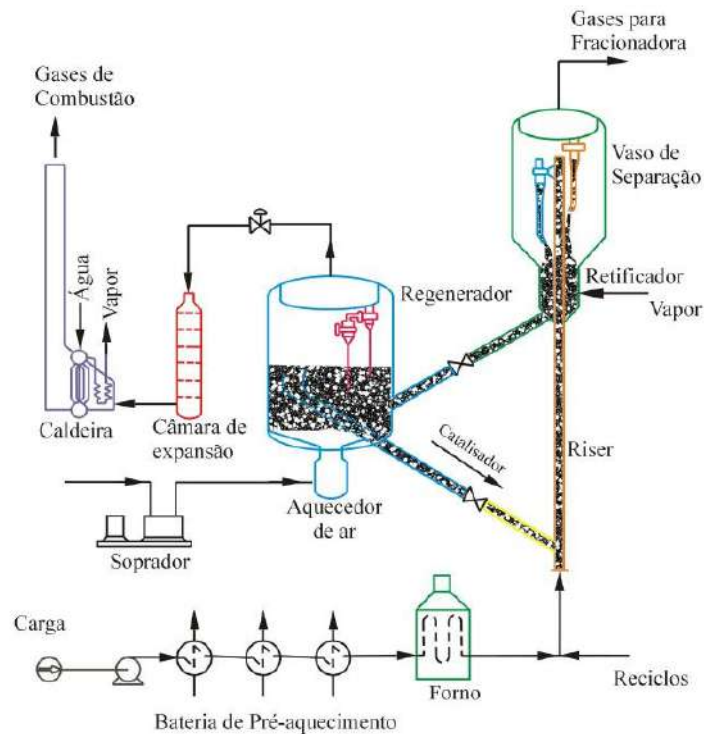


Figura 1: Esquema do processo de craqueamento catalítico (SOUZA, 2004).

Fundamentalmente, o processo consiste na quebra de moléculas pesadas pelo emprego de catalisadores à altas temperaturas. Além de acelerarem o processo de craqueamento, estes aluminos-silicatos são responsáveis por manter a seletividade do processo, limitando a formação de compostos indesejáveis.

Ainda assim, durante o processo existe a formação de coque, que provoca a desativação do catalisador, reduzindo a área de contato disponível para transformação dos reagentes. Portanto, se faz necessária a retirada do catalisador do vaso reacional para um regenerador, onde o coque formado na conversão será queimado para que seja restabelecida a atividade desejada. Esse conjunto regenerador e reator é denominado conversor.

Os produtos gerados no reator são encaminhados para uma torre de fracionamento, onde há uma separação primária dos cortes. No topo da torre de destilação sai uma corrente gasosa com nafta e hidrocarbonetos leves, no corte lateral são obtidos produtos óleos leves semelhantes ao diesel como o Óleo Leve de Reciclo (Light-Cycle Oil-LCO) e pelo fundo da torre produz-se óleo pesado, bastante denso, denominado resíduo de craqueamento.

Por fim, os gases de topo são condensados parcialmente e encaminhados para seção de recuperação de gases, através de operações de compressão e absorção. Em seguida, as correntes gasosas são enviadas à seção de tratamento, para que haja redução dos teores de enxofre nos produtos.

Os gases provenientes da queima de coque são direcionados para recuperadores de calor a fim de aproveitar todo potencial energético da combustão e reduzindo a temperatura dos gases antes de serem enviados para a atmosfera.

As tabelas a seguir representam o rendimento típico do processo de craqueamento em relação à carga fresca quando a unidade opera maximizando a produção de GLP (Tabela 1) ou de gasolina (Tabela 2), craqueando gasóleo puro.

Tabela 1: Operação para máxima produção de GLP.

CORRENTE	% VOLUME	% PESO
CARGA FRESCA	100	100
GÁS COMBUSTÍVEL	-	8,04
GÁS LIQUEFEITO	39,75	24
GASOLINA (NAFTA)	52,5	44,21
DIESEL DE FCC (LCO)	9,5	10,25
ÓLEO DECANTADO	5,5	6,7
COQUE	-	6,8

Tabela 2: Operação para o máximo de GASOLINA.

CORRENTE	% VOLUME	% PESO
CARGA FRESCA	100	100
GÁS COMBUSTÍVEL	-	4,3
GÁS LIQUEFEITO	28,9	17,9
GASOLINA (NAFTA)	65,2	53,7
DIESEL DE FCC (LCO)	10	11,7
ÓLEO DECANTADO	5	6
COQUE	-	6,4

3.2. Esquema de Refino

O esquema apresentado na Figura 2 ilustra as etapas tipicamente presentes nas refinarias do país. Basicamente, o sistema é composto por uma etapa de destilação atmosférica, seguida por uma etapa de destilação a vácuo, uma etapa de craqueamento

catalítico (FCC) e, por último, uma unidade de coqueamento, responsável por transformar porções de baixo custo de venda em produtos de maior valor agregado.

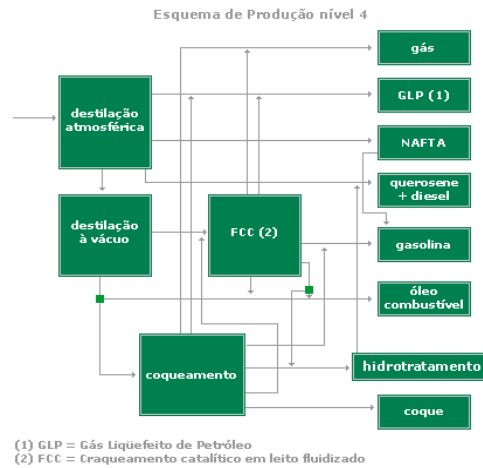


Figura 2: Esquema típico de uma refinaria.

3.3. Teoria da Fluidização

A operação unitária de fluidização baseia-se, fundamentalmente, na circulação de sólidos juntamente com um fluido de trabalho (gás ou líquido), impedindo a existência de pontos muito ativos ou de regiões estagnadas no leito; proporcionando também um maior contato superficial entre os sólidos e o fluido, favorecendo a transferência de massa e calor. Consequentemente, este processo apresenta grande aplicação industrial.

A principal vantagem de um leito fluidizado, quando comparado ao leito fixo, diz respeito ao favorecimento de reações químicas (catalíticas e não catalíticas) promovido pelo maior contato superficial entre as fases. Em geral, as velocidades de reação obtidas em leito fluidizado são muito maiores que as velocidades de reação observadas em leito fixo.

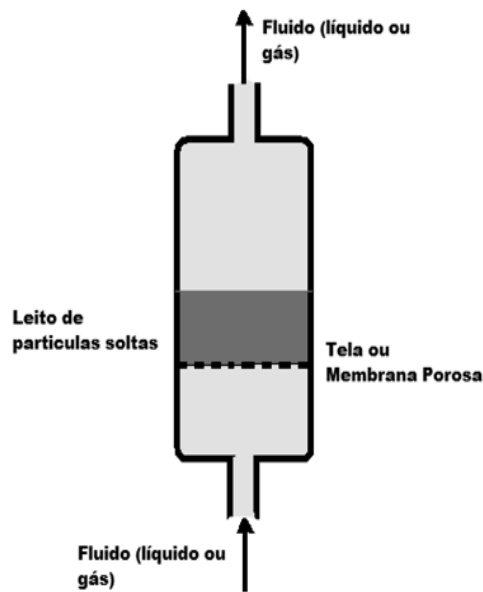


Figura 3: Esquema de um leito fluidizado.

Além das vantagens já mencionadas, outros pontos de destaque corriqueiramente associados aos leitos fluidizados são:

- Fácil escoamento em dutos, pois os sólidos comportam-se como fluido;
- Favorecimento de transporte de energia devido a fluidez;
- Aumento dos coeficientes de transferência de calor e massa, devido ao aumento de condutância e uniformidade da temperatura;
- Coeficientes de transferência de calor entre o leito e paredes do equipamento (ou tubos imersos) são extremamente favoráveis.

No entanto, estes leitos também apresentam algumas desvantagens quando comparados aos leitos fixos. Entre elas, destacam-se:

- Impossível manter um gradiente axial de temperatura e concentração, impossibilitando o favorecimento de uma reação específica no caso de reações múltiplas;

- Difícil cálculo do tempo de residência médio, não sendo possível pré-fixar uma posição da partícula;
- Atrito severo, ocasionando produção de pó, tornando-se necessário a reposição constante de pó e equipamentos de limpeza de gás na saída, envolvendo aumento de custo do processo;
- Erosão do equipamento devido a freqüente impacto dos sólidos;
- Consumo de energia devido a alta perda de carga (requer alta velocidade do fluido);
- Tamanho do equipamento maior que o leito fixo (devido a expansão do leito).

Uma das maneiras mais comuns de classificar os leitos catalíticos é considerando o comportamento dinâmico do mesmo, ou seja, distinguindo sua característica de acordo com o regime de trabalho.

O leito tipo fluidizado opera com velocidades entre 0,1 m/s e 12 m/s e diâmetro médio de partícula de 80 micra. Já o leito tipo teeser trabalha com velocidades um pouco maiores (variando entre 1,5 m/s e 12 m/s) e diâmetro de partícula médio de 0,25 mm. Para o leito tipo jorro, trabalha-se com velocidades entre 0,3 m/s e 1,8 m/s e com diâmetros de partícula entre 2,5 mm e 6,4 mm (Kunii e Levenspiel, 1990).

Geralmente, em um leito fluidizado, a variável mais significativa é a eficiência de contato entre as fases. No caso específico de FCC, este contato depende diretamente do regime de fluxo interno do leito, o qual apresenta forte correlação com o diâmetro, a densidade e a forma da partícula, bem como a densidade, a viscosidade e a velocidade média do fluido de trabalho, além da geometria e da arquitetura do Riser.

Os leitos fluidizados, de maneira geral, apresentam seis regimes de fluidização distintos, dependendo da velocidade de escoamento do gás.

Quando um fluido passa ascendentemente através de um leito de partículas finas a uma baixa vazão, o fluido apenas percola pelos espaços entre as partículas estacionadas. Este leito é dito fixo (ainda não está fluidizado) e está exposto na Figura 4 (a).

Com o aumento da vazão, atinge-se uma condição em que todas as partículas estão suspensas pelo fluxo ascendente do fluido. Neste ponto, a força de arraste se contrabalança com o peso da fase sólida, as forças verticais desaparecem e a pressão é contabilizada apenas pelo peso do fluido e das partículas. O leito encontra-se em mínima fluidização, como sugere a Figura 4 (b).

Neste estado, um incremento realizado de maneira suave na velocidade mínima de fluidização acarreta o surgimento de bolhas no escoamento devido à instabilidade. Neste caso, o leito não se expande significativamente, mantendo o seu volume próximo ao volume do estado de mínima fluidização, como sugere a Figura 4 (c). Este leito é chamado de borbulhante ou agressivo.

Quando as partículas finas são fluidizadas a uma vazão de gás suficientemente alta, a velocidade terminal dos sólidos é excedida, as bolhas formadas no leito agressivo começam a coalescer, aumentando a altura da coluna de leito fluidizado e formando vazios de gás. As partículas podem então deslizar por estes vazios e por regiões de menores velocidades próximas à parede. Esse comportamento é representado pela Figura 4 (d) e denominado leito fluidizado turbulento ou intermitente.

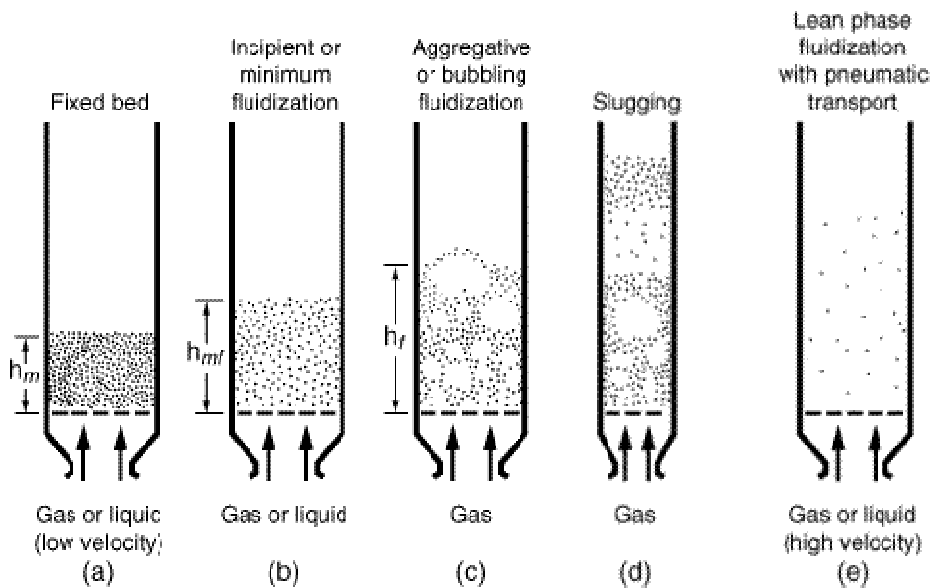


Figura 4: Regimes de leito fluidizado (Kunii e Levenspiel, 1990).

O último regime observado ocorre quando a velocidade é tão alta que as partículas são arrastadas por transporte pneumático para fora do leito, caracterizando um estado fluidizado disperso – Figura 4 (e). Para este tipo de regime, é improvável a existência de uma operação estacionária, uma vez que ocorre a formação dos chamados clusters (aglomerados menores de partículas recirculando em um determinado ponto) e o arrasto de sólidos.

Dada a importância da passagem das partículas de catalisador por colunas regeneradoras afim de promover a manutenção da sua atividade, este tipo de regime, que permite que as partículas deixem o leito e sejam recirculadas, é utilizado em unidades de FCC (Bastos, 2005). No entanto, como descrito, as velocidades observadas em um transporte pneumático são as mais altas possíveis que, associadas ao escoamento do tipo gás-sólido, maximizam o processo erosivo.

3.4. Comportamento Pseudo-Fluido

Historicamente, o escoamento em leito fluidizado apresenta diversas linhas de modelagem, todas contendo aproximações para as interferências que uma fase exerce sobre outra. Uma informação importante e fundamental para escolha da abordagem matemática a ser usada é o comportamento pseudofluido que as partículas adquirem ao serem fluidizadas, ou seja, as partículas passam a apresentar tanto propriedades (viscosidade, difusividade, etc...), como comportamento dinâmico semelhante aos dos fluidos. Conseqüentemente, o tratamento matemático da fase particulada como um pseudofluido (abordagem Euleriana) para o escoamento em leitos fluidizados não está muito longe da observação do comportamento real desta fase.

A abordagem Euleriana pode ser correntemente empregada para escoamentos densos (suspensões com altas concentrações de partículas), pois resolve um conjunto de equações de conservação para cada uma das fases (inclusive a particulada). A principal dificuldade associada a esta abordagem está em identificar as propriedades reológicas (viscosidade) da fase sólida. Já a modelagem Lagrangeana trata cada partícula individualmente, resolvendo a Segunda Lei de Newton (balanço de forças) para cada unidade, colocando o peso da perda de quantidade de movimento das partículas por choque em um coeficiente de restituição (e). Ademais, essa abordagem contabiliza muito bem o efeito da fase fluida sobre fase particulada, contudo, essa modelagem não é recomendada para problemas onde a quantidade de partículas é grande (ANSYS, 2010).

Assumida a hipótese do tratamento das partículas como pseudofluidos, propriedades físicas antes associadas apenas aos fluidos são “impostas” às partículas. No entanto, ao considerar este tratamento, há um surgimento natural de dificuldades sobre como determinar estas propriedades. Especificamente para a modelagem fluidodinâmica, por exemplo, uma propriedade importante e indefinida para a fase particulada é a viscosidade dinâmica.

Ao modelar a fase dispersa como um pseudofluido, aconselha-se a utilização de um valor bem pequeno de viscosidade sólida para escoamentos diluídos. Esta sugestão é pertinente, dado que o fator predominante no escoamento das partículas é contabilizado pelos efeitos interfásicos causados pelo arraste e pela turbulência (dispersão turbulenta). Para escoamentos densos, com alta porosidade, recomenda-se a utilização de valores altos de viscosidade sólida, para representar a dificuldade de mobilidade do escoamento.

3.5. Fluidodinâmica Computacional

CFD (Computational fluid dynamics) é o conjunto de ferramentas numéricas e computacionais utilizadas para resolver, visualizar e interpretar a solução das equações de balanço de *momentum*, massa e energia. Tais ferramentas lançam mão de técnicas numéricas avançadas para solucionar problemas complexos da engenharia, uma vez que esse tipo de simulação computacional é capaz de prever fenômenos físicos e físico-químicos que ocorrem em um dado escoamento.

O desenvolvimento dos computadores tornou viável a aplicação dessas técnicas em simulações industriais, pois o aumento do poder computacional permite dar maior veracidade aos modelos matemáticos disponíveis, tanto na complexidade geométrica quanto na fenomenologia do problema. Por isso, o campo de aplicação de CFD, hoje, é bem vasto.

Como exemplos de aplicações corriqueiras em CFD podemos citar: aerodinâmica de meios de transporte, simulação de equipamentos industriais, estudos ambientais e meteorológicos, entre outros.

Os softwares comerciais de CFD são geralmente fragmentados em quatro módulos distintos, cada um referente a uma das etapas características deste tipo de simulação:

- Gerador de geometria e malha;

- Módulo de pré-processamento;
- Solver;
- Módulo de pós-processamento.

A Figura 5 representa a seqüência com que os processos de simulação em CFD são encaminhados:

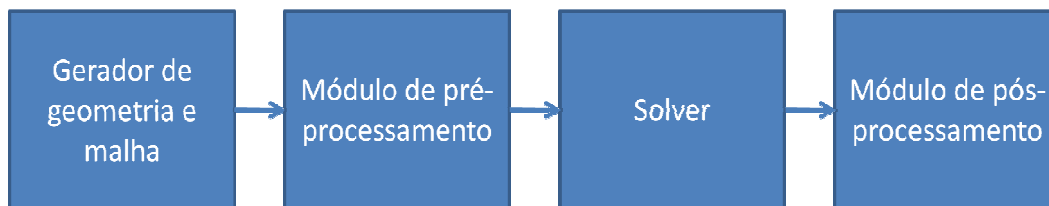


Figura 5: Seqüência com que os processos em CFD são encaminhados.

3.5.1. Geração de geometria e malha

A etapa inicial para realizar a simulação de um escoamento via CFD é determinar e gerar o domínio (2D, 3D, fluido, sólido ou poroso) onde se busca a solução. Neste momento, para que se escolha um domínio representativo ao problema, é muito importante levar em consideração se as condições de contorno para o volume selecionado são conhecidas.

Uma vez escolhido o domínio (ou os domínios) e determinadas as regiões de contorno, o próximo passo é gerar a malha de trabalho, ou seja, discretizar este volume de controle em uma série de elementos, onde será resolvido o sistema de equações de balanço. Interessante salientar a importância de uma malha representativa para garantir a qualidade da resposta desejada, ainda que a geração de malha esteja se tornando cada vez mais automática e robusta.

3.5.2. Módulo de pré-processamento

Esta é a etapa onde são especificadas as configurações de simulação, tais como propriedades físicas e modelos matemáticos (turbulência, multifásico, etc...) coerentes com o tipo de escoamento a ser estudado. Neste momento também são definidas as condições de contorno e as técnicas numéricas de resolução mais adequadas à simulação.

3.5.3. Solver

Dado que as equações de conservação envolvidas na resolução de um problema de engenharia são tipicamente diferenciais parciais (EDP) não lineares (impossíveis de serem resolvidas analiticamente dependendo da complexidade do caso avaliado), torna-se necessário aplicar técnicas numéricas para atingir a solução do sistema.

A técnica de CFD se baseia no emprego do método dos volumes finitos, onde, fundamentalmente, as EDPs são integradas no volume de controle (satisfazendo as leis básicas de conservação) e posteriormente convertidas em equações algébricas lineares para cada volume discretizado.

As soluções para essas equações algébricas são iterativas, portanto, atingir a solução final depende de uma série de critérios que são estipulados na etapa anterior de simulação (pré-processamento). Geralmente este critério está relacionado com um determinado valor de resíduo médio mínimo. Resumindo, o solver passa pelas seguintes etapas:

- Aproximação de incógnitas para funções simples (aproximação das derivadas);
- Discretização, pela substituição das aproximações citadas acima na equação de transporte com subsequente manipulação;
- Linearização do sistema de equações algébricas resultante;

- Solução das equações algébricas lineares.
- Avaliação do resíduo médio mínimo.

3.5.4. Módulo de pós-processamento

Nesta etapa, utiliza-se um software de visualização científica para avaliar os resultados obtidos numericamente. Com esta ferramenta, é possível obter resultados pontuais, vetoriais, ou, até mesmo, animações complexas, facilitando assim o entendimento dos fenômenos físicos presentes na simulação, e viabilizando a identificação da veracidade dos resultados obtidos.

As principais características desta etapa final da simulação são: capacidade de visualizar a geometria, a malha, gráficos de vetores, gráficos de contorno, iso-superfícies, iso-volumes, linhas de correntes, trajetória de partículas e elaborar vídeo.

4. Modelagem Matemática

Nesta seção, são apresentadas algumas propostas de modelagem matemática para prever o escoamento gás-sólido ao longo de um Riser. Serão descritas as equações de conservação de massa, energia e *momentum* utilizadas; modelos fenomenológicos e de fechamento. Para determinar qual a proposta mais promissora, um estudo sobre as possíveis modelagens será apresentado no capítulo 5.

Conforme apresentado e discutido nos capítulos 2 e 3, a boa aproximação do comportamento pseudofluido para a fase particulada em leitos fluidizados e as limitações lagrangeanas para escoamentos densos acarretaram na escolha da abordagem euleriana para a realização das simulações numéricas. Ainda assim, embora o escoamento real observado seja trifásico, as simulações realizadas neste projeto assumiram um comportamento bifásico (catalisador e gás-óleo), uma vez que, segundo a literatura, esta abordagem representa de forma adequada o fenômeno (Rosa e Mori, 2002).

Desta maneira, afim de determinar as propriedades como, por exemplo, pressão de sólido e viscosidade sólida para a fase dispersa, utilizou-se a teoria cinética granular. Quanto ao modelo de turbulência, foi escolhido o modelo κ - ϵ . No entanto, este modelo apresenta três versões distintas para casos multifásicos eulerianos: Mistura, Disperso e Por Fase. Testes foram realizados para determinar a qual versão do modelo que melhor representava a física real do escoamento. Além disso, para representar o troca de *momentum* entre as fases, um termo fonte representando a força de arraste foi utilizado nas equações de *momentum*. Neste estudo, dois modelos para o arraste de sólido foram testados: Gidaspow e O'Brien. Testes foram realizados, alterando simultaneamente a abordagem de arraste e os valores para os coeficientes de restituição. Conforme encontrado na literatura, (Gao, 2009; Hartge, 2009) os termos fontes referentes às forças de massa virtual e “lift” possuem contribuição

insignificante, dado que o escoamento é dominado pelas forças de arraste e, portanto, são desconsiderados. O presente estudo também utilizou esta abordagem. Para este tipo de escoamento, termos referentes à transferência de massa entre as fases não são aplicáveis.

4.1. Equações governantes

As equações de conservação de massa, energia e *momentum* para cada uma das fases (gasosa e particulada) são descritas abaixo:

- **Equação da Continuidade**

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

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

Onde r_i , ρ_i e U_i representam a fração volumétrica, a massa específica e a velocidade da fase i (g representa a fase gasosa e s representa a fase sólida), respectivamente.

- **Equação de Energia**

$$\frac{\partial(r_g \rho_g h_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_g \rho_g \mathbf{U}_g h_g) = k_g \alpha_g \frac{\partial p_g}{\partial t} + \boldsymbol{\tau}_g : \nabla \mathbf{U}_g - \nabla \cdot \mathbf{q}_g \quad (3)$$

$$\frac{\partial(r_s \rho_s h_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_s \rho_s \mathbf{U}_s h_s) = k_s \alpha_s \frac{\partial p_s}{\partial t} + \boldsymbol{\tau}_s : \nabla \mathbf{U}_s - \nabla \cdot \mathbf{q}_s \quad (4)$$

Onde h_i , p_i , k_i , α_g , τ_i e q_i representam a entalpia específica, a pressão, a condutividade térmica, a difusividade térmica, o tensor tensão e o fluxo de calor da fase i .

- **Equação de Quantidade de Movimento**

$$\frac{\partial(r_g \rho_g \mathbf{U}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_g \rho_g \mathbf{U}_g \mathbf{U}_g) = -r_g \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_g + r_g \rho_g \mathbf{a} + \beta(\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_g) \quad (5)$$

$$\frac{\partial(r_s \rho_s \mathbf{U}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_s \rho_s \mathbf{U}_s \mathbf{U}_s) = -r_s \nabla p - \nabla p_s + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_s + r_s \rho_s \mathbf{a} + \beta(\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s) \quad (6)$$

Onde β representa o coeficiente de transferência de *momentum* entre as fases e \mathbf{a} representa a aceleração da gravidade. Quando β é multiplicado pela velocidade de escorregamento entre as fases, o termo resultante representa a força de arraste entre as fases.

- **O tensor tensão**

$$\boldsymbol{\tau}_g = r_g \mu_g (\nabla \mathbf{U}_g + \nabla \mathbf{U}_g^T) - \frac{2}{3} r_g \mu_g (\nabla \cdot \mathbf{U}_g) \mathbf{I} \quad (7)$$

$$\boldsymbol{\tau}_s = r_s \mu_s (\nabla \mathbf{U}_s + \nabla \mathbf{U}_s^T) + \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) (\nabla \cdot \mathbf{U}_s) \mathbf{I} \quad (8)$$

Para resolver as equações de balanço mencionadas, ademais equações de fechamento são necessárias. O primeiro “sub-modelo” requerido está relacionado com a descrição da turbulência. Neste trabalho, três diferentes versões do modelo κ - ϵ para escoamentos multifásicos são avaliadas, sendo elas: Mistura, Dispersão e Por Fase.

4.2. Turbulência

Grande parte dos escoamentos encontrados na natureza são turbulentos. A turbulência consiste em flutuações do campo de velocidade no tempo e no espaço. É um fenômeno bastante complexo, principalmente por ser tridimensional, transiente, além de apresentar diversas escalas. A turbulência ocorre quando, para um determinado escoamento, as forças de inércia se tornam mais significantes que as forças viscosas, fato também caracterizado por altos números de Reynolds. Tais escoamentos têm as seguintes características:

1. Irregularidade: O escoamento é irregular, randômico e caótico. O escoamento consiste em espectros de diversas escalas (tamanhos de turbilhão);
2. Altos números de Reynolds: Escoamentos turbulentos apresentam altos números de Reynolds;
3. Tridimensional: O escoamento turbulento é sempre tridimensional e anisotrópico;
4. Dissipativo: O escoamento é dissipativo (pequenos turbilhões são transformados em energia interna);
5. Continuidade: A continuidade é mantida, já que as menores escalas de turbilhões ainda são maiores que o livre percurso médio das moléculas.

Dado o enorme custo computacional associado à uma simulação numérica direta (DNS) de toda a escala turbulenta, geralmente, o tratamento matemático associado ao fenômeno da turbulência contempla uma modificação na equação transiente de Navier-Stokes, acrescentando termos médios temporais e flutuações no campo de velocidade, produzindo equações do tipo RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes).

No entanto, uma consequência natural da utilização desta abordagem é o surgimento do chamado “problema de fechamento”, uma vez que os termos de flutuação são

indeterminados, gerando tensores extra (conhecidos por tensores de Reynolds), que, por sua vez, devem ser modelados para zerar o grau de liberdade do sistema.

Para determinar os tensores extra, propõe-se a hipótese da viscosidade turbulenta, a qual associa os tensores de Reynolds ao gradiente das velocidades médias da seguinte forma:

$$-\rho \overline{\mathbf{u}\mathbf{u}} = \mu_t (\nabla \overline{\mathbf{U}} + \nabla \overline{\mathbf{U}}^T) \quad (9)$$

Onde μ_t é a viscosidade turbulenta.

Desta maneira, a equação de conservação de *momentum* (monofásica), escrita em termos das suas grandezas médias, ganha um termo de viscosidade turbulenta, assumindo a seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho \overline{\mathbf{U}})}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho \overline{\mathbf{U}\mathbf{U}})) = \nabla \bar{p} + \nabla \cdot (\mu_{ef} (\nabla \overline{\mathbf{U}} + \nabla \overline{\mathbf{U}}^T)) + M \quad (10)$$

$$\overline{\mathbf{U}} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{U} dt \quad (11)$$

$$\mu_{ef} = \mu_t + \mu \quad (12)$$

Onde $\overline{\mathbf{U}}$ representa a velocidade média e μ_{ef} representa a viscosidade efetiva.

4.2.1. Escala de Turbulência

A turbulência é um fenômeno que ocorre em faixas muito amplas, ou seja, os turbilhões gerados podem variar da ordem de grandeza da geometria do escoamento em questão até as menores escalas. A energia das grandes escalas perde-se para as escalas menores com as quais interagem.

No caso das menores escalas, a energia cinética se dissipa em energia interna devido à intensidade das forças viscosas, definindo, a partir daí, uma taxa de dissipação de energia cinética, a qual é proporcional ao produto da viscosidade cinemática e o quadrado do gradiente da flutuação da velocidade. A dissipação viscosa afeta todas as escalas, porém é mais significativa nas menores escalas de turbulência.

As menores escalas nas quais a dissipação ocorre são denominadas de escalas de Kolmogorov. Para determinar esta escala, é importante levar em consideração o valor de viscosidade, já que a transformação de energia cinética depende das forças viscosas.

4.2.2. Modelagem Turbulenta

Os mais simples dos “modelos completos” de turbulência são os modelos a duas equações, nos quais a solução de duas equações distintas de transporte permite que a velocidade e o comprimento de escala turbulentos sejam determinados de maneira independente. O modelo padrão κ - ϵ situa-se dentro desta classe de modelos e se tornou muito popular para a resolução de problemas de engenharia. Robustez, baixo custo computacional, razoável precisão para uma série de escoamentos turbulentos explicam a sua popularidade para escoamentos industriais.

Trata-se, fundamentalmente, de um modelo para o transporte da energia cinética turbulenta (κ) e a sua taxa de dissipação (ϵ), cujos valores, ao serem inseridos na Equação (13), fornecem a viscosidade turbulenta da fase. O modelo pode ser considerado semi-

empírico dado que a modelagem para κ é derivada diretamente da equação exata, enquanto que a modelagem para ε foi obtida lançando mão de análises fenomenológicas e possui certa semelhança com o seu equacionamento matemático direto.

$$\mu_{t_i} = \frac{C_{\mu}\rho_i k_i^2}{\varepsilon_i} \quad (13)$$

Na sua gênese, o modelo κ - ε assume que o escoamento turbulento está na região plenamente desenvolvida e, portanto, sua correta aplicação limita-se aos escoamentos completamente turbulentos, como, por exemplo, o escoamento no interior de risers. Logo, a sua aplicação para este trabalho é perfeitamente aceitável, principalmente ao considerar o menor custo computacional do modelo.

Para determinar κ e ε , no caso de escoamentos multifásicos, existem três abordagens distintas ao modelo κ - ε padrão: Mistura, Dispersa e Por Fase.

Ao analisar a formulação da abordagem de mistura, fica claro que ela se baseia em uma extensão do modelo padrão monofásico, assumindo parâmetros de contribuição média entre as fases. Portanto, soa bastante razoável que, para um escoamento gás-sólido, onde as propriedades de cada fase não apresentam a mínima similaridade, esta abordagem não deve funcionar muito bem.

Além disto, por ser uma extensão para misturas do modelo padrão κ - ε , esta abordagem não contabiliza a transferência de quantidades turbulentas entre as fases no equacionamento de κ e ε , o que limita seu emprego a aplicações onde as fases não são interpenetrantes. Como comentado anteriormente, ao assumirmos uma abordagem multifásica euleriana ou modelagem do tipo “dois-fluidos”, estamos tratando as fases gasosa e sólida como interpenetrantes contínuas. Portanto, esta versão multifásica para o modelo padrão κ - ε foi descartada.

Uma versão alternativa para a modelagem turbulenta multifásica via κ - ε é a de Dispersão. Esta formulação se baseia na teoria de dispersão de partículas discretas em turbulência homogênea de Tchen (Hinze, 1975). As equações de turbulência padrões são resolvidas para a fase gasosa e os parâmetros de turbulência para a a fase sólida são deduzidos utilizando regras de dispersão (demonstradas a seguir).

$$\frac{\partial(r_g \rho_g k_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_g \rho_g \mathbf{U}_g k_g) = \nabla \cdot \left(r_g \frac{\mu_{tg}}{\sigma_k} \nabla k_g \right) + r_g G_{k_g} - r_g \rho_g \varepsilon_g + r_g \rho_g \Pi_{k_g} \quad (14)$$

$$\frac{\partial(r_g \rho_g \varepsilon_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_g \rho_g \mathbf{U}_g \varepsilon_g) = \nabla \cdot \left(r_g \frac{\mu_{tg}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon_g \right) + r_g \frac{\varepsilon_g}{k_g} (C_{1\varepsilon} C_{k_g} - C_{2\varepsilon} \rho_g \varepsilon_g) + r_g \rho_g \Pi_{\varepsilon_g} \quad (15)$$

Nestas equações, os termos μ_{tg} (viscosidade turbulenta da fase gasosa), G_{k_g} (produção de energia cinética turbulenta na fase gasosa), Π_{k_g} e Π_{ε_g} (termos associados à influência das partículas dispersas na fase gasosa) são modelados e terão suas equações descritas a seguir. Os termos σ_k , σ_ε , $C_{1\varepsilon}$, C_{k_g} e $C_{2\varepsilon}$ são constantes de fechamento e terão seus valores indicados ao final discussão sobre as versões para a extensão multifásica do modelo κ - ε .

$$\mu_{tg} = \frac{C_\mu \rho_g k_g^2}{\varepsilon_g} \quad (16)$$

$$G_{k_g} = \mu_{tg} \left[\nabla \mathbf{U}_g + \nabla (\mathbf{U}_g)^T \right] : \nabla \mathbf{U}_g \quad (17)$$

$$\Pi_{k_g} = \frac{\beta}{r_g \rho_g} [k_{sg} - 2k_g + (\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_g) \cdot \mathbf{U}_{dr}] \quad (18)$$

$$\Pi_{\varepsilon_g} = C_{3\varepsilon} \frac{\varepsilon_g}{k_g} \Pi_{k_g} \quad (19)$$

Onde k_{sg} (covariância entre as velocidades das fases gasosa e dispersa) e \mathbf{U}_{dr} (velocidade de “drift”) são modeladas através de equações a serem expostas e C_μ e $C_{3\varepsilon}$ também são

constantes de fechamento, cujos valores serão tabelados junto às demais constantes futuramente.

$$\mathbf{U}_{dr} = -\left(\frac{D_s}{\sigma_{sg}r_s}\nabla r_s - \frac{D_g}{\sigma_{sg}r_g}\nabla r_g\right) \quad (20)$$

Onde D_s e D_g são as difusividades de cada fase, e mais, de acordo com a teoria de Tchen,

$$D_s = D_g.$$

A formulação da turbulência para a fase sólida é obtida a partir da fase gasosa, utilizando relações algébricas. Dois parâmetros importantes na caracterização da turbulência para a fase dispersa são: o tempo característico de relaxamento das partículas, τ_{Fsg} , relacionado com os efeitos inerciais que atuam na fase dispersa e a escala de tempo integral Lagrangeana, τ_{tsg} , baseada nas trajetórias das partículas e seu cruzamento no espaço. Esses dois parâmetros são calculados segundo as seguintes equações:

$$\tau_{Fsg} = \frac{r_g \rho_g}{\beta} \left(\frac{\rho_s}{\rho_g} + C_U \right) \quad (21)$$

$$\tau_{tsg} = \frac{\tau_{tg}}{\sqrt{1 + C_\beta \xi^2}} \quad (22)$$

$$\xi = \frac{|\mathbf{U}_{sg}| \tau_{tg}}{L_{tg}} \quad (23)$$

$$C_\beta = 1,8 - 1,35 \cos^2 \theta \quad (24)$$

Onde o termo θ é o ângulo entre a velocidade média da partícula e a velocidade média relativa. Já os termos τ_{tg} e L_{tg} representam, respectivamente, o tempo característico e o

comprimento de escala dos turbilhões turbulentos na fase gasosa. Ambos os parâmetros são definidos através das equações:

$$\tau_{tg} = \frac{3}{2} C_\mu \frac{k_g}{\varepsilon_g} \quad (25)$$

$$L_{tg} = \sqrt{\frac{3}{2} C_\mu \frac{k_g^{3/2}}{\varepsilon_g}} \quad (26)$$

A razão entre os tempos característicos, η_{sg} , é dada por:

$$\eta_{sg} = \frac{\tau_{tsg}}{\tau_{Fsg}} \quad (27)$$

As quantidades de turbulência associadas à fase dispersa são então calculadas utilizando as equações que estão de acordo com a teoria de Tchen:

$$k_s^2 = k_g \left(\frac{b^2 + \eta_{sg}}{1 + \eta_{sg}} \right) \quad (28)$$

$$k_{sg} = 2k_g \left(\frac{b + \eta_{sg}}{1 + \eta_{sg}} \right) \quad (29)$$

$$D_{tsg} = \frac{1}{3} k_{sg} \tau_{tsg} \quad (30)$$

$$D_s = D_{tsg} + \left(\frac{2}{3} k_s - \frac{1}{3} k_{sg} \right) \tau_{Fsg} \quad (31)$$

$$b = (1 + C_U) \left(\frac{\rho_s}{\rho_g} + C_U \right)^{-1} \quad (32)$$

As hipóteses envolvidas na teoria de Tchen são limitadas para sistemas onde as colisões inter partículas não apresentam papél de destaque nas flutuações aleatórias da fase dispersa. Sob tais condições, a turbulência da fase dispersa é controlada principalmente pelos movimentos aleatórios da fase gasosa e pode ser estimada utilizando as razões características. Aparentemente, tal formulação requer que o sistema suspenso esteja diluído. Como a concentração de sólidos dentro do riser varia consideravelmente, a validade dessa abordagem dispersa é questionável para alguns pontos do equipamento. No entanto, sua validade em zonas diluídas permitiu que esta versão não fosse eliminada da etapa subsequente do estudo envolvendo testes de modelagem.

A última abordagem implementada no FLUENT, um pouco mais geral, para a extensão multifásica do modelo κ - ε é conhecida como Por Fase. Nesta abordagem, cada fase apresenta o seu conjunto de equações para κ e ε , sendo estas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\tilde{r}_g \rho_g k_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{r}_g \rho_g \mathbf{U}_g k_g) \\ = \nabla \cdot \left(\tilde{r}_g \frac{\mu_{tg}}{\sigma_k} \nabla k_g \right) + (\tilde{r}_g G_{k_g} - \tilde{r}_g \rho_g \varepsilon_g) + \beta(C_{sg} k_s - C_{gs} k_g) \\ - \beta(\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_g) \cdot \frac{\mu_{ts}}{r_s \sigma_s} \nabla r_s + \beta(\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_g) \cdot \frac{\mu_{tg}}{\tilde{r}_g \sigma_g} \nabla \tilde{r}_g \end{aligned} \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\tilde{r}_g \rho_g \varepsilon_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{r}_g \rho_g \mathbf{U}_g \varepsilon_g) \\ = \nabla \cdot \left(\tilde{r}_g \frac{\mu_{tg}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon_g \right) + \frac{\varepsilon_g}{k_g} (C_{1\varepsilon} \tilde{r}_g C_{k_g} - C_{2\varepsilon} \tilde{r}_g \rho_g \varepsilon_g) \\ + C_{3\varepsilon} \times \left[\beta(C_{sg} k_s - C_{gs} k_g) - \beta(\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_g) \cdot \frac{\mu_{ts}}{r_s \sigma_s} \nabla r_s \right. \\ \left. + \beta(\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_g) \cdot \frac{\mu_{tg}}{\tilde{r}_g \sigma_g} \nabla \tilde{r}_g \right] \end{aligned} \quad (34)$$

Esta versão para a extensão multifásica do modelo κ - ϵ não envolve nenhuma limitação, uma vez que a turbulência em ambas as fases são contabilizadas separadamente e sem nenhuma consideração.

No entanto, uma questão mais fundamental está associada a esta abordagem. Parece razoavelmente questionável utilizar um modelo de turbulência diretamente para uma fase sólida, dado que estes modelos foram desenvolvidos originalmente para modelar fluidos.

Se utilizado sem nenhuma consideração ou modificação, as propriedades da fase sólida serão utilizadas diretamente nas equações de turbulência, fato este que não apresenta nenhuma justificativa confiável.

Dada a sua possível utilização, embora dúbia, este modelo também conseguiu “aprovação” para a etapa de teste de modelagem realizada no presente estudo.

Tabela 3: Valor das constantes para as extensões multifásicas do modelo κ - ϵ .

$C_{1\epsilon}$	1,44
$C_{2\epsilon}$	1,92
$C_{3\epsilon}$	1,2
C_{μ}	0,09
σ_{κ}	1,0
σ_{ϵ}	1,0

4.3. Teoria Cinética granular

Conforme mencionado anteriormente, a utilização de uma abordagem euleriana acarreta naturalmente na determinação de uma viscosidade dinâmica para a fase particulada. Sendo assim, visando a obtenção desta propriedade, por consequência, o tensor tensão e a pressão de sólidos, surgiram os modelos de teoria cinética granular.

Fundamentalmente, a teoria cinética granular é uma analogia da teoria cinética dos gases aplicada a sólidos, porém, existem algumas diferenças entre elas, como, por exemplo, para escoamentos granulares, consideramos a dissipação de quantidade de movimento devido aos choques inelásticos entre as partículas, o que não ocorre na teoria cinética dos gases.

Na teoria cinética granular, a velocidade instantânea da partícula também é decomposta em flutuações aleatórias e um valor médio. Associada com o movimento aleatório das partículas, pode-se definir uma temperatura aparente (temperatura granular), parâmetro importante na determinação da viscosidade do sólido.

Para obtenção do valor desta temperatura granular, utiliza-se a equação de transporte para flutuação da velocidade. Em outras palavras, resolve-se um balanço de energia flutuante. No modelo proposto, utilizou-se uma equação diferencial parcial de equilíbrio entre a dissipação e a produção de energia cinética flutuante para as partículas. A mesma segue abaixo:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial (r_s \rho_s \theta_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_s \rho_s \mathbf{U}_s \theta_s) \right] = (-p_s \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_s) : \nabla \mathbf{U}_s + \nabla \cdot (k_{\theta_s} \nabla \theta_s) - \gamma_{\theta_s} + \phi_{sg} \quad (35)$$

Onde os termos θ_s (temperatura granular), p_s (pressão de sólidos), k_{θ_s} (condutividade de energia granular), γ_{θ_s} (dissipação colisional de energia) e ϕ_{I_s} (transferência de energia cinética gerada pelas flutuações no campo de velocidade entre as fases) necessitam de equações constitutivas de fechamento para serem determinados. As mesmas são descritas abaixo:

- **Temperatura Granular (θ_s)**

$$\theta_s = \frac{1}{3} \langle U'_s \rangle \quad (36)$$

Onde $\langle U'_s \rangle$ é dado pela média na flutuações do campo de velocidade para a fase sólida.

- **Condutividade de Energia Granular (k_{θ})**

Neste trabalho, foi utilizado o modelo de Syamlal *et al.*, 1993 para a condutividade de energia granular. Sua formulação é descrita a seguir:

$$k_{\theta} = \frac{15d_s\rho_s r_s \sqrt{\pi\theta}}{4(41 - 33\eta)} \times \left[1 + \frac{12}{5} \eta^2 (4\eta - 3) r_s g_0 + \frac{16}{15} (41 - 33\eta) \eta r_s g_0 \right] \quad (37)$$

Onde d_s é o diâmetro médio da fase particulada η é um parâmetro relacionado com o coeficiente de restituição das partículas, tal que:

$$\eta = \frac{1}{2} (1 + e_{ss}) \quad (38)$$

Onde e_{ss} é o coeficiente de restituição. (Valores recomendados pelo manual teórico do FLUENT estão na faixa entre 0,9 e 0,99. Testes foram realizados para determinar qual o valor a ser utilizado. Os resultados obtidos serão apresentados no próximo capítulo.)

Quanto ao parâmetro g_0 , este representa a função de distribuição radial da fase dispersa, cuja recomendação do manual do FLUENT para o caso de apenas uma fase euleriana sólida (condição utilizada neste trabalho) é:

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{r_s}{r_{s,max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (39)$$

Onde o termo $r_{s,max}$ representa a fração volumétrica máxima de sólidos (também conhecido por limite de empacotamento máximo) que, no caso de apenas uma fase euleriana dispersa (com diâmetro de partícula médio, d_s), assume o valor constante de 0,63 ou 63%.

- **Pressão de Sólidos (p_s)**

Este estudo utilizou o modelo de Lun *et al.*, 1984 para a pressão de sólidos. Sua formulação é descrita a seguir:

$$p_s = r_s \rho_s \theta + 2\rho_s (1 + e_{ss}) r_s g_0 \theta_s \quad (38)$$

- **Dissipação Colisional de Energia Cinética (γ_{θ_s})**

$$\gamma_{\theta_s} = \frac{12(1 - e_{ss}^2)g_0\rho_s r_s^2 \theta_s^{3/2}}{d_s \sqrt{\pi}} \quad (39)$$

- **Transferência de Energia Cinética Flutuante (ϕ_{sg})**

$$\phi_{sg} = -3k_{sg}\theta_s \quad (40)$$

Segundo a equação (8) descrita neste texto para a modelagem do tensor tensão da fase particulada, percebe-se que este parâmetro depende de um termo referente à viscosidade *bulk*, λ_s , e um termo referente à viscosidade cisalhante, μ_s , que nascem da troca de *momentum* na fase dispersa devido à translação e às colisões entre partículas.

A viscosidade cisalhante pode ser expressa como a soma das contribuições de três componentes: $\mu_{s,col}$ (contabiliza os efeitos colisionais para a resistência cisalhante), $\mu_{s,kin}$ (representa os efeitos cinéticos para a resistência cisalhante) e $\mu_{s,fr}$ (termo de fricção mecânica entre as partículas).

$$\mu_s = \mu_{s,col} + \mu_{s,kin} + \mu_{s,fr} \quad (41)$$

- **Viscosidade Cisalhante Colisional ($\mu_{s,col}$)**

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5}r_s\rho_s d_s g_0 (1 + e_{ss}) \sqrt{\frac{\theta_s}{\pi}} \quad (42)$$

- **Viscosidade Cisalhante Cinética ($\mu_{s,kin}$)**

Neste trabalho, foi utilizado o modelo de Syamlal *et al.*, 1993 para a viscosidade cisalhante cinética. Sua formulação é descrita a seguir:

$$\mu_{s,kin} = \frac{r_s \rho_s d_s g_0 \sqrt{\theta_s \pi}}{6(3 - e_{ss})} \left[1 + \frac{2}{5} (1 + e_{ss})(3e_{ss} - 1)r_s g_0 \right] \quad (43)$$

- **Viscosidade Cisalhante Friccional ($\mu_{s,fr}$)**

Dado que este parâmetro contabiliza a fricção mecânica entre as partículas, no caso de escoamentos densos (como o ocorrente em risers), onde a concentração de sólidos atinge o valor de empacotamento máximo em algumas regiões, este termo é de grande importância.

Para tal, um estudo detalhado envolvendo a sua ausência e a sua utilização via 2 modelagens distintas foi executado (será discutido melhor no próximo capítulo), uma vez que as zonas mais propensas ao fenômeno erosivo devem estar situadas em pontos onde a concentração de sólidos atinge o limite máximo estipulado. Quanto aos modelos empregados, as expressões de Schaeffer (1987) e de Johnson and Jackson (1987) foram avaliadas.

- **$\mu_{s,fr}$ por Schaeffer**

$$\mu_{s,fr} = \frac{p_s \sin \varphi}{2\sqrt{I_{2D}}} \quad (44)$$

Onde φ é o ângulo de fricção interna (valor default do FLUENT de 30,000 graus foi utilizado) e o termo I_{2D} é a segunda invariante do tensor tensão.

- $\mu_{s,fr}$ por Johnson and Jackson

$$\mu_{s,fr} = p_s \sin \varphi \quad (45)$$

- Viscosidade *Bulk* (λ_s)

O termo de viscosidade *bulk* contabiliza a resistência das partículas aos fenômenos de expansão e compressão. Este estudo utilizou o modelo de Lun *et al.*, 1984 para a sua formulação, a qual é descrita a seguir:

$$\lambda_s = \frac{4}{3} r_s \rho_s d_s g_0 (1 + e_{ss}) \sqrt{\frac{\theta_s}{\pi}} \quad (46)$$

4.4. Termos fonte

Como comentado anteriormente, geralmente, as equações de *momentum* para cada fase possuem termos fonte associados, visando contabilizar as forças adicionais de campo externo e os efeitos de transferência de *momentum* entre as fases. Afim de tratar a transferência de *momentum* entres as fases, diversos efeitos físicos independentes podem ser incluídos nos termos fonte, tais como: força de arraste, força de pressão de sólidos, força de massa virtual, etc...). Conforme descrito, para escoamentos gás-sólido, densos em risers, os termos de arraste dominam as demais contribuições e, portanto, foram os únicos efeitos inseridos como termo fonte nas equações de *momentum*.

- Força de Arrate

Durante a realização deste estudo, além dos demais testes já citados, também foi dado foco na escolha da modelagem mais apropriada para representar os termos de arraste entre fases. Nas equações de *momentum* de cada fase, a força de arraste é representada pela multiplicação entre o coeficiente de transferência de *momentum*, β , e a velocidade de escorregamento entre as fases.

De acordo com a literatura (Harte *et al.*, 2009), as correlações mais utilizadas para a descrição do arraste entre as fases são as de Gidaspow (1994) e Syamlal *et al.* (1987).

A modelagem proposta por Gidaspow é a combinação de duas abordagens existentes para contabilizar o arraste entre as fases: o trabalho de Ergun (1952), utilizado para escoamentos gás-sólido densos, e a formulação de Wen and Yu (1966), empregada para escoamentos gás-sólido diluídos. Ou seja, a correlação de Gidaspow assume um comportamento híbrido, dependendo da fração volumétrica da fase gasosa.

Já a modelagem proposta por Syamlal *et al.* é baseada no cálculo da velocidade terminal das partículas em uma suspensão gas-sólido.

Uma vez que o escoamento no interior dos risers assume ambas regiões de altas e baixas frações volumétricas, a proposta formulada por Gidaspow é válida para os casos simulados no presente estudo. Ao mesmo tempo, a correlação de Syamlal *et al.* também é recomendada pelo manual do software FLUENT quando a tensão cisalhante está sendo modelada pelas equações de Syamlal *et al.*, caso do presente estudo. Portanto, testes foram feitos, para verificação da melhor abordagem a ser utilizada para a simulação em questão. Os modelos de Gidaspow e Syamlal *et al.* seguem descritos:

- **Gidaspow, 1994**

$$\beta = \frac{3}{4} C_D \frac{r_s r_g \rho_g |U_s - U_g|}{d_s} r_g^{-2,65}, \quad \text{para } r_g > 0,8 \quad (47)$$

$$\beta = 150 \frac{r_s^2 \mu_g}{r_g d_s^2} + 1,75 \frac{r_s \rho_g |U_s - U_g|}{d_s}, \quad \text{para } r_g \leq 0,8 \quad (48)$$

Onde C_D é o coeficiente de arraste, dado por:

$$C_D = \frac{24}{r_g Re_s} [1 + 0,15 (r_g Re_s)^{0,687}] \quad (49)$$

Onde Re_s é o número de Reynolds relativo, dado por:

$$Re_s = \frac{\rho_g d_s |U_s - U_g|}{\mu_g} \quad (50)$$

- Syamlal *et al.*, 1993

$$\beta = \frac{3 r_s r_g \rho_g}{4 U_{r,s}^2 d_s} C_D \left(\frac{Re_s}{U_{r,s}} \right) |U_s - U_g| \quad (51)$$

Neste caso, o coeficiente de arraste, C_D , é dado por:

$$C_D = \left(0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{Re_s / U_{r,s}}} \right)^2 \quad (52)$$

Já o termo $U_{r,s}$, velocidade terminal da fase sólida é formulado segundo a seguinte expressão:

$$U_{r,s} = 0,5[A - 0,06Re_s + \sqrt{(0,06Re_s)^2 + 0,12Re_s(2B - A) + A^2}] \quad (53)$$

Onde A e B são parâmetros do modelo, cuja formulação segue abaixo:

$$A = r_g^{4,14} \quad (54)$$

$$B = 0,8r_g^{1,28}, \quad \text{para } r_g \leq 0,85 \quad (55)$$

$$B = r_g^{2,65}, \quad \text{para } r_g > 0,85 \quad (56)$$

5. Simulação

Neste capítulo será discutida toda a metodologia computacional utilizada, a começar pela descrição da geometria empregada, seguindo para os testes de malha e modelagem realizados e, finalmente, detalhando a simulação final para descrever o comportamento do escoamento interno para o riser em questão.

5.1. Geometria

Os dados geométricos do riser avaliado neste estudo foram retirados da teste de doutorado de Rosa, 2008. Para esta configuração, o equipamento compõe-se de um duto com terminação em curva, assim como uma junção cuja função é promover a entrada de catalisador. Para ambos o duto e a junção, o diâmetro associado era 76mm e a altura total do equipamento era 10m.

O desenho do modelo, que pode ser visto na figura 9, foi confeccionado dentro do módulo de CAD desenvolvido pela ANSYS, o DesignModeler. Embora não seja uma das ferramentas de CAD mais poderosas, este software possui todas as operações necessárias para o design do equipamento em questão, bem como a enorme vantagem da integração direta com a plataforma Workbench, com a qual torna-se possível que todas as etapas de simulação sejam desenvolvidas em um mesmo ambiente.

É importante salientar que a geometria utilizada está “quebrada” em diversos pontos, com o simples motivo de otimizar o processo de geração de malha. O DesignModeler permite que um domínio (denominado *part*) seja formado por uma série de sub-domínios (denominados *bodies*), reconhecendo, desta maneira, que os diferentes tipos de malha geradas para cada sub-domínio apresentarão coincidência de nós nas interfaces associadas.

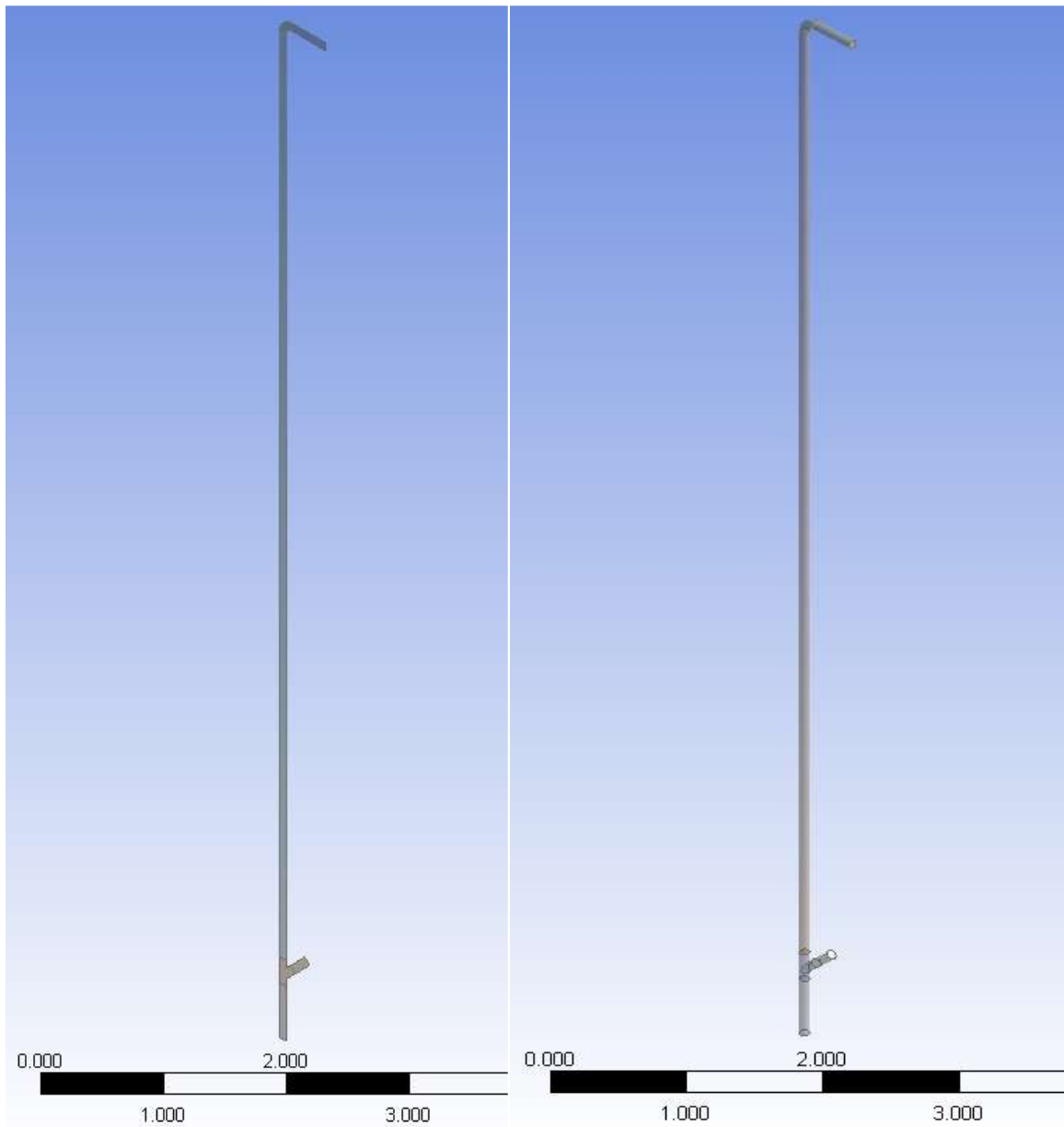


Figura 6: Configurações geométricas 2D e 3D do riser.

Por motivos que serão discutidos ainda neste capítulo, as etapas de teste de malha e modelagem foram realizadas a partir de simulações 2D, usando como modelo geométrico o perfil central do riser 3D, ilustrado na Figura 6.

5.2. Malha

Conforme citado anteriormente, a etapa seguinte ao design do modelo geométrico é gerar uma malha onde as equações já descritas serão discretizadas, Visto que , no caso de simulações de CFD, esta discretização é dada através do método dos volumes finitos (Maliska, 2004), garantindo que a modelagem está adequada ao problema, quanto maior o número de elementos, mais precisos serão os resultados da simulação. Entretanto, um fator limitante para escolha da malha é o poder computacional disponível.

Afim de evitar o gasto de tempo desnecessário com uma malha super-estimada, ou obter um resultado computacional muito distante da realidade com uma malha sub-estimada, uma etapa fundamental é o chamado teste de malhas, ou seja, realizar diversas simulações, aumentando continuamente o número de nós, em busca da menor malha que apresente discrepância mínima de resposta em relação a sua malha subsequente.

Dada a complexidade da modelagem física envolvida neste tipo de simulação (demonstrada no capítulo 4), associada à característica transiente do escoamento em questão (a qual envolve, neste caso, um longo tempo simulado para atingir a média transiente estacionária, além de baixos passos de tempo), seria inviável, dentro do caráter de um projeto final, a realização de um teste de malhas 3D.

Portanto, embora o escoamento interno para o equipamento em questão seja claramente tridimensional, os testes de malha e modelagem (descrito na próxima seção) foram realizados em simulações bidirecionais.

Importante mencionar que, seguindo a linha de integrar todas as ferramentas dentro de um mesmo ambiente de simulação, a plataforma Workbench, foi utilizado o software Meshing Tools para gerar as malhas empregadas neste estudo.

Conforme já comentado, a divisão da geometria possibilitou a geração de malhas híbridas, ou seja, malhas que assumem regiões com elementos tri (2D) ou tetra (3D), bem como áreas com elementos quad (2D) ou hexa (3D).

Por possuírem conformidade que se alinha com o escoamento global, os elementos quad (2D) ou hexa (3D) são desejáveis. No entanto, a presença da curvatura ao final do equipamento, bem como a junção lateral, impossibilitariam a total presença de elementos destes tipos.

Para aproveitar ao máximo as zonas do modelo geométrico onde estes elementos poderiam ser utilizados na geração da malha, o domínio foi dividido em 6 sub-domínios (como ilustrado na Figura 7).

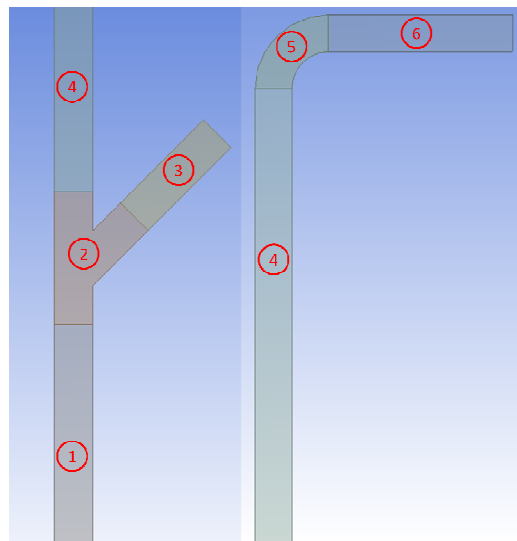


Figura 7: Identificação dos sub-domínios gerados.

Diante de uma geometria 2D dividida em 6 regiões, 6 configurações distintas para cada sub-domínio foram testadas, totalizando 6 malhas 2D distintas (Figuras 8, 9, 10, 11, 12 e 13) a terem seu desempenho avaliado. As particularidades de cada uma dessas malhas estão descritas na tabela abaixo.

Tabela 4: Configuração das malhas 2D para teste.

Malha	Região	Tipo de Malha	Tamanho de Elemento	# Divisões Axiais	# Divisões Radiais	Bias Axial	Bias Radial	# Elementos
#1	1	Quad	-	15	6	5	2	1855
	2	Tri/Quad	0,01m	-	6	-	2	
	3	Quad	-	10	6	4	2	
	4	Quad	-	200	6	12	2	
	5	Quad	-	17	6	-	2	
	6	Quad	-	16	6	5	2	
#2	1	Quad	-	30	12	5	2	7403
	2	Tri/Quad	0,005m	-	12	-	2	
	3	Quad	-	20	12	4	2	
	4	Quad	-	400	12	12	2	
	5	Quad	-	34	12	-	2	
	6	Quad	-	32	12	5	2	
#3	1	Quad	-	45	18	5	2	16896
	2	Tri/Quad	0,0033m	-	18	-	2	
	3	Quad	-	30	18	4	2	
	4	Quad	-	600	18	12	2	
	5	Quad	-	51	18	-	2	
	6	Quad	-	48	18	5	2	
#4	1	Quad	-	60	24	5	2	29703
	2	Tri/Quad	0,0025m	-	24	-	2	
	3	Quad	-	40	24	4	2	
	4	Quad	-	800	24	12	2	
	5	Quad	-	68	24	-	2	
	6	Quad	-	64	24	5	2	
#5	1	Quad	-	90	36	5	2	57540
	2	Tri/Quad	0,001875m	-	36	-	2	
	3	Quad	-	60	36	4	2	
	4	Quad	-	1000	36	12	2	
	5	Quad	-	105	36	-	2	
	6	Quad	-	96	36	5	2	

Malha	Região	Tipo de Malha	Tamanho de Elemento	# Divisões Axiais	# Divisões Radiais	Bias Axial	Bias Radial	# Nós
#6	1	Quad	-	120	48	5	2	91572
	2	Tri/Quad	0,00125m	-	48	-	2	
	3	Quad	-	80	48	4	2	
	4	Quad	-	1000	48	12	2	
	5	Quad	-	140	48	-	2	
	6	Quad	-	128	48	5	2	

Em seguida, uma vez encontrada a melhor malha 2D, cuidados foram tomados para que, tomando-se um corte central da malha 3D, sua configuração de nós e elementos fossem seguissem os tamanhos e divisões da malha 2D.

No próximo capítulo será demonstrado que a malha 2D mais leve a manter os resultados idênticos aos da malha seguinte foi a #5 e, portanto, tanto para os testes de modelagem 2D, como para a própria simulação 3D, foi empregada a configuração desta malha. A tabela 5 descreve os detalhes referente à malha do modelo 3D empregada, quando foram utilizados os parâmetros da malha 2D #5.

Já a Figura 14 ilustra a aparência da malha 3D empregada neste trabalho, ao assumirem-se os parâmetros da malha 2D #5 para a sua configuração. Para o número de divisões radiais, foi feito um cálculo proporcional entre o comprimento do “diâmetro” 2D e o comprimento da circunferência 3D, oque resultou na multiplicação do número de divisões radiais 2D por π .

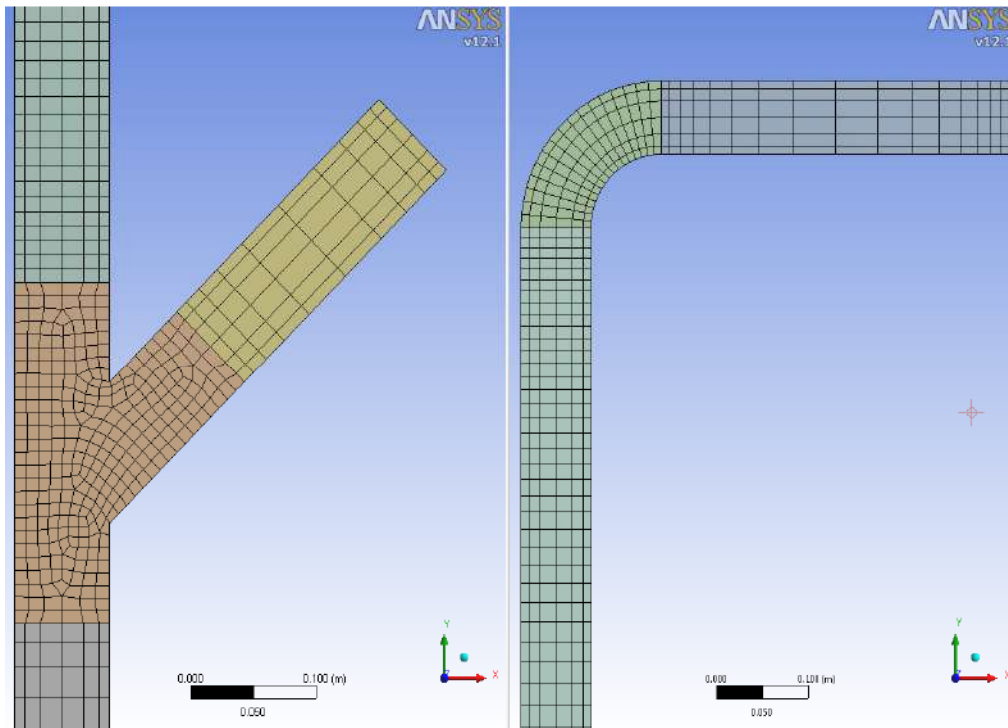


Figura 8: Detalhes da malha 2D #1.

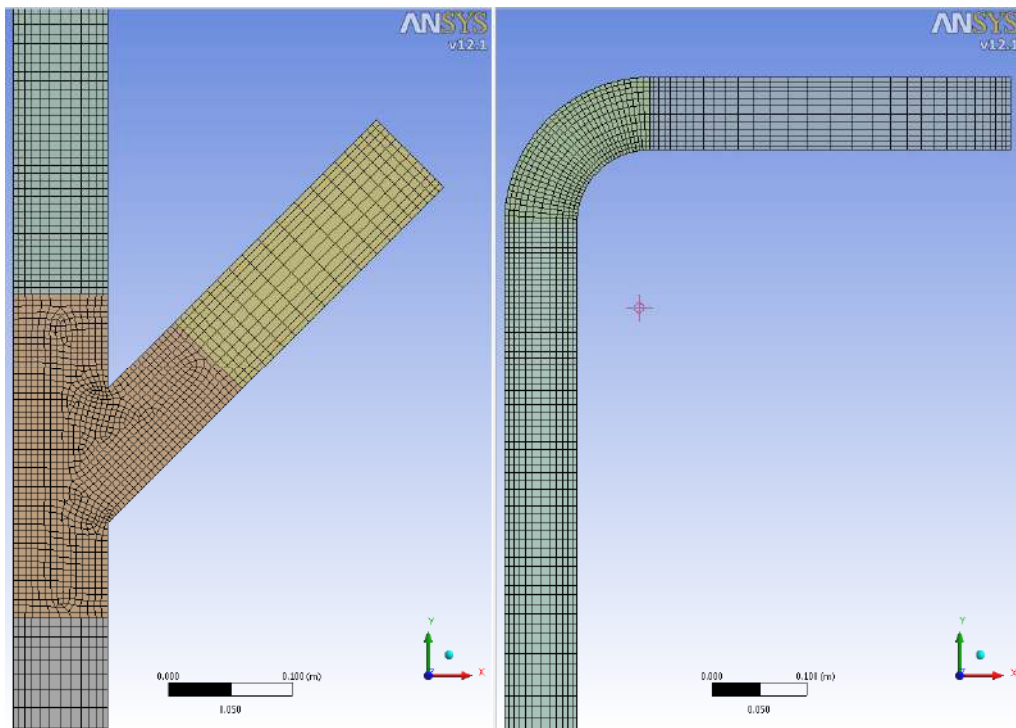


Figura 9: Detalhes da malha 2D #2.

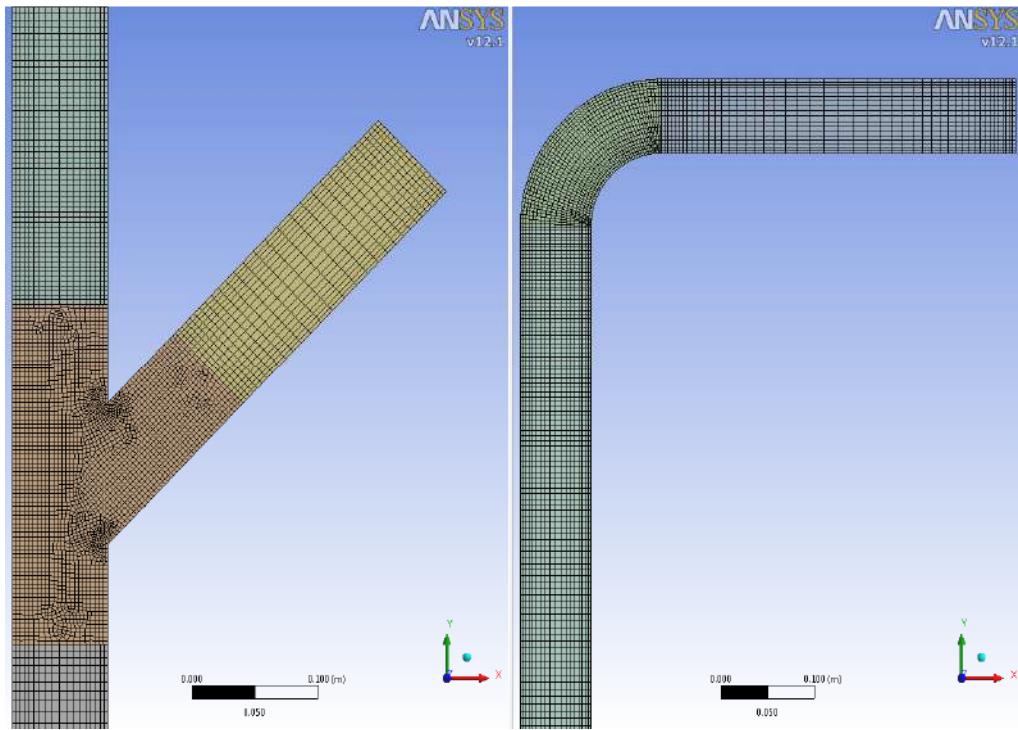


Figura 10: Detalhes da malha 2D #3.

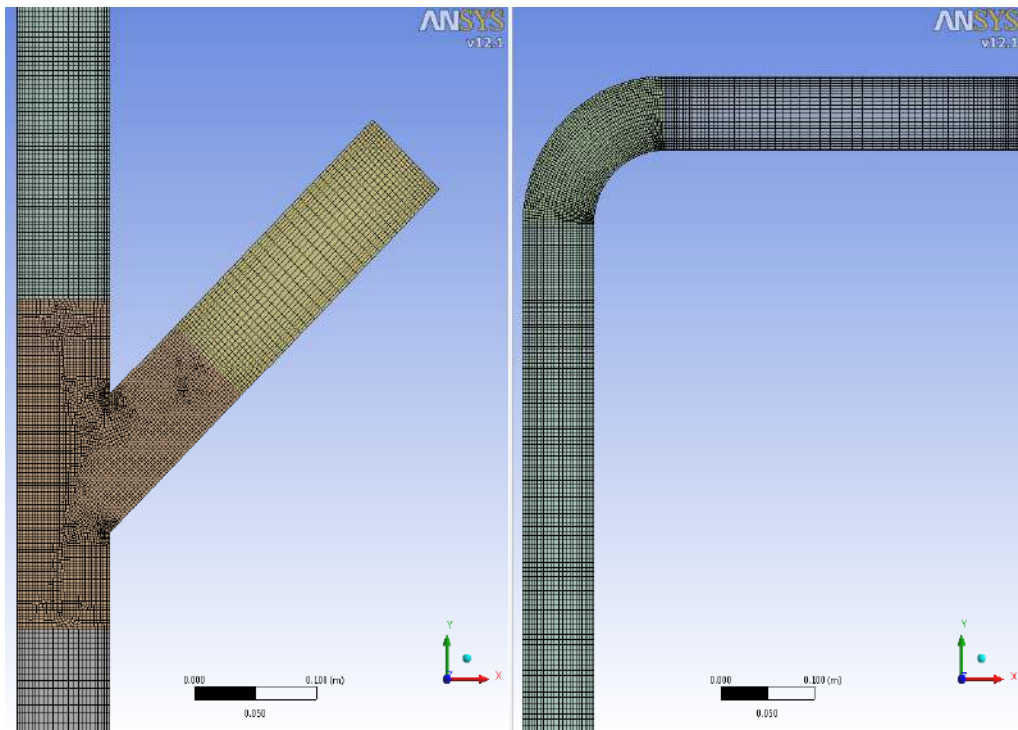


Figura 11: Detalhes da malha 2D #4.

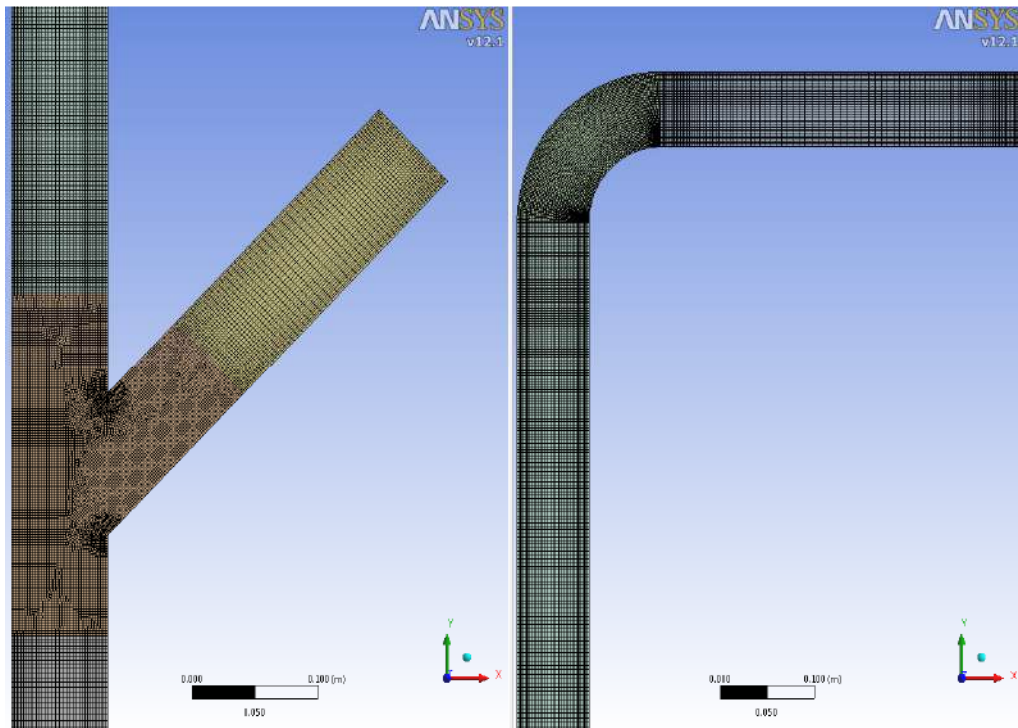


Figura 12: Detalhes da malha 2D #5.

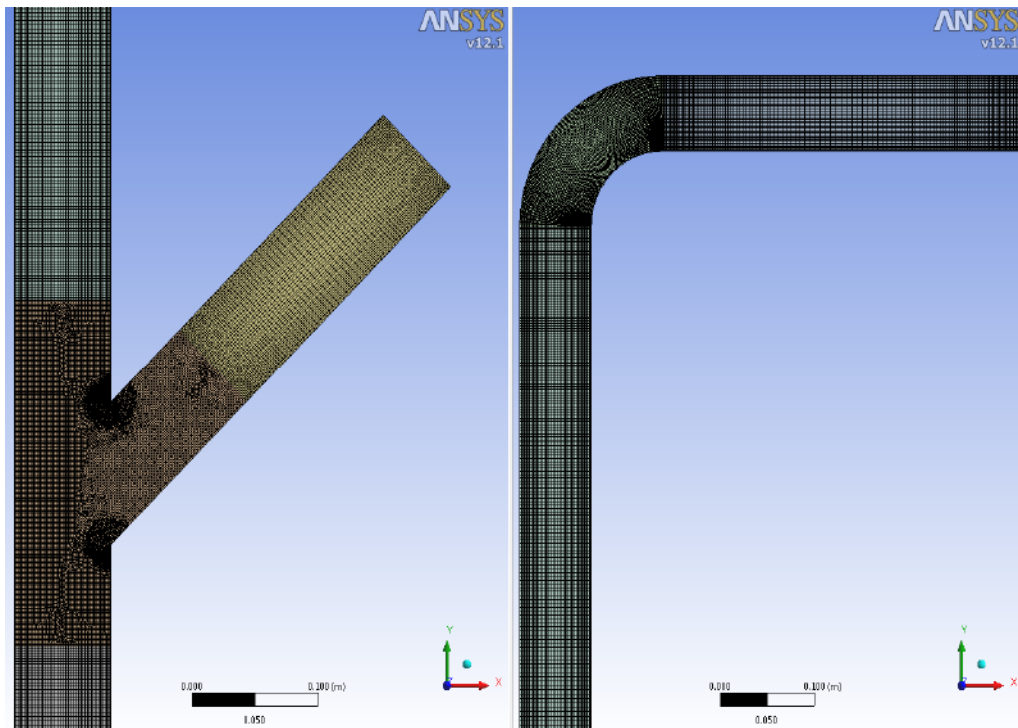


Figura 13: Detalhes da malha 2D #6.

Tabela 5: Configuração final da malha 3D empregada.

Malha	Região	Tipo de Malha	Tamanho de Elemento	# Divisões Axiais	# Divisões Radiais	Bias Axial	Bias Radial	# Elementos
3D	1	Hexa	-	90	115	5	2	4545546
	2	Tetra	0,001875m	-	115	-	2	
	3	Hexa	-	60	115	4	2	
	4	Hexa	-	1000	115	12	2	
	5	Hexa	-	105	115	-	2	
	6	Hexa	-	96	115	5	2	

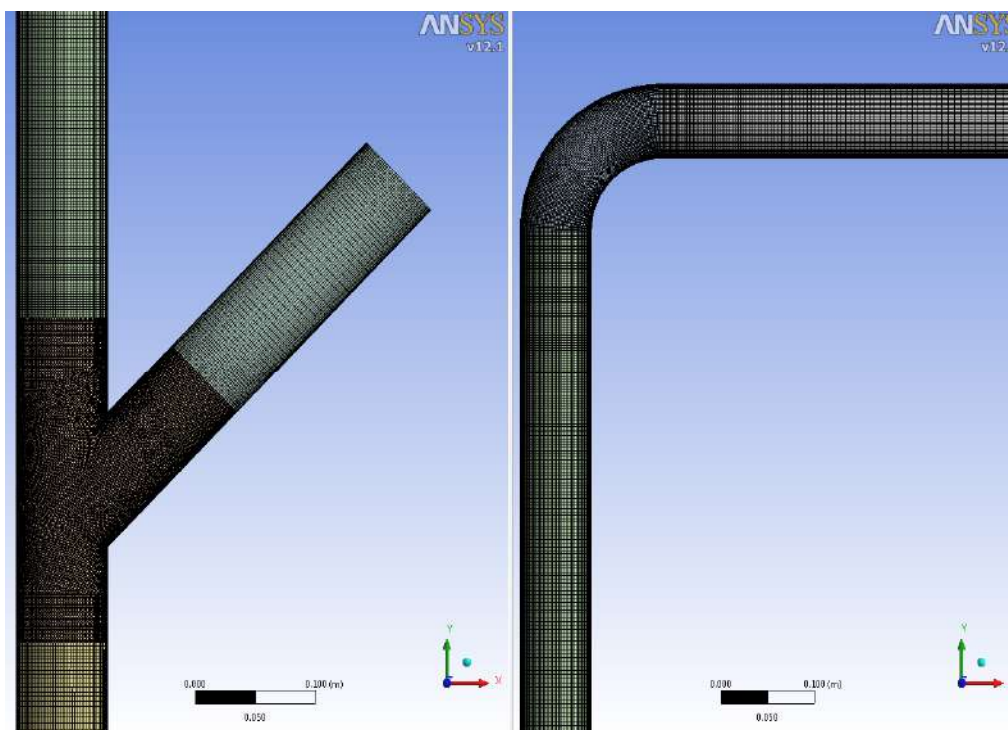


Figura 14: Detalhes da malha 3D.

As Figura 15 ilustra um corte central na malha 3D, demonstrando que a distribuição de elementos nesta região ficou muito próxima à encontrada na malha 2D #5. Já as Figuras 16 e 17 iustram, respectivamente, a boa transição entre os elementos de malhas diferentes, bem como a boa transição de elementos na camada de prisma.

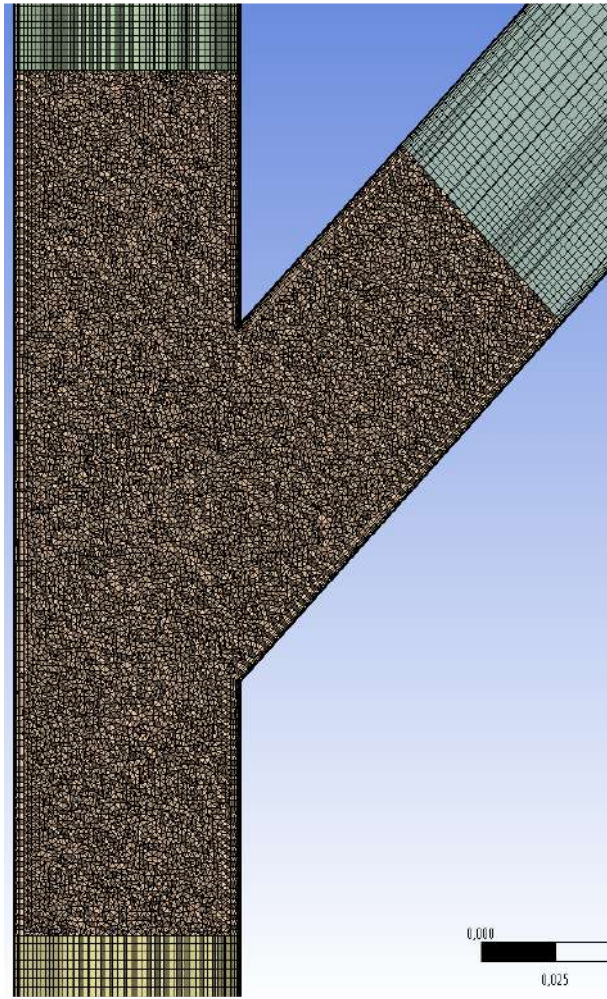


Figura 15: Corte central da malha 3D.

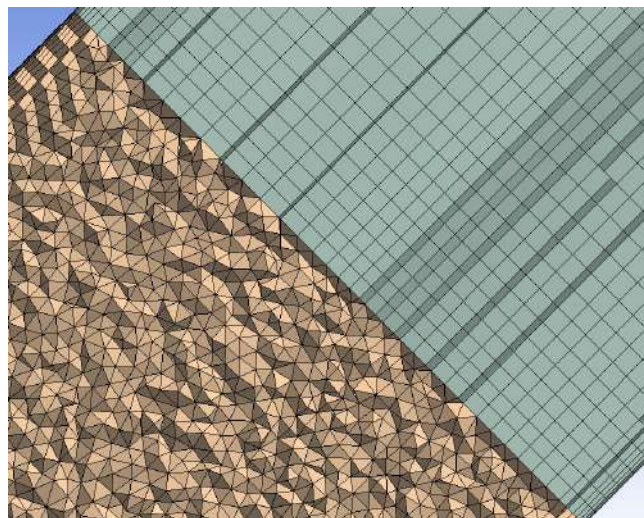


Figura 16: Transição entre elementos Hexa e Tetra na malha 3D.

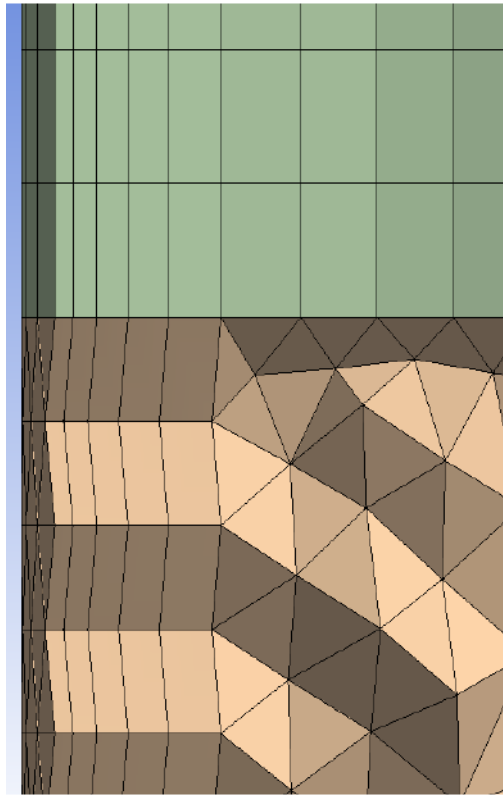


Figura 17: Transição de elementos da camada de prisma na malha 3D.

Na próxima seção deste capítulo será apresentado, primeiramente, um estudo da modelagem conforme descrito no capítulo anterior, bem como as configurações para a simulação 3D resultantes desta avaliação.

5.3. Simulação

Uma vez decidida qual a melhor malha 2D e gerada uma malha 3D fundamentada nos parâmetros da primeira, foram executadas simulações 2D transientes do tipo teste (para definir a modelagem mais adequada) e, finalmente, uma simulação 3D transiente.

Nesta seção, será descrito todo o caminho executado para atingir a configuração final utilizada no caso 3D transiente. Primeiramente, serão apresentadas as propriedades e parâmetros que não sofreram alteração e foram mantidos constantes ao longo de toda a

avaliação configuracional. Posteriormente, será demonstrado o percurso pelo qual esta avaliação decorreu e, finalmente, a configuração final estabelecida para o caso 3D transiente.

5.3.1. Parâmetros gerais

Para todas as simulações realizadas durante a execução deste trabalho, alguns elementos de configuração não sofreram alteração, ou seja, não foram objeto de estudo. Quanto à origem destes dados, alguns foram fornecidos pela Petrobras, outros foram obtidos da literatura e outros foram retirados da biblioteca do FLUENT. A tabela 6 descreve quais foram estes dados, bem como a sua origem.

Tabela 6: Parâmetros comuns a todas as simulações (2D e 3D).

Parâmetro	Valor ou Faixa	Origem
Temperatura alimentação ar	298,15 K	Rosa, 2008
Temperatura alimentação catalisador	973,15 K	Rosa, 2008
Densidade do catalisador	1500 kg/m ³	Rosa, 2008
Densidade do ar	1,225 kg/m ³	FLUENT
Viscosidade do catalisador	Cálculada pela Teoria Cinética Granular	FLUENT
Parâmetro	Valor ou Faixa	Origem
Viscosidade do ar	1,7894e-05 kg/m.s (Pa.s)	FLUENT
Diâmetro médio do catalisador	67 µm	Rosa, 2008
Empacotamento máximo	0,63 (63%)	FLUENT
Transferência de calor / fases	Ranz-Marshall	FLUENT
Constante de rugosidade de	0,5	FLUENT

parede		
Pressão operacional	1 atm	Rosa, 2008

5.3.2. Simulações 2D – Teste de Modelagem

Nesta etapa do trabalho, conforme comentado previamente, alguns parâmetros e modelos foram avaliados via simulações 2D, com o objetivo de definir a melhor abordagem para a simulação 3D.

A primeira hipótese assumida neste patamar do estudo foi a de que, ao compararmos as respostas dos testes de modelagem realizados, embora as simulações fossem bidirecionais, haveria um cancelamento das contribuições dimensionais e, desta maneira, os modelos e parâmetros mais promissores poderiam ser estendidos à simulação 3D.

Uma outra simplificação considerada neste trabalho foi a de que o estudo da modelagem 2D foi realizado em etapas, ignorando o efeito de escolha de uma etapa anterior sob a escolha da etapa seguinte.

Embora ambas as considerações tenham motivos para terem sua validade questionada, mais uma vez, a limitação de tempo (associada à grande complexidade de modelagem para representar a física do escoamento versus o poder computacional disponível) acabou por restringir as possibilidades para o desenvolvimento de uma metodologia diferente da comentada para o estudo em questão.

Tabela 7: Ordem de avaliações 2D do teste de modelagem.

1ª Etapa	2ª Etapa	3ª Etapa	4ª Etapa
Tipo de modelo κ - ϵ	Modelo de arraste / Coeficiente de restituição	Viscosidade friccional	Coeficiente de especularidade
Disperso	Syamlal <i>et al.</i> / 0.9	Sem	0
	Syamlal <i>et al.</i> / 0.99	Schaeffer	0.1
Por Fase	Gidaspow / 0.9	Jonhson and Jackson	0.2
	Gidaspow / 0.99		

Fundamentalmente, assumiu-se uma ordem de avaliações, demonstrada na tabela 7, onde os tipos Disperso e Por Fase para a extensão multifásica do modelo κ - ϵ são comparados, seguindo com uma análise dos modelos de Syamlal *et al.* e Gidaspow para representar o arraste entre as fases juntamente com valores para os coeficientes de restituição (esta etapa, exclusivamente, sofreu uma avaliação cruzada pois entendeu-se que seus efeitos não poderiam ser contabilizados isoladamente). Posteriormente, a ausência do termo para a viscosidade friccional para a fase dispersa, bem como a sua formulação via Schaeffer *et al.* e

Jonhson and Jackson também foram contabilizadas. Por fim, uma análise sobre o coeficiente de especularidade da fase sólida na parede (o qual contribui diretamente para a força cisalhante desta fase na parede) foi efetuada. Em todos os casos 2D, foi simulado um tempo total de 20s, utilizando um passo de tempo de 0,01s.

Embora, ao descrever a configuração utilizada para a simulação 3D, a próxima seção deste capítulo indique qual a modelagem mais apropriada encontrada nesta etapa, por motivos de melhor apresentação do trabalho, os resultados e discussões que promoveram a sua escolha estarão detalhados no próximo capítulo apenas.

Quanto às condições de contorno definidas para as avaliações 2D, a Figura 18 ilustra as regiões e suas classificações, enquanto que a tabela 8 indica a configuração de cada região demonstrada.

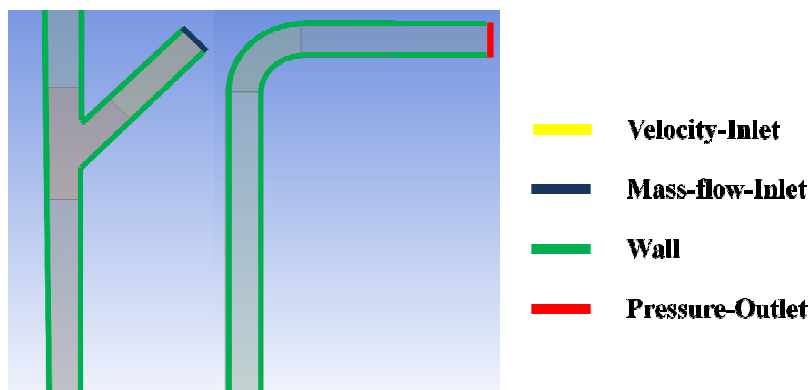





Figura 18: Distribuição das condições de contorno ao longo do equipamento

É importante salientar que as distribuição das condições de contorno ao longo do equipamento demonstradas na Figura 18 serão mantidas para a simulação 3D, alterando-se, por motivos a serem mencionados futuramente, as condições de alimentação do equipamento.

Tabela 8: Condições de operação do equipamento para as simulações 2D.

Região	Alimentação ar	Alimentação catalisador	Temperatura	Pressão rel.	Origem
	8 m/s	0 m/s	298,15 K	-	Petrobras
	0,0653 kg/m ² .s	80 kg/m ² .s	973,15 K	-	Petrobras
	-	-	-	0 atm	-

5.3.3. Simulação 3D

Após a determinação da malha e da modelagem que melhor representam o escoamento em questão, foi configurada uma simulação 3D transiente, utilizando a malha ilustrada na Figura 15, os parâmetros comuns descritos na Tabela 6, as condições de operação detalhadas na Tabela 9 e as escolhas efetuadas para a modelagem descritas na Tabela 10.

Tabela 9: Condições de operação do equipamento para a simulação 3D.




Região	Alimentação ar	Alimentação catalisador	Temperatura	Pressão rel.	Origem
	6,5 m/s	0 m/s	298,15 K	-	Petrobras
	0,01225 kg/m ² .s	15 kg/m ² .s	973,15 K	-	Petrobras
	-	-	-	0 atm	-

Tabela 10: Escolhas de modelagem empregadas na simulação 3D.

1ª Etapa	2ª Etapa	3ª Etapa	4ª Etapa
Tipo de modelo κ - ε	Modelo de arraste / Coeficiente de restituição	Viscosidade friccional	Coeficiente de especularidade
Disperso	Syamlal <i>et al.</i> / 0.9	Sem	0
	Syamlal <i>et al.</i> / 0.99	Schaeffer	0.1
Por Fase	Gidaspow / 0.9		
	Gidaspow / 0.99	Jonhson and Jackson	0.2

Para finalizar, diferentemente do que foi determinado para os casos 2D, onde o critério de parada para a simulação ficou baseado em atingir um tempo total fixo de 20s de escoamento simulado, o caso 3D teve como critério o tempo total de escoamento simulado onde as médias temporais das frações volumétricas de catalisador ao longo do equipamento e da queda de pressão observada se tornavam constantes. Neste caso, o software efetuava a média temporal dessas variáveis em cada passo de tempo e as escrevia em um arquivo .dat, cujos pontos geraram diversos gráficos (ilustrados no próximo capítulo), onde foi possível a

visualização dos comportamentos. Assim que os gráficos ficaram constantes, a simulação foi interrompida. Neste momento, o tempo total de escoamento simulado era de 22s. Importante salientar, também, que, para a realização da simulação 3D, por motivos de convergência, o passo de tempo ficou fixado em 0,0005s. Como forma de referência e, consolidando a idéia de realizar testes de malha e modelagem com uma malha 2D, o tempo total gasto para simular 22s de escoamento 3D com este passo de tempo ficou em torno de 90 dias (utilizando 32 processadores em paralelo do clúster disponível).

6. Resultados e Discussões

Neste capítulo, serão demonstrados e discutidos todos os resultados referentes à metodologia de simulação adotada no trabalho em questão, iniciando pelas respostas obtidas no estudo de convergência de malha, seguindo com uma análise da modelagem proposta e, finalmente, os resultados da simulação 3D, corroborando com todo o procedimento de cálculo adotado.

6.1. Convergência de Malha

Conforme citado anteriormente, dada a dificuldade da realização de um teste de malhas utilizando um modelo geométrico 3D (alto custo computacional), o estudo levou em consideração um corte central do modelo 3D e, a partir da geometria 2D resultante, 6 malhas distintas (configurações e tamanhos descritos no capítulo 5 – Tabela 4) foram geradas.

De posse destas malhas, embora este tipo de escoamento não apresente nenhum tipo de simetria que garantisse a aplicabilidade de uma simulação 2D, simulações planares foram executadas, assumindo-se que todas as malhas sofreriam mesma discrepância pelo efeito da hipótese de simetria e, sendo assim, diante de uma comparação, tais diferenças desapareceriam, restando somente as alterações nas resposta causadas pelo efeito de refino de malha. Dentro da modelagem disponível já apresentada, escolheu-se arbitrariamente um conjunto de configurações de maneira que todas as simulações com as diferentes malhas respeitassem esses parâmetros.

A Figura 19 demonstra o perfil de fração volumétrica média da fase dispersa ao longo do equipamento para todas as malhas 2D simuladas. Mediante uma análise comparativa, é possível perceber que as malhas #1 e #2 (mais grosseiras) apresentam não somente diferenças

no valor da variável exposta, como também fogem ao comportamento da distribuição observado nas malhas restantes.

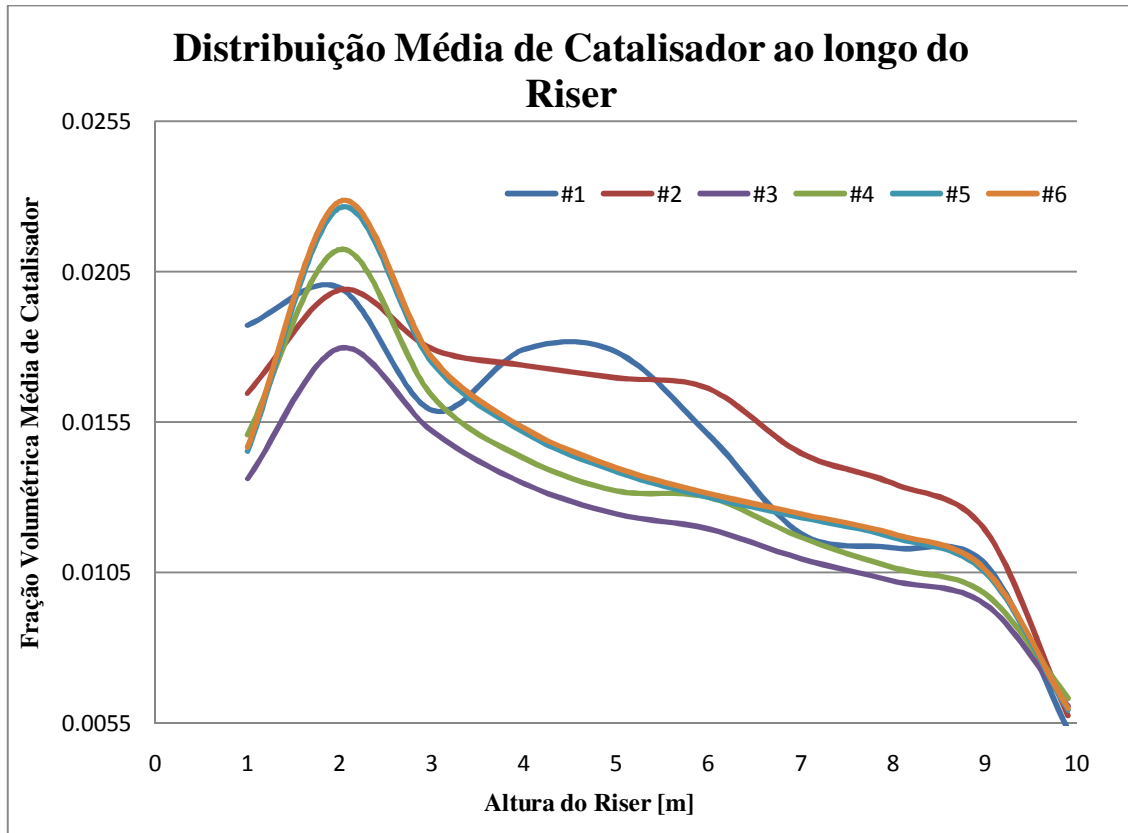


Figura 19: Resposta das diferentes malhas 2D estudadas.

Embora apresentem comportamento semelhante (Figura 20), fica claro o efeito de resposta causado pelo refino entre as malhas #3, #4, #5, sendo que, a partir desta, este efeito desaparece.

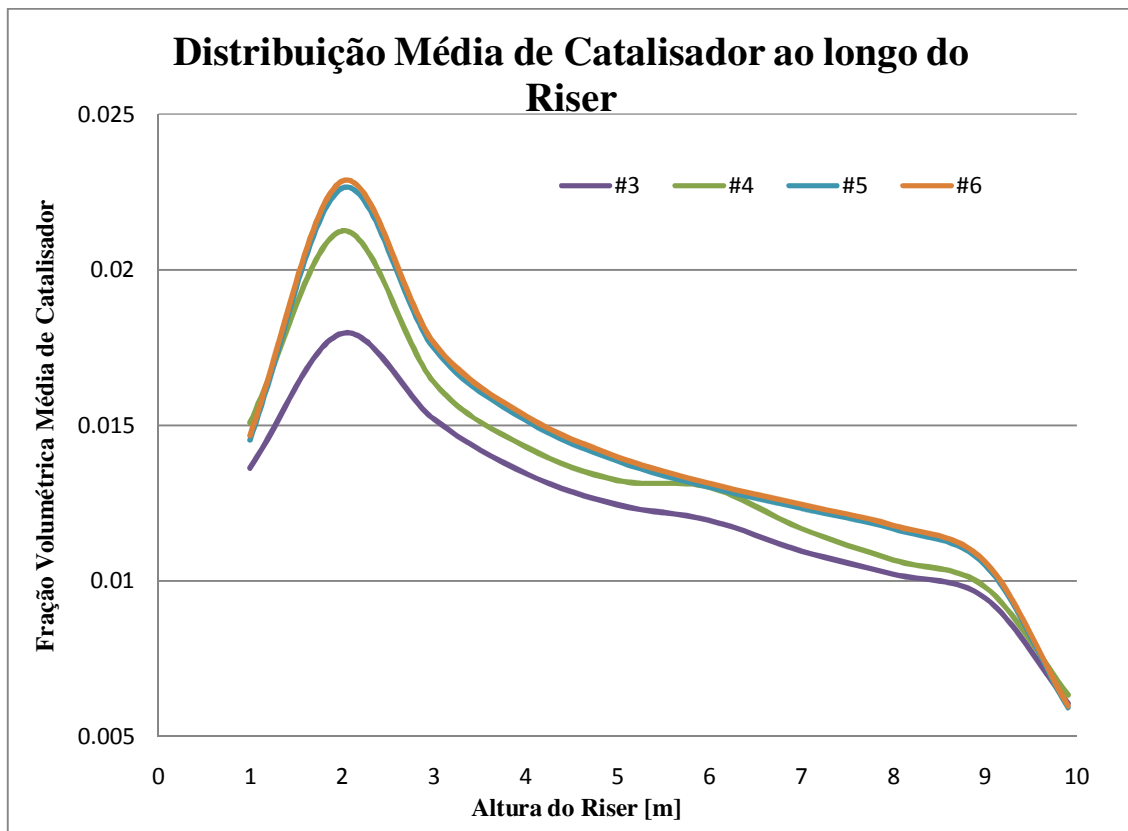


Figura 20: Resposta das diferentes malhas 2D estudadas com filtro nas malhas #1 e #2.

Uma vez encontrada a malha 2D convergida (malha #5), a próxima etapa do trabalho envolveu uma série de estudos 2D quanto à modelagem da simulação, isto é, a escolha dos modelos e parâmetros mais representativos ao problema em questão.

Neste momento, é interessante relembrar que a malha 3D gerada para a simulação final foi gerada de maneira a apresentar no seu corte central a mesma configuração de elementos e nós que a malha 2D #5 apresentava. Para o número de divisões radiais, foi feito um cálculo proporcional entre o comprimento do “diâmetro” 2D e o comprimento da circunferência 3D, o que resultou na multiplicação do número de divisões radiais 2D por π .

6.2. Estudo de Modelagem

Uma vez decidida qual a melhor malha 2D e gerada uma malha 3D fundamentada nos parâmetros da primeira, foram executadas simulações 2D transientes do tipo teste, com o objetivo de definir a modelagem mais adequada para a realização de uma simulação 3D transiente.

Novamente, o trabalho assumiu a hipótese de que, para uma avaliação comparativa, os efeitos causados pela hipótese de simetria planar (2D) seriam cancelados e que as diferenças observadas nos resultados apresentados para cada parâmetro e modelo eram puramente creditáveis à escolha dos mesmos. Além desta simplificação, o estudo de modelagem foi feito em etapas, assumindo que as decisões tomadas na etapa anterior não alterariam mediante as escolhas realizadas no passo seguinte, ou seja, eliminando os efeitos cruzados.

No entanto, entende-se que, para alguns parâmetros, esta hipótese seria pouco aplicável e, de acordo com as etapas para o estudo de modelagem já demonstradas no capítulo 5, é possível perceber que avaliações cruzadas foram realizadas quando julgado necessário.

6.2.1. Tipo de modelo κ - ϵ

A primeira etapa do estudo de modelagem envolveu a avaliação de duas versões para a extensão multifásica do modelo de turbulência κ - ϵ : Dispersa e Por Fase. Os resultados expostos na Figura 21 demonstram que a abordagem Por Fase é inapropriada para a realização de simulações envolvendo este tipo de escoamento.

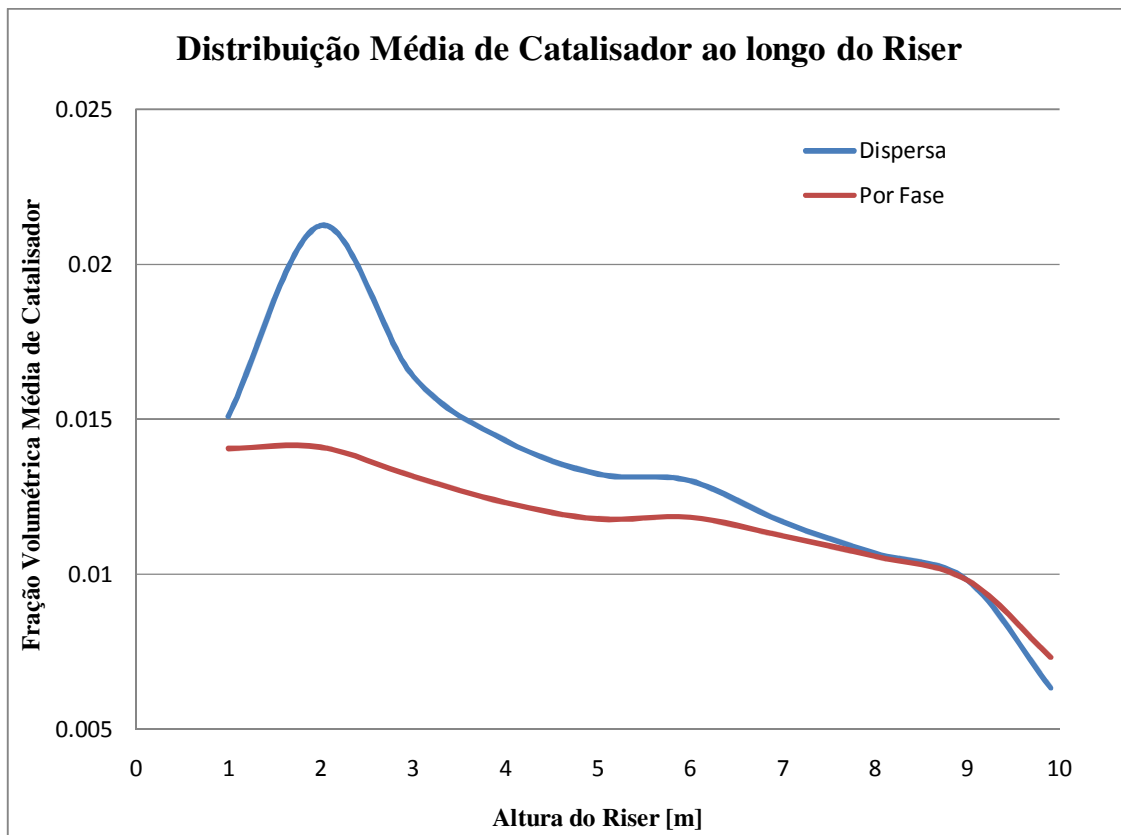


Figura 21: Diferenças observadas entre as abordagens Dispersa e Por Fase.

Ao modelar a turbulência de cada fase separadamente, a abordagem Por Fase não apresenta fontes de erros causadas pelas considerações feitas para inserir o efeito de sólidos nas equações de turbulência da fase contínua. No entanto, dado que a modelagem de turbulência foi desenvolvida, a princípio, para fluidos, tratar a fase sólida com o mesmo conjunto de equações acarretou, neste caso, ao desaparecimento de uma zona clássica de concentração de sólidos, promovida pela alta recirculação próxima à entrada lateral do equipamento.

Consequentemente, embora também apresente limitações ao uso (discutidas no Capítulo 4), a versão Dispersa para a extensão multifásica do modelo de turbulência κ - ϵ foi a opção escolhida para seguir as próximas etapas do trabalho.

6.2.2. Modelo de Arraste / Coeficiente de Restituição

De acordo com o que foi comentado previamente, uma das etapas envolvidas no estudo de modelagem contabilizou o efeito cruzado da escolha de modelos e parâmetros. Esta foi justamente a escolha entre o modelo para o arraste entre as fases e o coeficiente de restituição. Neste momento do trabalho, as decisões situam-se entre as propostas de Gidaspow e Syamlal *et al.* para a troca de *momentum* entre as fases e os valores de entre 0,9 e 0,99 para o coeficientes de restituição (faixa escolhida com base no trabalho de Hartge *et al.*, 2009).

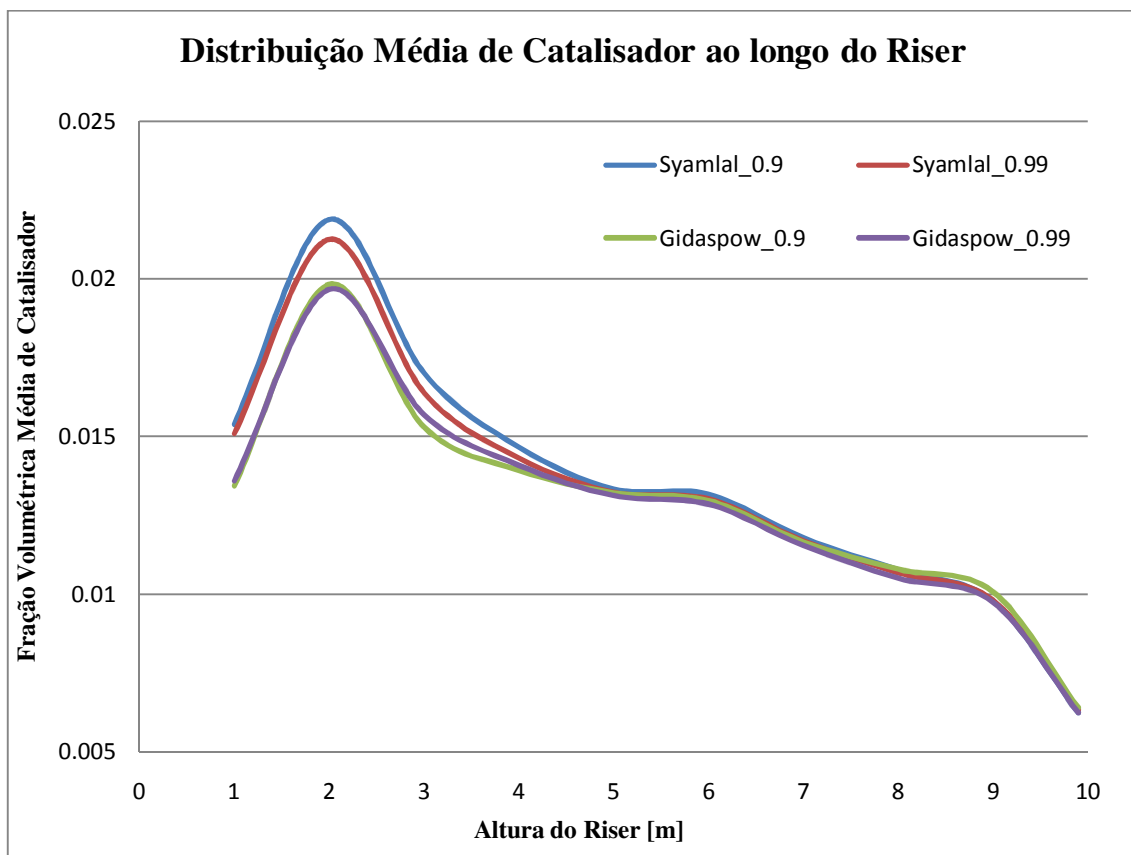


Figura 22: Diferenças observadas entre os modelos de arraste e valores para coeficientes de restituição.

Ao observar a Figura 22, é possível enxergar que o modelo de Gidaspow sofre pouca influência do coeficiente de restituição empregado. Podemos dizer que, por se tratar de um modelo híbrido em termos de fração volumétrica de catalisador, a formulação de Gidaspow se “adapta” aos diferentes valores de coeficiente de restituição, mantendo quase a mesma distribuição em ambas as situações.

Já para a abordagem de Syamlal *et al.* (1987), como comentado pelo próprio manual do FLUENT, percebe-se sua maior adequação aos casos onde a modelagem de Syamlal *et al.* também está sendo empregada no cálculo das tensões cisalhantes (o que ocorre neste estudo), uma vez que a região clássica de alta concentração de sólidos é melhor capturada. Além disto, como era de se esperar, a combinação desta formulação com o menor valor testado para o coeficiente de restituição resulta em um deslocamento na curva de distribuição média de sólidos ao longo do equipamento para regiões mais concentradas.

Em acordo com o objetivo deste trabalho de propor uma modelagem capaz de capturar os efeitos erosivos em um Riser de FCC, foi escolhida a abordagem de Syamlal *et al.* em conjunto com o valor de 0,9 para o coeficiente de restituição, uma vez que esta combinação demonstrou proporcionar o pior cenário erosivo possível (maior concentração média de sólidos ao longo do equipamento).

6.2.3. Viscosidade Friccional

Um dos parâmetros avaliados neste trabalho foi a viscosidade friccional. Simulações foram realizadas com a ausência deste termo, bem como a sua contabilização mediante duas formulações distintas: Schaeffer e Jonhson & Jackson. Os resultados obtidos nesta etapa estão ilustrados na Figura 23.

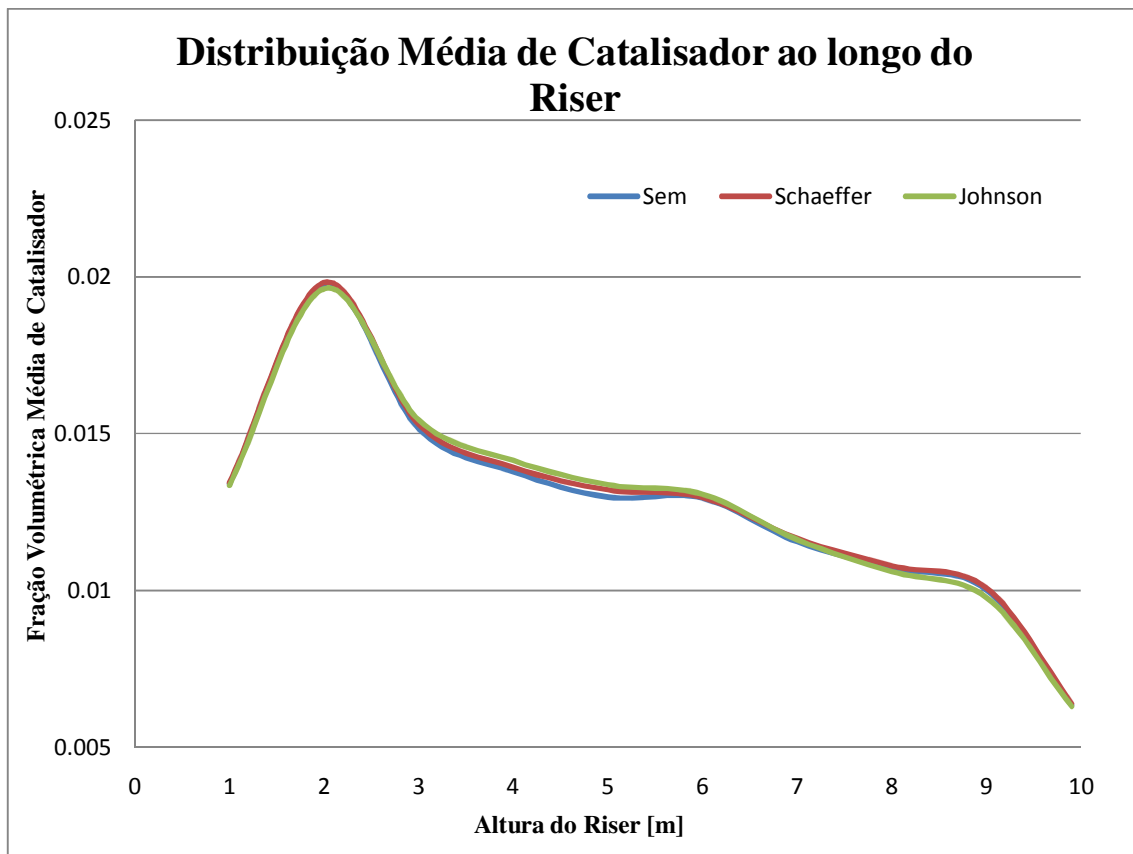


Figura 23: Curvas de distribuição média de catalisador para diferentes modelos de viscosidade friccional.

Nota-se, pela Figura 23, que a presença de um termo de viscosidade friccional na modelagem do escoamento em questão não acarretou em diferenças significativas para a simulação. Conforme descrito no Capítulo 4, este termo contabiliza as fricções entre as partículas e, portanto, assume importante papel nas regiões de empacotamento máximo. Dado que nenhum ponto da distribuição média ao longo do equipamento passa por esta região (fração volumétrica = 0,63), é justificável que a presença deste termo não tenha afetado a resposta do gráfico acima.

Sendo assim, optou-se por fazer uma outra análise nos contornos de tensão cisalhante média na parede do equipamento, buscando diferenças de comportamento nas regiões de empacotamento máximo. Importante ressaltar que, embora as simulações realizadas no software FLUENT sejam puramente 2D, ao abrir os resultados no programa de pós-

processamento, CFD-Post, este extruda automaticamente a superfície 2D em um elemento na sua direção normal (uma vez que os softwares da família CFX não permitem simulações puramente 2D). Esta metodologia de análise provou-se bastante útil neste caso para a melhor visualização dos contornos.

Uma análise da Figuras 24 desvenda a dúvida gerada pela Figura 23 e demonstra que a abordagem de Jonhson & Jackson previu os maiores valores para a tensão cisalhante da fase dispersa nas regiões de empacotamento máximo, sendo assim a formulação mais adequada.

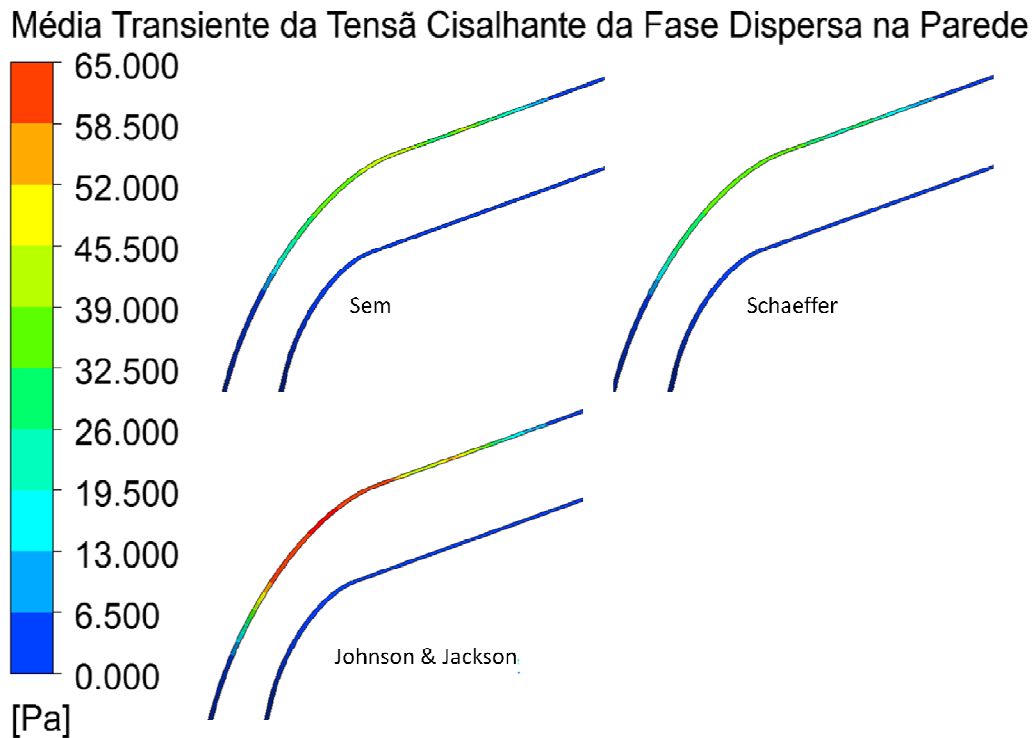


Figura 24: Tensão cisalhante média da fase dispersa prevista na parede 2D.

6.2.4. Coeficiente de Especularidade

A última etapa envolvida no teste de modelagem deste estudo está relacionada com o coeficiente de especularidade da fase dispersa na parede. Bolio *et al.* (1995) estipularam que a faixa operacional para este coeficiente seria entre 0,02 e 0,5, no entanto, este trabalho focou-se em estudar três valores: 0, 0,1 e 0,2.

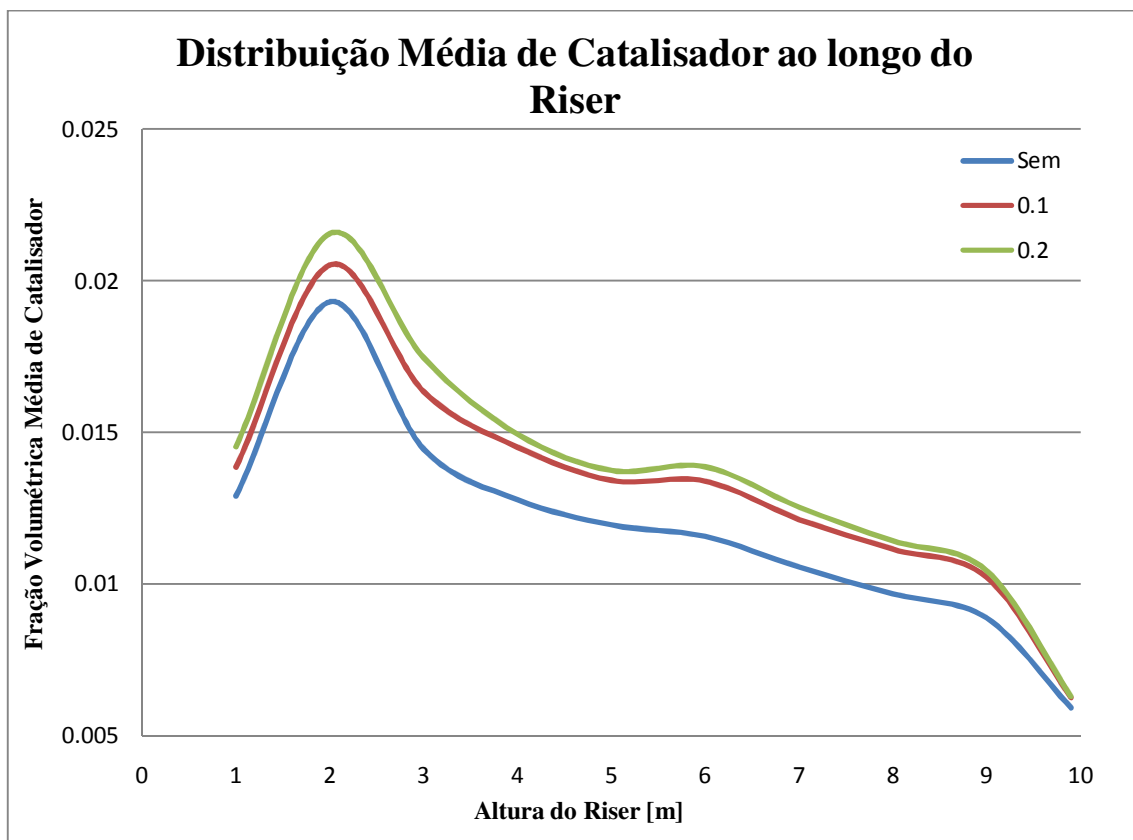


Figura 25: Diferenças observadas para diferentes valores de coeficientes de especularidade.

A Figura 25 ilustra os resultados obtidos quanto à distribuição média de catalisador ao longo do equipamento para cada valor de coeficiente de especularidade. Assim como no caso do coeficiente de restituição, optou-se por utilizar o valor de 0,2 para a simulação 3D, uma

vez que este valor gera a curva de distribuição média de catalisador mais concentrada, o que poderia ser considerado o pior caso do ponto de vista do fenômeno erosivo.

6.3. Critério de Convergência

Após a determinação da modelagem disponível mais adequada ao escoamento estudado, foi realizada uma simulação 3D cuja configuração foi descrita ao final do capítulo 5. Foram utilizadas curvas de fração volumétrica média em determinadas alturas do equipamento, bem como uma curva de queda de pressão no equipamento ao longo do tempo como critério de convergência para a simulação 3D. A simulação foi interrompida quando estas curvas apresentaram inclinação nula (aproximadamente 22s, segundo as Figuras 26 e 27).

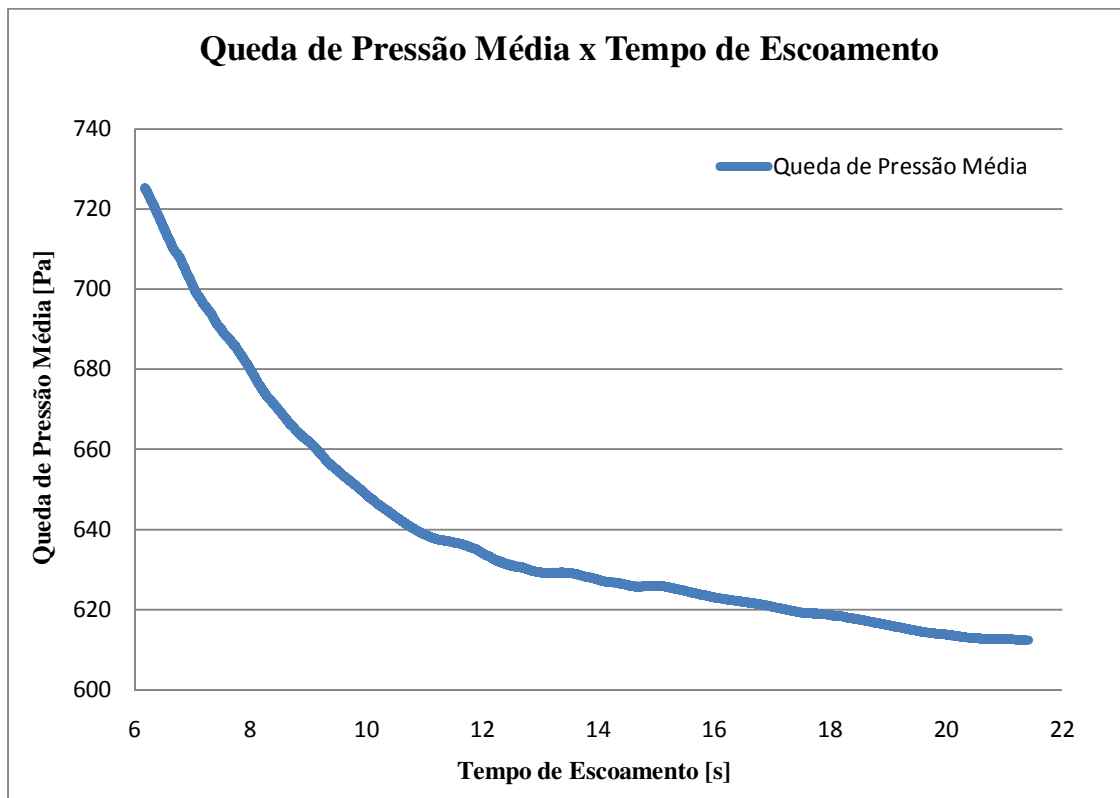


Figura 26: Critério de Convergência 3D #1 – Queda de pressão média.

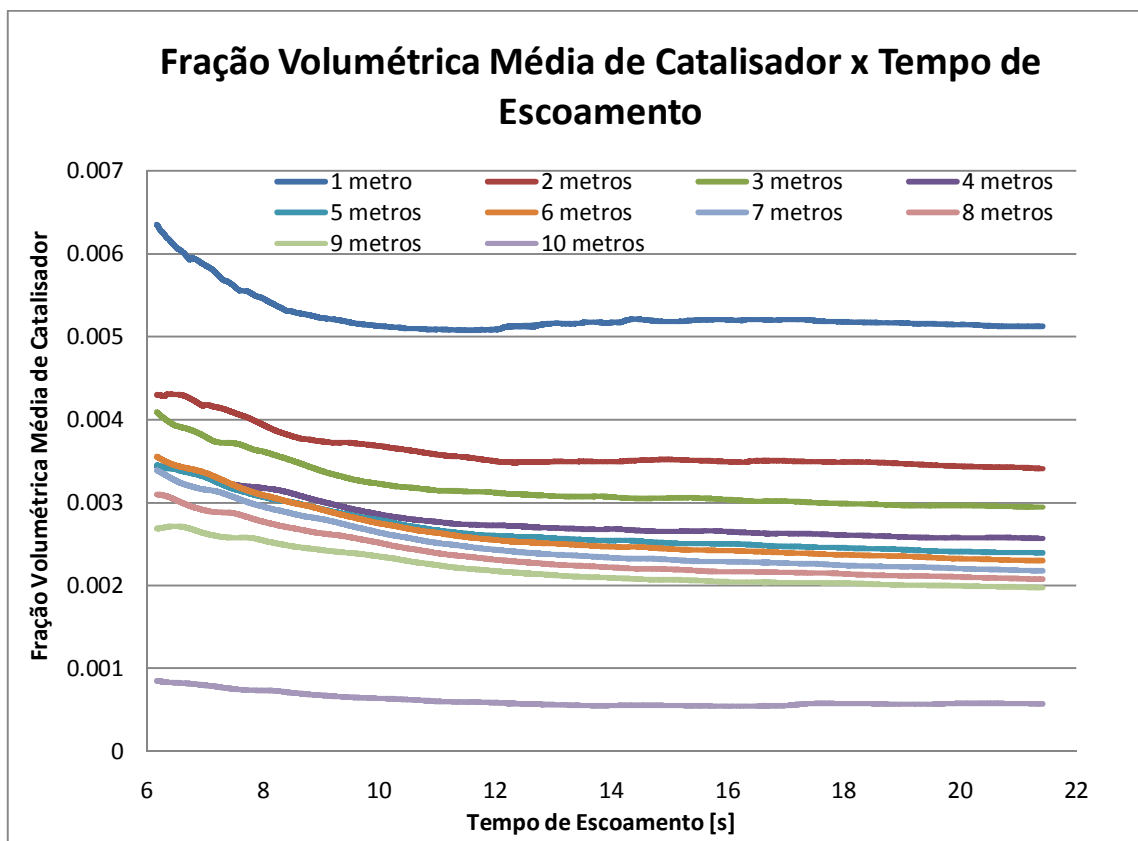


Figura 27: Critério de Convergência 3D #2 – Fração volumétrica média de catalisador.

6.4. Simulação 3D

Após uma análise detalhada da configuração (malha e modelagem) mais promissora, foi realizada uma simulação 3D transiente, com uma alimentação de sólidos menos concentrada ($15 \text{ kg/m}^2\text{s}$) em relação às simulações 2D ($80 \text{ kg/m}^2\text{s}$). Uma vez que o trabalho objetiva o desenvolvimento de uma metodologia de simulação capaz de prever o escoamento no interior de um riser, bem como os pontos mais suscetíveis ao fenômeno erosivo, o ideal seria trabalhar com uma alimentação de sólidos mais concentrada, no entanto, o custo computacional associado era muito maior.

Ainda assim, as Figuras 27, 28, 29 e 30 indicam que a metodologia desenvolvida foi capaz de capturar os efeitos existentes neste tipo de escoamento. Os resultados médios

obtidos nas simulações para a fração volumétrica de sólidos, a queda de pressão e o perfil de velocidades foram compatíveis com o esperado. Um aspecto importante é ressaltar que este trabalho traça um paralelo qualitativo entre o escoamento simulado (virtual) e o existente (real). Dada a inexistência de resultados experimentais para o riser estudado, o trabalho comprova a validade da metodologia desenvolvida por comparação comportamental entre o resultado simulado e o esperado.

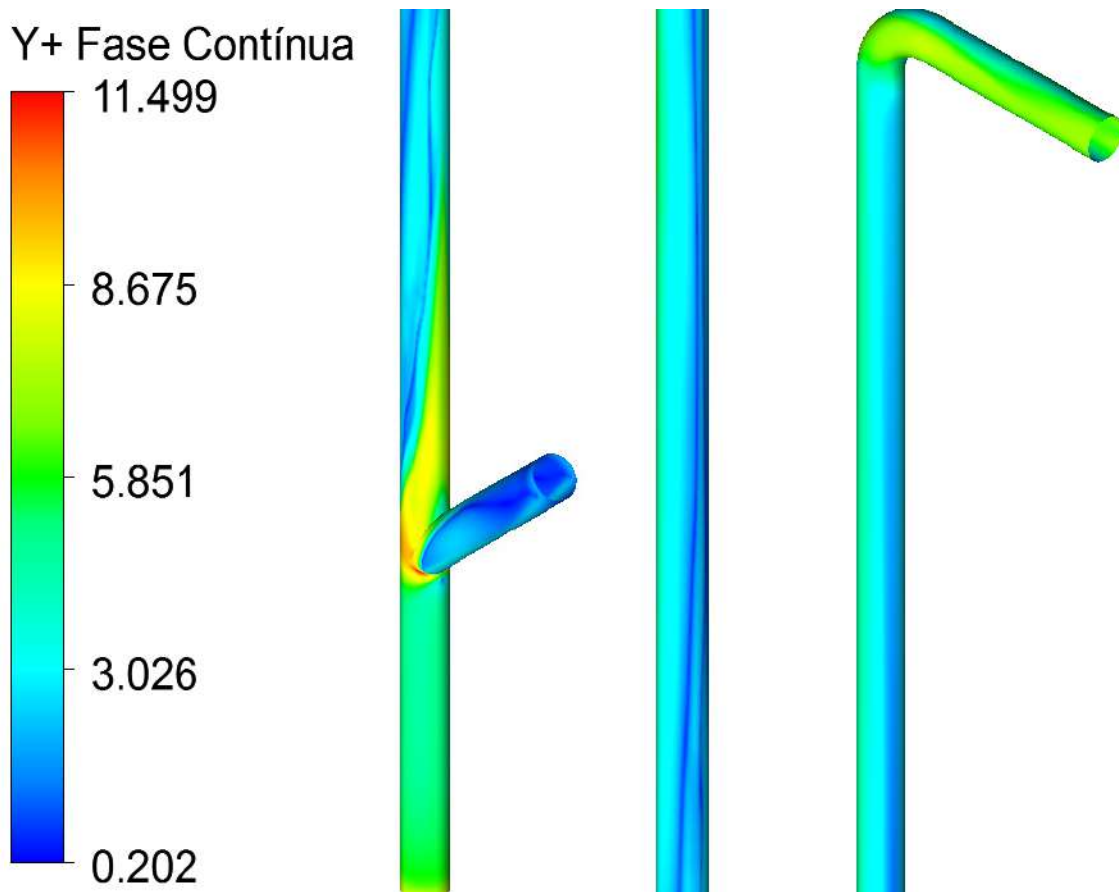


Figura 28: Contornos de fração y^+ para a fase contínua.

A Figura 28 ilustra a adequação da malha ao conjunto do modelo de turbulência e da lei de parede empregados neste estudo. A faixa recomendada pelo manual do usuário do software utilizado (FLUENT, 2010) para um modelo de parede do tipo standard dita que os

valores de y^+ não podem exceder o valor 300 ao longo da parede do domínio. Neste caso, y^+ é um parâmetro adimensional que depende da densidade do fluido, da velocidade turbulenta, da viscosidade do fluido e da distância entre o centróide do primeiro elemento à parede.

As Figuras 29 e 30 ilustram claramente o desenvolvimento de um escoamento core-anular (Gidaspo, 1994) ao longo do equipamento, onde, devido à recirculação desejada para aumentar a eficiência catalítica, os sólidos tendem a acumular nas regiões próximas à parede, diminuindo sua concentração em direção ao centro do equipamento.

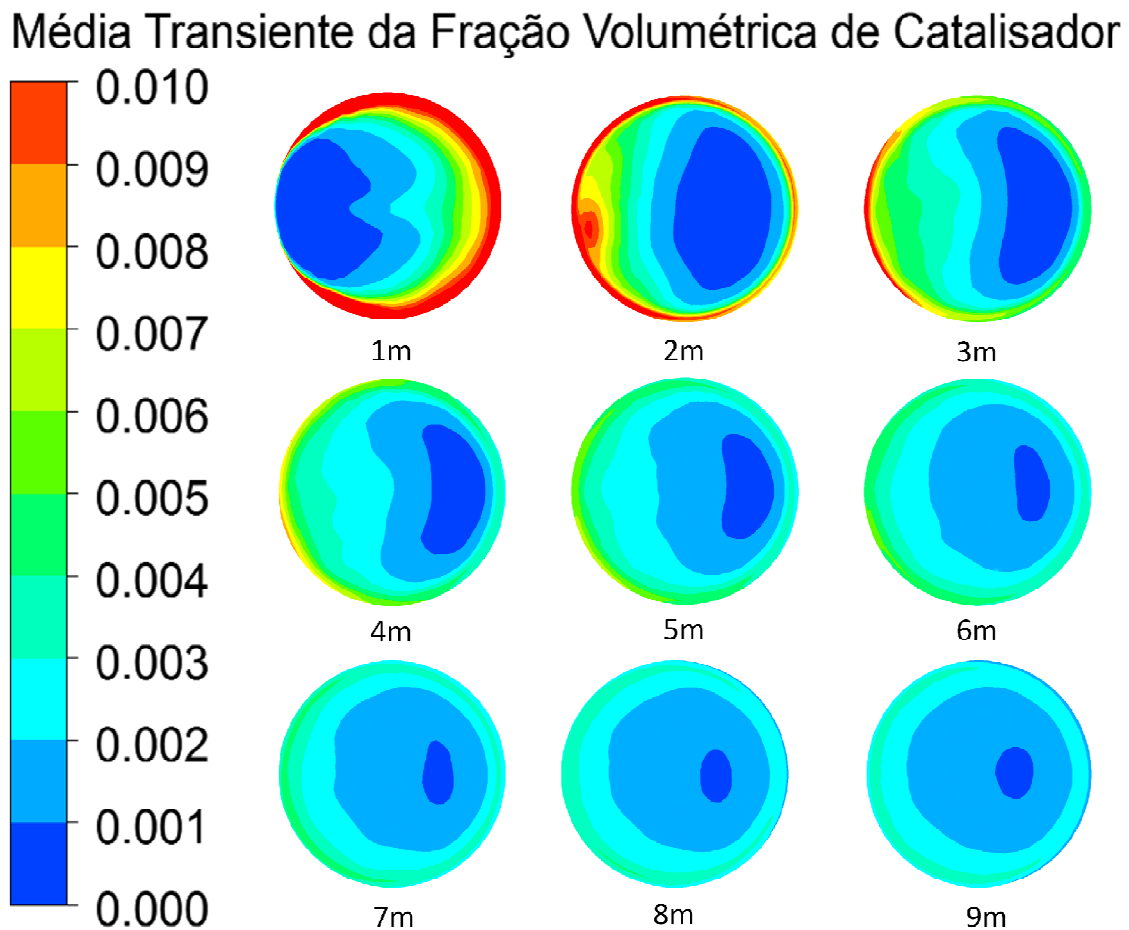


Figura 29: Contornos de fração volumétrica média de catalisador em planos situados em diferentes alturas do equipamento.

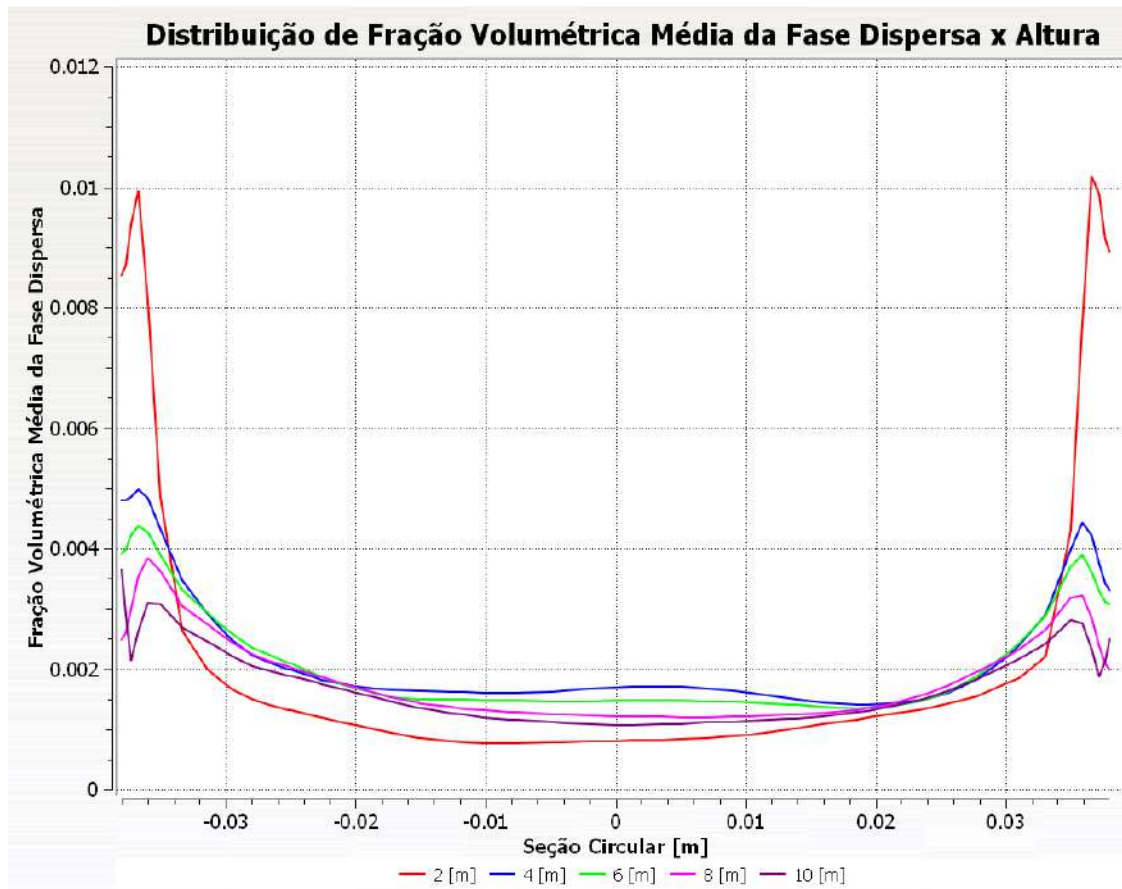


Figura 30: Distribuição radial de fração volumétrica média da fase dispersa ao longo do riser.

As Figura 31 e 32 corrobora com essa análise, demonstrando que os perfis de velocidade média da fase dispersa assumem seus maiores valores no centro do riser, diminuindo com o raio, garantindo o escoamento core-anular (Gidaspow, 1994).

Média Transiente da Componente Y da Velocidade da Fase Contínua

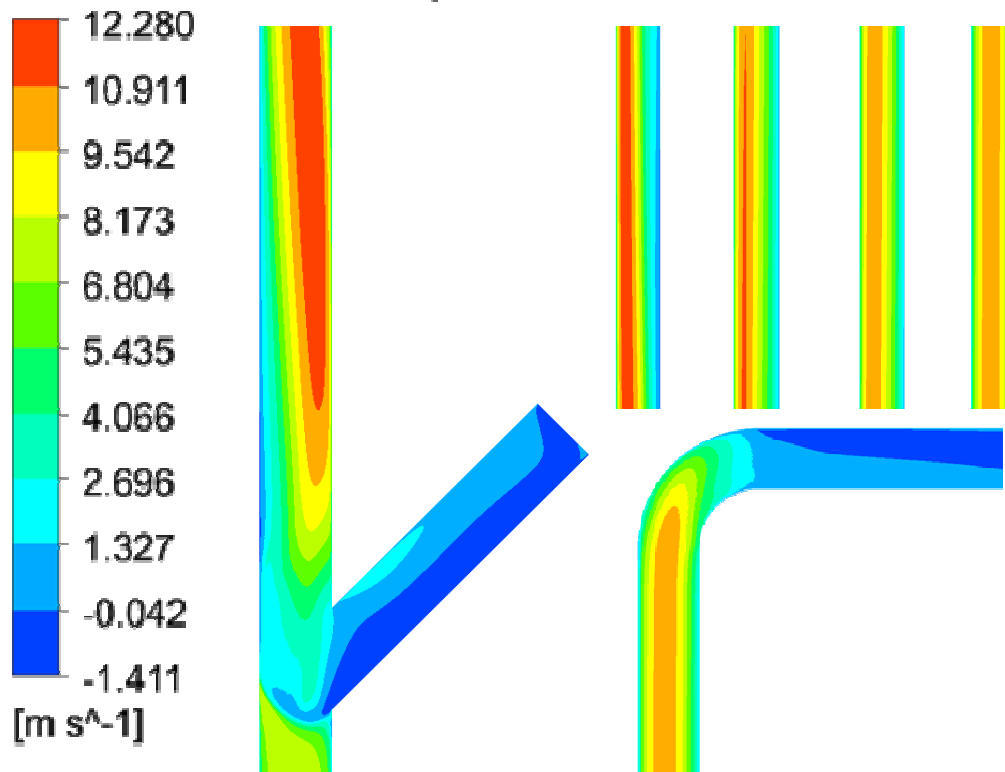


Figura 31: Contornos da componente Y (direção axial) para a velocidade média da fase contínua ao longo do equipamento.

Ao visualizar os contornos na Figura 29, é possível perceber o desvio de simetria na distribuição de sólidos causado pelos efeitos de entrada. Adicionalmente, a Figura 29 indica que, próximo da alimentação, os perfis fogem à simetria radial. Entretanto, com o aumento da altura, estes perfis caminham nesta direção. Considerando que a alimentação é feita lateralmente, já era esperado que os sólidos não apresentassem uma distribuição perfeitamente simétrica na região de baixas alturas.

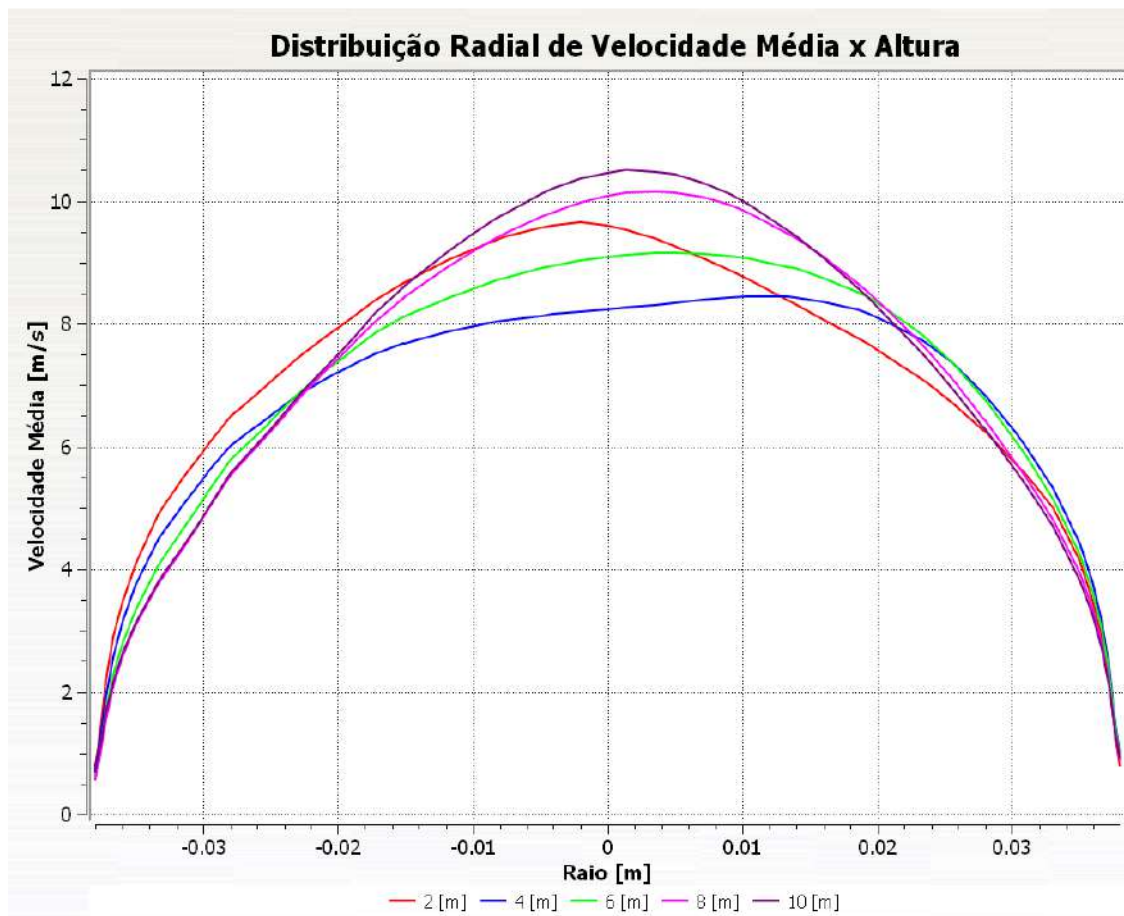


Figura 32: Distribuição radial de velocidade média da fase dispersa ao longo do riser.

A Figura 33 permite a visualização de regiões com inclinações distintas de queda de pressão. Esse tipo de comportamento é clássico em risers com alimentação lateral (Gidaspow, 1994), onde a primeira região representa a perda de carga ainda sem a presença de sólidos, seguida de uma segunda região (pós-alimentação lateral) mais concentrada em sólidos e uma terceira região onde a fase dispersa está diluída no interior do equipamento.

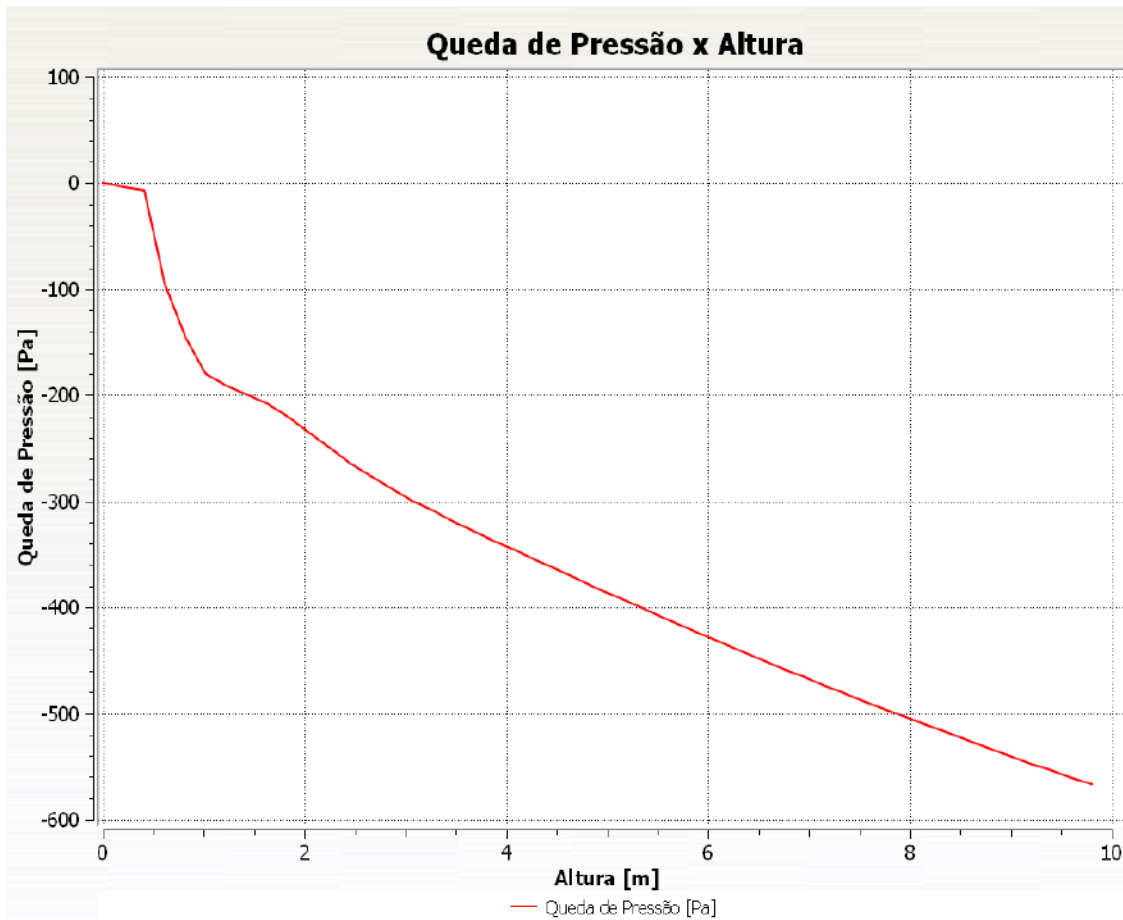


Figura 33: Queda de Pressão Média ao longo do Riser.

Como comentado previamente, a abordagem multifásica Euleriana foi utilizada para modelar ambas as fases e, desta maneira, a visualização das áreas mais prováveis a sofrer desgaste foi possível pela relação direta entre a sua intensidade e a tensão cisalhante média de sólidos na parede. A figura 34 ilustra os contornos desta variável em torno de toda a parede do equipamento, demonstrando os pontos onde o material deverá receber um reforço para aumentar sua durabilidade.

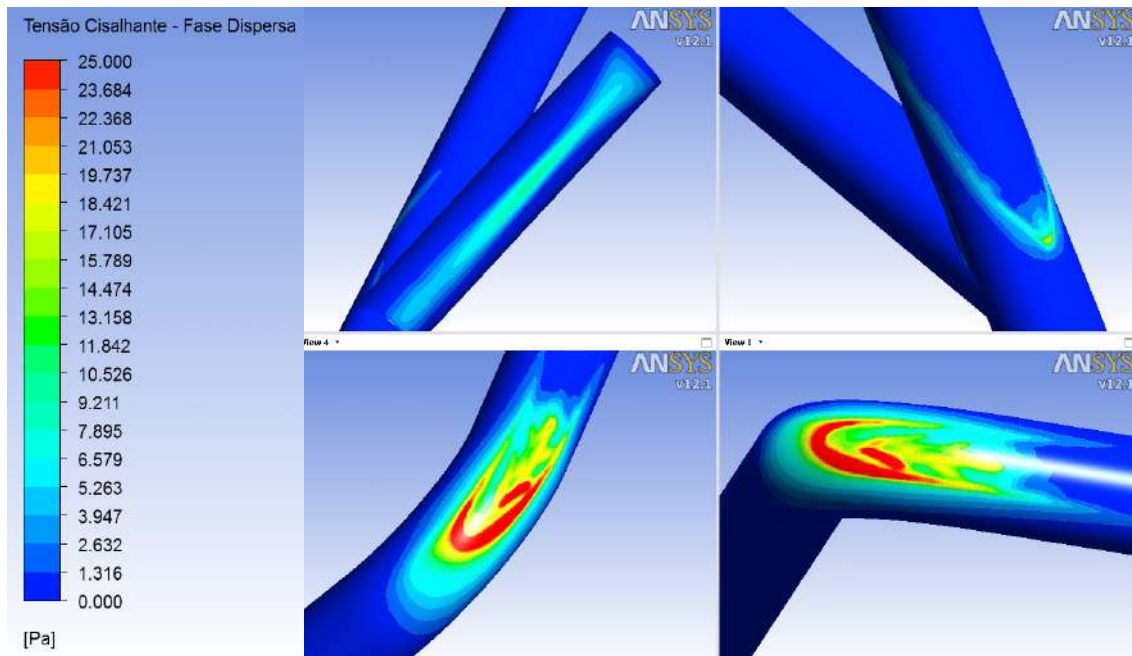


Figura 34: Contornos de Tensão Cisalhante Média da Fase Dispersa na Parede – Erosão.

7. Conclusões Gerais

A modelagem desenvolvida neste trabalho é capaz de prever, qualitativamente, o perfil do escoamento observado no interior de um riser, bem como as áreas de maior potencial ao fenômeno erosivo, mesmo diante das hipóteses e simplificações assumidas. Esta conclusão foi obtida a partir de uma comparação comportamental com resultados clássicos existentes na literatura (Gidaspow, 1994).

Além disto, ao inserirmos os efeitos de entrada que foram negligenciados, por exemplo, no estudo de Santos (2007), foi possível observar um desvio na simetria do perfil de velocidades na região de baixas alturas.

- **Sugestões para trabalho futuros**

Como trabalho futuro, sugere-se a avaliação quantitativa desta modelagem para um riser já existente (com resultados experimentais documentados), com uma alimentação de sólidos mais concentrada (pode-se, inclusive, avaliar o desempenho da modelagem DDPM – *Dense Discrete Phase Model* – uma extensão recente da abordagem Lagrangeana para escoamentos densos).

Sugere-se também avaliar o desempenho de diversas geometrias de topo para o riser, buscando uma minimização do processo erosivo que é bastante intenso nessa região. Mais uma vez, a modelagem DDPM poderia ser empregada, uma vez que, ao utilizarmos uma abordagem Lagrangeana, é possível medir diretamente o grau de erosão presente no equipamento.

Neste trabalho, a avaliação 3D foi realizada com uma alimentação de sólidos diluída. Em se dispor de melhores recursos computacionais, uma avaliação com uma alimentação mais concentrada poderá ser feita para avaliar a extensão desta modelagem.

8. Referências Bibliográficas

HUILIN, L., GIDASPOW, D., Hydrodynamics of binary fluidization in a riser: CFD simulation using two granular temperatures, *Chemical Engineering Science*, n.58, p.3777-3792, Agosto 2003.

NERI, A., GIDASPOW, D., Riser Hydrodynamics: Simulation using Kinetics Theory. *AIChE Journal*, v.46, n.1, 2000.

ROSA, L.M Simulação de Reações e Consumo de Calor em Reatores Riser. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas-SP, 2002.

C.K.K. LUN, S.B. SAVAGE D.J. JEFFERY, and N. CHEPUMY, Kinetic Theories for Granular Flow : Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flow Field, *Journal Fluid Mechanics.*, 140, pp. 223-256, 1984.

GIDASPOW, D., Multiphase Flow and Fluidization, *Academic Press*, 1994.

SAMUELSBERG, A., HJERTAGER, B. H., Computational Modeling of Gas/Particle Flow in a Riser. *AIChE Journal*, v. 42, n. 6, p. 1536-1546, 1996.

BASTOS, J.C.S.C., Simulação do Escoamento Gás-Sólido em um Duto Cilíndrico Vertical em Leito Fluidizado Rápido Aplicando a Técnica CFD. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas-SP, 2005.

ANSYS FLUENT, *FLUENT 12.1 Solver Modelling*. Ansys Inc. Canonsburg, USA, 2010.

ANSYS FLUENT, *FLUENT 12.1 Solver Theory*. Ansys Inc. Canonsburg, USA, 2010.

ANSYS FLUENT, *FLUENT 12.1 Users Guide*. Ansys Inc. Canonsburg, USA, 2010.

ALVES, JOSE JAILSON NICACIO. Modelagem Fenomenológica e simulação bidimensional fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado circulante, Dissertação de Doutorado, UNICAMP, Campinas-SP, 1998

SOUZA, JEFERSON ÁVILA. Simulação numérica e otimização termodinâmica de *risers* de craqueamento catalítico em leito fluidizado para a máxima produção de combustíveis. Dissertação de Doutorado, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2004.

RIBEIRO, DANIEL DA CUNHA. Implementação de um modelo de fechamento em riser de FCC através de um código comercial CFD, Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas-SP, 2001

Introdução a fluidodinâmica Computacional, Escola Piloto, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro-RJ.

MALISKA, C.R (2004). *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. 2ª ed. LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A. Rio de Janeiro.

ABADIE, E. Relatório da Petrobras sobre: Craqueamento Catalítico, Rio de Janeiro-RJ, 1997

- RANADE, VIVEK V. MODELLING OF SOLID FLOWS IN FCC RISER REACTOR FULLY DEVELOP FLOW, Second International conference on CFD in Mineral and Process Industries, Melbourne, Australia, 1999.
- MASSARANI, G., Fluidodinâmica em Sistemas Particulados, E-Papers Serviços Editoriais, 2002.
- ROPELATO, K., CREMASCO, M.A., MEIER, H. F., *Modelagem 3D e Simulação Dinâmica do Escoamento gás Sólido em Reator Downer*. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas-SP, 2004.
- GAO, J., XU, C., LIN, S., YANG, G., Advanced Model for Turbulent Gas-Solid Flow and Reaction in FCC Riser Reactors, *AIChE Journal*, v. 45, n. 5, p.1095-1112, 1999.
- LEVENSPIEL, O., KUNII, D., Fluidization Engineering, *Butterworth-Heinemann*, 2^o ed., 1990.
- GAO, J., XU, C., LI, W., WANG, G., LAN, X., CFD Modeling of gas-solid flow and cracking reaction in two-stage riser FCC reactors, *Chemical Engineering Science*, v. 64, p.3847-3858, 2009.
- CORNELISSEN, J. T., TAGHIPOUR, F., ESCUDIÉ, R., ELLIS, N., GRACE, J. R., CFD modeling of a liquid-solid fluidized bed, *Chemical Engineering Science*, v. 62, p.6334-6348, 2007.

MCKEEN, T., PUGSLEY, T., Simulation and experimental validation of a freely bubbling bed of FCC catalyst, *Powder Technology*, v. 129, p. 139-152, 2003.

HARTGE, E.U., RATSCHOW, L., WISCHNEWSKI, R., WHERTER, J., CFD-simulation of a circulating fluidized bed riser, *Particuology*, v. 7, p. 283-296, 2009.