

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
ENGENHARIA DE PROCESSOS**

**MODELAGEM 3D E SIMULAÇÃO DINÂMICA DO
ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO EM REATOR *DOWNER***

Autora: Karolline Ropelato

Orientador: Prof. Dr. Marco Aurélio Cremasco

Co-Orientador: Prof. Dr. Henry França Meier

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas - São Paulo

Março – 2004

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

| | |
|------------|--|
| UNIDADE | DC |
| Nº CHAMADA | UNICAMP |
| | R681m |
| V | EX |
| TOMBO | 595 30 |
| PROC. | 16-2 117/04 |
| | <input type="checkbox"/> <input checked="" type="checkbox"/> |
| PREÇO | 11,00 |
| DATA | 14/09/2004 |
| Nº CPD | |

Bib Id 321321

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

R681m Ropelato, Karolline
Modelagem 3D e simulação dinâmica do escoamento gás-sólido em reator DOWNER / Karolline Ropelato. -- Campinas, SP: [s.n.], 2004.

Orientadores: Marco Aurélio Cremasco e Henry França Meier.

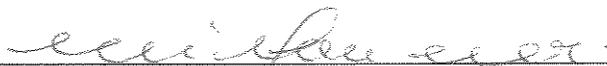
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Métodos de simulação. 2. Modelos matemáticos. 3. Reatores fluidizados. 4. Escoamento Bifásico. 5. Escoamento turbulento. I. Cremasco, Marco Aurélio. II. Meier, Henry França. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

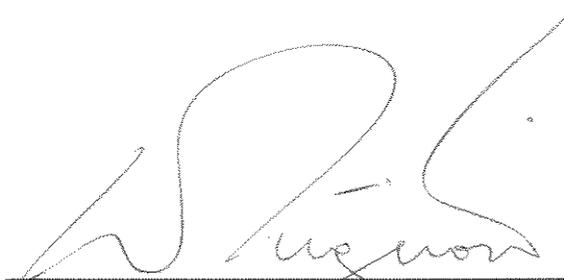
Dissertação de Mestrado defendida por Karolline Ropelato e aprovada em 25 de março de 2004 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Marco Aurélio Cremasco – Orientador



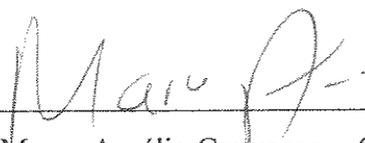
Dr. Milton Mori



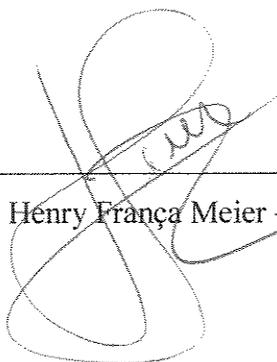
Dr. Waldir Pedro Martignoni

200418673

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química.



Prof. Dr. Marco Aurélio Cremasco – Orientador



Dr. Henry França Meier – Co-Orientador

Este trabalho de dissertação é dedicado a todos os meus amigos, estando eles próximos ou distantes, tanto no tempo como no espaço, e em especial à minha família e ao Júnior, pela compreensão, carinho e amor.

Agradeço aos meus orientadores, os professores Marco Aurélio Cremasco e Henry França Meier, pela paciência, incentivo e confiança.

Aos amigos do LFC, “Boca”, Cíntia, Dirceu, Fábio e “Vini”, pela amizade, companheirismo e as discussões de fluidodinâmica.

Aos colegas do LMSPQ, pelo suporte, onde desenvolvi minhas simulações no início do mestrado em especial a “Graça”, Anna Ritta e “Leo”.

À Andréia, Elis, “Josi”, e Karen, eternas amigas.

Esta Dissertação faz parte do Projeto FINEP/Petrobras, Convênios Funcamp 2513 e 2552, respectivamente.

*“Duvidar de tudo ou acreditar em tudo
são duas soluções igualmente cômodas:
uma e outra nos dispensam de refletir”.*

(Jules Henri Poincaré)

Abstract

The present work provides an unsteady, three-dimensional, two-phase, inviscid model of the solid phase, as an approach of the flow dynamics inside downer reactors of FCC processes, and the validation of the proposed model against experimental data available on the literature. Four geometrical configurations were evaluated to validate the proposed model: downer with an annular axial inlet, downer with two cross radial inlets, downer with one tangential inlet and a downer with four transversal inlets. The main conclusions about the grid size analysis for the unsteady, three-dimensional and multi-phase flow shows the correct grid independence results to solve partial differential equations system. Studies involving the advection scheme were also performed. By comparison between the numerical predictions on this work and experimental data from literature it is possible to conclude that the results present good agreement against each other. In fact, the inviscid model of the solid phase, despite of its simplicity modeling, with 3D transient features, could reproduce quite well the main phenomenological characteristics of the turbulent gas-solid flow. In the 90's decades, Chinese's started to study the FCC process gravity concurrently, studying downflow (downer reactors) instead of upflow behaviors (riser reactors). The experimental studies show fuel increases production and decreases of secondary products formation. This a classical example of a change on conceptual between the downer and riser approaches in industrial facilities.

Resumo

O tema central desta investigação consiste no desenvolvimento de um modelo matemático multifásico (gás-sólido) tridimensional e transiente, como uma aproximação da dinâmica do escoamento em reatores *downer* de FCC, ampliando horizontes, com a corroboração ou validação do modelo com dados experimentais da literatura, nos estudos de incremento de performance do processo de FCC. Foram testadas quatro configurações geométricas para a validação do modelo proposto: *downer* com entrada axial anular; *downer* com entrada radial cruzada; *downer* com entrada radial tangencial e o *downer* com entrada transversal. As principais conclusões obtidas a partir de um estudo de verificação, observando a influência do número de elementos da malha numérica para uma geometria 3-D e um modelo matemático multifásico, transiente e turbulento, bem como do esquema de interpolação, determinando o número adequado de elementos para a resolução das equações diferenciais parciais. Além do estudo de validação, avaliando a influência das condições de alimentação na distribuição de partículas, determinando a melhor configuração geométrica entre as estudadas, para um perfil de distribuição uniforme de partículas no leito do reator, validando o modelo matemático multifásico (gás-sólido) tridimensional e transiente, para a predição da dinâmica do escoamento em reatores *downer* de FCC, com a corroboração a partir de dados experimentais disponíveis na literatura. Convencionalmente a tecnologia de FCC usa reatores de leito móvel ascendente conhecidos por reator *riser*. Os chineses, fortemente na década de 90, resolveram analisar o processo de "ponta cabeça", ou seja, em vez de fluxos ascendentes de partículas e gás, estudaram esse mesmo contato considerando-o descendente, o *downer*. Como resultado, verificaram o aumento da produção de gasolina e diminuição de produtos secundários. Eis o exemplo clássico da modificação conceitual sobre o já existente.

Sumário

| | |
|---|-----------|
| Abstract | xiii |
| Resumo | xv |
| Lista de Figuras | xxi |
| Nomenclatura | xxiii |
| CAPÍTULO 1. CONSIDERAÇÕES INICIAS | 1 |
| 1.1 Motivação e o tema da dissertação | 1 |
| 1.2 Objetivos da dissertação | 4 |
| 1.3 Organização da dissertação | 4 |
| CAPÍTULO 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA | 7 |
| 2.1 A Tecnologia de craqueamento catalítico em leito fluido (tecnologia de FCC) | 7 |
| 2.2 Os reatores de fcc: <i>riser</i> versus <i>downer</i> | 9 |
| 2.3 Trabalhos experimentais com reator <i>downer</i> | 13 |
| 2.4 Escolha da abordagem experimental - numérica | 15 |
| 2.5 A técnica numérica empregada | 19 |
| 2.5.1 Os Códigos de CFD | 20 |
| 2.5.2 O código comercial CFX 4.4 | 22 |
| CAPÍTULO 3. MODELAGEM MATEMÁTICA | 25 |
| 3.1 Modelagem matemática monofásica | 26 |
| 3.1.1 Equação instantânea da conservação de massa total (equação da continuidade) | 26 |
| 3.1.2 Equação instantânea da conservação da quantidade de movimento (equação do <i>momentum</i>) | 28 |
| 3.1.3 Equações de conservação médias temporais | 32 |
| 3.2 Modelagem matemática multifásica | 33 |

| | | |
|---|--|-----------|
| 3.2.1 | Equações de conservação (Modelo bifásico) | 35 |
| 3.2.2 | Equações constitutivas | 36 |
| 3.3 | Condições iniciais e de contorno | 40 |
| 3.4 | Modelo completo (3-D e transiente) | 40 |
| CAPÍTULO 4. MÉTODOS NUMÉRICOS E O CÓDIGO DE CFD | | 43 |
| 4.1 | Aspectos gerais sobre o método dos volumes finitos (MVF) | 44 |
| 4.1.1 | Discretização do termo transiente | 46 |
| 4.1.2 | Discretização do termo referente à contribuição convectiva | 47 |
| 4.1.3 | Discretização do termo referente à contribuição difusiva | 47 |
| 4.1.4 | Discretização do termo fonte | 47 |
| 4.1.5 | Esquemas de interpolação | 48 |
| 4.1.6 | Forma discreta da equação geral de conservação | 49 |
| 4.1.7 | Acoplamento pressão velocidade | 49 |
| 4.2 | Construção de geometria e malha numérica no pré-processador | 50 |
| 4.3 | Visualização científica | 54 |
| CAPÍTULO 5. ESTUDOS DE CASO PARA EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA | | 57 |
| 5.1 | Dados experimentais para os estudos de validação e verificação | 57 |
| 5.2 | Estudos de caso | 60 |
| 5.2.1 | Estudo de CASO 1: Entrada 3-D axial anular | 60 |
| 5.2.2 | Estudo de CASO 2: Entrada 3-D radial cruzada | 62 |
| 5.2.3 | Estudo de CASO 3: Entrada 3-D tangencial | 63 |
| 5.2.4 | Estudo de CASO 4: Entrada transversal | 64 |
| 5.2.5 | Principais características numéricas | 65 |
| 5.3 | Principais observações | 65 |
| CAPÍTULO 6. RESULTADOS E DISCUSSÕES | | 67 |
| 6.1 | Tipo de entrada do reator | 67 |
| 6.2 | Malha numérica | 70 |

| | | |
|---|-----------------------------|-----------|
| 6.3 | Esquema de interpolação | 73 |
| 6.4 | Corroboração do modelo | 75 |
| 6.5 | Visualização dos resultados | 81 |
| CAPÍTULO 7. CONCLUSÕES E SUGESTÕES | | 95 |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | | 99 |

Lista de Figuras

| | |
|--|----|
| <i>Figura 2.1: Representação esquemática do processo de FCC (ABADIE, 1997).</i> | 8 |
| <i>Figura 2.2: Representação esquemática de uma unidade de FCC (CREMASCO, 2002).</i> | 10 |
| <i>Figura 2.3: Escoamento da fase particulada no riser e downer (CREMASCO, 2002).</i> | 11 |
| <i>Figura 2.4: Unidades do CFX 4.4.</i> | 22 |
| <i>Figura 3.1: Balanço material para um volume de controle.</i> | 27 |
| <i>Figura 4.1: Balanço de massa para um volume de controle.</i> | 44 |
| <i>Figura 4.2: Seção transversal da malha numérica usada nos experimentos numéricos deste trabalho.</i> | 50 |
| <i>Figura 4.3: Seção transversal da entrada com modificações.</i> | 51 |
| <i>4.4: Malha numérica: (a) CASO 1; (b) CASO 2.</i> | 52 |
| <i>4.5: Malha numérica: (a) CASO 3; (b) CASO 4.</i> | 53 |
| <i>Figura 4.6: Visualização da geometria e da malha numérica com o código CFX.</i> | 54 |
| <i>Figura 4.7: Mapa da distribuição radial da fração volumétrica de sólidos: (a) caso 4; (b) altura de 0,44m; (c) altura de 1,45 m; (d) altura de 2,90m.</i> | 55 |
| <i>Figura 5.2: Visualização da geometria e da malha numérica para o CASO 1.</i> | 61 |
| <i>Figura 5.3: Visualização da geometria e da malha numérica para o CASO 2.</i> | 62 |
| <i>Figura 5.4: Visualização da geometria e da malha numérica para o CASO 3.</i> | 63 |
| <i>Figura 5.5: Visualização da geometria e da malha numérica para o CASO 4.</i> | 64 |
| <i>Figura 6.1: Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da distribuição da fração volumétrica de sólidos para uma altura de 1,45m.</i> | 68 |
| <i>Figura 6.2: Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da distribuição da fração volumétrica de sólidos para uma altura de 2,21m.</i> | 69 |
| <i>Figura 6.4: Avaliação da malha numérica para altura de 1,45m (CASO 4).</i> | 71 |
| <i>Figura 6.5: Avaliação da malha numérica para altura de 2,21m (CASO 4).</i> | 71 |
| <i>Figura 6.7: Comparação do esquema de interpolação upwind e higher upwind para altura de 1,45m (CASO 4).</i> | 73 |
| <i>Figura 6.8: Comparação do esquema de interpolação upwind e higher upwind para altura de 2,21m (CASO 4).</i> | 74 |
| <i>Figura 6.9: Comparação do esquema de interpolação upwind e higher upwind para altura de 2,90m (CASO 4).</i> | 74 |
| <i>Figura 6.11: Visualização da validação do modelo para a seção de 2,21m de altura.</i> | 76 |

| | |
|--|----|
| <i>Figura 6.12: Visualização da validação do modelo para a seção de 2,90m de altura.</i> | 77 |
| <i>Figura 6.13: Distribuição da fração volumétrica de sólidos no reator para a seção de 1,45m de altura.</i> | 78 |
| <i>Figura 6.14: Distribuição da fração volumétrica de sólidos no reator para a seção de 2,21m de altura.</i> | 78 |
| <i>Figura 6.15: Distribuição da fração volumétrica de sólidos no reator para a seção de 2,90m de altura.</i> | 79 |
| <i>Figura 6.16: Distribuição radial da componente axial da velocidade axial dos sólidos para a seção de 1,45m de altura.</i> | 79 |
| <i>Figura 6.17: Distribuição radial da componente axial da velocidade axial dos sólidos para a seção de 2,21m de altura.</i> | 80 |
| <i>Figura 6.18: Distribuição radial da componente axial da velocidade axial dos sólidos para a seção de 2,90m de altura.</i> | 80 |
| <i>Figura 6.19: Mapa da distribuição da fração volumétrica de sólidos para o CASO 1.</i> | 83 |
| <i>(a) $H= 0,44$ m; (b) $H=1,45$ m e (c) $H=2,90$ m.</i> | 83 |
| <i>Figura 6.20: Mapa da distribuição da fração volumétrica de sólidos para o CASO 2.</i> | 85 |
| <i>(a) $H= 0,44$ m; (b) $H=1,45$ m e (c) $H=2,90$ m.</i> | 85 |
| <i>Figura 6.21: Mapa da distribuição da fração volumétrica de sólidos para o CASO 3.</i> | 87 |
| <i>(a) $H= 0,44$ m; (b) $H=1,45$ m e (c) $H=2,90$ m.</i> | 87 |
| <i>Figura 6.22: Mapa de fração volumétrica para o CASO 4.</i> | 89 |
| <i>(a) $H= 0,44$ m; (b) $H=1,45$ m e (c) $H=2,90$ m.</i> | 89 |
| <i>Figura 6.23: Mapa da relação fração volumétrica, velocidade axial e massa específica da partícula para o CASO 4. (a) $H= 0,44$ m; (b) $H=1,45$ m e (c) $H=2,90$ m.</i> | 91 |
| <i>Figura 6.24: Representação da dinâmica para fração volumétrica na alimentação para o CASO4.</i> | 92 |
| <i>Figura 6.25: Representação da dinâmica para fração volumétrica na altura de 1,45 do reator para o CASO4.</i> | 93 |

Nomenclatura

Letras Latinas

| | |
|-------|---|
| A | Área [m^2] e coeficiente matricial |
| C | Coefficiente convectivo e concentração de partículas [Kg/m^3] |
| C_d | Coefficiente de arraste [$Kg.m^3/s$] |
| D | Tensor taxa de deformação [N/m^2] |
| D | Diâmetro [m] e operador difusão |
| d | Diâmetro da partícula [m] |
| l | Ponto leste da malha |
| e | Vetor unitário |
| F | Vetor força [N] |
| ξ | Fração volumétrica |
| G | Geração de energia cinética turbulenta |
| g | Força campo gravitacional [m/s^2] |
| H | Comprimento vertical [m] |
| h | Distância entre os nós [m] |
| I | Tensor identidade |
| k | Energia cinética turbulenta [m^2/s^2] |
| L | Comprimento horizontal [m] |
| l | Comprimento de mistura [m] |

| | |
|----|---|
| n | Vetor normal |
| P | Ponto central do volume de controle |
| p | Pressão [Pa] |
| Q | Vazão volumétrica [m^3/s] |
| q | Escala de velocidade [m/s] |
| s | Tensor cisalhante [N/m^2] |
| S | Termo fonte |
| SP | Coefficiente angular de linearização |
| SU | Coefficiente linear |
| T | Tensor tensão [N/m^2] |
| t | Tempo [s] |
| U | Velocidade axial [m/s] |
| V | Volume [m^3] |
| v | Vetor velocidade [m/s] |
| O | Ponto oeste da malha. |

Letras Gregas

| | |
|---------------|--|
| β | Coefficiente de interface |
| ε | Taxa de dissipação de energia térmica turbulenta [m^2/s^3] |
| ϕ | Propriedade escalar genérica e esfericidade |
| Γ | Coefficiente de difusão/dispersão |

| | |
|----------|---|
| μ | Viscosidade molecular [Kg/m.s] |
| ρ | Massa específica [Kg/m ³] |
| σ | Tensor normal e constante do modelo k- ϵ |

Constantes e Parâmetros

| | |
|------------------------------|---|
| $C_1 - C_2 - C_\mu$ | Constante do modelo k- ϵ |
| c | Constante |
| $K_1 - K_2$ | Constante do modelo de coeficiente de arraste |
| $\sigma^k - \sigma^\epsilon$ | Constante do modelo k- ϵ |

Superescritos

| | |
|-----|---|
| ` | Indica flutuação |
| — | Indica propriedade média temporal |
| ef | Valor efetivo |
| T | Indica operação matricial de transposição |
| (t) | Turbulento |

Subscritos

| | |
|-----|--|
| g | Fase gás |
| k | Relativo a fase genérica k |
| P | Referente ao ponto central do volume de controle |
| p | Partícula |
| res | resistiva |

| | |
|------|---------------------------------|
| s | Fase sólida |
| x | Direção axial |
| y | Direção radial |
| z | Direção tangencial |
| O, o | Referente ao ponto a oeste de P |

Siglas

| | |
|---------|---|
| CFD | Fluidodinâmica Computacional |
| CFX | Código CFD comercial |
| E-E | Euleriano - Euleriano |
| E-L | Euleriano - Lagrangeano |
| FEQ | Faculdade de Engenharia Química |
| MVF | Método dos Volumes Finitos |
| LDV | Laser Doppler Velocimetry |
| SIMPLEC | Algoritmo de acoplamento pressão-velocidade |
| 1-D | Unidimensional |
| 2-D | Bidimensional |
| 3-D | Tridimensional |

CAPÍTULO 1

CONSIDERAÇÕES INICIAIS

1.1 Motivação e o tema da dissertação

O crescimento de uma nação, invariavelmente, está associado ao desenvolvimento tecnológico que, por sua vez, está presente em todas as etapas na obtenção de um produto ou de um processo, desde a sua concepção até ao instante em que é posto ao mercado. A tecnologia, por sua vez, não está somente relacionada a inventos transformadores, mas também a continua modificação e adaptação do já existente, na busca do melhor, do mais econômico, da maior produção, e do mercado mais abrangente (CREMASCO, 2002). Tendo em vista tal necessidade, uma determinada tecnologia ainda que utilizada intensamente e com resultados satisfatórios comprovados pode ser sempre posta em cheque na medida em que a curiosidade humana a questiona na tentativa de melhorá-la. Um dos exemplos mais contundentes neste sentido são os processos de craqueamento¹ que surgiram da necessidade de produção de gasolina em quantidade e qualidade suficiente para atender à crescente demanda desse combustível com o crescimento da indústria automobilística dos Estados Unidos no século XX.

Até 1913, toda a gasolina produzida era obtida por destilação direta do petróleo, portanto, tanto a qualidade como a quantidade dependiam unicamente da oferta de petróleo

¹ O processo de craqueamento consiste na degradação ou quebra de frações pesadas de petróleo oriundo dos processos convencionais de destilação, em frações mais leves por ação térmica e/ou catalítica.

e de sua qualidade. Como havia grande variedade de petróleo tinha-se também uma grande variação no rendimento e na qualidade das gasolinas. A partir da segunda década do século XX, começaram a surgir processos comerciais de craqueamento, objetivando suprir as necessidades da indústria automobilística. Iniciando com o craqueamento térmico, o processo mais tarde passou a utilizar a versão catalítica, em leitos fixo, móvel ou fluidizado, desenvolvendo-se de forma notável esta última concepção, até atingir o estágio atual onde o processo de craqueamento catalítico fluido (processo ou tecnologia de FCC) é praticamente um processo imprescindível às modernas refinarias do mundo.

A seguir apresentam-se algumas menções da literatura que corroboram a importância da tecnologia do craqueamento catalítico em leito fluido (tecnologia de FCC).

“O craqueamento catalítico é um processo de refino que visa aumentar a produção de gasolina e GLP (gás liquefeito de petróleo) de uma refinaria, através da conversão de cortes pesados provenientes da destilação do petróleo (gasóleo e resíduos), em frações mais leves. É um processo largamente utilizado em todo o mundo, uma vez que a demanda de gasolina em vários países é superior a dos óleos combustíveis. O craqueamento catalítico corrige a produção de gasolina e GLP, suplementando a diferença entre a quantidade obtida diretamente do petróleo e a requerida pela refinaria de modo a atender ao mercado de sua área de influência” (WILSON, 1997).

“O processo FCC (Fluid Catalytic Cracking) é hoje largamente difundido em todo o mundo para o craqueamento catalítico das frações pesadas do petróleo devido principalmente a dois fatores. O primeiro deles consiste no fato de contribuir eficazmente com a refinaria no sentido de ajustar sua produção às reais necessidades do mercado consumidor local, devido à sua grande flexibilidade operacional. O segundo fator que tornou consagrado o processo está ligado ao aspecto econômico. Transformando frações residuais, de baixo valor comercial, em derivados nobres de alto valor, tais como gasolina e GLP (gás liquefeito de petróleo), o craqueamento catalítico aumenta em muito os lucros da refinaria, devido à sua extraordinária rentabilidade” (ABADIE, 1997).

“Na indústria de refino de petróleo, o craqueamento catalítico em leito fluidizado (FCC) é a tecnologia mais importante de conversão de cargas pesadas em produtos mais

nobres, e praticamente 30% do petróleo processado é convertido em uma unidade de FCC. Em termos mundiais, isso significa que são mais de 10.000.000 barris/dia processados diariamente em mais de 400 unidades de FCC distribuídas por todo o planeta. Soma-se ainda o fato deste processo ser um dos mais lucrativos da atividade de refino de petróleo. Portanto, tornar ou manter uma refinaria competitiva, exige competitividade tecnológica na operação, aprimoramento e desenvolvimento da tecnologia de FCC” (MORI e MEIER, 1999).

Convencionalmente a tecnologia de FCC usa reatores de leito móvel ascendente das fase fluida e sólida em escoamento concorrente conhecidos por reator *riser*, é a mais utilizada no processo de craqueamento de hidrocarbonetos visando principalmente a produção de gasolina. Entretanto, ao se utilizar altas cargas de catalisadores e baixo fluxo de reagentes, começa haver craqueamento térmico pela necessidade de aquecer a massa, produzindo reações indesejáveis ao processo diminuindo, como consequência, a seletividade da reação principal (produção de gasolina). Os chineses, fortemente na década de 90, resolveram analisar o processo de "ponta cabeça", ou seja, em vez de fluxos ascendentes de partículas e gás, estudaram esse mesmo contato considerando-o descendente, o *downer*. Como resultado, verificaram o aumento da produção de gasolina e diminuição de produtos secundários. O grande desafio é entender, profundamente, os aspectos básicos que governam o processo, como a sua fluidodinâmica, procurando compreendê-la e dominá-la a partir do conhecimento dos campos de velocidades das fases leve (reagente) e particulada (catalisador), distribuições de concentração e de tempo de residência dos particulados (CREMASCO, 2002).

Portanto, o tema central desta investigação consiste na seleção e validação de um modelo matemático multifásico (gás-sólido) tridimensional e transiente, com uma aproximação da dinâmica do escoamento e reatores *downer* de FCC, ampliando horizontes, com a corroboração ou validação do modelo com dados experimentais da literatura, nos estudos que visam o incremento de performance do processo de FCC, conforme desafio sugerido pelo Professor Marco Aurélio Cremasco quando coloca a questão e os desafios de entender os fenômenos que ocorrem no reator *downer* como estratégia para melhorar o existente para aprimorar a tecnologia a serviço da humanidade.

Particularmente, o modelo proposto nesta dissertação defende a questão paradigmática de que a fase sólida deve ser tratada como um fluido hipotético interpenetrante e invíscido, que adquire uma chamada “fluidez” pelo contato direto com um fluido real submetido às tradicionais forças de superfície (viscosas, de pressão termodinâmica e de arraste pelo contato com outras fases reais e/ou hipotéticas), forças de campo (gravitacional) e efeitos inerciais turbulentos inerentes na essência dos escoamentos reais.

1.2 Objetivos da dissertação

Esta dissertação de mestrado tem por objetivo geral a modelagem matemática e a simulação numérica de um reator *downer* aplicada à tecnologia de FCC.

Dentre os diversos aspectos a serem estudados na simulação, este trabalho tem como objetivos específicos:

- Desenvolvimento da atividade de verificação de código comercial de Fluidodinâmica Computacional (CFD – “Computational Fluid Dynamics”) para a realização de experimentação numérica com modelagem matemática multifásica, tridimensional, transiente e turbulenta;
- Desenvolvimento da atividade de validação do modelo matemático multifásico (gás-sólido) tridimensional e transiente, para a predição da dinâmica do escoamento em reatores *downer* de FCC, com a corroboração a partir de dados experimentais disponíveis na literatura;

1.3 Organização da dissertação

No **Capítulo 2 – Fundamentação teórica**, apresentam-se os fundamentos teóricos para uma melhor compreensão da tecnologia de craqueamento catalítico de petróleo (tecnologia de FCC), dos principais aspectos associados aos reatores *riser* e *downer* e das técnicas de CFD utilizadas nos experimentos numéricos deste trabalho.

A Modelagem Matemática adotada para a resolução desse trabalho é a apresentada no **Capítulo 3 – Modelagem matemática**, comparando-se o modelo matemático para a representação da fluidodinâmica dos reatores *downer* a partir dos princípios fundamentais da conservação de massa e quantidade de movimento, e das equações constitutivas de natureza empírica necessárias para o fechamento do modelo.

Os métodos numéricos apresentam-se como uma ferramenta poderosa na tentativa de reproduzir e prever o comportamento da natureza. No **Capítulo 4 – Métodos numéricos**, é apresentada discussão sobre o método dos volumes finitos além da caracterização da malha numérica e da solução de equações, adotada nos experimentos numéricos.

Para facilitar a compreensão, dividiu-se o trabalho em casos de estudo no **Capítulo 5 – Estudos de caso**, detalhando-se as geometrias adotadas e a influência das mesmas sobre a solução das equações que modelam a fluidodinâmica do reator.

No **Capítulo 6 – Resultados e discussões**, são apresentados os estudos realizados para corroborar o modelo multifásico adotado como aproximação da fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em reator do tipo *downer* de FCC.

Apresenta-se também uma discussão sobre a influência da geometria sobre a fluidodinâmica de um reator *downer* e, conseqüentemente, na tentativa de representação matemática da fluidodinâmica do *downer*.

As conclusões e sugestões são apresentadas no **Capítulo 7 - Conclusões e sugestões**, finalizando o trabalho de dissertação de mestrado em Engenharia Química.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O Capítulo 2 apresenta a Revisão Bibliográfica desenvolvida para a dissertação. Os trabalhos de maior relevância para esta dissertação são apresentados, tais como, a descrição do processo de craqueamento catalítico, uma comparação entre os reatores *riser* e *downer*, apresentando as vantagens e desvantagens de cada reator localizando a importância dos mesmos para o processo de craqueamento catalítico. Tendo em vista que o presente trabalho destina-se principalmente na avaliação fluidodinâmica do reator *downer*, um enfoque maior é dado nesse tipo de reator em virtude dos objetivos da dissertação.

2.1 A Tecnologia de craqueamento catalítico em leito fluido (tecnologia de FCC)

O processo de craqueamento catalítico ilustrado na Figura 2.1, consiste na quebra (*cracking*) de moléculas pesadas presentes na corrente gás-óleo e resíduos, por ação de um catalisador em altas temperaturas. A ruptura das ligações possibilita o aparecimento de moléculas leves, principalmente aquelas compostas de 3 a 12 átomos de carbono, devido à seletividade do catalisador usado. As reações provocam também a formação, em menor escala, de gases leves (C_1 e C_2), gás-óleo leve e pesado e coque, este último deposita-se na superfície do catalisador (ABADIE, 1997).

Os gases de craqueamento efluentes do reator são encaminhados à seção de fracionamento, onde, por intermédio de uma torre de destilação, obtém-se uma separação primária dos cortes produzidos. Pelo fundo da torre produz-se um óleo pesado, bastante

denso, denominado resíduo de craqueamento. Essa corrente também é conhecida como óleo decantado ou óleo clarificado. A fracionadora produz, como corte lateral, um óleo de faixa de ebulição semelhante ao diesel conhecida como óleo leve de reciclo (Light Cycle Oil-LCO) ou diesel de craqueamento.

Pelo topo da torre sai uma corrente gasosa composta da nafta² de craqueamento e de hidrocarbonetos mais leves que, uma vez resfriada e condensada parcialmente, gera no tambor de acúmulo duas correntes. A corrente gasosa é composta de hidrocarbonetos leves (C_1 , C_2 , C_3 e C_4), enquanto a fração líquida é constituída de nafta instabilizada (grande quantidade de gases leves dissolvidos). Ambas são enviadas à seção de recuperação de gases.

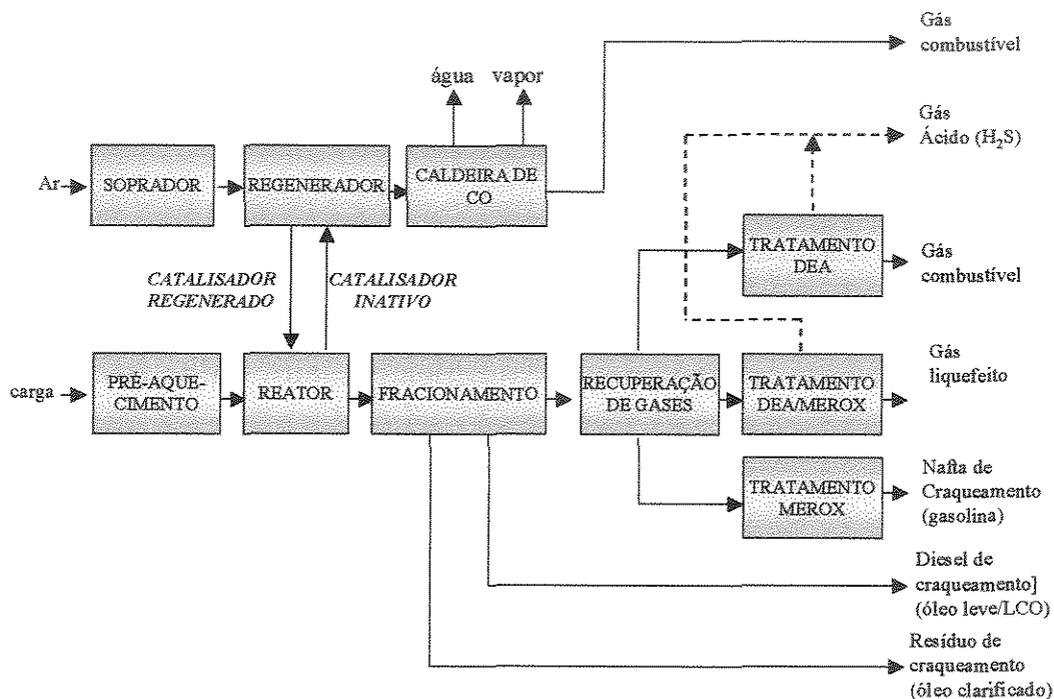


Figura 2.1: Representação esquemática do processo de FCC (ABADIE, 1997).

² Nafta: "Fração de destilação do petróleo, constituída por hidrocarbonetos de baixo ponto de ebulição. Utilizada como matéria-prima na indústria petroquímica, fornecendo, através do craqueamento, uma grande variedade de produtos". (<http://www.algelfire.com/al/geografia/glossario.html>. Capturado em : 03 de dezembro de 2003).

A finalidade da seção de recuperação de gases é, por meio de operações de compressão, absorção, retificação e destilação em várias etapas, processar as correntes de gases e de nafta instabilizada, e dela separar três frações distintas, o gás combustível (C_1 e C_2), o gás liquefeito (C_3 e C_4) e a nafta de craqueamento (C_5 a C_{12}).

As correntes mencionadas anteriormente são enviadas em seguida à seção de tratamento onde, por intermédio de produtos químicos, tais frações têm seus respectivos teores de enxofre consideravelmente reduzidos. Os processos utilizados são: tratamento com Di-Etanol-Amina (DEA) para remoção de H_2S do gás combustível e do gás liquefeito, e o tratamento mercox, que remove mercaptans do GLP e da nafta de craqueamento (gasolina). Após essas operações as frações são destinadas à estocagem

Os gases de combustão provenientes da queima do coque durante a regeneração do catalisador saem dessa etapa em elevadas temperaturas (superiores a $700\text{ }^\circ\text{C}$), aproveitando todo o potencial energético dessa corrente que é encaminhada a caldeiras de calor, onde produzem vapor d'água de alta pressão, resfriando os gases de combustão antes dos mesmos serem lançados à atmosfera.

2.2 Os reatores de fcc: *riser* versus *downer*

Os leitos fluidizados circulantes (CFB), Figura 2.2, nos quais as fases gasosa e particulada têm fluxos ascendentes (*riser*), são largamente utilizados nas indústrias química, metalúrgica e petroquímica, como nos processos de craqueamento catalítico (FCC) (WANG *et al.*, 1998; CHENG *et al.*, 1998; 1999).

No que se refere ao escoamento multifásico no *riser*, observam-se comportamentos distintos nas direções axial e radial. A distribuição axial dos sólidos pode ser, geralmente, descrita como havendo uma região densa na base do equipamento e uma diluída no seu topo. Em alguns casos, o topo pode conter concentrações densas de particulados, dependendo da sua configuração geométrica. Já o escoamento radial é típico centro-anular, ou seja há uma região central diluída de sólidos, em que as partículas existem de forma dispersa, com altas velocidades tanto do fluido quanto do sólido. A região central, por sua

vez, é envolta por outra mais densa, sendo que junto à parede do equipamento há escoamento lento de sólidos em fluxo descendente (WEI *et al.*, 1995, 1997; CHENG *et al.*, 1998), notadamente para concentrações mais elevadas $\xi_s \gg 6\%$ (WANG *et al.*, 1998). Na região anular do escoamento, o mecanismo de mistura entre as fases é dominado pelas dispersões axial e radial que ocorrem, basicamente, devido à agregação de particulados (WEI *et al.*, 1995). Esse fenômeno de agregação e conseqüente recirculação de catalisador acaba comprometendo o desempenho do riser, oferecendo uma distribuição não-uniforme de concentração de sólidos, aumentando a distribuição do tempo de residência de particulados (WEI *et al.*, 1995) e, conseqüentemente, elevando o seu tempo de residência médio no equipamento. Tal comportamento não é interessante quando se intenta reações rápidas, evitando reações secundárias, características típicas de processos de craqueamento catalítico.

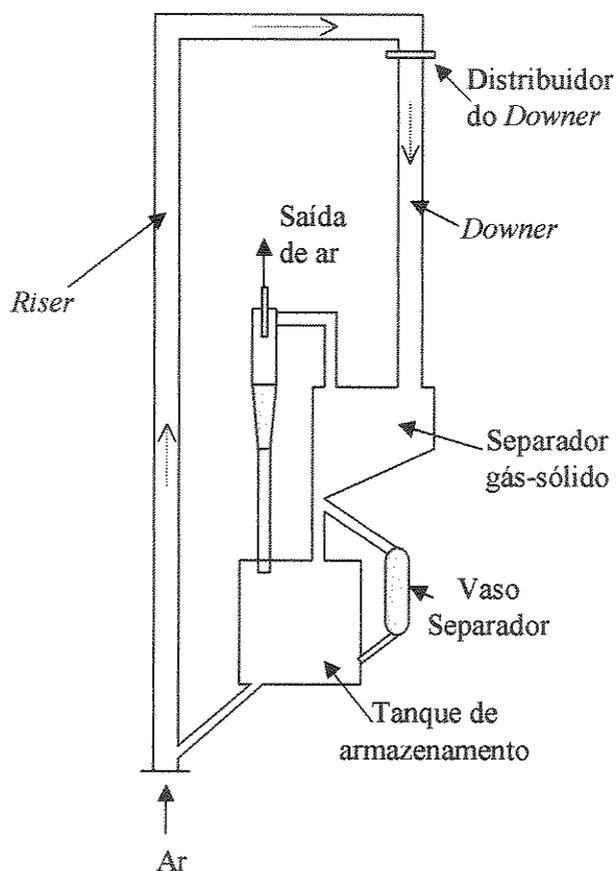


Figura 2.2: Representação esquemática de uma unidade de FCC (CREMASCO, 2002).

Pode-se concluir da leitura do parágrafo anterior que se torna interessante reavaliar a tecnologia FCC quando se utiliza do *riser*, mesmo por que é importante processar altas cargas de catalisador com consideráveis efetividade e seletividade da reação, que acabam sendo comprometidos pela configuração *riser*, o qual é adequado, basicamente para baixas concentrações volumétricas de sólidos. Por outro lado, esses problemas podem ser amenizados pelo uso do sistema em que há o escoamento descendente tanto da fase fluida quanto da particulada (*downer*), no qual ambas as fases escoam na mesma direção da ação gravitacional. Ou seja, o *downer* é uma tecnologia FCC de reatores tubulares com escoamento descendente dos catalisadores (fase particulada) e dos reagentes (fase fluida), Figura 3.3.

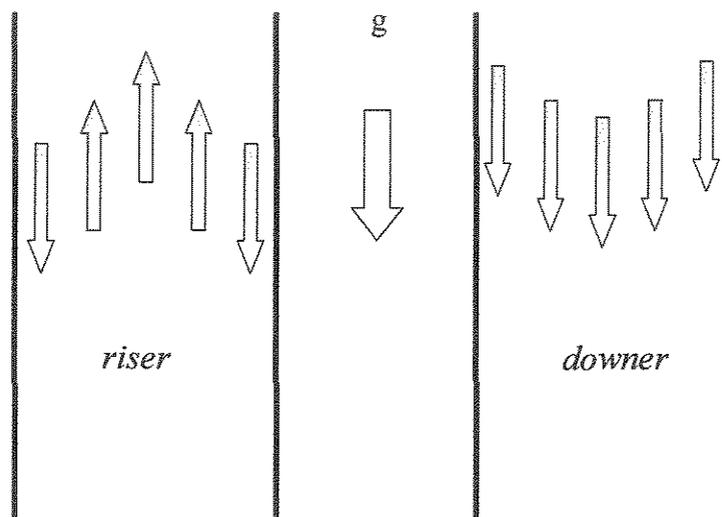


Figura 2.3: Escoamento da fase particulada no *riser* e *downer* (CREMASCO, 2002).

Tendo em vista que, no *downer*, a ação da força gravitacional é favorável à direção do escoamento das fases envolvidas no processo, conforme apresentado na Figura 2.3, tem-se uma distribuição mais uniforme da concentração de catalisador, na direção radial em uma dada seção transversal do equipamento, levando, com isso, a menor segregação radial e axial das fases fluida e particulada com a característica de escoamento próxima a de um

fluxo empistonado (CHENG *et al.*, 1999), ocasionando menor distribuição de tempo de residência dos particulados (WEI *et al.*, 1995; SOBOCINSKI *et al.*, 1995; CHENG *et al.*, 1999; 2001) quando comparados aos do *riser*. Com essas propriedades o *downer* é um sério candidato para (CREMASCO, 2002):

- Reações muito rápidas em que os intermediários são os produtos desejados, nas quais o contato rápido entre as fases é essencial para prevenir reações secundárias assegurando, com isto, uma boa seletividade;
- Reações em que se espera alta taxa de alimentação sólido-gás,
- Reações catalisadas em que há rápida perda de ação do catalisador (CHENG *et al.*, 1999).

Essas características são particularmente interessantes para os processos que necessitam de breve tempo de contato e uma distribuição uniforme de sólidos, isto é, craqueamento catalítico em relação ao térmico, craqueamento do óleo residual e pirólise da biomassa (CHENG *et al.*, 2001), como é o caso do processamento de hidrocarbonetos. Este aspecto é de suma importância, pois a tecnologia FCC é a maior e a mais econômica dentre os processos catalíticos no mundo. Dessa maneira, um pequeno aumento na seletividade ou recuperação da gasolina é fundamental para o processo. Nesse aspecto, o *downer* mostra um grande potencial de aplicabilidade industrial em FCC (WEI, 1997).

O craqueamento catalítico visando a produção de gasolina, é acompanhado por reações que diminuem a seletividade, bem como a efetividade de produção. O entendimento da fluidodinâmica é importantíssimo para dominar o processo e assim garantir o aumento da qualidade do produto. Sendo assim, o pleno conhecimento do campo de velocidades e a distribuição do tempo de residência das fases envolvidas, bem como o conhecimento da distribuição radial e axial da concentração da fase particulada são primordiais para a otimização do reator. Apesar de o *downer* apresentar melhor desempenho quando comparado ao do *riser* (WEI *et al.*, 1995; 1997), ainda apresenta altas concentrações junto à região da parede do equipamento se comparada à da zona central (CHENG *et al.*, 1999), podendo influenciar as reações desejadas no craqueamento catalítico. Desse modo, é fundamental o conhecimento da fluidodinâmica em um *downer* quando se opera com altas

cargas de catalisador, visando, principalmente, o controle de variáveis operacionais para evitar futuras reações indesejáveis durante o processo de craqueamento catalítico.

PINHO *et al.* (2002) apresenta os rendimentos comparativos com resultados das unidades-piloto do CENPES (Centro de Pesquisas da Petrobras) de *downer* e *riser*, realizados nas mesmas condições operacionais o *downer* apresenta significativos ganhos de rentabilidade específica de 6,7 US\$/t de carga com ganhos de conversão de 2,2%.

O primeiro passo na busca da compreensão dos parâmetros que governam o desempenho do *downer* passa, portanto pelo domínio da sua fluidodinâmica o qual advém de avaliações adequadas de grandezas fundamentais, tais como: distribuição de velocidades das fases envolvidas no processo, distribuições do tempo de residência e de concentração dos sólidos.

2.3 Trabalhos experimentais com reator *downer*

Reatores gás – sólido com fluxo descendente no sentido da gravidade (*downer*), em leitos circulantes fluidizados, têm sido propostos na literatura para superar algumas desvantagens dos reatores com fluxo ascendente (*riser*). No processo de craqueamento catalítico (FCC) ocorrem regiões de recirculação de sólidos (*backmixing*) em reatores com fluxo contracorrente à gravidade, observando-se a formação de aglomerados de partículas, além da segregação de sólidos na seção radial originando um aumento no tempo de residência, diminuindo o rendimento na produção de gasolina. Devido à grande tendência de formação de coque, o processo de FCC necessita de um pequeno, mas uniforme, tempo de contato entre as fases gasosa e sólida.

Comparando com reatores convencionais de fluxo contracorrente à gravidade, *riser*, reatores *downer* podem oferecer vantagens significativas, como fluxo gás-sólido mais uniforme, menor aglomeração de sólidos, menor dispersão axial de gás e de sólidos e menor tempo de residência (BAI *et al.* 1991, WANG *et al.* 1992, ZHU & WEI, 1996). Essas propriedades são particularmente benéficas em processos de FCC e craqueamento catalítico fluidizado de óleo residual (RFCC) onde é necessário um tempo de contato pequeno mas

uniforme entre o gás e o sólido (ZHU, YU, JIN, GRACE & ISSANGYA, 1995). Para uma boa representação da fluidodinâmica, um modelo tem que ser representativo, ou seja, reproduzir da melhor forma possível as condições reais, segundo BOLKAN - KENNY et al. 1991, é preciso ter cuidado no modelo hidrodinâmico.

Como a fase gasosa e a sólida escoam na direção da gravidade, o fluxo é mais rápido no *downer*, pois os sólidos são acelerados tanto pela fase gasosa quanto pela gravidade, enquanto no *riser* os sólidos são acelerados somente pelo fluxo de gás, mas sofre a resistência da gravidade. Conseqüentemente, o comprimento da região de aceleração no *downer* é menor (WANG, BAI, JIN 1992, JOHNSTON et al. 1999). A fração volumétrica de sólidos na parede do *downer* é menor, quando comparado a um *riser* típico (1 – 5%), em um típico *downer* a fração volumétrica fica abaixo de 1% (WANG, BAI, JIN 1992, JOHNSTON et al. 1999, ZHANG, ZHU, BERGOUGNOU 1999), representando um problema para reações onde a relação, altas concentrações de sólidos por taxa de gás é requerido.

WANG, BAI E JIN (1992) estudaram o comportamento do fluxo axial utilizando técnicas de medidas de pressão. O gradiente de pressão a partir da distribuição axial, propuseram um comportamento para a distribuição do fluxo axial no *downer* composto de três seções:

- Na primeira seção seria a de uma região de aceleração a partir da entrada até a posição axial, onde a velocidade da partícula é igual a velocidade do gás. Nesta seção, a velocidade da partícula é menor do que a velocidade do gás e as partículas são aceleradas tanto pela força de arraste quanto pela gravidade;
- Na segunda região de aceleração, as partículas continuam a ser aceleradas pela gravidade, sofrendo a influência da resistência da força de arraste, já que a velocidade do gás é menor do que a velocidade da partícula. O aumento da velocidade da partícula continua até a região onde a velocidade de deslizamento gás-partícula entra em equilíbrio, atingindo um valor que a força de arraste contracorrente entra em equilíbrio com a força gravitacional;

- A partir da terceira região a velocidade é constante, a velocidade da partícula e do gás são constantes.

Existem estudos sobre a estrutura do fluxo radial de sólidos (YANG *et al.*, 1991; BAI, JIN, YU & GAN, 1991; WANG *et al.*, 1992; HERBERT, GAUTHIER, BRIENS & BERGOUGNOU, 1994; HERBERT, 1997; WEI, LIU, JIN & YU, 1997; MIRGAIN, BRIENS, DEL POZO, LOUATY & BERGOUGNOU, 1998; WIRTH & SCHIEWE, 1998), conduzidos em condições limitadas de medidas axiais e sobre uma faixa limitada de condições operacionais onde o maior valor de velocidade superficial para o gás não superou os 8m/s e a maior taxa de recirculação de sólidos foi inferior a 100kg/m²s, sem reação. Enquanto alguns resultados observados por diferentes autores não são consistentes, quando comparados entre si. Por exemplo, o perfil radial de concentração de sólidos obtido por YANG *et al.* (1991), BAI *et al.* (1991) e WANG *et al.* (1992) apresentou uma região anular com um escoamento plano com um pico máximo em $r/R = 0,92$. Por outro lado, os resultados obtidos por HERBERT *et al.* (1994) para o perfil de concentração de sólidos teve um pico muito menor em aproximadamente $r/R = 0,7$.

CHENG *et al.* (2001), realizaram estudo da influência da entrada no comportamento hidrodinâmico do *downer*. Utilizaram oito constantes empíricas para corroborar o modelo com dados experimentais, forçando a validação de resultado. As medidas foram realizadas utilizando-se LDV (Laser Doppler Velocimetry), mas a descrição da posição das medidas não é apresentada.

Para a validação do modelo matemático multifásico (gás-sólido) tridimensional e transiente para a predição da dinâmica do escoamento em reator *downer* de FCC proposto nessa dissertação serão utilizados os dados do experimento de CHENG *et al.* (2001).

2.4 Escolha da abordagem experimental - numérica

Códigos de CFD têm sido usados (desde a década de 1960) para a simulação de casos industriais, basicamente para casos unidimensionais (1D), e com sérias limitações para o detalhamento matemático necessário para um bom resultado de simulação. O

desenvolvimento de uma nova geração de ferramentas computacionais e métodos numéricos, a partir da década de 1990, vem proporcionando maior nível de detalhamento fenomenológico na análise de casos de estudo, incrementando significativamente a qualidade das predições teóricas.

Para o escoamento gás-sólido são apresentados diversos estudos de CFD na literatura (DECKER, 2003); A predição da fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em tubos apresenta-se como fator dependente das condições geométricas adotadas, onde verificam-se efeitos bruscos na direção do escoamento, em virtude, principalmente, da presença de curvas que promovem a redistribuição da fase particulada, e não podem ser desconsideradas na geometria e malha numérica. Tais efeitos não são considerados quando as simplificações de uma geometria 2D e escoamento permanente são adotados.

MASON e LEVY (1998) compararam o uso de um modelo unidimensional (1D) com o tridimensional (3D), simulando o escoamento gás-sólido através de uma tubulação. Ambos os modelos resolveram as equações de conservação de massa, de momento e de energia. Observaram que o modelo 1D apresenta, como o esperado, resultados mais rápidos em relação ao 3D, embora este apresenta a vantagem de predizer problemas em algumas regiões para geometrias com curvas, tais como o desgaste em curvas, e na predição de escoamento estratificados, onde a velocidade de transporte é menor que o da suspensão.

MUDEDE e SIMONIN (1999), simularam a injeção de bolhas no centro da base de uma geometria retangular, utilizando o código ASTRID. As simulações incluíram a turbulência com o modelo $k-\epsilon$ para as geometrias bidimensional (2D) e tridimensional (3D). Observaram que, para o caso 2D, uma solução estacionária é obtida enquanto para o caso 3D, o escoamento não atinge o regime estacionário, de tal maneira que uma solução transiente é obtida. A viscosidade turbulenta observada para o caso 3D é menor do que o 2D, conseqüentemente a difusão da bolha é menor no caso 2D.

Em 2001, MUDEDE e EVAN DEN AKKER avaliaram a simulação de condições 2D e 3D em um reator *airlift*, considerando a condição de estado estacionário. Basearam-se no escoamento bifásico com o modelo de turbulência $k-\epsilon$. A geometria 3D apresentou uma

reprodutibilidade fenomenológica melhor das condições reais, comparada ao desempenho da geometria 2D.

NORILER (2003) observou a formação de pequenas zonas de recirculação ao simular o escoamento 3D transiente em um prato de destilação, o que não foi observado no modelo 2D.

Para a representação matemática do escoamento bifásico gás-sólido são empregados basicamente dois tipos de abordagens: a abordagem Euleriana-Lagrangiana (E-L); e a abordagem Euleriana-Euleriana (E-E). Na abordagem E-L o gás é considerado como uma fase contínua enquanto o sólido, fase descontínua, interagindo entre si por meio de forças de interação gás-sólido, como o arraste. A fase fluida é modelada por equações clássicas de conservação, da mecânica do contínuo, e as partículas, como entidades individuais, são tratadas pela mecânica clássica do corpo sólido, especificamente pela aplicação da 2ª Lei do movimento de Newton. Para a abordagem E-E, tanto a fase gás quanto a fase sólida são consideradas como fases contínuas, distintas possuindo propriedades distintas na mesma localização do espaço-tempo, interagindo entre si e induzindo à interpenetrabilidade das fases (MEIER, 1998).

YASUNA *et al.* (1995) apud DECKER (2003), ao compararem os resultados simulados com experimentais, obtiveram previsões quantitativas do escoamento gás-sólido em escoamento laminar. Os autores utilizaram abordagem E-E, em coordenadas cilíndricas, negligenciando no modelo aspectos físicos relevantes ao problema, pois somente as interações partícula-partícula são consideradas. As previsões do modelo são satisfatórias quando o fluxo de sólidos é reduzido ou quando a velocidade superficial do gás é aumentada, ou seja, para sistemas diluídos.

AKILLI *et al.* (2001) apud DECKER (2003) propuseram um modelo matemático para a previsão do comportamento do escoamento gás-sólido em um tubo horizontal, após uma curva de 90° da posição vertical para a posição horizontal, utilizando a abordagem E-L para a caracterização da fase sólida. Como alternativa de solução, AKILLI *et al.* (2001)

utilizaram o modelo de turbulência RNG- $k-\epsilon^3$ para a solução do escoamento gás-sólido. O modelo proposto não considerava as colisões entre partícula-partícula, mas sim, somente as colisões entre partícula-parede. Estas colisões eram modeladas por intermédio de um coeficiente de restituição, obtido pela razão entre a velocidade normal da partícula antes e depois do choque com a parede. A condição de não - deslizamento foi empregada para a velocidade do gás na superfície da parede. Para validar os perfis de concentração de sólidos e velocidade para a fase sólida, os autores realizaram uma série de experimentos. Como resultado de seus experimentos, observaram a formação de aglomerados na parte superior do duto horizontal, logo após a saída da curva de 90° da posição vertical para a posição horizontal, devido a ação de forças centrífugas sobre as partículas, mais precisamente na região da curva de 90°. Com isto, conforme a relação comprimento do duto/diâmetro do duto (L/D) aumentava, a distribuição de sólidos na seção transversal tomava forma, devido aos efeitos da força gravitacional sobre as partículas de maior diâmetro. Conseqüentemente, estas partículas se depositavam na parte inferior do duto, chegando a uma distribuição constante na área de seção transversal, quando a relação L/D se aproximava de 29, onde era observado o escoamento completamente desenvolvido. Desta forma, obtiveram uma boa concordância entre resultados numéricos e experimentais para a solução do escoamento gás-sólido com baixas razões de carga (sistemas diluídos).

DECKER (2003) validou o modelo invíscido, transiente e tridimensional, para o transporte vertical e horizontal de partículas, com dados experimentais obtidos com a técnica de PDA (Phase Doppler Anemometer) apresentando boa concordância entre os mesmos. Para a resolução das equações diferenciais parciais do modelo, empregou o código comercial de CFD, o CFX da AEA Technology. Foram utilizadas como estratégias para garantir uma solução estável e convergente acoplamento pressão-velocidade do tipo SIMPLEC e o, modelo de turbulência $k-\epsilon$ padrão para a fase gás.

³ O modelo RNG $k-\epsilon$ é uma alternativa ao modelo $k-\epsilon$ padrão para escoamentos com valores altos de Reynolds (AEA TECHNOLOGY PLC, 1997).

Baseando-se na metodologia adotada por DECKER (2003), o reator *downer* dos experimentos numéricos da presente dissertação em consonância com os estudos de validação dos experimentos e dados experimentais de CHENG *et al.* (2001) foram escolhidos para os experimentos numéricos da dissertação de mestrado.

2.5 A técnica numérica empregada

Segundo GUNZBURGER e NICOLAIDES (1993), a fluidodinâmica computacional (CFD) consiste na análise de problemas, ou seja, situações físicas envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor, de massa, e outros fenômenos associados como reações químicas, por meio de fontes computacionais de simulação numérica. Esta técnica é poderosa e abrange aplicações nas áreas industrial e educacional (Tabela 2.1).

Tabela 2.1: Aplicações de CFD.

| ÁREA DE APLICAÇÃO | EXEMPLOS |
|--------------------------|--|
| Automotiva | Aerodinâmica de veículos, escoamento através de válvulas, filtros e tanques. |
| Processos Industriais | Escoamento de plástico e vidro, matrizes de extrusão, transferência de calor e de massa em reatores químicos, operações unitárias (destilação, evaporação, filtração e secagem) e tratamento de águas e efluentes. |
| Biomédica e Farmacêutica | Escoamento de fluidos através de veias, artérias, próteses e cérebros. |
| Alimentícia | Processos de pasteurização e envase de líquidos. |
| Aeroespacial | Escoamento em torno de corpos submergidos, efeitos da ação (ou ausência) da gravidade, cabines de ventilação e tanques. |

As técnicas de CFD apresentam grande utilidades na concepção de projetos, tais como:

- redução substancial de tempo computacional e custos, relativos a concepção de novos projetos;
- facilidade em estudar problemas onde os controladores experimentais são difíceis ou até mesmo impossíveis de se estabelecerem, por exemplo, situações relacionadas à grandes escalas;
- nível não - limitado de detalhes e resultados com as simulações para projeto;
- produz grandes volumes de resultados computacionais, não agregando altos custos, como é o caso da construção de um aparato experimental e execução de experimentos reais.

2.5.1 Os Códigos de CFD

O código comercial conhecido como CFX baseado na técnica de CFD, está estruturado em algoritmos numéricos capazes de resolver os problemas que envolvem escoamento de fluidos. Todos códigos comerciais de CFD possuem basicamente três elementos:

- a) Pré-processador,
- b) Solver,
- c) Pós-processador.

a) Pré-processador

Consiste em uma unidade do código na qual se alimenta a entrada do problema. As atividades desse código envolvem:

- definição da geometria e regiões de interesse do problema (domínio computacional);
- geração do *grid*, ou seja, a malha que contém subdivisões do domínio computacional. Estas subdivisões são normalmente chamadas de células, elementos ou volumes de controle;
- seleção dos fenômenos físicos e químicos que necessitam ser modelados;
- definição das propriedades dos fluidos envolvidos no problema;
- especificação das condições de contorno.

A resolução do problema (velocidades, temperaturas, pressões, frações volumétricas, etc.) se dá nos nodos, ou seja, dentro de cada célula que compõe a malha. A qualidade da solução é governada pelo número de células. Em geral, quanto maior o número de células, melhor a solução a ser obtida; porém, maior o tempo computacional (hardware) a ser gasto na solução dos cálculos, necessitando investimento em poderosos computadores.

b) Solver

Os métodos numéricos contidos nessa unidade do código de CFD resolvem o problema percorrendo três etapas:

- aproximação das variáveis do problema em funções simples;
- discretização das aproximações que governam o problema e, conseqüente manipulação matemática;
- solução algébrica das equações.

c) Pós-processador

Esta unidade do código comercial baseado em CFD permite a visualização dos resultados através de diferentes posições em relação a geometria. Os gráficos e mapas que podem ser construídos incluem:

- geometrias do domínio computacional;
- campos vetoriais de linhas de contorno e de superfícies 2D e 3D;
- manipulações gráficas, com rotação e translação;
- animações dinâmicas de determinados resultados.

2.5.2 O código comercial CFX 4.4

Segundo PIERITZ e CZESNAT (2001), o código comercial CFX 4.4 é composto pelas unidades pré-processador, solver e pós-processador, que são ilustradas na Figura 2.4, na qual se manteve os termos em inglês para facilitar a compreensão e visualização no software.

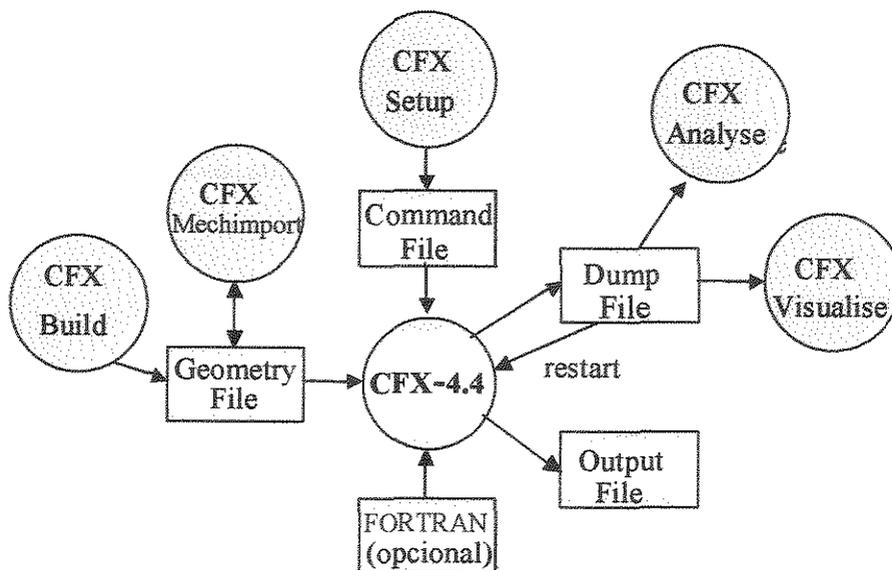


Figura 2.4: Unidades do CFX 4.4.

No pré-processador, existe o módulo *build* que possibilita a construção da geometria que abriga a situação física que se vai analisar. A malha construída é estruturada, ou seja, cada célula deve conter quatro lados e não pode ficar em contato com duas ou mais outras células. Após a criação da malha, gera-se o arquivo de geometria “.geo”.

No módulo *environment* cria-se o arquivo “.fc” que contém os parâmetros para a resolução do problema, como modelos matemáticos, propriedades das fases envolvidas, esquemas de resolução numéricos e demais condições específicas. Termos fontes também podem ser adicionados através de rotinas na linguagem de programação Fortran, gerando-se arquivos “.f”.

Segundo AEA TECHNOLOGY PLC (1997), de posse desses arquivos (geometria, *comand file* e rotina Fortran), o CFX passa pela unidade solver, onde resolve o problema utilizando o método numérico dos volumes finitos, e imprime na tela do microcomputador um gráfico de resíduos, em que se busca atingir os menores valores possíveis para que a conservação das propriedades envolvidas seja garantida.

O solver gera os arquivos *output file*, o qual contém os valores numéricos de resultados e o arquivo “.dmp”. É através desse último que se consegue visualizar os gráficos de resultados através do módulo *analyse*.

A escolha do código de CFD, CFX 4.4 para os estudos de verificação em CFD, com o modelo matemático multifásico (gás-sólido) tridimensional e transiente, para a predição da dinâmica do escoamento em reator *downer*, baseou-se na comprovação da aplicabilidade dos diversos trabalhos já apresentados nas seções anteriores, DECKER (2003) e NORILER (2003), e comprovação da confiabilidade dos resultados. O código utiliza o método dos volumes finitos para a resolução das equações diferenciais parciais, associando robustez e facilidade de generalização e implementação computacional.

CAPÍTULO 3

MODELAGEM MATEMÁTICA

Um modelo matemático não é a realidade, mas apenas uma tentativa de representá-la adequadamente num campo abstrato da realidade matemática. Assim, tanto melhor será o modelo quanto mais adequadamente ele descrever a realidade, com a simbologia, regras de “sintaxe”, propriedades e definições típicas da matemática (MEIER, 1998).

Um modelo é qualquer objeto, concreto ou abstrato, utilizado para explicar algum tipo de fenômeno. O mais comum na engenharia, contudo, é que um certo conjunto de dados e idéias abstratas seja utilizado para explicar um fenômeno de interesse e relacionar as inúmeras variáveis do problema. Quando um modelo de engenharia atinge o seu ápice, ele torna possível estabelecer relações quantitativas precisas entre as variáveis do problema: ele vira um modelo matemático (PINTO, 2001).

Modelos matemáticos podem ser classificados genericamente como teóricos e empíricos. Modelos teóricos são aqueles desenvolvidos a partir de pressupostos teóricos que tentam descrever de forma mais fundamentada os vários aspectos envolvidos no problema. Modelos empíricos são aqueles que não estão baseados em quaisquer pressupostos teóricos, sendo apenas utilizados para descrever um conjunto de pontos experimentais. Os modelos empíricos são tão bons quanto os modelos teóricos, embora estes últimos possam ser utilizados de forma bem mais racional do que os modelos empíricos.

O objetivo principal desse capítulo é apresentar a modelagem matemática adotada para a representação das equações que governam o escoamento multifásico, tridimensional, transiente e turbulento, associados à fluidodinâmica do reator *downer* de FCC.

3.1 Modelagem matemática monofásica

O modelo matemático dos fenômenos de transporte são aqueles que utilizam os princípios físico-químicos regidos por leis de conservação de massa, de energia e da quantidade de movimento, ou seja:

- conservação de massa (lei de Lavoisier) \equiv “na natureza nada se perde, nada se cria, tudo se transforma”;
- conservação de energia (1ª lei da termodinâmica) \equiv “a variação na energia de um sistema é igual ao calor fornecido, menos o trabalho realizado”;
- conservação da quantidade de movimento (2ª lei do movimento de Newton) \equiv “o somatório das forças atuantes sobre o sistema é igual a variação da sua quantidade de movimento”.

Um modelo de conservação para ser considerado fechado, isto é, passível de solução matemática, deve estar completo com as equações de conservação e com todas as informações experimentais ou constitutivas, e com as condições iniciais e de contorno que descrevem o fenômeno a ser estudado.

As equações fundamentais da fluidodinâmica do escoamento monofásico são a equação da conservação da massa (continuidade) e as equações do movimento (momentum).

3.1.1 Equação instantânea da conservação de massa total (equação da continuidade)

Para a obtenção da equação da continuidade (BIRD, 2002), considera-se o volume de controle apresentado na Figura 3.1.

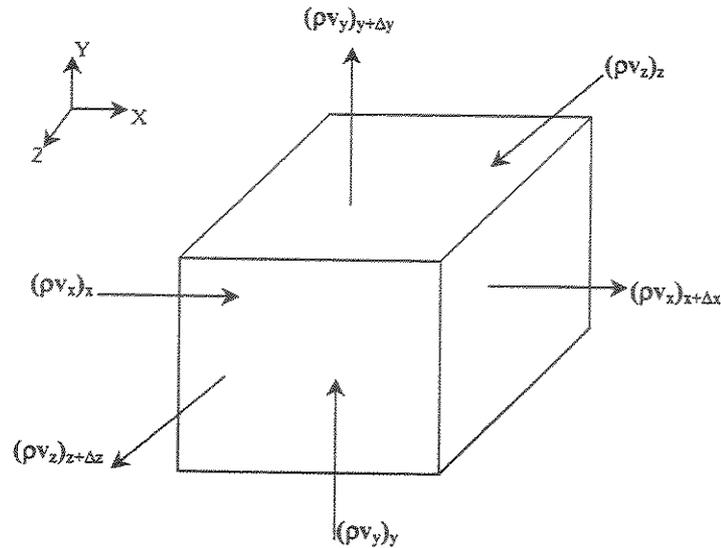


Figura 3.1: Balanço material para um volume de controle.

Um balanço material de conservação para o elemento diferencial de volume da Figura 3.1:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{entrada nas} \\ \text{superfícies} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{saída nas} \\ \text{superfícies} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{acúmulo} \\ \text{no volume} \end{array} \right\}$$

ou,

$$(\rho v_x|_x - \rho v_x|_{x+\Delta x}) + (\rho v_y|_y - \rho v_y|_{y+\Delta y}) + (\rho v_z|_z - \rho v_z|_{z+\Delta z}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (3.1)$$

As taxas de entrada, saída e acúmulo são obtidas a partir da multiplicação dos termos de entrada e saída, pelas suas respectivas áreas e o acúmulo pelo seu volume, obtendo-se:

$$\begin{aligned}
 & (\rho v_x|_x - \rho v_x|_{x+\Delta x}) \Delta y \Delta z + (\rho v_y|_y - \rho v_y|_{y+\Delta y}) \Delta x \Delta z + \\
 & (\rho v_z|_z - \rho v_z|_{z+\Delta z}) \Delta x \Delta y = \frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Considerando que o volume apresentado na Figura 3.1, não varia com o tempo, dividindo-se a Equação (3.2) pelo seu volume e fazendo o volume tender a zero, obtém-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left[\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} \right] \tag{3.3}$$

Os três últimos termos da Equação (3.3), caracterizam o divergente ($\nabla \cdot$) do vetor ρv :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho v) = 0 \tag{3.4}$$

A Equação (3.4) representa a equação conservativa da continuidade.

3.1.2 Equação instantânea da conservação da quantidade de movimento (equação do *momentum*)

Para a obtenção da equação de quantidade de movimento, utiliza-se como suporte fundamental a 2ª Lei de Newton, para as superfícies do volume de controle da Figura 3.2.

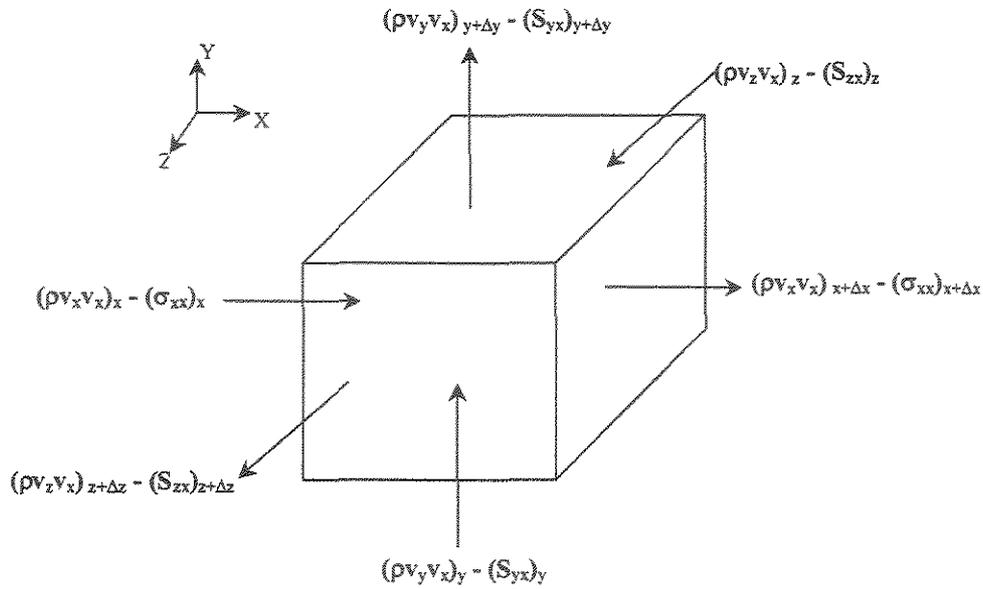


Figura 3.2: Representação do balanço de forças para um volume de controle.

Um balanço de quantidade de movimento no elemento diferencial de volume da Figura 3.2 fica:

$$\underbrace{\left\{ \begin{array}{l} \text{Forças atuando} \\ \text{na entrada do} \\ \text{volume de controle} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Forças atuando} \\ \text{na saída do} \\ \text{volume de controle} \end{array} \right\}}_{\text{Contribuições difusiva e convectiva para o sistema}} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Acúmulo de} \\ \text{quantidade de} \\ \text{movimento} \end{array} \right\} \quad (3.5)$$

Ou, substituindo-se os termos contidos na Figura 3.2 para a direção x, considerando apenas a contribuição convectiva, tem-se:

$$\begin{aligned}
 & (\rho v_x v_x|_x - \rho v_x v_x|_{x+\Delta x}) \Delta y \Delta z + (\rho v_y v_x|_y - \rho v_y v_x|_{y+\Delta y}) \Delta x \Delta z + \\
 & (\rho v_z v_x|_z - \rho v_z v_x|_{z+\Delta z}) \Delta x \Delta y
 \end{aligned} \quad (3.6)$$

Para a contribuição difusiva:

$$(\tau_{xx}|_x - \tau_{xx}|_{x+\Delta x})\Delta y\Delta z + (\tau_{yx}|_y - \tau_{yx}|_{y+\Delta y})\Delta x\Delta z + (\tau_{zx}|_z - \tau_{zx}|_{z+\Delta z})\Delta x\Delta y \quad (3.7)$$

As forças atuantes no sistema a serem consideradas são as forças de pressão(p) e a força gravitacional (g) para a direção x, resultando em:

$$\Delta y\Delta z (p|_x - p|_{x+\Delta x}) + \rho g_x \Delta x\Delta y\Delta z \quad (3.8)$$

O acúmulo para o sistema da Figura 3.2, é representado da seguinte forma:

$$\left(\frac{\partial \rho v_x}{\partial t}\right)\Delta x\Delta y\Delta z \quad (3.9)$$

Substituindo as Equações (3.6), (3.7), (3.8) e (3.9) na Equação (3.5), dividindo por $\Delta x\Delta y\Delta z$ aplicando limite para Δx , Δy e Δz tendendo a zero, tem-se:

$$\left(\frac{\partial \rho v_x}{\partial t}\right) = -\left[\frac{\partial(\rho v_x v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y v_x)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z v_x)}{\partial z}\right] - \left[\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}\right] - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho g_x \quad (3.10)$$

Generalizando a Equação (3.10) para as três direções com as definições apresentadas para as contribuições convectiva e difusiva:

$$\rho \mathbf{v}\mathbf{v} = \begin{bmatrix} \rho v_x v_x & \rho v_y v_x & \rho v_z v_x \\ \rho v_x v_y & \rho v_y v_y & \rho v_z v_y \\ \rho v_x v_z & \rho v_y v_z & \rho v_z v_z \end{bmatrix} \equiv \text{Termo convectivo,} \quad (3.9)$$

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & S_{yx} & S_{zx} \\ S_{xy} & \sigma_{yy} & S_{zy} \\ S_{xz} & S_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \equiv \text{Termo difusivo,} \quad (3.10)$$

chega-se, portanto às equações da fluidodinâmica para condições instantâneas em um referencial euleriano e na forma conservativa:

- Equação da continuidade,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3.11)$$

- Equação do momentum,

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}\mathbf{v}) = \mathbf{g}\rho + \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (3.12)$$

em que \mathbf{T} é o tensor tensão que, para um fluido newtoniano, pode ser expresso pela equação de Stokes:

$$\mathbf{T} = -p\delta - \left(\frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \mathbf{I} + \mu \left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right] \quad (3.14)$$

sendo \mathbf{g} , a força do campo gravitacional, μ é a viscosidade dinâmica, e \mathbf{I} é o tensor identidade.

3.1.3 Equações de conservação médias temporais

As equações de conservação médias temporais podem ser usadas para representar tanto o escoamento em regime laminar quanto o escoamento em regime turbulento, em virtude do último ser de natureza instantânea (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). Entretanto, não é comum, para propósitos de cálculos de engenharia, resolver tais equações na forma direta, pelo fato da necessidade de escalas temporal e espacial muito pequenas para caracterizar o escoamento instantâneo. Isto conduz a um esforço computacional atualmente indisponível, exceto para escoamentos para baixo número de Reynolds. Assim, é necessário introduzir o conceito das médias temporais e o conceito da decomposição de Reynolds. Faz-se isso, com o uso da definição das médias temporais. A média temporal de uma propriedade qualquer é definida como:⁴

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi dt \quad (3.15)$$

em que Δt é uma diferença de tempo infinitamente grande em relação às flutuações turbulentas, e pequeno em relação ao tempo em que se almeja avaliar. Separando-se em termos das flutuações, têm-se:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.16)$$

⁴ Todas variáveis serão consideradas como variáveis médias-temporais sem a notação ($\bar{\quad}$), por questões de conveniência.

sendo Φ uma variável fluidodinâmica instantânea, $\bar{\phi}$ a sua média temporal e ϕ' , a flutuação turbulenta de ϕ .

Desta forma, introduzindo estes conceitos nas equações de transporte e aplicando o procedimento conhecido como decomposição de Reynolds, chega-se nas equações médias-temporais para as propriedades envolvidas (massa, velocidade e pressão):

- Equação média-temporal da continuidade,

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{v}) = 0 \quad (3.17)$$

- Equação média-temporal do *momentum*,

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{v} \mathbf{v}) = \bar{\rho} \mathbf{g} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{T}} - \bar{\rho} \mathbf{v}' \mathbf{v}') \quad (3.18)$$

O último termo da Equação (3.18), $\overline{\rho \mathbf{v}' \mathbf{v}'}$, refere-se à média temporal do produto diádico da flutuação da velocidade e é chamado de tensor de Reynolds ou tensor turbulento. É, justamente por este novo termo na equação do momentum que se observa a “mistura” de momentum em escoamentos turbulentos.

Dificuldades aparecem quando da caracterização do tensor de Reynolds em termo das propriedades médias temporais. Este problema é conhecido como problema de fechamento da turbulência (*turbulence closure*) e ainda é considerado “em aberto” na Física contemporânea.

3.2 Modelagem matemática multifásica

As principais hipóteses adotadas para um modelo bifásico gás-sólido, segundo MEIER (1998), são as hipóteses do contínuo e a da interpenetrabilidade entre as fases.

Entende-se por hipótese do contínuo a caracterização das fases em uma visão macro e micro, como matérias contínuas, ou seja, não são consideradas as características moleculares da matéria, tais como, potenciais intermoleculares e colisões intermoleculares. Entretanto, como as fases são “ditas” contínuas, e duas porções contínuas de matéria não ocupam o mesmo lugar no espaço, há necessidade de implementar uma nova hipótese, a da interpenetrabilidade das fases. Para isto, faz-se necessário um leve aumento de escala espacial para que, ainda em visão microscópica, a hipótese seja válida. A aplicação da hipótese da interpenetrabilidade, além de permitir um enfoque euleriano para ambas as fases, faz com que as propriedades médias temporais de transporte e propriedades turbulentas estejam presentes de forma distintas, tanto na fase gás quanto na fase particulada.

Outro aspecto a ser considerado, é o da adoção de um modelo invíscido para a caracterização da fase sólida, ou seja, os aglomerados de sólidos comportam-se como fluidos hipotéticos, não possuindo tensão de natureza viscosa ou molecular como os fluidos reais. Os fluidos hipotéticos (fase sólida) são aqueles que adquirem comportamento fluidodinâmico devido as interações físico-químicas com os fluidos reais (fase gás).

O aparecimento de uma dispersão turbulenta de quantidade de movimento na fase hipotética, com o tensor de Reynolds resultante das flutuações de velocidade, é negligenciado por considerar que as flutuações turbulentas na fase fluida hipotética são inferiores, em ordem de grandeza, quando comparadas com as da fase fluida real. E, neste sentido, o arraste promovido pelo fluido real é responsável, também, pela geração de turbulência e flutuação na fase fluida hipotética.

Outra consideração adotada como hipótese da presente dissertação, refere-se a ausência de forças de pressão atuantes na fase fluida hipotética. Conforme GIDASPOW (1994), as forças de pressão são resultados única e exclusivamente das porções de fluido real (no caso, o gás), e não da presença do fluido hipotético.

Além das hipóteses mencionadas anteriormente, faz-se necessária a definição de fração volumétrica, ou seja, uma relação entre a vazão da fase envolvida (gás ou partícula) sobre a vazão total do escoamento (gás + partícula), para o desenvolvimento do modelo:

$$\xi_g = \frac{Q_g}{Q_s + Q_g}, \text{ com } \xi_g + \xi_s = 1 \quad (3.19)$$

3.2.1 Equações de conservação (Modelo bifásico)

Tendo estabelecidas as hipóteses, é possível apresentar o modelo matemático baseado nas propriedades médias temporais e na decomposição de Reynolds, capaz de representar o escoamento bifásico, envolvendo mecanismos turbulentos, as interações gás-sólido, a dinâmica do escoamento, o domínio espacial tridimensional, entre outras características. Por se tratar de um modelo isotérmico, as equações da conservação utilizadas são às de conservação da massa e à do *momentum*, aplicadas para cada fase.

As equações da conservação da massa para a fase gás e sólida são expressas, respectivamente por meio das seguintes equações:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\xi_g \rho_g) + \nabla \cdot (\xi_g \rho_g \mathbf{v}_g) = 0 \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\xi_s \rho_s) + \nabla \cdot (\xi_s \rho_s \mathbf{v}_s) = 0 \quad (3.21)$$

Já as equações do movimento, para as fases gás e sólida, são expressas:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\xi_g \rho_g \mathbf{v}_g) + \nabla \cdot (\xi_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = -\xi_g \nabla \cdot (\mathbf{T}_g^{ef}) + \xi_g \rho_g \mathbf{g} - \nabla p + \mathbf{F}_{res} \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\xi_s \rho_s \mathbf{v}_s) + \nabla \cdot (\xi_s \rho_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = \xi_s \rho_s \mathbf{g} - \mathbf{F}_{\text{res}} \quad (3.23)$$

3.2.2 Equações constitutivas

O tensor efetivo sobre a fase gasosa estabelece uma relação similar ao modelo para um fluido newtoniano, no qual a tensão é diretamente proporcional à deformação e é dado pela expressão,

$$\mathbf{T}_g^{\text{ef}} = -2\mu^{\text{ef}} \mathbf{D}_g \quad (3.24)$$

em que,

$$\mathbf{D}_g = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{v}_g + (\nabla \mathbf{v}_g)^T] \quad (3.25)$$

e,

$$\mu^{\text{ef}} = \mu_g + \mu^{(t)} \quad (3.26)$$

Na Equação (3.27) a viscosidade turbulenta, $\mu^{(t)}$, é obtida a partir de um modelo isotrópico de turbulência conhecido por modelo k- ϵ padrão (PATANKAR, 1971):

$$\mu^{(t)} = C_\mu \rho_g \frac{k_g^2}{\epsilon_g} \quad (3.27)$$

As equações adicionais de conservação, para a energia cinética turbulenta (k) e outra para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \xi_g k_g) + \nabla \cdot (\rho_g \xi_g \mathbf{v}_g k_g) = \xi_g \nabla \cdot \left(\mu_g + \frac{\mu_k^t}{\sigma^k} \nabla k_g \right) + \xi_g [G_g - \rho_g \varepsilon_g] \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \xi_g \varepsilon_g) + \nabla \cdot (\rho_g \xi_g \mathbf{v}_g \varepsilon_g) = \xi_g \nabla \cdot \left(\mu_g + \frac{\mu_k^t}{\sigma^k} \nabla \varepsilon_g \right) + \xi_g \frac{\varepsilon_g}{k_g} [C_1 G_g - C_2 \rho_g \varepsilon_g] \quad (3.29)$$

sendo,

$$\mathbf{G}_g = \mu^t \left[\begin{array}{l} 2 \left(\frac{\partial v_{x,g}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_{y,g}}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_{z,g}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{x,g}}{\partial y} + \frac{\partial v_{y,g}}{\partial x} \right)^2 \\ + \left(\frac{\partial v_{y,g}}{\partial z} + \frac{\partial v_{z,g}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{z,g}}{\partial x} + \frac{\partial v_{x,g}}{\partial z} \right)^2 \end{array} \right] \quad (3.30)$$

Sendo μ^t a viscosidade turbulenta e $C_1, C_2, C_\mu, \sigma^k$ e σ^ε constantes do modelo e \mathbf{G}_g um termo de geração de energia cinética turbulenta no seio da fase gasosa.

A Tabela 3.1 apresenta os valores das constantes empíricas do modelo k- ε padrão.

Tabela 3.1. Constantes do modelo k- ε padrão

| Constante | C_1 | C_2 | C_μ | σ^k | σ^ε |
|-----------|-------|-------|---------|------------|----------------------|
| Valor | 0,09 | 1,44 | 1,92 | 1,00 | 1,30 |

A força resistiva entre as fases é modelada por uma equação do tipo (GIDASPOW, 1994):

$$F_{res} = \beta_{g,s} (v_g - v_s) \quad (3.31)$$

O coeficiente de interface $\beta_{g,s}$, pode ser predito para escoamentos concentrados ($\xi_g < 0,8$) através da lei de Darcy (GIDASPOW, 1994):

$$\beta_{g,s} = 150 \frac{(1-\epsilon_g)^2 \mu_g}{\epsilon_g (d_p \phi_p)} + 1,75 \frac{\rho_g (1-\epsilon_g) |v_g - v_s|}{d_p \phi_p} \quad (3.32)$$

Para escoamentos diluídos ($\xi_g > 0,8$), um modelo proposto por WEN e YUU (GIDASPOW (1994)) relaciona o coeficiente de interface com o coeficiente de arraste, C_D , da seguinte forma:

$$\beta_{g,s} = \frac{3}{4} C_D \frac{\xi_g \rho_g |v_g - v_s| (1-\xi_g)}{d_p \phi_p} \quad (3.33)$$

O cálculo do coeficiente de arraste para os vários regimes de escoamento é dado pelas seguintes correlações (AEA TECHNOLOGY PLC, 1997):

- Para o regime de Stokes ($0 < Re_p \leq 0,2$) tem-se,

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \quad (3.34)$$

- Para a região viscosa ($0,2 < Re_p \leq 500$ a 1000),

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}) \quad (3.35)$$

- Para região turbulenta ($Re_p > 500$ a 1000),

$$C_D = 0,44 \quad (3.36)$$

DECKER (2002), avaliou a correlação proposta por Coelho e Massarani (1997), que abrange todos os valores de Reynolds para a partícula, evitando possíveis descontinuidades provocadas pela mudança do regime de escoamento devido ao aumento da velocidade axial:

$$C_D = \left[\left(\frac{24}{K_1 Re_p} \right)^{0,85} + K_2^{0,85} \right]^{1,18} \quad (3.37)$$

em que, K_1 e K_2 são constantes do modelo, expressos pelas seguintes correlações:

$$K_1 = 0,843 \cdot \log_{10} \left(\frac{\phi_p}{0,065} \right) \quad (3.38)$$

$$K_2 = 5,31 - 4,88\phi_p \quad (3.39)$$

Com ϕ_p a esfericidade das partículas e Re_p , o número de Reynolds da partícula que é dado por,

$$Re_p = \frac{\rho_g |v_g - v_s| d_p}{\mu_g} \quad (3.40)$$

3.3 Condições iniciais e de contorno

As condições de contorno usadas para a validação do modelo parte da simulação da condição inicial “somente gás” até atingir o balanço de massa, condição de pressão constante, condição de deslizamento para paredes. Todas as condições são apresentadas detalhadamente no Capítulo 5.

3.4 Modelo completo (3-D e transiente)

O modelo tridimensional, multifásico (gás-sólido), tridimensional e transiente em sistema de coordenadas cartesianas apresentado anteriormente para qualquer propriedade, ϕ_k , na fase α , pode ser generalizado da seguinte forma (MEIER *et al.*, 1999):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \xi_g \phi_g) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_g \xi_g v_x \phi_g) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho_g \xi_g v_y \phi_g) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_g \xi_g v_z \phi_g) = \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left[\xi_g \Gamma_g \frac{\partial (\rho_g \phi_g)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\xi_g \Gamma_g \frac{\partial (\rho_g \phi_g)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\xi_g \Gamma_g \frac{\partial (\rho_g \phi_g)}{\partial z} \right] + S_\phi \end{aligned} \quad (3.41)$$

em que, ϕ_g são as propriedades fluidodinâmicas (u , v , w , k e ξ) na fase gás; Γ e S são o coeficiente de difusão e o termo fonte para cada propriedade ϕ_g , respectivamente; ρ_g é a massa específica da fase gás e ξ_g é a fração volumétrica da fase gás.

A Tabela 3.2 apresenta de uma forma compacta o modelo 3-D e Transiente, onde são definidos os termos fontes para cada variável ϕ_α , S_ϕ , e as expressões para o coeficiente de difusão Γ de acordo com a equação (3.41), sendo que α representa a fase genérica.

Tabela 3.2. Forma compacta do modelo 3-D Transiente.

| Conservação | ξ_α | ϕ_α | Γ_α | S_ϕ |
|--|--------------|---------------|--|--|
| Massa Fase Gás | ξ_g | 1 | 0 | 0 |
| Massa Fase Sólida | ξ_s | 1 | 0 | 0 |
| Momentum em x para fase gás | ξ_g | $(v_x)_g$ | $\frac{\mu_g + \mu_g^t}{\rho_g}$ | $-\xi_g \frac{\partial p}{\partial x} + \xi_g \rho_g g_x - FR_x$ |
| Momentum em x para fase sólida | ξ_s | $(v_x)_s$ | 0 | $0 + \xi_s \rho_s g_x + FR_x$ |
| Momentum em y para fase gás | ξ_g | $(v_y)_g$ | $\frac{\mu_g + \mu_g^t}{\rho_g}$ | $-\xi_g \frac{\partial p}{\partial y} + \xi_g \rho_g g_y - FR_y$ |
| Momentum em y para a fase sólida | ξ_s | $(v_y)_s$ | 0 | $0 + \xi_s \rho_s g_y + FR_y$ |
| Momentum em z para fase gás | ξ_g | $(v_z)_g$ | $\frac{\mu_g + \mu_g^t}{\rho_g}$ | $-\xi_g \frac{\partial p}{\partial z} + \xi_g \rho_g g_z - FR_z$ |
| Momentum em z para fase sólida | ξ_s | $(v_z)_s$ | 0 | $0 + \xi_s \rho_s g_z + FR_z$ |
| Energia cinética turbulenta Fase Gás | ξ_g | k | $\frac{\mu_g + \frac{\mu}{\sigma} k}{\rho_g}$ | $\xi_g G_g - \rho_g \epsilon $ |
| Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta Fase Gás | ξ_g | ϵ | $\frac{\mu_g + \frac{\mu}{\sigma} \epsilon}{\rho_g}$ | $\xi_g \frac{\epsilon}{k} (C_1 G_g - C_2 \rho_g \epsilon)$ |

Tabela 3.2. Continuação.

$$G_g = \mu^t \left[\begin{array}{l} \text{Equações constitutivas} \\ 2 \left(\frac{\partial v_{x,g}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_{y,g}}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_{z,g}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{x,g}}{\partial y} + \frac{\partial v_{y,g}}{\partial x} \right)^2 \\ + \left(\frac{\partial v_{y,g}}{\partial z} + \frac{\partial v_{z,g}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{z,g}}{\partial x} + \frac{\partial v_{x,g}}{\partial z} \right)^2 \end{array} \right]$$

$$FR_x = \frac{3}{4} \rho_g \frac{\xi_s}{d_p} C_D (v_{x,s} - v_{x,g}) |v_{x,s} - v_{x,g}|$$

$$FR_y = \frac{3}{4} \rho_g \frac{\xi_s}{d_p} C_D (v_{y,s} - v_{y,g}) |v_{y,s} - v_{y,g}|$$

$$FR_z = \frac{3}{4} \rho_g \frac{\xi_s}{d_p} C_D (v_{z,s} - v_{z,g}) |v_{z,s} - v_{z,g}|$$

$$0,0 < Re_p < 0,2$$

$$C_D = \frac{24}{Re_g}$$

$$0,2 < Re_p < 500,0$$

$$C_D = \frac{24}{Re_g} \left(1 + 0,1 Re_g^{0,75} \right)$$

$$Re_p > 500,0$$

$$C_D = 0,44$$

$$0 \leq Re_p \leq \infty$$

$$C_D = \left[\left(\frac{24}{K_1 Re_p} \right)^{0,85} + K_2^{0,85} \right]^{1,18}$$

$$K_1 = 0,843 \cdot \log_{10} \left(\frac{\phi_p}{0,065} \right)$$

$$K_2 = 5,31 - 4,88 \phi_p$$

O modelo completo, formado pela Equação (3.41) e a Tabela 3.2, com as condições iniciais e de contorno serão utilizados nos estudos de validação numérica desse trabalho.

CAPÍTULO 4

MÉTODOS NUMÉRICOS E O CÓDIGO DE CFD

Em virtude do avanço tecnológico, abordagens numéricas são cada vez mais utilizadas, prevendo comportamentos e proporcionando otimização de processos. Com o desenvolvimento tecnológico, cada vez mais o Ser Humano busca aliar-se à tecnologia e nesse sentido, os métodos numéricos tornam-se ferramentas capazes de solucionar de forma discreta, modelos matemáticos cada vez mais representativos da realidade física.

Para a solução de problemas de fluidodinâmica computacional, existe uma quantidade considerável de material bibliográfico sobre a utilização do método dos volumes finitos, destacando-se PATANKAR e SPALDING (1971) (precursores do método); Van DOORMAAL e RAITHBY (1984); MEIER *et al.* (1999); salientando PATANKAR (1980) e MALISKA (1995).

Este capítulo apresenta, de forma sucinta o método dos volumes finitos, o esquema de interpolação, o acoplamento pressão - velocidade, a geração de malha necessários ao estudo de experimentação numérica a que se propõe esta dissertação. Apresentam-se também os principais aspectos associados ao código de CFD usado nos estudos do presente trabalho.

Todo domínio do fenômeno que está sendo observado é então discretizado em volumes de controle ou computacionais que interagem entre si trocando massa, quantidade de movimento e energia, na forma de células de informações de conservação no algoritmo numérico de solução.

Considerando-se um sistema monofásico e a partir da equação genérica apresentada na Tabela 3.2, para as equações de transporte:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) - \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) = S \phi. \quad (4.1)$$

onde Γ é a contribuição difusiva para uma dada variável dependente ϕ e S , o termo fonte.

Integrando a Equação (4.1) tem-se:

$$\iiint_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV + \iiint_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) dV + \iiint_V -\nabla \cdot \Gamma \cdot \phi, dV = + \iiint_V S \phi dV. \quad (4.2)$$

Com o teorema da divergência de Gauss,

$$\iiint_V \nabla \cdot \mathbf{f} dV = \iint_A (\mathbf{f} \cdot \mathbf{n}) dA. \quad (4.3)$$

aplicado na Equação (4.2), chega-se à equação integrada no volume de células em todas as suas superfícies:

$$\iiint_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV + \iint_A (\rho \mathbf{v} \phi \cdot \mathbf{n}) dA - \iint_A (\Gamma \phi \cdot \mathbf{n}) dA = \iiint_V S \phi dV. \quad (4.4)$$

Cada termo da Equação (4.4) anterior, acúmulo, contribuição convecção, contribuição difusão e fonte, deve ser integrado em um volume de controle para se obter a sua representação discreta no domínio computacional;

$$\underbrace{\int \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV}_{\text{Termo Transiente}} + \underbrace{\int \rho \phi v n dA}_{\text{Contribuição Convectiva}} - \underbrace{\int \Gamma \nabla \phi n dA}_{\text{Contribuição Difusiva}} = \underbrace{\int S_{\phi} dV}_{\text{Termo Fonte}}. \quad (4.4)$$

A seguir apresenta-se, sucintamente, as principais etapas da discretização da equação geral de conservação para uma propriedade conservável genérica ϕ .

4.1.1 Discretização do termo transiente

A determinação do termo transiente ocorre por meio da sua integração para um determinado intervalo de tempo $t+\Delta t$, aplicando aproximação “backward” Euler de primeira ordem como pode ser observado no equacionamento a seguir:

$$\iiint_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV \cong \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV \quad (4.3)$$

e,

$$\iiint_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV \cong \left[\frac{(\rho \phi^n - \rho \phi^{n-1})}{\Delta t} \right] \Delta V \quad (4.4)$$

em que, o sobrescrito n , esta associado ao instante de tempo entre os passos de tempo.

4.1.2 Discretização do termo referente à contribuição convectiva

A integração do termo referente à contribuição convectiva para a face oeste, resulta em:

$$\int \rho \phi v n dA = \rho v_o A_o \phi_o$$

$$\int \rho \phi v n dA = C_o \phi_o$$

sendo C_o , representa o fluxo convectivo na face oeste e deve ser aproximado por um esquema de interpolação na face do volume de controle.

4.1.3 Discretização do termo referente à contribuição difusiva

O termo referente à contribuição difusiva na superfície oeste do volume de controle é discretizado da seguinte forma:

$$\int \Gamma \nabla \phi n dA = \frac{\Gamma A_o}{h_o} (\phi_p - \phi_o) \equiv D_o (\phi_p - \phi_o). \quad (4.5)$$

em que, A representa a área na face correspondente e h a distância entre o nó e o nó central (P) e D_o o coeficiente difusivo na face oeste.

4.1.4 Discretização do termo fonte

A integração do termo fonte é dada por:

$$\int SdV = SU + SP\phi_P . \quad (4.6)$$

onde, SP representa o coeficiente angular e SU o coeficiente linear para a aproximação numérica de linearização do termo fonte.

4.1.5 Esquemas de interpolação

Os esquemas de interpolação geram aproximações diferentes, produzindo diferentes soluções para uma mesma equação diferencial, enquanto a malha não for refinada. O esquema de interpolação pode ser fundamental na análise de um resultado. Em virtude desse aspecto foram utilizados esquema de interpolação de primeira ordem (*upwind*) e de segunda ordem (*higher hipwind*) para comparação dos resultados.

- Esquemas de interpolação *upwind*

Considerando a Figura 4.1, a função de interpolação tem as seguintes expressões:

$$\phi_o = \phi_O \quad , \quad \phi_l = \phi_P \quad \text{para} \quad v > 0$$

$$\phi_o = \phi_P \quad , \quad \phi_l = \phi_L \quad \text{para} \quad v < 0$$

O esquema *upwind* tem sua relação direta com o valor na interface, que é igual ao valor da função no volume a montante, mudando de acordo com o sentido da velocidade (MALISKA, 1995).

- Esquemas de interpolação *higher upwind*

O esquema de interpolação *upwind* é de primeira ordem, enquanto que o *higher upwind*, de segunda ordem por extrapolar valores de dois pontos a montante. Dessa forma, têm-se:

$$\phi_o = \phi_o + \frac{1}{2}(\phi_o - \phi_{oo})$$

$$\phi_e = \frac{3}{2}\phi_P - \frac{1}{2}\phi_o$$

sendo ϕ_{oo} a variável na face oeste oeste.

4.1.6 Forma discreta da equação geral de conservação

A forma discreta para a equação geral de conservação fica:

$$A_P \phi_P - \sum_{nb} A_{nb} \phi_{nb} = SU. \quad (4.7)$$

$$A_P = \sum_{nb} A_{nb} - SP + C_U - C_D + C_N - C_S + C_L - C_O + \frac{\rho V}{\Delta t}. \quad (4.8)$$

Sendo que os termos $C_U, C_D, C_N, C_S, C_L, C_O$ representam as contribuições convectivas advindas dos fluxos convectivos nos pontos adjacentes ao ponto P do volume de controle.

4.1.7 Acoplamento pressão velocidade

Para a solução numérica estável utiliza-se o método SIMPLEC, que trata do acoplamento pressão – velocidade por meio da introdução de um termo de relaxação na equação de conservação de movimento para a velocidade e pressão. PATANKAR (1980) e MALISKA (1995) apresentam uma descrição detalhada para a obtenção do acoplamento pressão-velocidade.

4.2 Construção de geometria e malha numérica no pré-processador

A construção da geometria e da malha numérica consiste em uma etapa fundamental para o sucesso das simulações. Parâmetros como o número de pontos e a sua distribuição influenciam diretamente na ortogonalidade dos elementos da geometria. Tais detalhes podem diferenciar consideravelmente o tempo computacional e a convergência da simulação.

Para um reator, com as características de um *downer*, com uma relação da altura muito maior em relação ao diâmetro e promovendo menor segregação radial e axial das fases fluida e particulada, para que essas características sejam bem representadas, faz-se necessário uma malha numérica adequada aos fenômenos de interesse. Na concepção da distribuição dos nodos para a formação dos elementos, optou-se pelo refino da malha no centro e na parede do reator, buscando sempre a melhor ortogonalidade dos elementos.

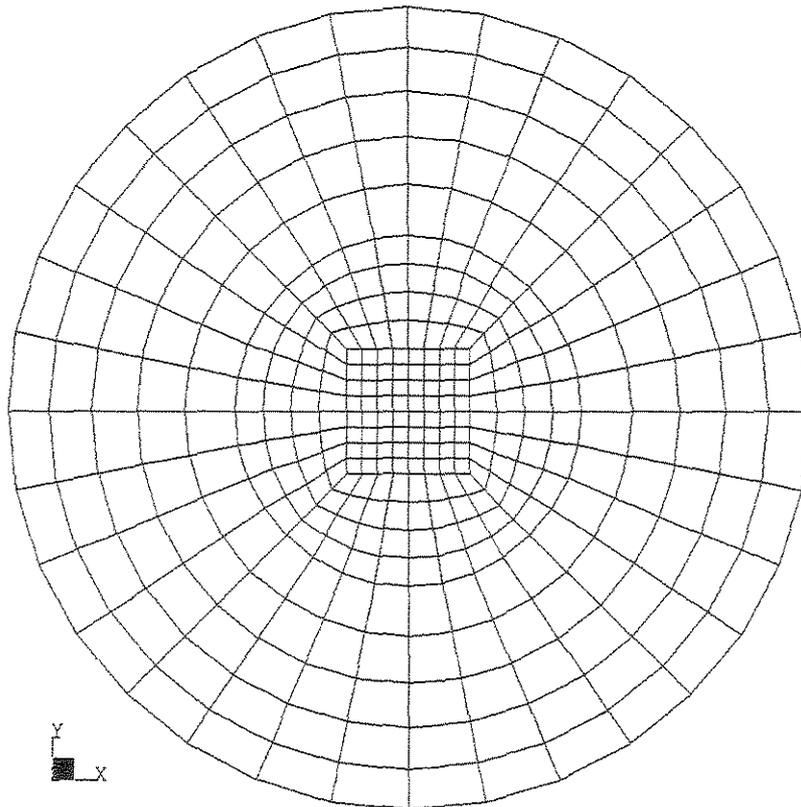


Figura 4.2: Seção transversal da malha numérica usada nos experimentos numéricos deste trabalho.

A Figura 4.2, apresenta uma seção transversal da malha numérica adotada, com número aproximado de 52.000 elementos. Para outro caso, em virtude de diferentes características de entrada do reator a malha numérica fica conforme Figura 4.3. As malhas numéricas utilizadas para as simulações variaram em número de elementos, de 52.000 até 95.000 elementos, possibilitando a verificação da influência do número de elementos sobre o perfil de distribuição de sólidos.

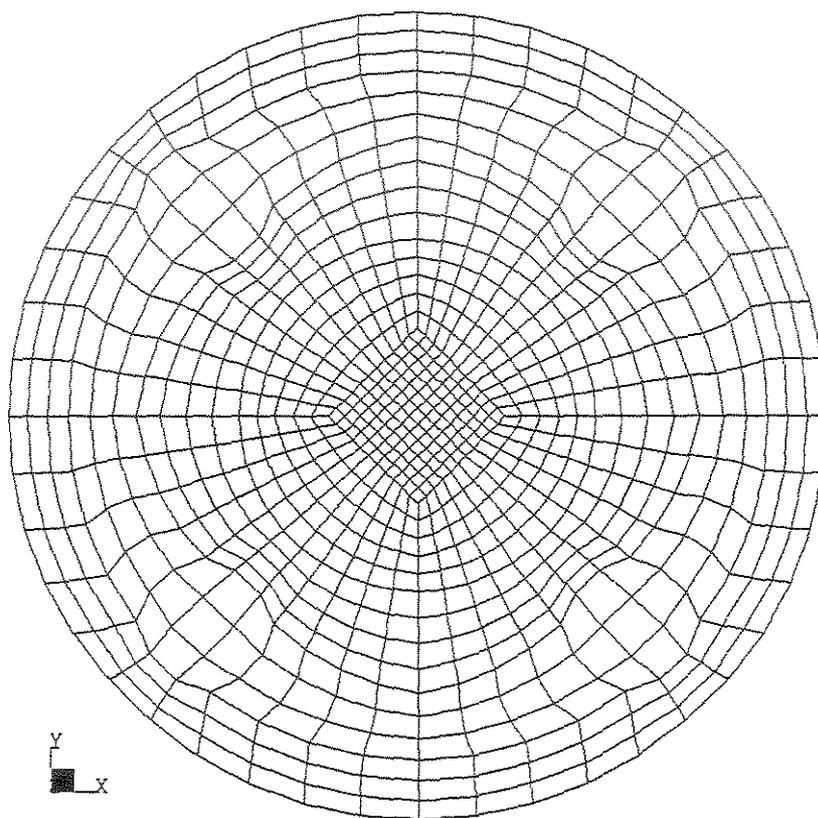
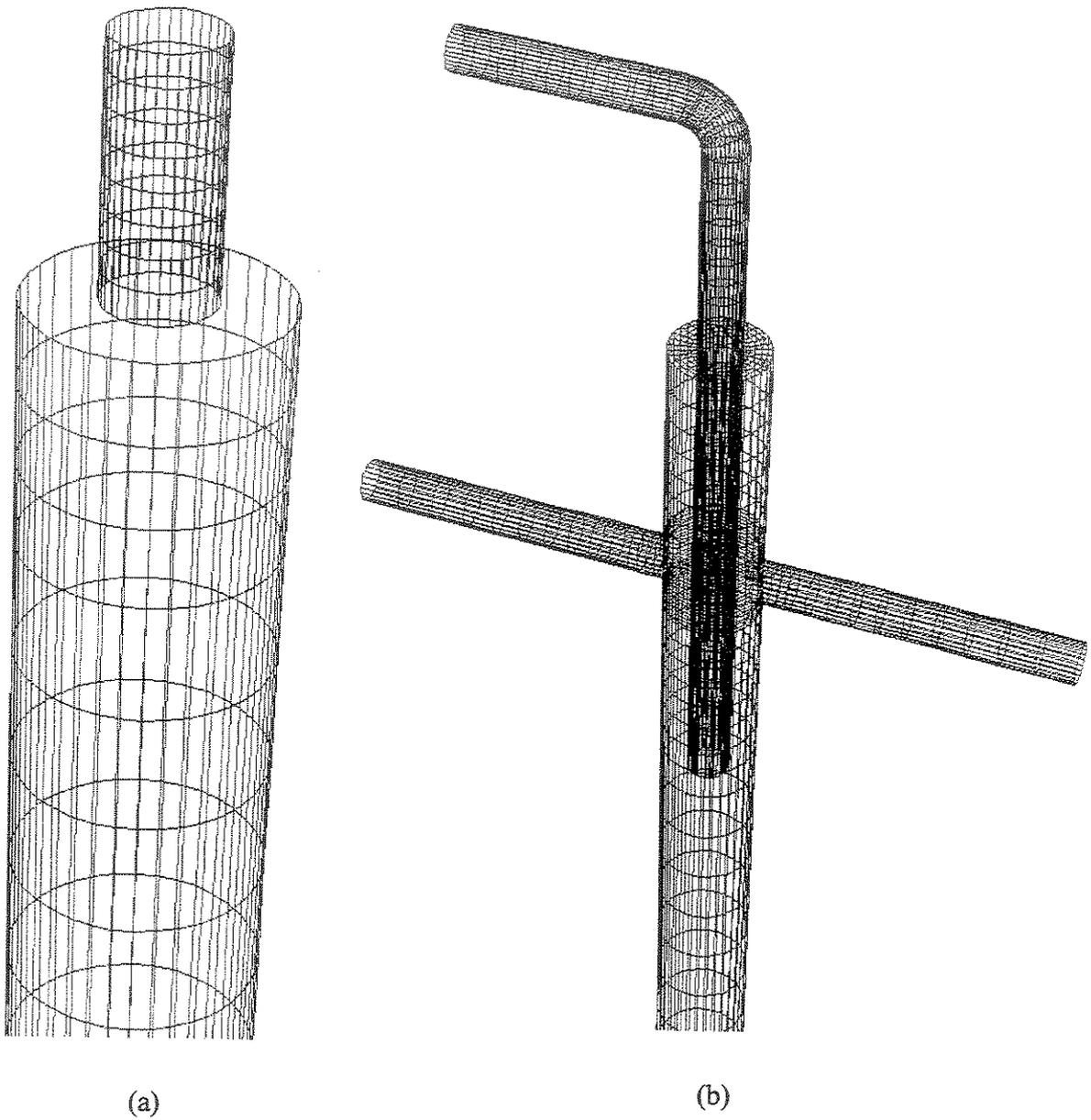
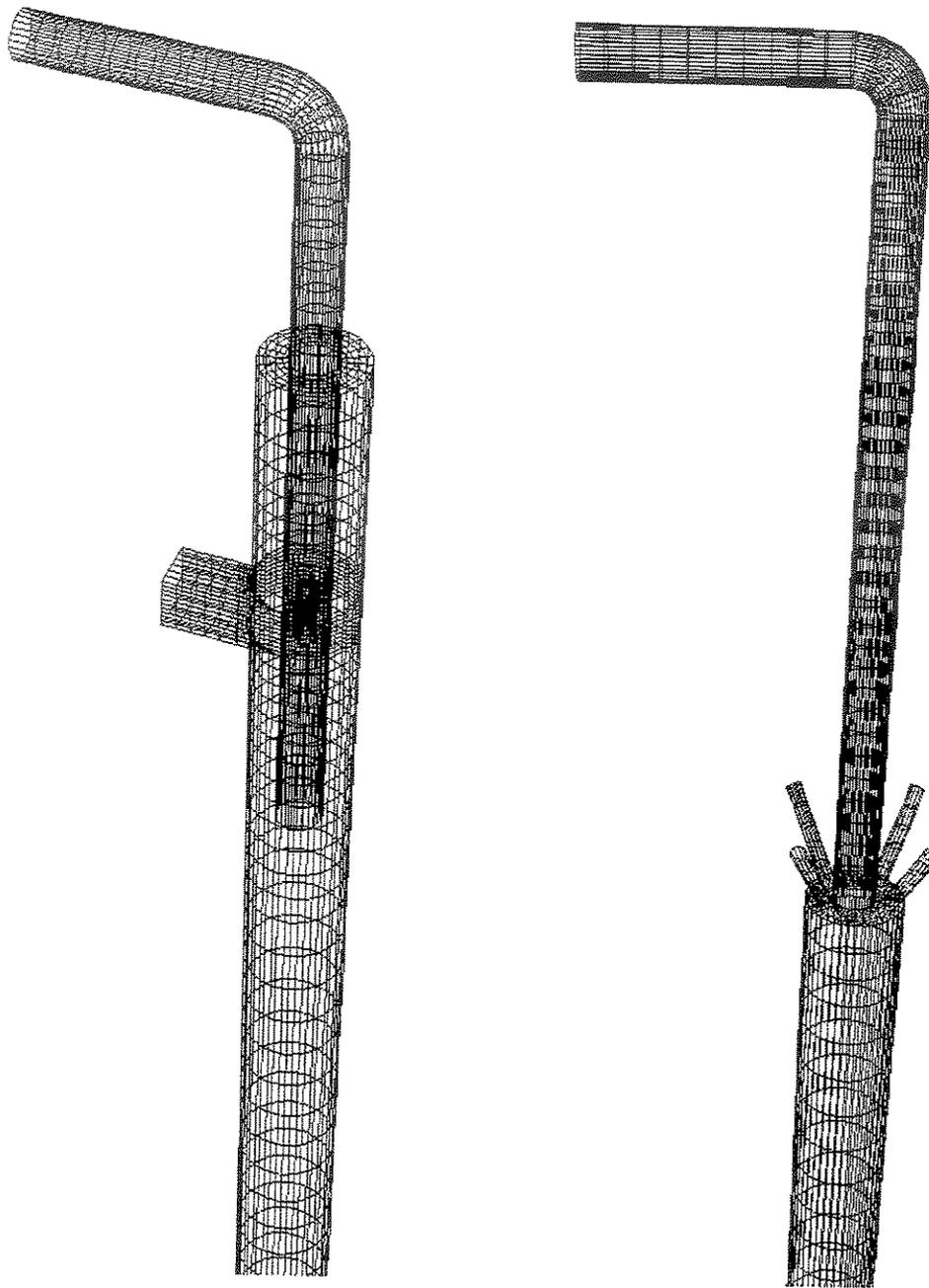


Figura 4.3: Seção transversal da entrada com modificações.

Quatro malhas diferentes foram construídas para a solução numérica referente a cada estudo de caso (Casos 1, 2, 3 e 4). Para cada configuração geométrica é necessária uma nova malha. As Figuras 4.2 e 4.3 apresentam o detalhamento na região de entrada para cada geometria.



4.4: Malha numérica: (a) CASO 1; (b) CASO 2.



(a)

(b)

4.5: Malha numérica: (a) CASO 3; (b) CASO 4.

4.3 Visualização científica

Para a visualização dos resultados, o código de CFD empregado, disponibiliza a visualização das distribuições de pressão, velocidade, fração volumétrica, mapas vetoriais, malha numérica entre outros. A Figura 4.6 apresenta um exemplo de algumas possibilidades de visualização de uma geometria.

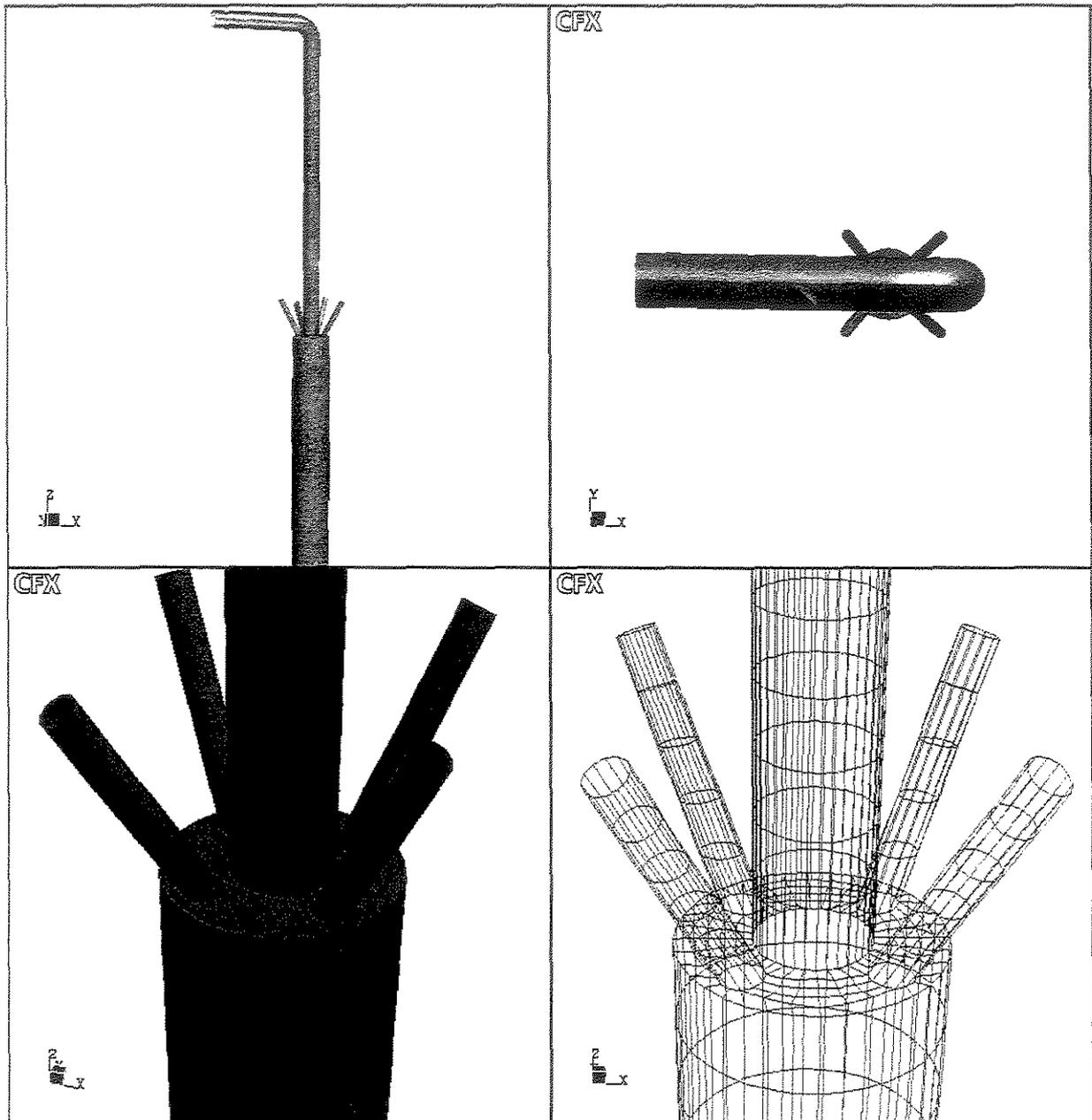


Figura 4.6: Visualização da geometria e da malha numérica com o código CFX.

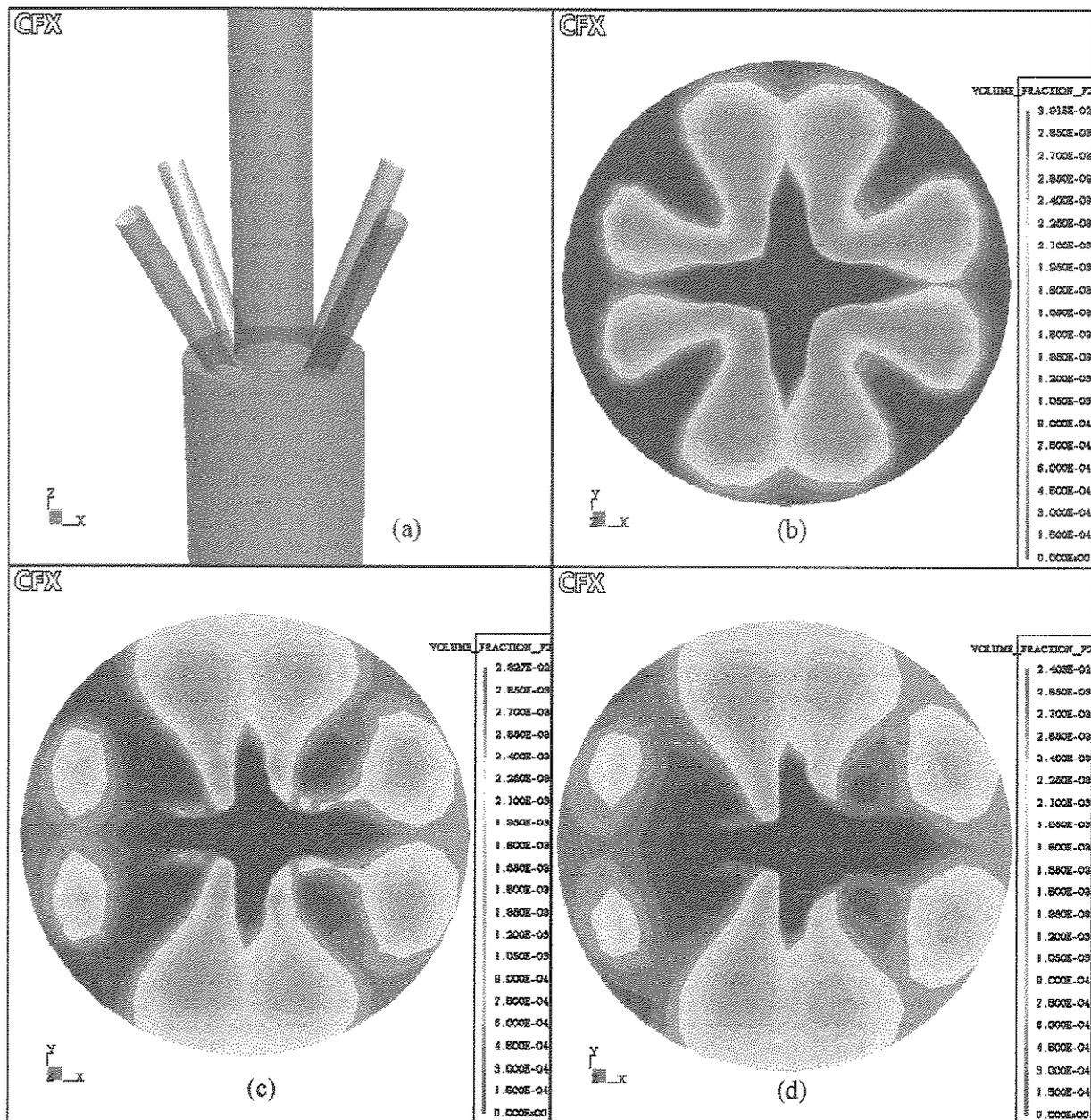


Figura 4.7: Mapa da distribuição radial da fração volumétrica de sólidos:
 (a) caso 4;(b) altura de 0,44m; (c) altura de 1,45 m; (d) altura de 2,90m.

A representação da dinâmica do escoamento é apresentada na Figura 4.7, para o estudo de CASO 4 em um tempo real de 140 segundos. Os estudos de verificação do código de CFD, CFX – 4.4, deste trabalho fizeram uso dos métodos apresentados neste capítulo.

CAPÍTULO 5

ESTUDOS DE CASO PARA EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA

Neste Capítulo apresenta-se a caracterização dos casos de estudo usados na experimentação numérica, com o detalhamento da geometria, da malha numérica e das condições operacionais.

O CASO 1 apresenta os estudos atribuídos à geometria adotada por CHENG (2001). Do CASO 2 em diante são apresentadas as propostas de entrada para o reator *downer*, buscando sempre um perfil homogêneo de distribuição da fase particulada no reator, semelhante à idealidade de um reator *plug flow*, para corroborar resultados numéricos com os dados experimentais obtidos por CHENG (2001).

5.1 Dados experimentais para os estudos de validação e verificação

O trabalho proposto por CHENG (2001) consiste basicamente em um reator *downer*, com alimentação central gás-sólido, enquanto que a região anular é alimentada pela fase gasosa para dispersão da fase sólida no seio da seção transversal da parte cilíndrica do reator.

As características geométricas do reator são apresentadas na Figura 5.1(a) e (b). A abordagem numérica adotada por CHENG (2001) está apresentada na Figura 5.1(b), onde uma geometria axissimétrica 2-D é considerada como aproximação para a representação 3D

demonstrada na Figura 5.1(a), onde a influência dos efeitos da alimentação do reator são desprezados.

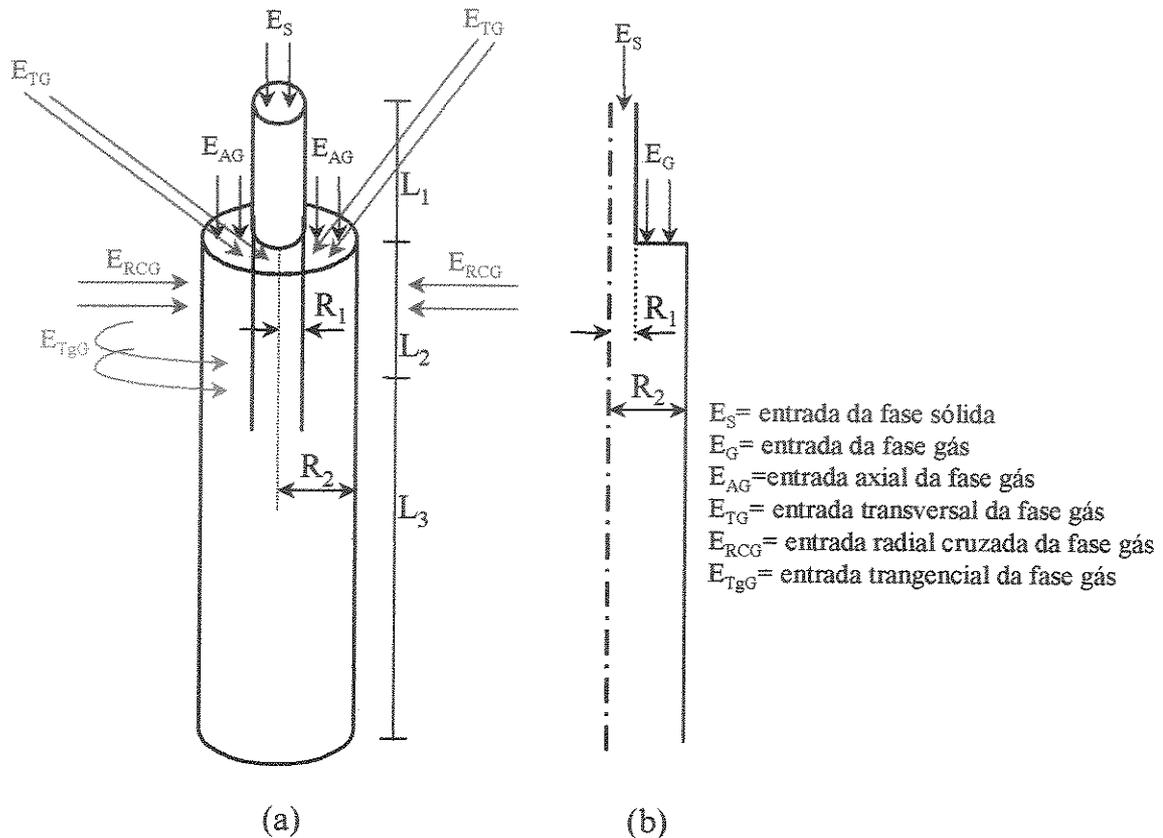


Figura 5.1: Representação esquemático do reator *downer*

(a) Reator experimental, (b) reator numérico proposto por CHENG, 2001.

Para a validação dos dados numéricos com os experimentais, CHENG (2001), não especifica no corte transversal, em que posição tangencial foram feitas as medidas, além da utilização do modelo com oito parâmetros de correção em seus estudos de CFD.

As possibilidades de orientação da entrada do gás mostradas na Figura 5.1 (a) são: entrada axial anular; entrada radial cruzada; entrada radial tangencial; e entrada transversal. A representação da entrada axial do gás é uma idealização usada por CHENG (2001) para

justificar a adoção da hipótese da axissimetria ou simetria axial em um domínio 2-D. No entanto, o modelo não considera nenhuma possibilidade de giro ou de mudança brusca de direção por ação de acessórios como curvas, tês, etc... A Tabela 5.1 define as grandezas geométricas do *downer*, proposto por CHENG (2001), as propriedades físicas na Tabela 5.2, e as condições operacionais são apresentadas na Tabela 5.3.

Tabela 5.1: Grandezas geométricas do reator *downer* (CHENG, 2001).

| | |
|---|---------|
| Raio para a região de entrada de sólido (R_1) | 0,020 m |
| Raio para a seção anular (R_2) | 0,046 m |
| Altura da região de entrada de sólido (L_1) | 0,092 m |
| Altura da parede interna do sólido (L_2) | 0,30 m |
| Altura do reator <i>downer</i> (L_3) | 4 m |

Tabela 5.2: Propriedade físicas (CHENG, 2001).

| | |
|---|-----------|
| Fluxo de catalisador ($\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$) | 20 |
| Viscosidade cinemática dos sólidos ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$) | invíscido |
| Massa específica dos sólidos (kg.m^{-3}) | 1398 |
| Diâmetro das partículas (μm) | 56 |
| Viscosidade cinemática dos gases ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$) | 1,85 |
| Massa específica do gás (kg.m^{-3}) | 1,0290 |

Tabela 5.3: Condições operacionais utilizadas nos estudos de caso

| Velocidade | CASO 1 | CASO 2 | CASO 3 | CASO4 |
|----------------------------|--------|--------|--------|-------|
| v_g (m.s ⁻¹) | 3,10 | 6,65 | 15,00 | 53,20 |
| v_s (m.s ⁻¹) | 1,51 | 1,51 | 1,51 | 1,51 |

Conforme apresentado na revisão bibliográfica, poucos trabalhos apresentam as condições geométricas completas para simulação. Em tais situações simplificações como eixos de simetria são comumente utilizadas admitindo um escoamento simétrico.

Nas simulações adotaram-se geometrias tridimensionais, pois existem fenômenos que não podem ser preditos em condições de aproximação conforme foi discutido por NORILER (2003). No presente estudo considerou-se uma curva de 90° para alimentação de sólido no reator, e várias entradas conforme sugerido na Figura 5.4.

5.2 Estudos de caso

A concepção das geometrias para a visualização dos resultados, os estudos de caso, com entrada axial anular, entrada radial cruzada, entrada radial tangencial e a entrada transversal são apresentados a seguir com o detalhamento das condições geométricas.

5.2.1 Estudo de CASO 1: Entrada 3-D axial anular

A validação do modelo matemático multifásico (gás-sólido) tridimensional e transiente foi motivada a partir das condições apresentadas por CHENG (2001); reator com entrada anular para a fase gasosa e central para a fase sólida. Tal concepção é idealizada. Os critérios de construção da malha numérica partem do princípio de que a

ortogonalidade dos elementos ou células numéricas é primordial para a solução convergente do problema. A geometria do CASO 1 apresenta aproximadamente 42.000 elementos. Para a corroboração dos resultados as condições iniciais de simulação respeitaram os dados fornecidos na Tabela 5.2.

A Figura 5.2 apresenta a configuração geométrica adotada para o reator do CASO 1, com uma entrada 3 – D axial anular.

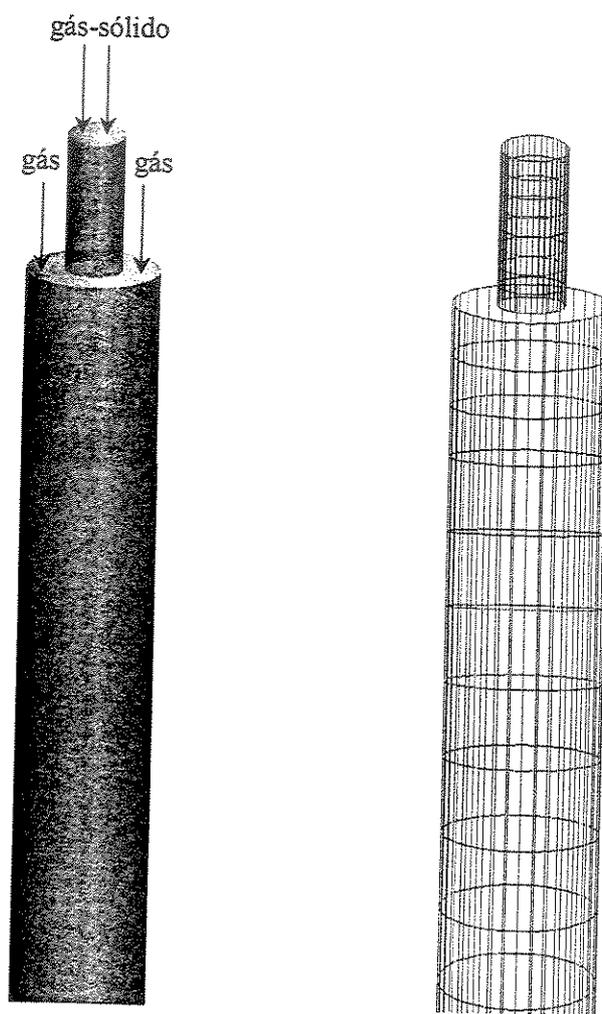


Figura 5.2: Visualização da geometria e da malha numérica para o CASO 1.

5.2.2 Estudo de CASO 2: Entrada 3-D radial cruzada

No estudo de CASO 2, a concepção geométrica do reator considera a entrada da mistura gás-sólido em um reator *downer*, sendo que a fase gás é alimentada lateralmente. A configuração geométrica adotada é representada na Figura 5.3.

Com a condição inicial de entrada lateral para a fase gás, é considerado a uniformidade da velocidade para a fase gás, de tal forma que a fase, apresenta um perfil de distribuição desenvolvido para alimentação do reator até atingir a região de entrada de sólido do reator. O estudo de CASO 2 possui aproximadamente 50.000 elementos.

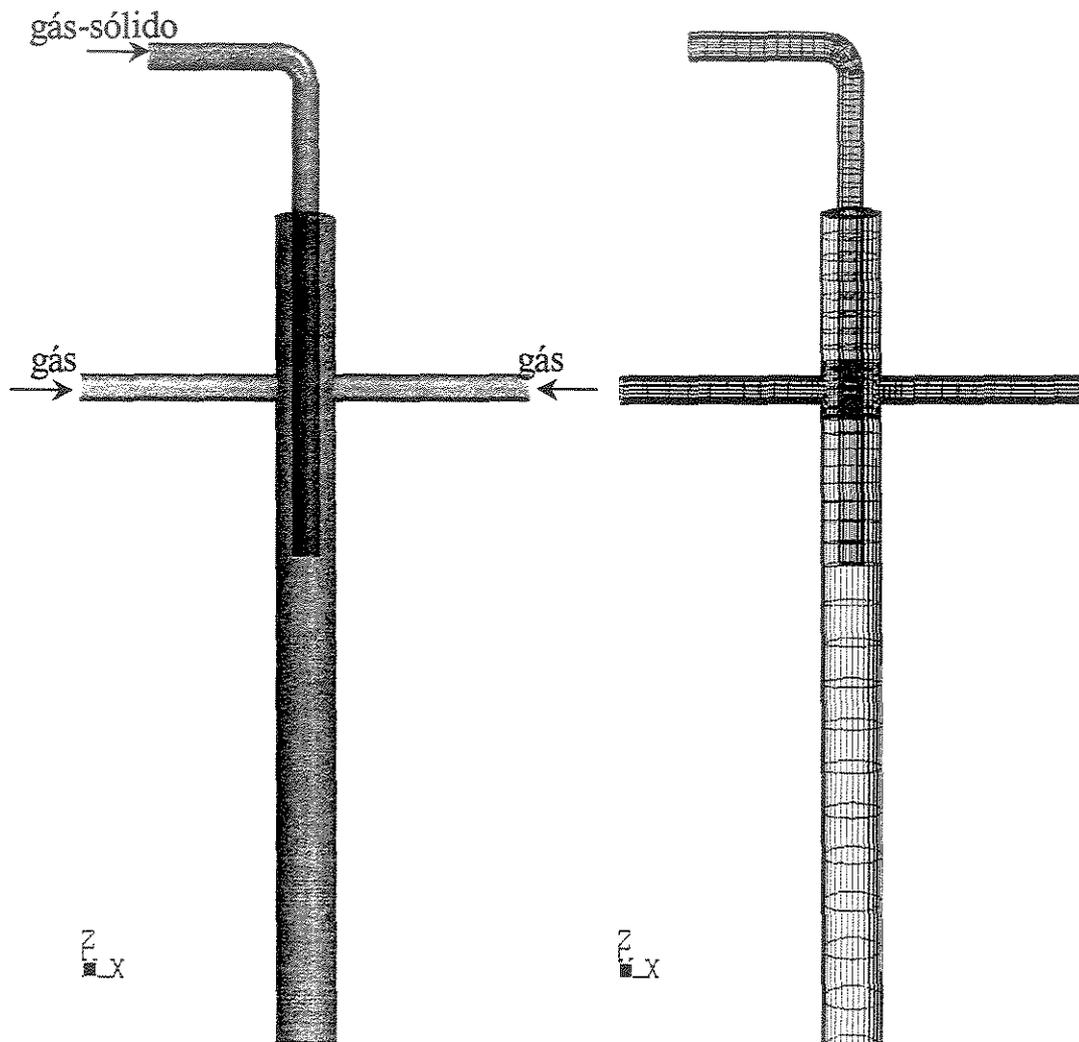


Figura 5.3: Visualização da geometria e da malha numérica para o CASO 2.

5.2.3 Estudo de CASO 3: Entrada 3-D tangencial

A configuração geométrica adotada para as simulações do Estudo de CASO 3, Figura 5.4, considera uma entrada gás - sólido no topo do reator enquanto que a alimentação da fase gás foi inspirada na entrada tangencial ciclônica, com um número de elementos próximo a 40.000 elementos.

A entrada tangencial ciclônica baseou-se no comportamento fluidodinâmico dos ciclones, onde a fase particulada escoa na direção da parede, em virtude de forças centrífugas atuantes no sistema.

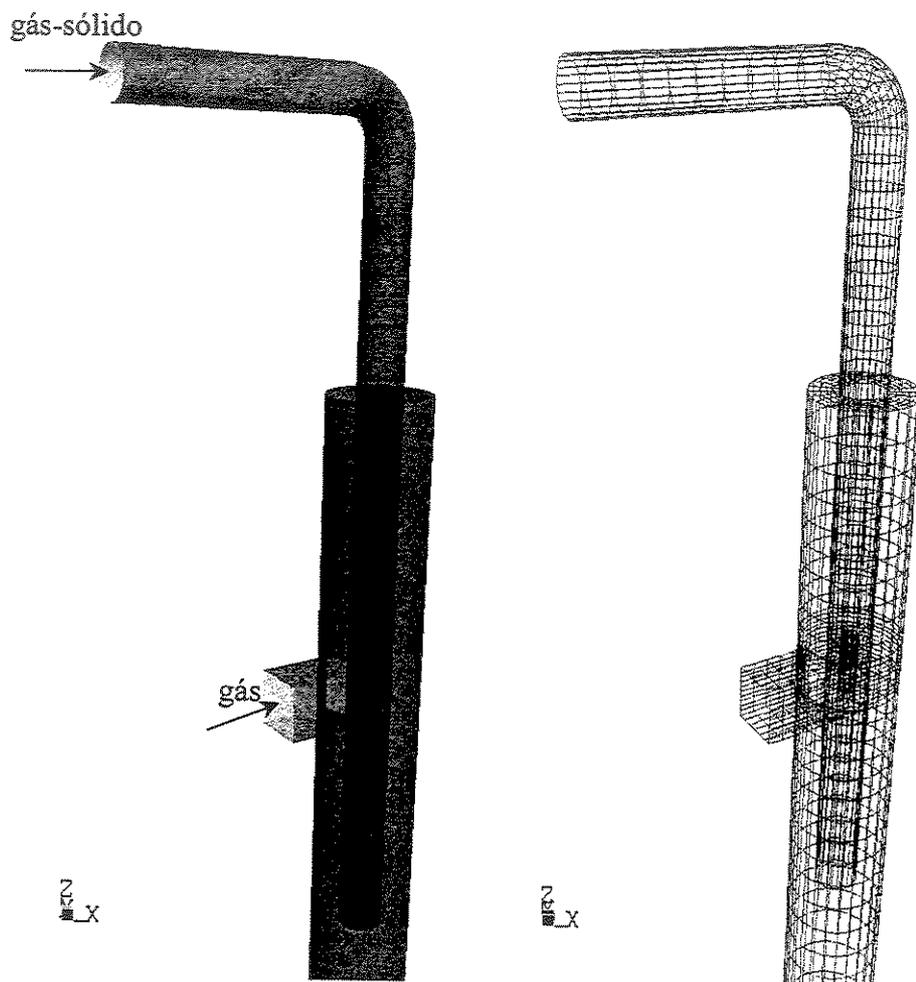


Figura 5.4: Visualização da geometria e da malha numérica para o CASO 3.

5.2.4 Estudo de CASO 4: Entrada transversal

No Estudo de CASO 4, Figura 5.5, a alimentação da fase gás do reator é feita através de quatro entradas com inclinação de 30° com a vertical no topo do reator. A utilização de quatro entradas de gás, possui o mesmo objetivo dos demais casos de estudo, ou seja, a de promover uma distribuição uniforme do escoamento corroborando os dados experimentais disponíveis na literatura. Para o CASO 4 a malha numérica é composta por aproximadamente 50.000 elementos.

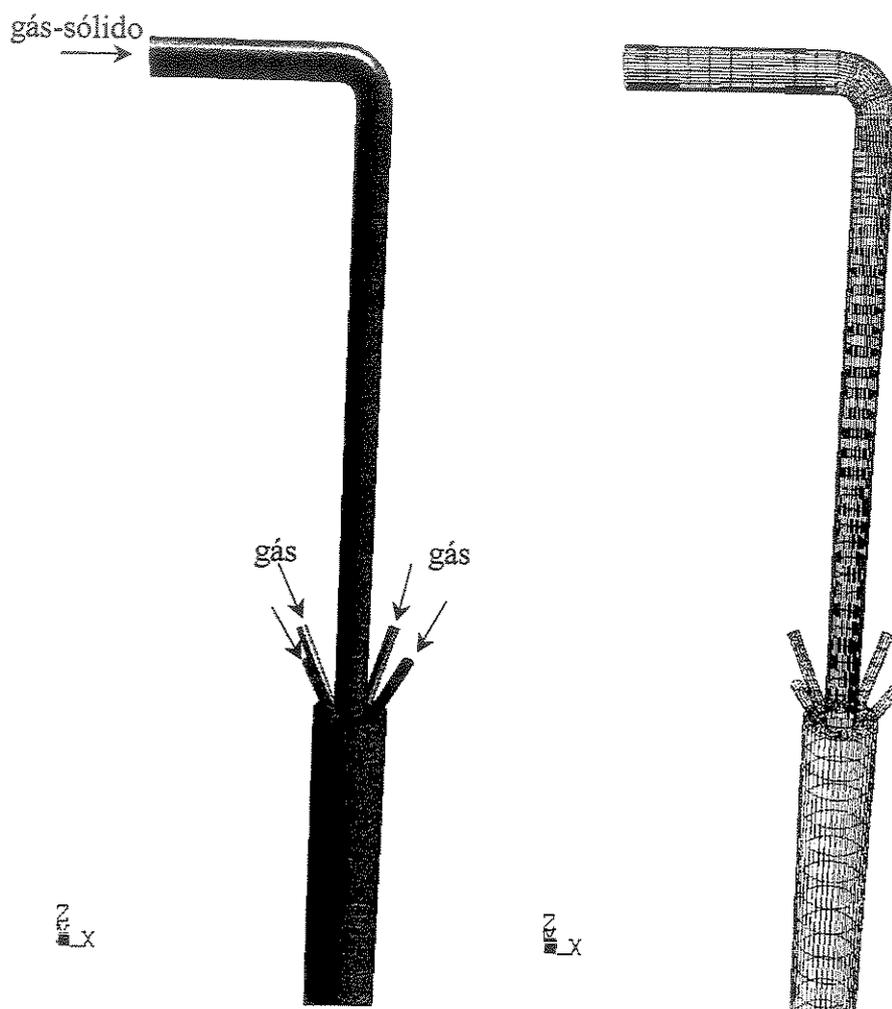


Figura 5.5: Visualização da geometria e da malha numérica para o CASO 4.

5.2.5 Principais características numéricas

As simulações foram feitas algumas simplificações são adotadas na solução do modelo matemático, a Tabela 5.4 apresenta o detalhamento das principais características numéricas adotadas.

Tabela 5.4: Principais características numéricas.

| | |
|---|--|
| Distribuição do perfil de velocidade na entrada | uniforme |
| Condição de contorno na parede | não deslizamento |
| Esquema de diferenciação | primeira ordem (UPWIND) segunda ordem (HIGHER UPWIND) |
| Acoplamento pressão-velocidade | SIMPLEC |
| Dimensão da malha numérica | 0,03 x 0,05 m |
| Modelo de turbulência | k- ϵ |

5.3 Principais observações

As possibilidades geométricas adotadas para o reator downer, de entrada axial anular, entrada radial cruzada; entrada radial tangencial; e entrada transversal são apresentados detalhadamente os resultados no capítulo seguinte.

Devido a CHENG (2001) não detalhar a entrada real do *downer* os casos 2, 3 e 4 procuram representar algumas possibilidades de entrada do gás no reator. Além disso, nestes casos, considerou-se também a presença de uma curva de 90° no duto de alimentação de sólidos. A corroboração do modelo com os dados experimentais dependem necessariamente das condições geométricas da entrada.

Os resultados numéricos relativos às propostas de entrada aqui expostas, são apresentados e detalhados no próximo capítulo.

CAPÍTULO 6

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Serão apresentados os resultados numéricos obtidos, considerando o *downer* proposto por CHENG (2001), comparando com dados obtidos numericamente de uma geometria tridimensional, adotando um escoamento inviscido, utilizando o modelo E-E.

Embora os reatores *downer* e *riser* possuam semelhanças em relação a sua construção, diferenciando-se na modelagem basicamente em virtude do sentido do escoamento, já que o reator *riser* o escoamento acontece no sentido contracorrente a gravidade enquanto que o reator *downer* concorrente, para as equações essa diferença acarreta na inversão do sinal da gravidade nas equações de modelagem matemática.

6.1 Tipo de entrada do reator

A variação no tipo de entrada do reator permite avaliar as influências que as condições geométricas podem gerar sobre a distribuição de catalisador no leito do reator. Os resultados são apresentados para diferentes alturas do reator (1,45m; 2,21m e 2,90m).

O CASO 1 em virtude de apresentar alimentação para a fase gás na região anular do reator, caracteriza a não distribuição dos sólidos, percebe-se alta concentração de sólidos no centro do reator e, conseqüentemente, a ausência de sólidos na parede. Esse perfil de distribuição de sólidos ocorre em virtude da condição de alimentação do reator, os efeitos de entrada são fundamentais para o perfil de distribuição de sólidos nos equipamentos, e tais

efeitos não são considerados nesse estudo de caso. As Figuras 6.1, 6.2 e 6.3 apresentam o perfil de distribuição de sólidos para as regiões de estudo do reator *downer*.

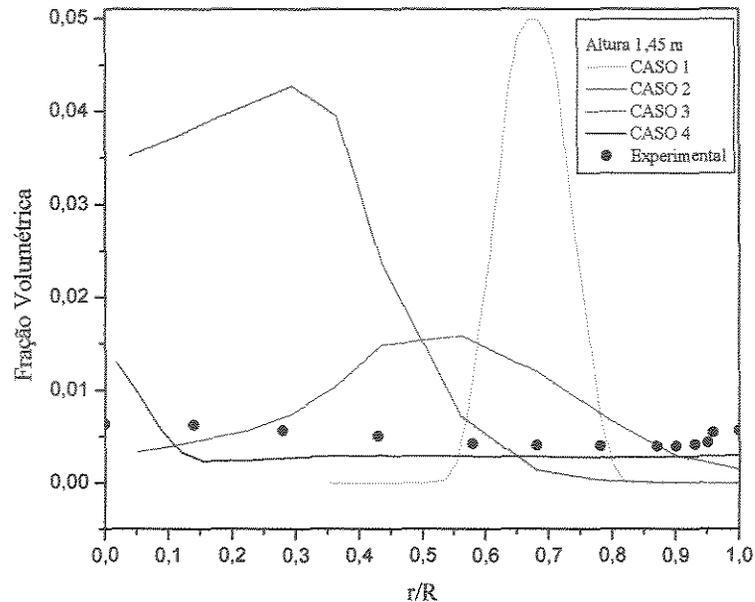


Figura 6.1: Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da distribuição da fração volumétrica de sólidos para uma altura de 1,45m.

Embora o CASO 2 apresente a concepção para a entrada do gás nas laterais, na tentativa de promover um escoamento mais distribuído para o gás, não é o suficiente para a obtenção de um perfil de distribuição de sólidos mais uniforme. Os efeitos da distribuição do gás influenciam diretamente o perfil de distribuição do sólidos, já que a força resistiva (F_{res}) está diretamente relacionada com a relação entre a velocidade do gás e do sólido, conforme apresentado no Capítulo 3 – Modelagem Matemática, Equação (3.31).

Uma melhor distribuição de sólidos pode ser observada no CASO 3, apesar de não ser ainda ideal, a entrada com características de um ciclone, favorece a distribuição dos sólidos no reator *downer*, as forças centrífugas atuam no sólido, fazendo com que a fase

sólida seja mais bem distribuída. Percebe-se para esse caso também, a forte dependência da distribuição de sólidos em relação a altura do reator, na seção de 2,90 metros o perfil de distribuição de sólidos mais uniforme quando comparado com as seções 2,21 e 2,90 metros.

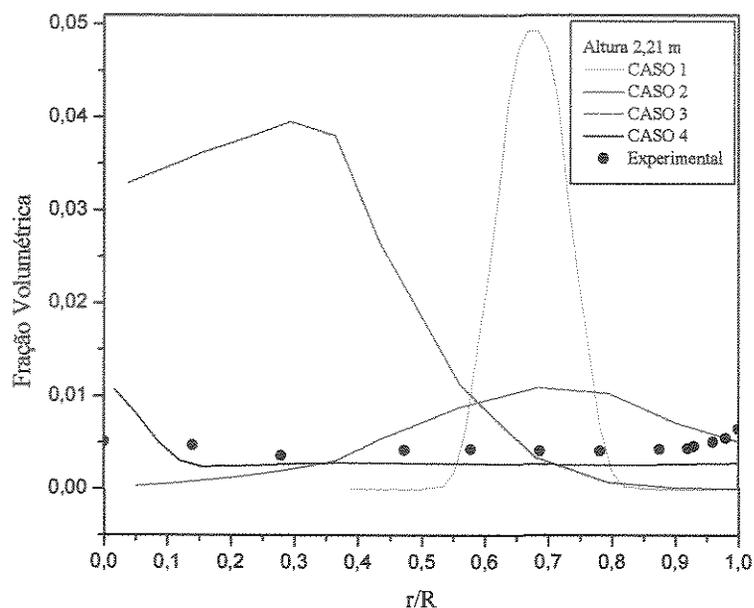


Figura 6.2: Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da distribuição da fração volumétrica de sólidos para uma altura de 2,21 m.

O CASO 4 demonstra boa concordância com os dados experimentais, reproduzindo tanto qualitativamente como quantitativamente, a região de concentração no centro do reator e na parede pode ser observada clara mente nas Figuras 6.12; 6.13 e 6.14, existe uma diferença um pouco maior observada na região central do reator.

Os resultados apresentados nas Figuras 6.1; 6.2 e 6.3 demonstram claramente os efeitos geométricos sobre o escoamento. Todos os resultados foram obtidos a partir de uma solução estacionária, com a observação do fechamento do balaço de massa, garantindo a conservação das espécies.

Embora o CASO 4 represente com sucesso a tendência de distribuição de sólidos, ainda existe uma variação ao comparar com os dados experimentais, principalmente na região central do reator. Tal fenômeno pode ser justificado a partir da condição de alimentação transversal do gás favorecer a formação de uma região de rotação do corpo rígido promovendo a concentração de sólidos no centro do reator, por ação de um campo centrífugo de alta intensidade.

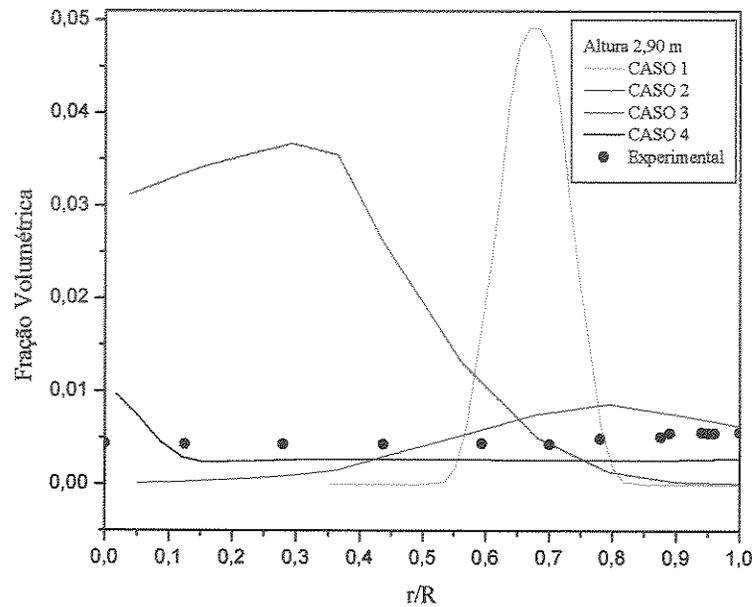


Figura 6.3: Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da distribuição da fração volumétrica de sólidos para altura de 2,90m.

6.2 Malha numérica

Para avaliação da influência da malha numérica sobre os resultados, testaram-se duas malhas diferentes, com 55.000 elementos e 95.000 elementos, todos para o CASO 4, em virtude de ser o caso que reproduz melhor o perfil de distribuição de sólidos ao comparar com os dados experimentais obtidos por CHENG, 2001.

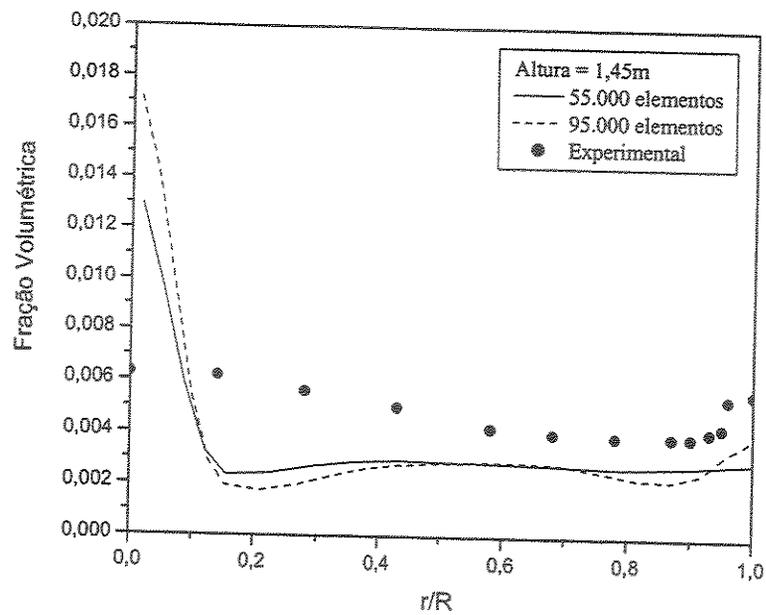


Figura 6.4: Avaliação da malha numérica para altura de 1,45m (CASO 4).

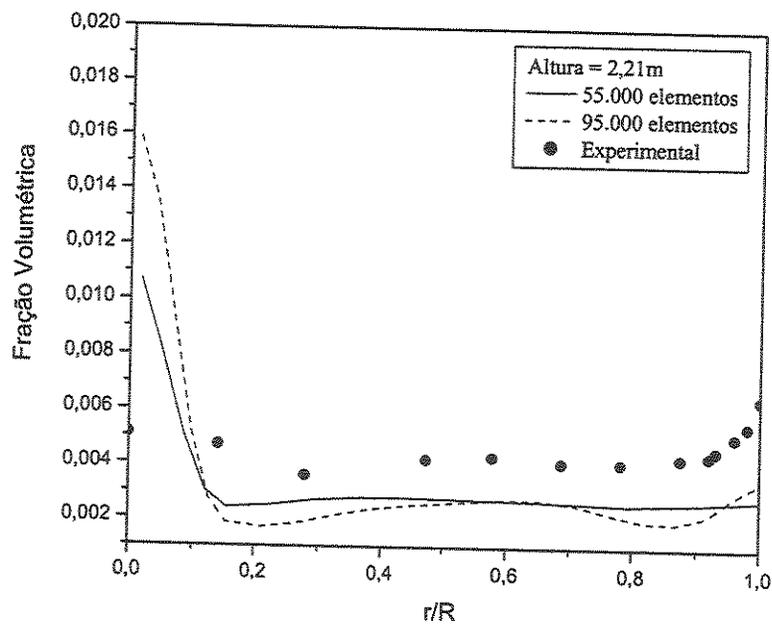


Figura 6.5: Avaliação da malha numérica para altura de 2,21m (CASO 4).

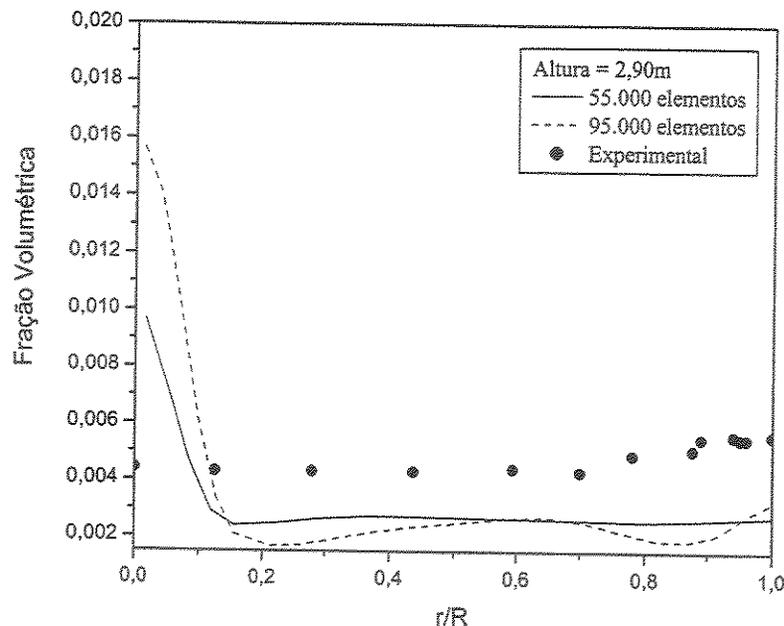


Figura 6.6: Avaliação da malha numérica para altura de 2,90m (CASO 4).

O número de elementos adequado pode ser fundamental para a determinação de determinados comportamentos, não visíveis em malhas grosseiras. Analisando a distribuição de sólidos para as seções de interesse (1,45 mm; 2,21m e 2,90m), Figuras 6.4, 6.5 e 6.6, observa-se a influência do refino da malha numérica sobre os resultados. A dependência com o refino é mais nítida para a região no centro do reator *downer*, apesar de ser uma influência sutil sem modificar os resultados qualitativamente mas influenciando na tendência da curva.

O refino da malha numérica promove a observação de fenômenos não perceptíveis anteriormente. Como foi apresentado e discutido anteriormente, as características de alimentação do reator são fundamentais na determinação do comportamento de distribuição de sólidos no reator. No CASO 4, em virtude do tipo de alimentação transversal do gás, ocorre a formação de um eixo de rotação do corpo rígido a exemplo do que acontece em ciclones onde o campo centrífugo de alta intensidade promove a formação de uma região com alta concentração de sólidos no centro, independentemente da altura do reator.

6.3 Esquema de interpolação

Foram testados esquemas de interpolação tanto de primeira ordem (*upwind*) como de segunda ordem (*higher upwind*) a descrição completa do método é feita no item 4.1.5. Tal estudo baseia-se na influência que o esquema de interpolação pode ter sobre os resultados.

Como os resultados de corroboração do modelo com dados experimentais apresentaram-se melhor para o CASO 4, estudou-se para esse caso a variação do esquema de interpolação.

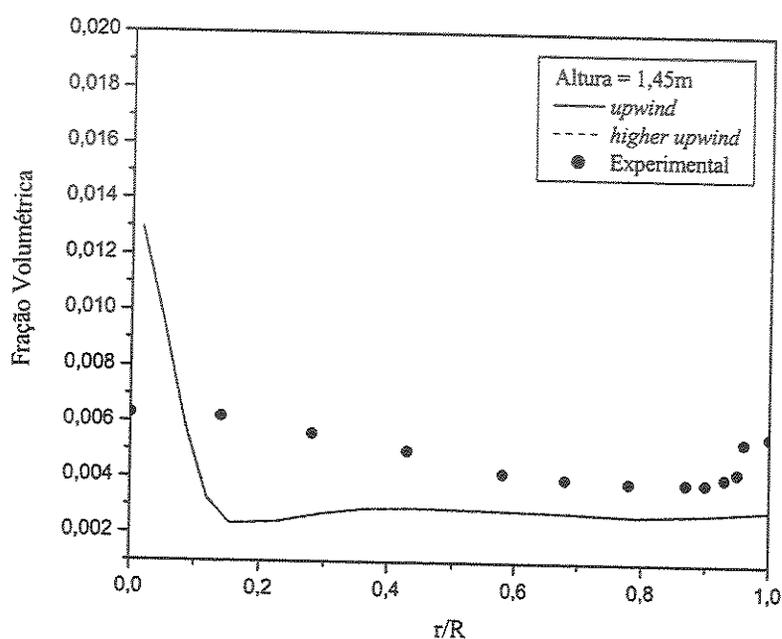


Figura 6.7: Comparação do esquema de interpolação *upwind* e *higher upwind* para altura de 1,45m (CASO 4).

As Figuras 6.7, 6.8 e 6.9 apresentam a distribuição da fração volumétrica para diferentes alturas do reator, sendo que a Figura 6.7, apresenta a distribuição de sólidos para uma altura de 1,45m do reator, enquanto que as Figuras 6.8 e 6.9 apresentam sequencialmente para as seções de 2,21m e 2,90m de altura do reator observa-se que para as três seções não existe a influência da variação do esquema de interpolação, chegando a ser na ordem de 1.10^{-4} .

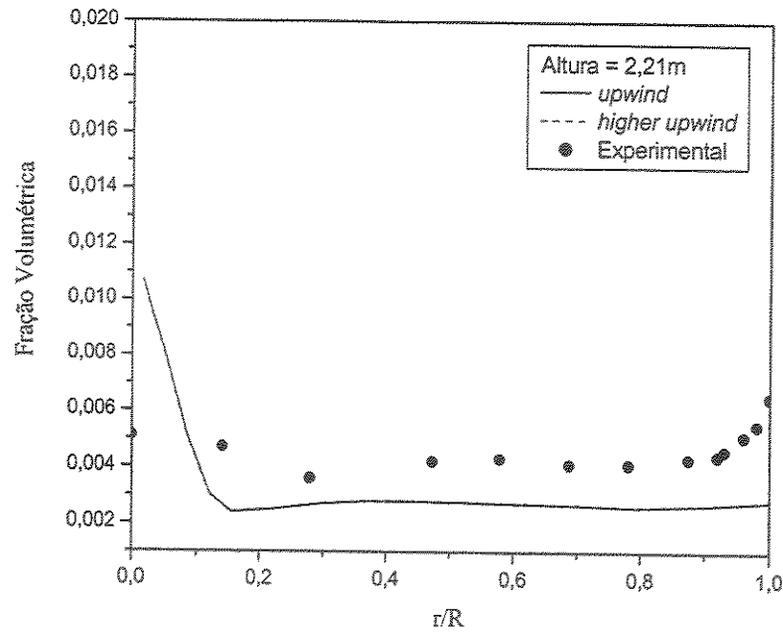


Figura 6.8: Comparação do esquema de interpolação *upwind* e *higher upwind* para altura de 2,21m (CASO 4).

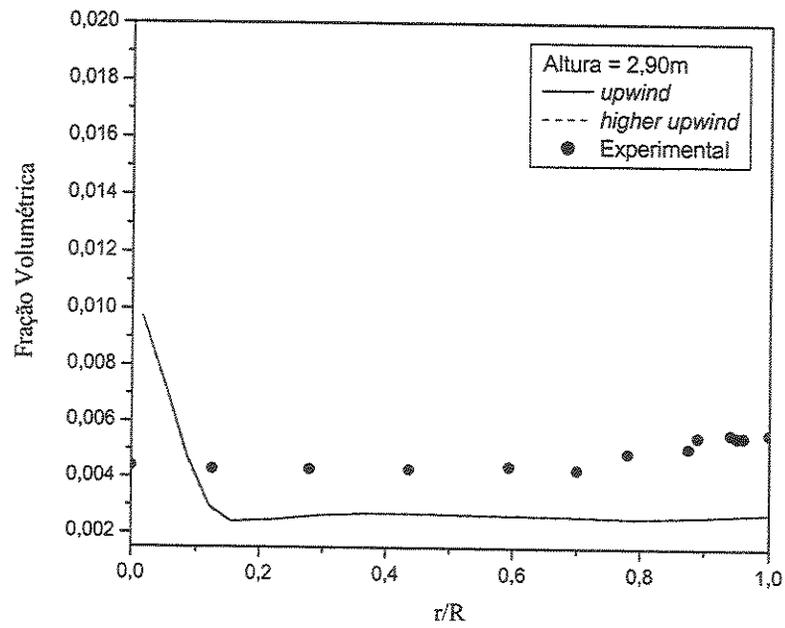


Figura 6.9: Comparação do esquema de interpolação *upwind* e *higher upwind* para altura de 2,90m (CASO 4).

6.4 Corroboração do modelo

Para todas as simulações do reator *downer* os resultados foram obtidos com a solução estacionária de escoamento monofásico seguido de um tempo de aproximadamente 2,5 min de escoamento bifásico para garantir um novo regime estacionário, garantindo-se, dessa forma, o fechamento dos balanços de massa para todos os casos.

As Figuras 6.10, 6.11 e 6.12 apresentam a comparação entre o perfil radial do fluxo devido à contribuição convectiva de massa da fase sólida obtido numericamente com os valores experimentais de CHENG (2001), para 3 posições axiais distintas do reator, especificamente para o CASO 4, entrada transversal, que apresentou a melhor concordância entre todos os demais casos analisados, conforme apresentado no item 6.1 Tipo de entrada do reator.

Para validação do modelo proposto, adotou-se uma estratégia de comparação dos resultados experimentais com os numéricos, fazendo a composição de propriedades físicas com as características operacionais adotadas, sendo que a Tabela 5.2 apresenta o fluxo de catalisador utilizada no experimento ($20 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$). A Equação (6.1) apresenta a representação dos parâmetros envolvidos para a validação do modelo proposto.

$$|\rho_s \cdot \xi_s \cdot v_s|_{\text{Experimental}} = |\rho_s \cdot \xi_s \cdot v_s|_{\text{Numérico}} \quad (6.1)$$

A composição dos parâmetros pode ser observada nas Figuras 6.10; 6.11 e 6.12, nota-se uma boa concordância em todas as posições axiais com exceção para aqueles pontos próximos ao centro do reator, o que permite validar o modelo proposto. A média dos resultados apresentados nas Figuras 6.10; 6.11 e 6.12, permite comparar os resultados numéricos com os experimentais, ao fazer a integração dos resultados em função da área, observa-se uma diferença em torno de 6% entre os experimentos e os valores numéricos. A estratégia adotada serve de ferramenta para validação do modelo proposto, sendo que a afirmação da Equação (6.1) tem que ser mantida para o sistema em análise, servindo como justificativa para o fato de que a decomposição dos parâmetros não representa tão bem o fenômeno como a composição dos mesmos.

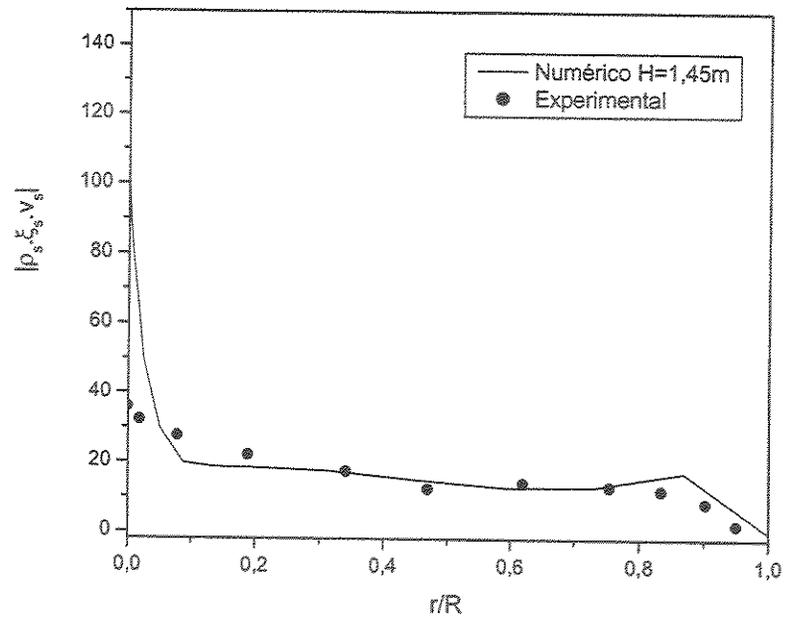


Figura 6.10: Visualização da validação do modelo para a seção de 1,45m de altura.

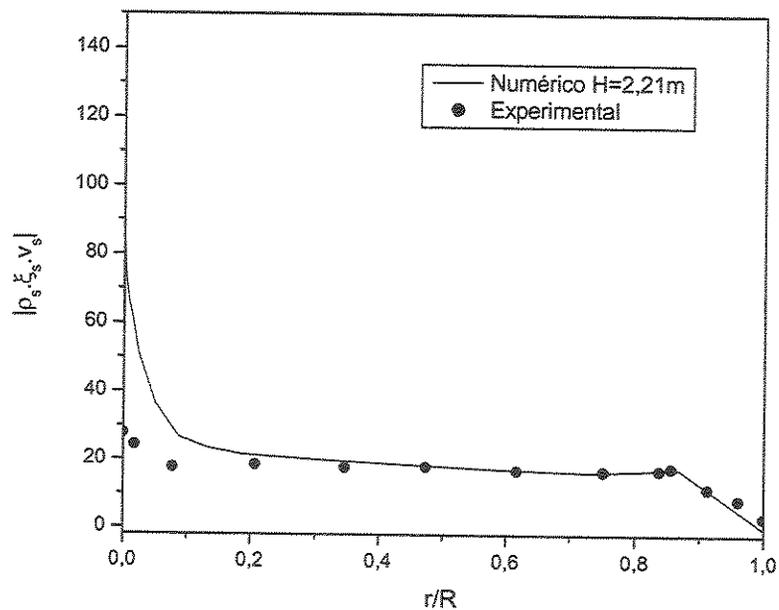


Figura 6.11: Visualização da validação do modelo para a seção de 2,21m de altura.

Existem erros associados aos resultados numéricos bem como aos resultados experimentais, que devem ser considerados na comparação dos resultados. O fato de não ser conhecida a região onde foram realizadas as medidas experimentais dificulta a comparação dos resultados.

As Figuras 6.13 a 6.18 apresentam a decomposição dos resultados. São apresentadas nas Figura 6.13; 6.14 e 6.15 a representação dos resultados para a distribuição da fração volumétrica para as respectivas seções de estudo (1,45m; 2,21m e 2,90m), o comportamento apresentado para essas regiões já foi discutido anteriormente no item 6.1 – Tipo de entrada do reator, permitindo agora visualizar melhor as discrepâncias entre os resultados experimentais e o modelo proposto.

A visualização da decomposição dos parâmetros para a velocidade pode ser observada nas Figuras 6.16; 6.17 e 6.18, percebe-se a diferença qualitativa na representação dos resultados, mas qualitativamente os resultados para as seções de estudo, apresentam satisfatória concordância com os resultados experimentais obtidos por CHENG (2001).

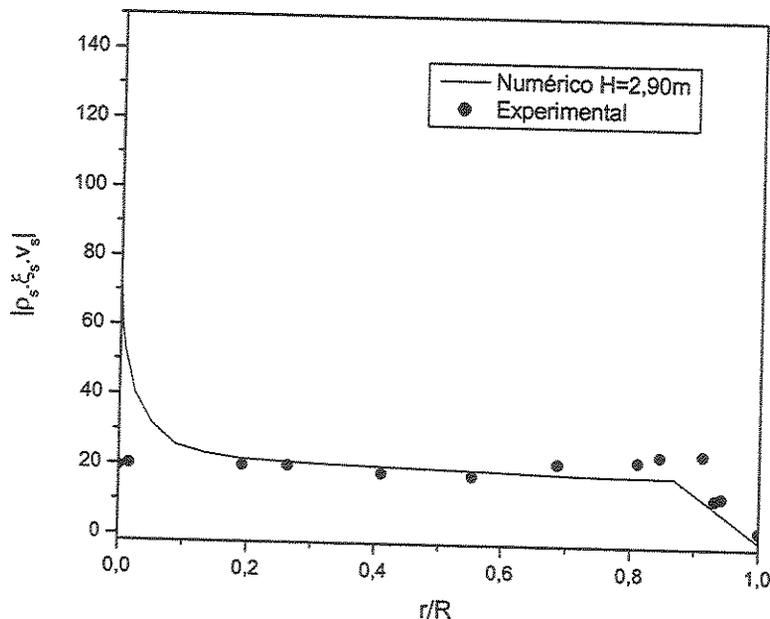


Figura 6.12: Visualização da validação do modelo para a seção de 2,90m de altura.

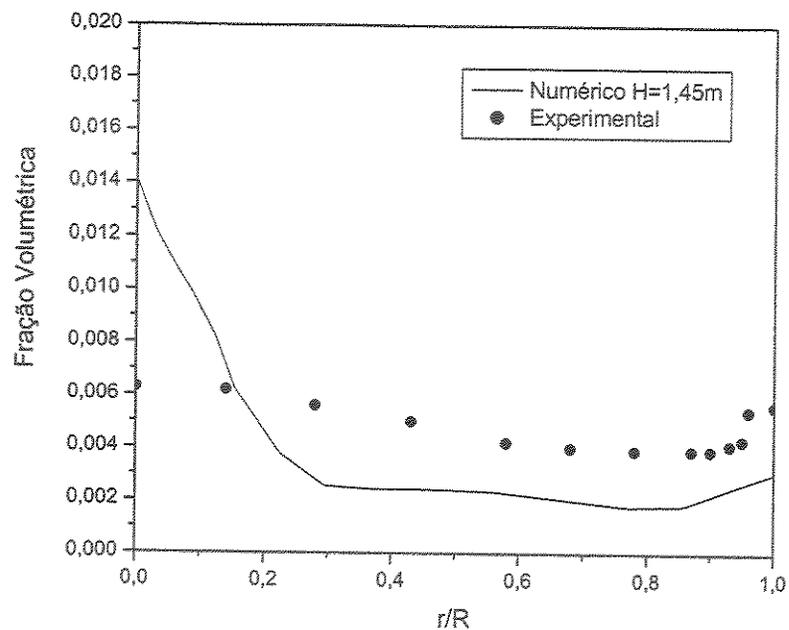


Figura 6.13: Distribuição da fração volumétrica de sólidos no reator para a seção de 1,45m de altura.

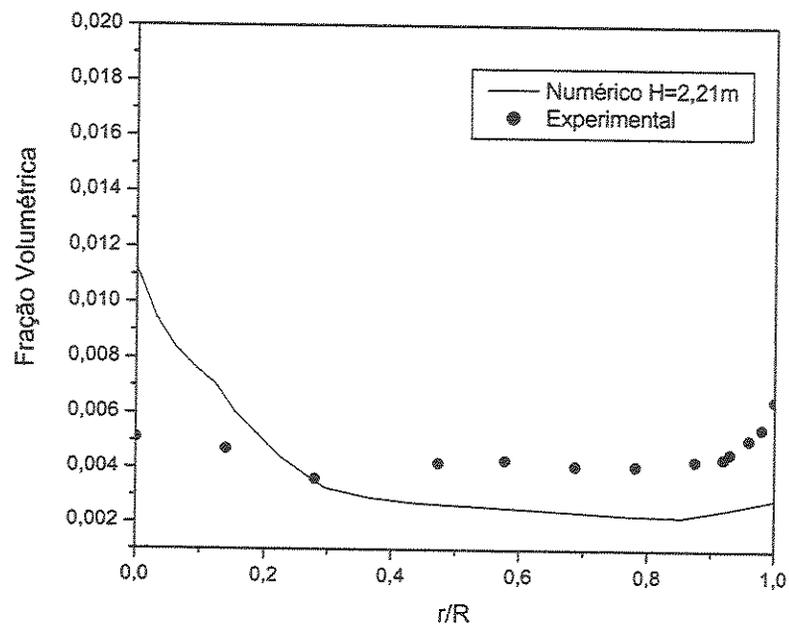


Figura 6.14: Distribuição da fração volumétrica de sólidos no reator para a seção de 2,21m de altura.

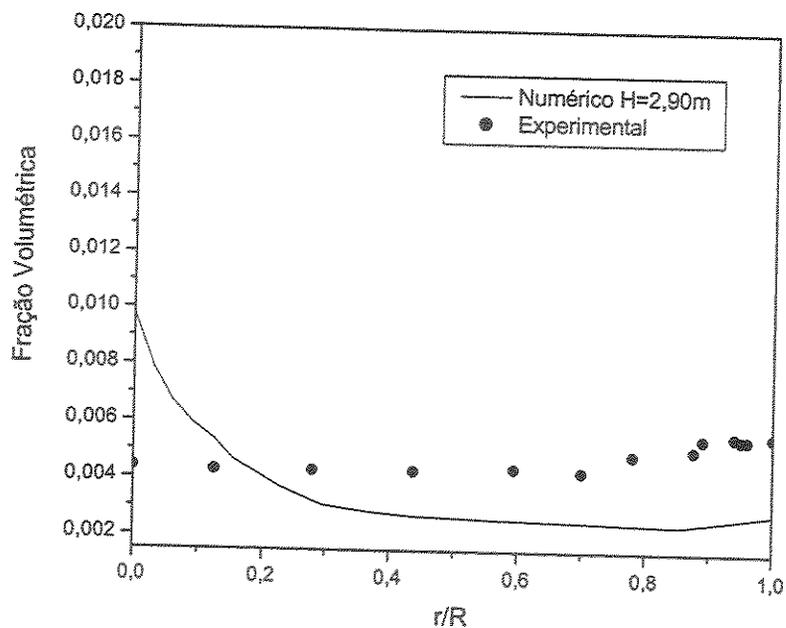


Figura 6.15: Distribuição da fração volumétrica de sólidos no reator para a seção de 2,90m de altura.

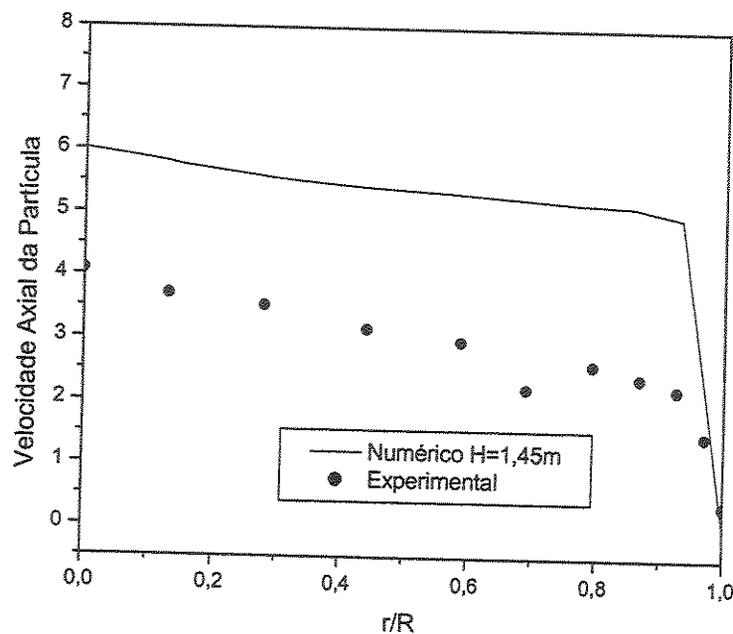


Figura 6.16: Distribuição radial da componente axial da velocidade axial dos sólidos para a seção de 1,45m de altura.

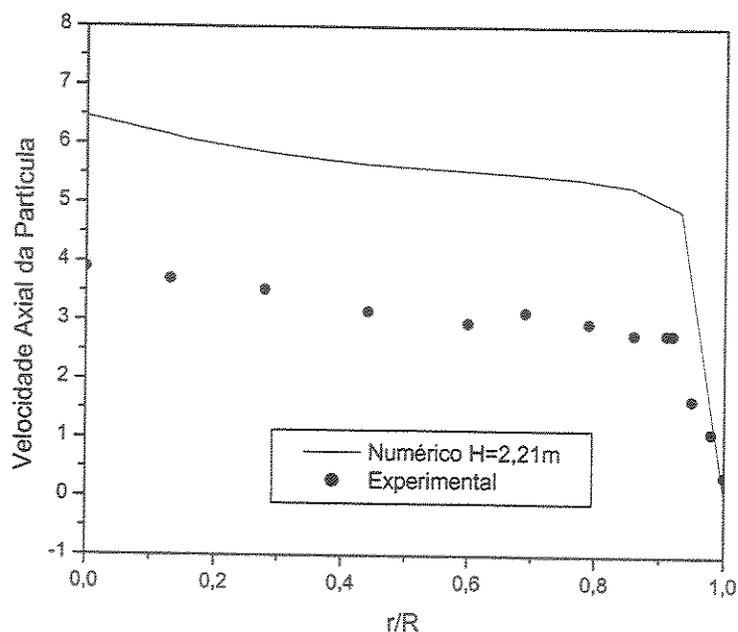


Figura 6.17: Distribuição radial da componente axial da velocidade axial dos sólidos para a seção de 2,21m de altura.

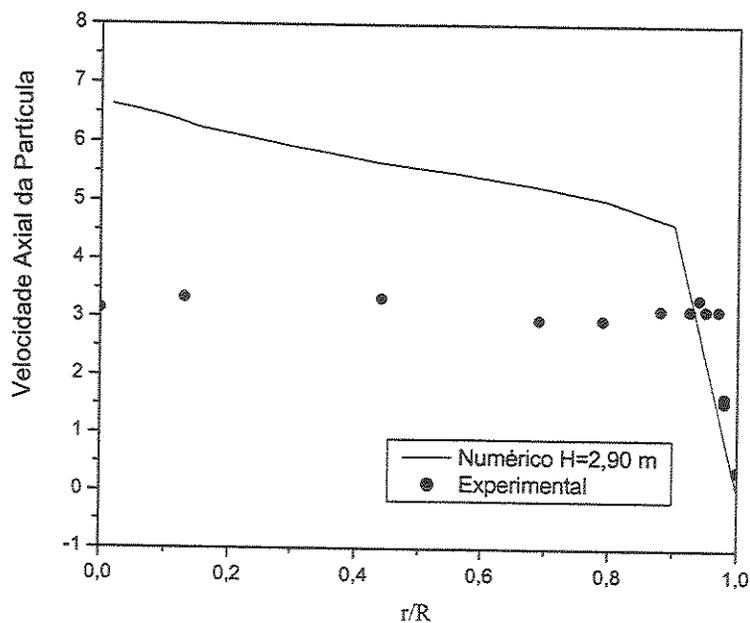


Figura 6.18: Distribuição radial da componente axial da velocidade axial dos sólidos para a seção de 2,90m de altura.

Nota-se claramente que a decomposição do fluxo mássico de sólidos nos seus componentes, fração volumétrica e velocidade da fase sólida, não apresenta o mesmo grau de concordância qualitativa e quantitativa observado com o fluxo. Uma possível explicação para o fenômeno esta relacionada com a alta concentração de sólidos próximo ao eixo de rotação do corpo rígido que perturba os valores de fração volumétrica, estes da ordem de grandeza de 10^{-3} , levando, conseqüentemente às variações significativas na velocidade para garantir a conservação da massa da fase sólida.

6.5 Visualização dos resultados

A visualização dos resultados na forma de mapas facilita a compreensão dos fenômenos que ocorrem para os casos estudados, além da compreensão dos fenômenos envolvidos. A Figura 6.19 apresenta as características de entrada do reator seqüencialmente para as seções de 0,44m, 1,45m e 2,90m permitindo a visualização da distribuição da fração volumétrica para o CASO 1.

Analisando a geometria idealizada por CHENG (2001), em virtude da alimentação da fase gás ser na região anular, percebe-se o escoamento concentrado de sólidos na região central do reator, mesmo com o desenvolvimento dos escoamento em relação à altura do reator, esse comportamento não é alterado. Tal comportamento não é adequado quando se procura uma distribuição mais uniforme, favorecendo a reação no *downer*. Percebe-se uma simetria no escoamento gás-sólido para o CASO 1.

O CASO 2 apresentado na Figura 6.20, demonstra melhoras na distribuição de sólidos quando comparado com o CASO 1, apesar disso, o comportamento não chega a ser o desejável, já que a fração sólida do escoamento permanece concentrado no centro do reator., apresentando um comportamento simétrico.

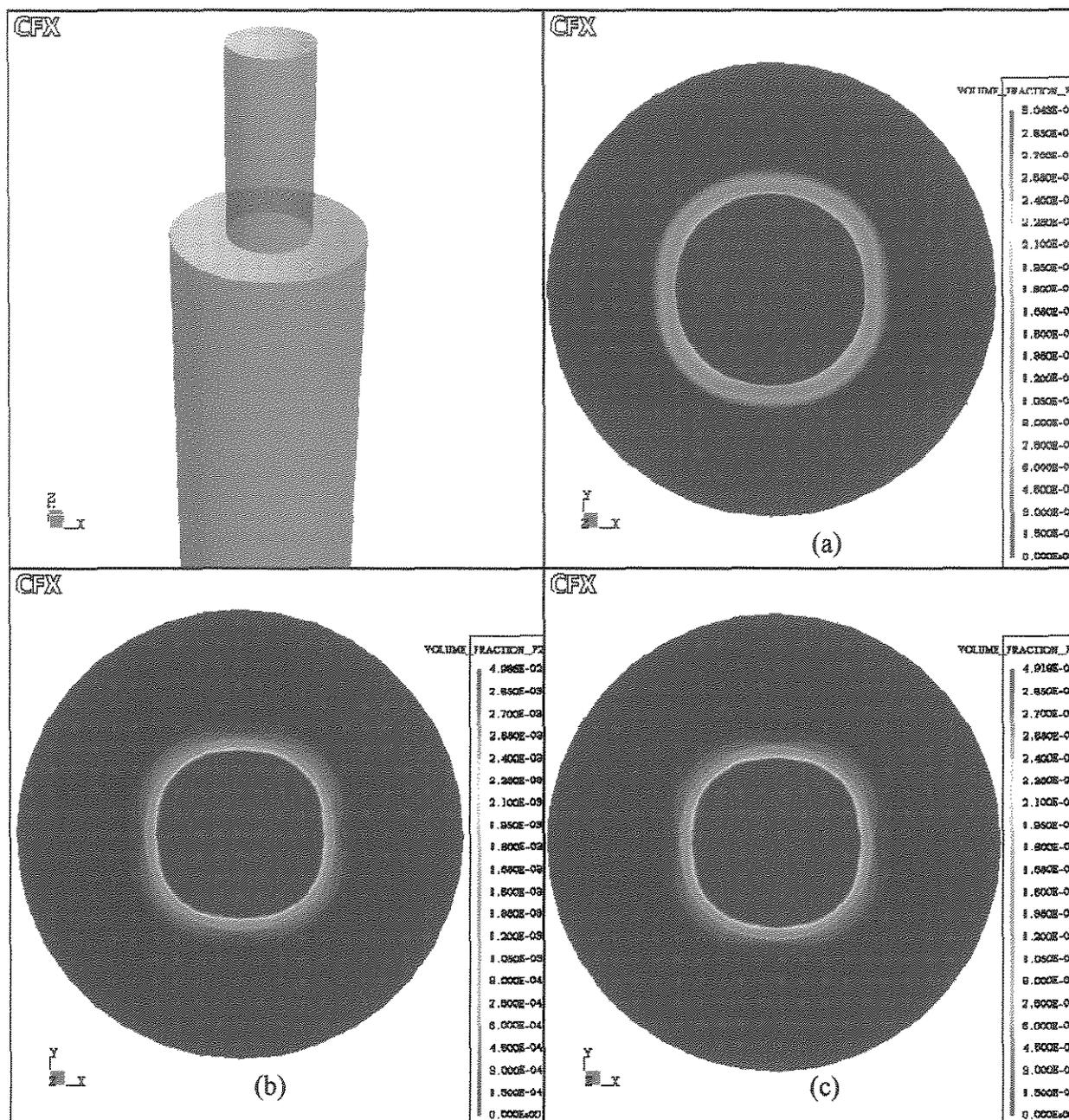


Figura 6.19: Mapa da distribuição da fração volumétrica de sólidos para o CASO 1.

(a) $H= 0,44$ m; (b) $H=1,45$ m e (c) $H=2,90$ m.

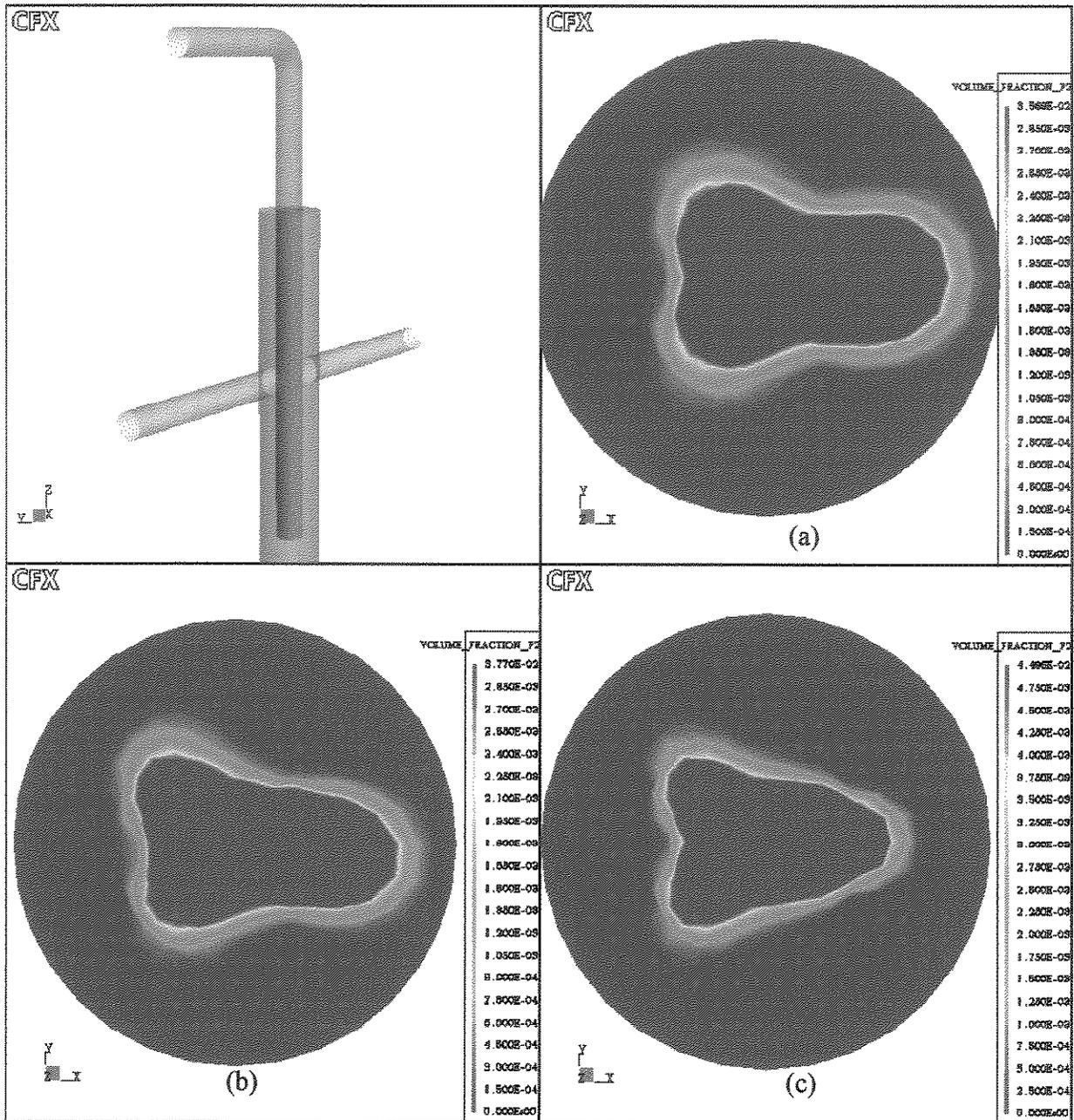


Figura 6.20: Mapa da distribuição da fração volumétrica de sólidos para o CASO 2.

(a) $H= 0,44$ m; (b) $H=1,45$ m e (c) $H=2,90$ m.

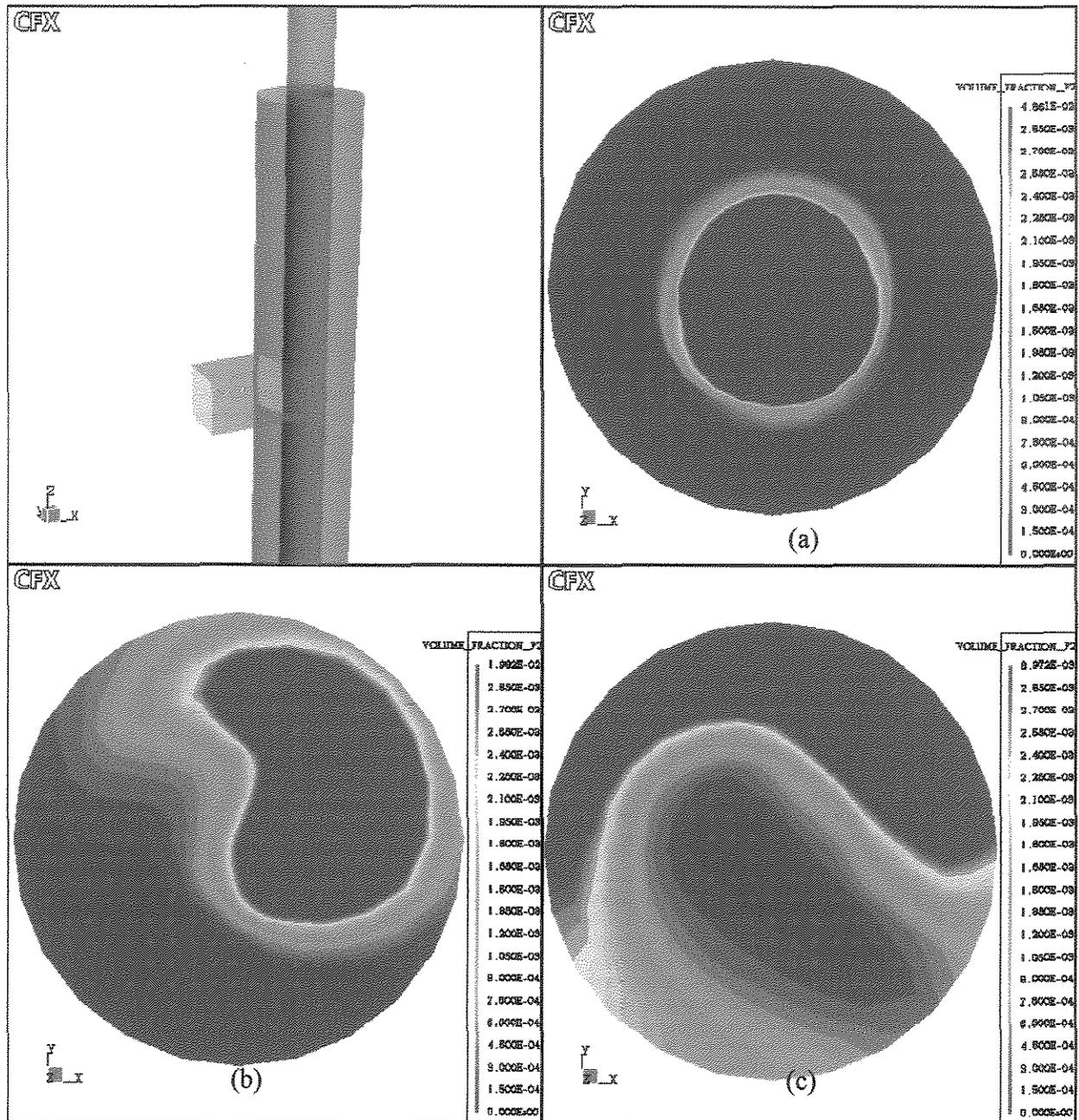


Figura 6.21: Mapa da distribuição da fração volumétrica de sólidos para o CASO 3.

(a) $H=0,44$ m; (b) $H=1,45$ m e (c) $H=2,90$ m.

Para a visualização dos resultados para o CASO 3 a Figura 6.21 apresenta a distribuição do catalisador para as mesmas seções apresentadas na Figura 6.21 correspondente ao CASO 2, verifica-se um comportamento completamente diferente aos casos anteriores, para a seção (a), observa-se um comportamento simétrico enquanto as seções seguintes o perfil é completamente distinto se apresentar axissimetria. Para este caso observa-se a reversão do fluxo na seção (c) em virtude da configuração geométrica para entrada de gás, inspirada na geometria de um ciclone, favorecendo a formação de giros. A região (c) da Figura 6.21 demonstra a reversão do fluxo para o CASO 3.

A Figura 6.22 correspondente ao CASO 4 apresenta o mapa de distribuição de catalisador, percebe-se a variação ao comparar as seções do reator, além de uma distribuição bem mais homogênea do catalisador no reator, definindo a geometria adotada para o CASO 4 como a mais adequada. As características empregadas para esse caso demonstram caráter de inovação tecnológica. A Figura 6.23 representa a composição da fração volumétrica, massa específica e da velocidade para a fase sólida.

A Figura 6.24 representa a dinâmica do escoamento na entrada do reator para a fração volumétrica no CASO 4 estudado para o tempo de 20,2 segundos, percebe-se a influência dos efeitos da curva, na distribuição de sólidos, em $t=20,4s$ é possível de identificar uma região de recirculação como consequência das características do distribuidor de sólidos, em $t=20,7 s$ o catalisador já esta na região do *downer*, e a região de recirculação é amortecida pela influência do catalisador

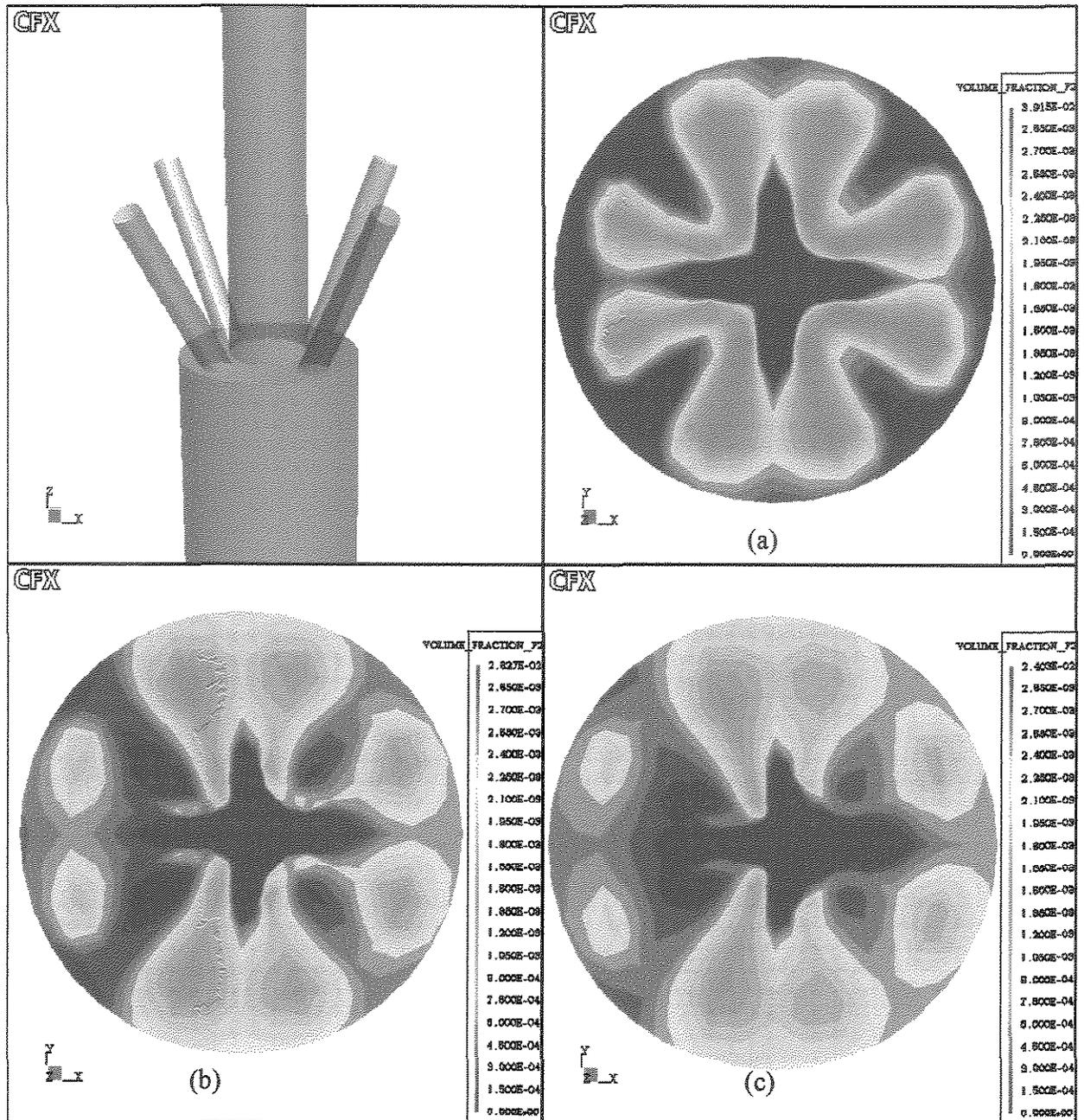


Figura 6.22: Mapa de fração volumétrica para o CASO 4.

(a) H= 0,44 m; (b) H=1,45 m e (c) H=2,90 m.

influenciada por três fatores: a geometria do reator; o escoamento da fase gás e os efeitos do escoamento da fase sólida. Os efeitos da alimentação para a fase gás é representado na Figura 6.25 por setas contínuas enquanto que o comportamento da fase sólida é representado por setas pontilhadas. O sólido nos tempos iniciais apresenta-se concentrado do centro do reator, com o passar do tempo os efeitos da características de alimentação percebe-se a distribuição dos sólidos na seção de 1,45 m estudada.

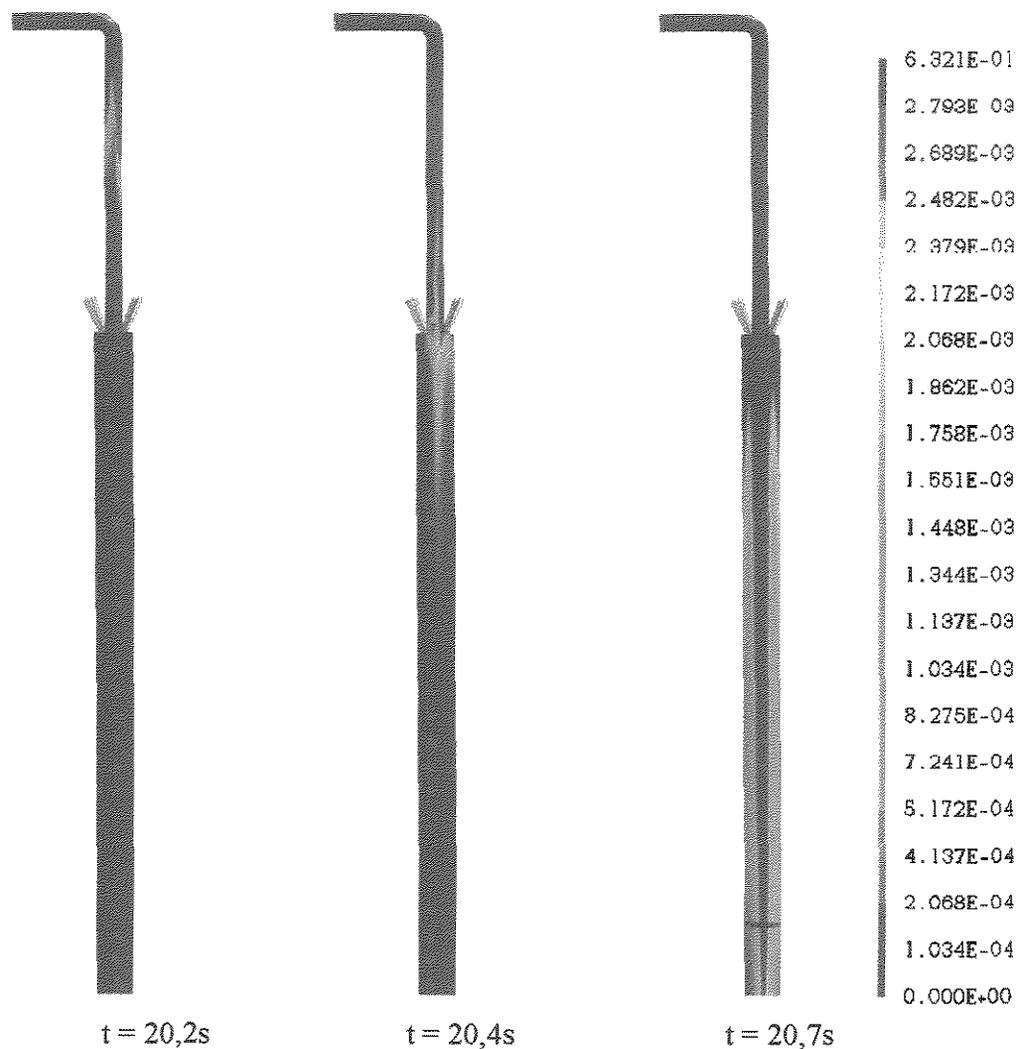


Figura 6.24: Representação da dinâmica para fração volumétrica na alimentação para o CASO4.

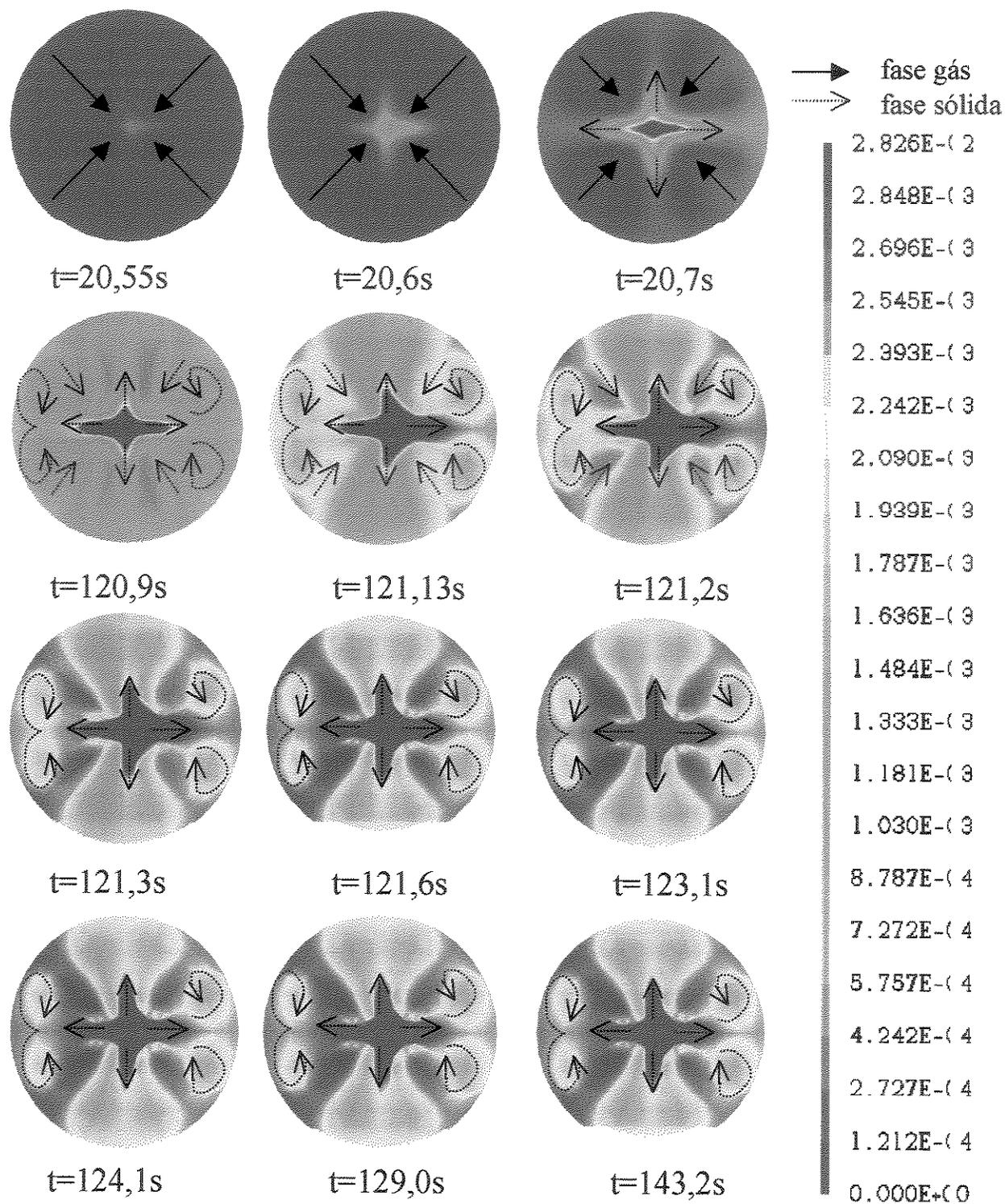


Figura 6.25: Representação da dinâmica para fração volumétrica na altura de 1,45 do reator para o CASO4.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Esse trabalho apresentou uma nova metodologia experimental numérica para o estudo da fluidodinâmica de um reator *downer* de FCC, através da utilização de um modelo matemático multifásico (gás-sólido), 3-D, transiente e turbulento, com estudos detalhados de verificação e validação em fluidodinâmica computacional (V & V in CFD). A dissertação apresenta uma visão paradigmática na abordagem multifásica, onde o escoamento gás-sólido é analisado como um escoamento heterogêneo onde um fluido real (gás) promove o comportamento de fluido hipotético para a fase sólida, com a existência de um termo de arraste de forma e fricção num referencial euleriano-euleriano, que promove a existência de uma turbulência induzida pelo fluido real sobre o fluido hipotético.

O modelo matemático foi implementado numericamente num código comercial de CFD e diversos estudos numéricos foram conduzidos visando-se a verificação do código e a validação do modelo matemático.

Os resultados dos principais estudos de validação do modelo matemático conduzem as seguintes conclusões:

- As condições geométricas adotadas para a entrada do reator são fundamentais na determinação da distribuição radial de sólidos, na seção transversal do reator *downer*;
- A condição de entrada transversal para o reator *downer* é a que melhor valida os resultados experimentais obtidos por CHENG (2001);

- A predição pelo modelo do perfil radial da taxa de sólidos ($\rho_s \xi_s V_s$) é muito mais próxima dos resultados experimentais do que a decomposição do perfil em frações volumétrica (ξ_s) e velocidade axial, sendo que a diferença entre os dados experimentais e os obtidos numericamente apresentam uma diferença de 6% na taxa de catalisador;
- É provável que este fato esteja relacionado com a técnica experimental de decomposição das medidas, que não é discutida no trabalho de CHENG (2001)
- O modelo prediz com realismo a dinâmica da formação da distribuição de fração volumétrica no interior do reator *downer* ainda não discutidos e apresentados na literatura.

Quanto aos estudos de verificação, os resultados obtidos neste trabalho possibilitam concluir que:

1 - Quanto ao método dos volumes finitos foram realizados estudos de verificação que possibilitam as seguintes conclusões:

- A utilização de vários esquemas de interpolação demonstra que no problema não há influência da solução com a variação dos esquemas de primeira e segunda ordem;
- Não foi usada nenhuma relaxação para evitar instabilidade numérica que pode levar a um retardo da dinâmica do escoamento.

2 - Quanto ao código comercial de CFD o CFX 4.4:

- O código de CFD empregado é uma ferramenta versátil, trabalhando com diversas condições operacionais, com grande variedade de condições de contorno para diversas situações operacionais, além de mostrar-se como uma ferramenta eficiente para predizer o comportamento fluidodinâmico em reatores *downer*;
- Apesar de inúmeras aplicações o estudo e uso contínuo do software revela a forte dependência da construção da geometria e condições de contorno sobre os resultados, exigindo um tempo significativo para a utilização correta dessa

ferramenta poderosa nos estudos de verificação e validação em fluidodinâmica computacional (V & V in CFD).

Finalmente, para a seqüência deste trabalho exploratório sugere-se os seguintes estudos como trabalhos futuros:

- Desenvolvimento experimental para incrementar a validação do modelo, com maior conjunto de dados experimentais e com aprofundamento dos aspectos teórico-experimentais da técnica de medida contemplando informações sobre erros e propriedades estatísticas do trabalho, entre outras;
- Incrementar o modelo com a conservação da energia térmica, e na seqüência com a conservação das espécies químicas tornando o modelo matemático mais realista na predição do craqueamento catalítico com reator do tipo *downer*.
- Avaliar a influência da condição de contorno na parede, SLIP, para a fase sólida

Diante dos resultados apresentados neste trabalho acredita-se na sua contribuição no estado da arte em modelagem 3D e simulação dinâmica do escoamento gás-sólido em reator *downer*, e a importância para trabalhos futuros de outros autores.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABADIE, E. Relatório da Petrobrás sobre: *Craqueamento Catalítico*, 1997.
- AEA Technology PLC. *CFX 4.2*. Oxfordshire: United Kingdom. 2 CD ROM. Ambiente Windows NT, 1997.
- AEA Technology PLC. *CFX 4.2*. Oxfordshire: United Kingdom. Solver Manual, 1997.
- AKILLI, H., LEVY, E. K., SAHIN, B., *Gas-solid behavior in a horizontal pipe after a 90° vertical-to-horizontal elbow*. Powder Technology, v. 116, p. 43-52, 2001.
- BAI, D.-R., JIN, Y., YU Z.-Q., GAN, N.-J. *Radial Profiles of Local Solid Concentration and Velocity in a Concurrent Downflow Fast Fluidized Bed*. In Circulating Fluidized Bed Technology III, eds. P. Basu, M. Horio and M. Hasatani, Pergamon Press, Toronto, p. 157 – 162, 1991.
- BOLKAN – KENNY, J. G., PUGSLEY, T. S., BERRUTI, F. *Computer Simulation of the Performance of Fluid Catalytic Cracking Risers and Downers*. Ind. Eng. Chem. Res., 33, pp. 3043 – 3052, 1991.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. *Transport Phenomena*. 2 ed. John Wiley & Sons, 2002.

CHENG, Y., WEI, F., YANG, G., JIN, Y. *Inlet and outlet effects on flow patterns in gas-solid risers*. Powder Technology, v. 98, p.151-156, 1998.

CHENG, Y., GUO, Y., WEI, F., JIN, Y., LIN, W. *Modeling the hydrodynamics of downer reactors based on kinetic theory*. Chem. Engineering Science, v. 54, p. 2019-2027, 1999.

CHENG, Y., WEI, F., GUO, Y., JIN, Y. *CFD simulation of hydrodynamics in the entrance region of a downer*. Chem. Engineering Science, v. 56, p. 1687-1696, 2001.

CREMASCO, M. A. *Estudo de reator de fluxo descendente para reações de craqueamento catalítico*. Relatório parcial de Pesquisa. Petrobrás/Finep, Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 2002.

DECKER, R.K. *Modelagem e simulação tridimensional transiente do escoamento gás-sólido*. Dissertação de Mestrado apresentada à faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química, 2003.

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

GUNZBURGER, M. D., NICOLAIDES, R. A. *Incompressible computational fluid dynamics: trends and advances*. New York: Cambridge University, 1993.

HERBERT, P. M., GAUTHIER, T. A., BRIENS, C. L., BERGOUGNOU, M. A. *Application of fiber optic reflection probes to the measurement of local particle velocity and concentration in gas - solid flow*. Powder Technology, v. 80, p. 243 – 252, 1994.

HERBERT, P. M. *Hydrodynamic study of a downflow circulating fluidized bed*. Ph. D. Dissertation, The University of Western Ontario, London, Canada, 1997.

JOHNSTON, P. M., de LASA, H. I., ZHU, J. *Axial flow structure in the entrance region of downer fluidized bed: effects of the distribution design*. Chem. Engineering Science, v. 54, p. 2161 – 2173, 1999.

KNOWLTON, T., GELDART, D., MATSEN, J., KING, D. *Comparison of CFB Hydrodynamic Model*. PSRI Challenge Problem Presented at the Eight International Fluidization Conference, 1995.

MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. LTC. Rio de Janeiro, 1995.

MASON, D.J., LEVY, A., *A comparison of one-dimensional and three-dimensional models for the simulation of gas-solids transport systems*. Applied Mathematical Modelling, v. 22, p. 517-532.

MEIER, H. F., *Modelagem fenomenológica e simulação bidimensional de ciclones por técnicas da fluidodinâmica computacional*. Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 1998. Tese (Doutorado)

MEIER, H. F., ALVES, J. J. N., MORI, M. *Comparison between staggered and collocated grids in finite – volume method performance for single and multi – phase flows*. Computer and Chemical Engineering, v. 23, p 247 – 262, 1999.

MIRGAIN, C., BRIENS, C. L., del POZO, M., LOUTATY, R., BERGOUGNOU, M. A. *Experimental evaluation of gas – solids mixing chambers for short contact times fluidized bed reactors*. In L. – S. fan, e T. M. Knowlton, Fluidization IX, p. 357 – 364. New York: Eng. Foundation, 1998.

MORI, M., MEIER, H. F., Relatório: *Projeto CFD/FCC – Aperfeiçoamento de Tecnologia de Craqueamento Catalítico de Petróleo em Leito Fluidizado (FCC), por Experimentação e Técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD)*, 1999.

MUDDE, R. F., SIMONIN, O. *Two-and three-dimensional simulations of a bubble plume using a two-fluid model*. Chem. Engineering Science, v. 54, p. 5061 – 5069, 1999.

MUDDE, R. F., VAN DEN AKKER, H. E. A. *2D and 3D simulations of a internal airlift loop reactor on the basis of two-fluid model*. Chem. Engineering Science, v. 56, p. 6351 – 6358, 2001.

NORILER, D. *Modelagem Matemática e Simulação Numérica do Escoamento Gás-Sólido num Prato de Destilação*. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas. São Paulo, 2003.

PATANKAR, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing Corporation. New York, 1980.

PATANKAR, S. V., SPALDING, D. B. *A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three – dimensional parabolic flows*. Int. Journal Heat Mass Transfer. V. 15, p. 1787 – 1806. 1971.

- PIERITZ, R.A.; CZESNAT, A. *Linguagem de programação fortran 77 aplicada à programação científica em CFD*. ESSS. 1 CD ROM, 2001.
- PINHO, A. R., RAMOS, J. G. F., SILVA, M., HUZIWARA, W. K. *Downflow – O FCC do futuro*. Bol. Téc. PETROBRAS, Rio de Janeiro, v. 45 (1): p. 16-20, jan/mar 2002.
- PINTO, J.C., LAGE, P.L.C. *Métodos numéricos em problemas de engenharia química*. Rio de Janeiro: E-Papers, 2001.
- POINCARÉ, J. H. *A ciência e a hipótese*. Trad. Maria Auxiliadora Kneipp. Brasília, Universidade de Brasília, 1985.
- ROSA, L., RIBEIRO, D. C. MORI, M., MARTIGNONI, W. P. *Sobre a Modelagem e Efeitos de Geometria na Simulação Bifásica de um Riser*, COBEQ 2002.
- ROSA, L. *Simulação de Reatores Químicos e Consumo de Calor em Risers*. Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 2002. Dissertação (Mestrado)
- SOBOCINSKI, D. A ., YOUNG, B.J.; LASA, H. I. *New fiber-optic method for measuring velocities of strands and solid hold-up in gas-solids downflow reactors*. Powder Technology, v. 83, p. 1-11, 1995.
- VAN DOORMAAL, L. P., RAITBY, G. D. *Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows*. Numerical Heat Transfer. V. 7, p. 147 – 163. (1984)

VERSTEEG, H. K. e MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method*. Longman Group Ltda. Longman, England. 1995.

WANG, Z., BAI D. e JIN Y. *Hydrodynamics of Cocurrent Downflow Circulating Fluidized Bed (CDCFB)*. Powder Technology, v. 70, p. 271 – 275, 1992.

WANG, Y.; WEI, F., WANG, Z.; JIN, Y.; ZHIQING, Y. *Radial profiles of solids concentration and velocity in a very fine particle (36 μ m) riser*. Powder Technology, v. 96, p. 262-266, 1998.

WANG, S.J., GELDART, D., BECK, M.S., DYAKOXSKI, T. *A Behaviour of a Catalyst Powder Flowing Down in Dipleg*. Proceedings of 1st World Congress on Industrial Process Tomography, p. 147-152, Buxton, England, April 14-17, 1999.

WEI, F., JIN, Y., YU, Z., CHEIN, W. *Lateral and axial mixing of the disperse particle in CFB*, J. Chem. Engineering of Japan, v. 28, n.5, p. 506-510, 1995.

WEI, F., ZHU, J-X. *Effect of flow direction on axial solid dispersion in gas-solids cocurrent upflow and downflow systems*. Chem. Engineering J., v. 64, p. .345-352, 1996.

WEI, F., FANGBIN, L., YOUNG, J., ZHIQING, Y. *Mass flux profiles in a high density circulating fluidized bed*. Powder Technology, v. 91, p. 189-195, 1997.

WEI, F., LIU, J., JIN, Y., e YU, Z. *Hydrodynamics and mixing behavior in the entrance region of a downer*. In M. Kwauk, e J. Li, Circulating fluidized bed V, Beijing: Science Press, p. 122 – 127, 1997.

WEI, F., XING, R., RUJIN, Z.; GUOHUA, L., YOUNG, J. *A dispersion model for fluid catalytic cracking risers and downers reactors*. Ind. Engineering, Chem. Res., v. 36, n.12, p. 5049-5053, 1997.

WEI, F., LIN, H., CHENG, Y., WANG, Z.; JIN, Y. *Profiles of particle velocity and solids fraction in a high-density riser*. Powder Technology, v. 100, p. 183-189, 1998

WILSON, J. W. *Fluid Catalytic cracking technology and operations*. Oklahoma: Pennwell Books, 1997, 322 p

WIRTH, K. -E., e SCHIEWE, T. *Flow structures in a downer reactor*. In L. - S. Fan, e T. M. Knowlton, Fluidization IX, New York: Eng. Foundation. p. 253 - 260, 1998..

YANG, Y-L., JIN, Y., YU, Z-Q e WANG, Z-W. *Particle Flow Pattern in a Dilute Cocurrent Upflow and Downflow Circulating Fluidized Bed*. Fluidizatio'91: Science and Thecnology, Science Press, Beijing, p. 66-75, 1991.

YASUNA, J. A., MOYER, H. R., ELLIOTT, S., SINCLAIR, J. L. *Quantitative prediction of gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle interactions*. Powder Technology. V. 84, p.23-34, 1995.

ZHANG, H., ZHU, J-X., e BERGOUGNOU, M. A. *Flow development in a gas-solids downer fluidized bed*. Canadian Journal of Chemical Engineering, v. 77, p. 194-198, 1999.

ZHU, J-X., YU, Z. _Q., JIN, Y., GRACE, J. R., e ISSANGYA, A. *Cocurrent downflow circulating fluidized bed (Downer) reactors - A state of the art review*. Canadian Journal of Chem. Engineering, v. 73 (75), p. 662-667, 1995.