



DIENER VOLPIN RIBEIRO FONTOURA

**“DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO TRIDIMENSIONAL
BIFÁSICO PARA A PREDIÇÃO DE FORMAÇÃO DE COQUE
NO INTERIOR DE TUBOS DE FORNOS DE
PRÉ-AQUECIMENTO DE PETRÓLEO ”**

CAMPINAS

2013



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

DIENER VOLPIN RIBEIRO FONTOURA

“DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO TRIDIMENSIONAL
BIFÁSICO PARA A PREDIÇÃO DE FORMAÇÃO DE COQUE
NO INTERIOR DE TUBOS DE FORNOS DE
PRÉ-AQUECIMENTO DE PETRÓLEO ”

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Co-orientador: Prof. Dr. Everton Moraes Matos

Tese de Doutorado apresentada ao programa de Pós Graduação em
Engenharia Química da Faculdade de Engenharia Química da Universidade
Estadual de Campinas para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA TESE
DEFENDIDA PELO ALUNO DIENER VOLPIN RIBEIRO FONTOURA
E ORIENTADO PELO PROF. DR. JOSÉ ROBERTO NUNHEZ

Assinatura do Orientador

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "José Roberto Nunhez", is written over a horizontal line.

CAMPINAS

2013

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

F738d

Fontoura, Diener Volpin Ribeiro

Desenvolvimento de um modelo tridimensional bifásico para a predição de formação de coque no interior de tubos de fornos de pré-aquecimento de petróleo / Diener Volpin Ribeiro Fontoura. --Campinas, SP: [s.n.], 2013.

Orientador: José Roberto Nunhez

Coorientador: Everton Moraes Matos.

Tese de Doutorado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Fluidodinâmica computacional (CFD). 2. Método dos volumes finitos. 3. Escoamento bifásico. 4. Coque de petróleo. 5. Fenômenos de transporte. I. Nunhez, José Roberto, 1961-. II. Matos, Everton Moraes. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Título em Inglês: Development of a three-dimensional two-phase model for predicting coke formation inside tubes of petroleum preheating furnaces

Palavras-chave em Inglês: Computational fluid dynamics (CFD), Finite volume method, Two-phase flow, Coke, Transport phenomena

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

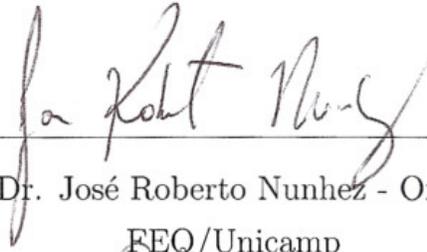
Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora: Sávio Souza Venâncio Vianna, Paulo Vatauvuk, Leonardo Machado da Rosa, Wu Hong Kwong

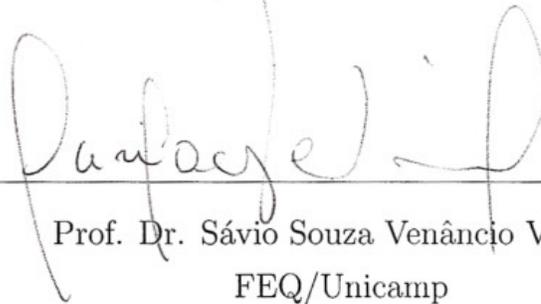
Data da defesa: 31-01-2013

Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Tese de Doutorado defendida por Diener Volpin Ribeiro Fontoura e aprovada em 31 de Janeiro de 2013 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



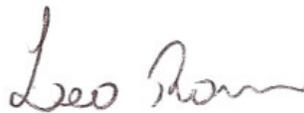
Prof. Dr. José Roberto Nunhez - Orientador
FEQ/Unicamp



Prof. Dr. Sávio Souza Venâncio Vianna
FEQ/Unicamp



Prof. Dr. Paulo Vatauvuk
FEC/Unicamp



Dr. Leonardo Machado da Rosa
UCS



Prof. Dr. Wu Hong Kwong
DEQ/UFSCar

À minha esposa Edileusa.

Agradecimentos

Em primeiro lugar gostaria de agradecer à minha esposa Edileusa pelo amor, amizade, companheirismo, fidelidade e confiança depositada em mim durante todo o tempo de trabalho.

Agradeço ao Professor José Roberto Nunhez pela confiança ao aceitar me orientar e também por sua amizade, ajuda com conselhos, sugestões e ensinamentos, os quais foram essenciais para realização do trabalho.

Também agradeço ao meu co-orientador Dr. Everton Moraes Matos pelo ritmo que deu ao trabalho, pelo conhecimento passado e pelas discussões técnicas que vieram a enriquecer a Tese.

Quero agradecer a todos os meus companheiros do Laboratório de Fluidodinâmica Computacional (LCFD) pela convivência diária e pelas horas de conversas amigáveis que fizeram o meu dia a dia ser mais agradável. Também agradeço a todos pelas discussões e conhecimentos transmitidos referentes aos seus trabalhos, que vieram somente a somar em minha formação.

Agradeço aos pesquisadores do Laboratório de Pesquisa em Processos Químicos e Gestão Empresarial (PQGe), em especial aos Doutores Gabriela Cantarelli Lopes e Leonardo Machado da Rosa, que tiveram um papel fundamental ao longo do meu trabalho tirando minhas dúvidas e me ajudando em várias ocasiões importantes.

Também agradeço ao Dr. Ricardo Serfaty do CENPES/PETROBRAS pelo apoio e colaboração durante a realização do trabalho.

Agradeço ao Dr. Márcio Machado pelos conselhos e pela ajuda prestada ao LCFD no início de meu trabalho.

Devo também agradecer a todos os meus amigos que sempre confiaram que eu iria vencer esse desafio.

Agradeço à minha família, que sempre esteve ao meu lado, me apoiando e acreditando no meu potencial para a conquista de mais uma etapa importante em minha vida.

Agradeço aos membros da Banca Examinadora, Prof. Dr. Sávio Souza Venâncio Vianna, Prof. Dr. Paulo Vatajuk, Dr. Leonardo Machado da Rosa e ao Prof. Dr. Wu Hong Kwong. Também agradeço ao Dr. Nicolas Spogis pela participação na Banca Examinadora da minha qualificação.

Um agradecimento especial à CAPES pela bolsa de estudo que possibilitou eu ter dedicação integral durante os anos de estudo, à FAPESP que financiou o equipamento que tornou possível a realização do trabalho e à UNICAMP que abriu as portas permitindo eu cursar o Doutorado com uma excelente estrutura.

*Aprender é a única coisa de que a mente
nunca se cansa, nunca tem medo
e nunca se arrepende.*

Leonardo da Vinci.

Resumo

O escoamento de fluidos é, sem dúvida, de grande importância na indústria, especialmente no transporte de fluidos entre as unidades de operação. Sistemas multifásicos são bastante comuns, e em muitos casos, também ocorrem processos de transferência de massa e energia, como é o caso dos fornos de pré-aquecimento na indústria petroquímica. O escoamento gás-líquido nessas linhas é muitas vezes complexo, pois durante a vaporização da carga ocorre também o craqueamento térmico do petróleo. É comum nestas operações a formação de coque no interior do tubo, o que é muito indesejável. Para entender as condições nas quais esta formação de coque é minimizada, ou aumentada, foi proposto um modelo fluidodinâmico computacional para simular o escoamento bifásico gás-líquido do petróleo no interior desses tubos. O modelo foi implementado na plataforma OpenFOAM, ao qual foram acrescentadas novas rotinas para a estimativa das temperaturas e concentrações através das equações de conservação de massa e energia. O modelo $k - \epsilon$ foi utilizado para descrever a turbulência e dois modelos de vaporização foram utilizados para caracterizar a mudança de fase. Uma formulação não conservativa foi adotada na escrita das equações do modelo para maior estabilidade numérica em altas frações volumétricas. Foi também implementada uma rede cinética dependente da temperatura para descrever o craqueamento térmico. Através do modelo foi possível simular o escoamento tridimensional de petróleo no interior de um tubo com as dimensões da planta obtendo como resultado os perfis de velocidades, temperaturas e concentrações das fases líquida e gasosa.

Palavras-chave: 1. Fluidodinâmica computacional (CFD), 2. Método dos volumes finitos, 3. Escoamento bifásico, 4. Coque de petróleo, 5. Fenômenos de transporte.

Abstract

Fluid flow is of great importance in the industry, especially for its transport between the operating units. Multiphase systems are very frequent. In many cases, mass and energy transfer processes, such as the case of preheating furnaces in petrochemical industry, are also observed. The gas-liquid flow in these lines is often complex, because during the vaporization of the charge it also occurs the petroleum thermal cracking. It is common in these operations the very undesirable formation of coke inside the tube. With the aim of understanding under which conditions the formation of coke is minimized or increased it was proposed a computational fluid dynamic model for simulating the petroleum gas-liquid two-phase flow inside of these tubes. The model was implemented on the OpenFOAM software, to which new routines for the calculation of temperatures and concentrations using the equations of conservation of mass and energy were added. The model *k - epsilon* was used to describe the turbulence and two vaporization models were used to characterize the phase change. A non-conservative formulation was adopted for describing the equations of the model in order to obtain numerical stability at high volumetric fractions. It was also implemented a temperature dependent kinetic net to describe the thermal cracking. With this model it was possible to simulate the three-dimensional flow of petroleum inside a tube with real industrial dimensions as a result of the gas and liquid phases profiles of velocities, temperatures and concentrations.

Keywords: 1. Computational fluid dynamics (CFD), 2. Finite volume method, 3. Two-phase flow, 4. Coke, 5. Transport phenomena.

Sumário

Resumo	x
Abstract	xi
Lista de Figuras	xxiv
Lista de Tabelas	xxv
Nomenclatura	xxvi
1 Introdução	1
2 Objetivos do trabalho	4
2.1 Objetivo Geral	4
2.2 Objetivos Específicos	4
3 Revisão Bibliográfica	6
3.1 Fornos de pré-aquecimento de petróleo	6
3.2 Caracterização e análises do petróleo.	13
3.2.1 Ponto de Ebulição Verdadeiro (PEV)	14
3.2.2 Destilação diferencial	16
3.2.3 Destilação simulada	16
3.2.4 Métodos térmicos em análise de petróleo.	16

3.3	Craqueamento do petróleo e rede cinética.	17
3.4	Regimes bifásico no interior de tubos	19
3.4.1	Regimes de escoamento vertical	19
3.4.2	Regimes de escoamento horizontal	23
3.5	Fluidodinâmica computacional aplicados a processos petroquímicos.	29
4	Discretização em volumes finitos (MVF) no software OpenFOAM	32
4.1	Discretização no domínio de cálculo	32
4.2	Discretização das equações	37
4.2.1	Derivada temporal	38
4.2.2	Termo convectivo	38
4.2.3	Termo difusivo	40
4.2.4	Gradiente	40
4.2.5	Termo fonte	41
4.3	Discretização temporal	42
5	Formulação do modelo.	43
5.1	Modelo de dois fluidos	45
5.2	Conservação de massa da fase	47
5.3	Transporte de quantidade de movimento gás-líquido	52
5.3.1	Transferência de quantidade de movimento interfacial	52
5.3.2	Fechamento das forças interfaciais	58
5.3.3	Formulação intensiva na fase.	59
5.4	Tratamento do termo ε_α no denominador.	63
5.5	Acoplamento pressão-velocidade	64
5.6	Modelo de turbulência	67
5.7	Transferência de energia	71

5.8	Transferência de massa multicomponente da fase líquida.	78
5.8.1	Rede cinética	80
5.8.2	Difusividade mássica	82
5.9	Mudança de fase	82
5.9.1	Modelo simplificado de vaporização	83
5.9.2	Taxa de vaporização por termoanálises	86
5.9.3	Condensação	89
6	Geração das malhas e procedimento numérico.	90
6.1	Construção das geometrias	90
6.2	Malha computacional	92
6.3	Sistema de equações	95
6.4	Metodologia numérica de resolução	98
6.5	Equipamento computacional	99
6.6	Procedimento de solução	101
6.7	Método gráfico para previsão de precipitação do coque.	101
7	Resultados e discussões	103
7.1	Validações aplicadas ao modelo de escoamento bifásico	103
7.1.1	Teste de independência e consistência de malha	103
7.1.2	Resultados da validação do escoamento em uma condição limite.	104
7.1.3	Resultados da validação do escoamento bifásico líquido-gás.	106
7.2	Simulações realizadas para o escoamento bifásico com um modelo de vaporização simplificado.	117
7.2.1	Definição das simulações para escoamento bifásico com um modelo de vaporização simplificado.	117
7.2.2	Resultados das simulações com modelo de vaporização simplificado.	120

7.3	Simulações realizadas para escoamento bifásico através de um modelo de vaporização ajustados aos dados experimentais por termoanálises.	145
7.3.1	Definição das simulações para escoamento bifásico através de um modelo de vaporização ajustado aos dados experimentais por termoanálises.	145
7.3.2	Resultados das simulações utilizando um modelo de vaporização ajustado a dados de termoanálises.	147
8	Conclusões e sugestões para trabalhos futuros	161
8.1	Conclusões	161
8.2	Sugestões	163
	Bibliografia	165

Lista de Figuras

3.1	Tipos básicos de fornos de pré-aquecimento (Fonte: CAO (2010)).	8
3.2	Esquema de Fornalha ilustrando os queimadores e a sequência da tubulação em seu interior (Fonte: THOMAS (2011))	10
3.3	Coque formado durante a operação de um forno de pré-aquecimento: a) Coque aderido as paredes; b) Tubo após a limpeza do coque e c) Coque recolhido após a limpeza.	11
3.4	Curva PEV para petróleo bruto do Kuwait (Fonte: WAUQUIER (1995)). . .	15
3.5	Rede cinética para a reação de craqueamento do petróleo (MENDONÇA FILHO (1998))	18
3.6	Diagrama ternário para previsão de precipitação de coque em petróleo (Fonte: TAKATSUKA <i>et al.</i> (1989))	19
3.7	Principais regimes de escoamento em tubos verticais: a) Fluxo disperso; b) Fluxo golfante (<i>slug</i>); c) Fluxo turbulento ou de transição e d) Fluxo anular.	20
3.8	Regimes de escoamento sistema ar-água em um tubo vertical de 2,6cm de diâmetro. (Fonte: GOVIER E AZIZ (1972).)	22
3.9	Mapa de regime de escoamento para fluxo vertical ascendente co-corrente (Fonte: HEWITT e ROBERTS (1969).)	23
3.10	Principais regimes de escoamento em tubo horizontal: a) Fluxo estratificado; b) Fluxo estratificado ondulado; c) Fluxo anular; d) Fluxo pistonado; e) Fluxo golfante e f) Fluxo com bolhas dispersas.	24
3.11	Ondas na superfície. Líquido subindo pelas paredes do tubo formando uma crescente.	25

3.12	Líquido subindo pelas paredes até próximo a parte superior do tubo. Bolhas de líquido se desprendem indo para a parte central.	25
3.13	Líquido formando um anel completo junto a parede do tubo. Bolhas de líquido se desprendem indo para a parte central.	26
3.14	Regimes de escoamento sistema ar-água em um tubo horizontal de 2,6cm de diâmetro. (Fonte: GOVIER E AZIZ (1972).)	28
3.15	Mapa de regime de escoamento para fluxo horizontal co-corrente (Fonte: BAKER (1954).)	29
4.1	Discretização do domínio de cálculo. (Fonte: RUSCHE (2002))	33
4.2	Parâmetros utilizados na discretização por volumes finitos (Fonte: RUSCHE (2002))	34
4.3	Três tipos de argumentos de armazenagem de variáveis. a) Campo de volumes: valores são armazenados no centro das células . b) Campo de faces: valores são armazenados no centro das faces. c) Campo de pontos: valores são armazenados nos pontos nodais.	36
5.1	Coefficiente de arraste na secção transversal de um cilindro e em uma partícula esférica. Os ângulos de separação da camada limite são para o cilindro (retirado de SCHLICHTING (2000) e modificado por BERGMAN (2011)). . . .	54
5.2	Coefficiente de sustentação para uma esfera rígida e lisa em função do número de Reynolds. Linha sólida: solução analítica para escoamento invíscido; linhas pontilhadas: ajuste da curva para os resultados numéricos com $S_r = 0,02(\bullet)$ e $S_r = 0,2(\blacktriangle)$; linhas tracejadas: solução analítica para <i>creepingflow</i> com $S_r = 0,02$ e $S_r = 0,2$ (retirado de LEGENDRE e MAGNAUDET (1998)) . .	56
5.3	Calor convectivo transferido da parede interna do tubo ao fluido.	84
5.4	Termogravimetria de petróleo bruto do Campo Venezuelano de Laguna Once: Curva 1 - Petróleo bruto; Curva 2 - Resíduo de vácuo (Fonte: KOPSCH (1995))	86
6.1	Ilustração da interface gráfica do SALOME para construção de geometrias .	91
6.2	Geometria representando o tubo de um forno. a)Tubo na horizontal; b)Corte da secção transversal.	92

6.3	Malha computacional com topologia O-Grid	93
6.4	Malha utilizada nas simulações do escoamento bifásico em tubo horizontal para validação do modelo.	94
6.5	Diagrama ternário adaptado de TAKATSUKA <i>et al.</i> (1989).	102
7.1	Comparação entre as pressões no centro do tubo para três tamanhos de malha.	104
7.2	Comparação da perda de carga estimada pelo modelo fluidodinâmico e pela correlação usando fator de fricção para escoamento turbulento.	105
7.3	Comparação entre a velocidade estimada pelo modelo CFD e os dados experimentais na posição radial para regime turbulento monofásico plenamente desenvolvido.	106
7.4	Geometria do tubo utilizada nas simulações para validação do escoamento líquido-gás de acordo com EKAMBARA <i>et al.</i> (2012).	107
7.5	Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,25 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a 0,043.	109
7.6	Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,50 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a 0,080.	109
7.7	Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,80 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a 0,139.	110
7.8	Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $1,34 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a 0,204.	110

7.9	Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,51 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $4,4 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,102$	111
7.10	Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,51 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $3,74 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,105$	111
7.11	Comparação entre os valores da velocidade axial do líquido previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,25 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,043$	113
7.12	Comparação entre os valores da velocidade axial do líquido previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,50 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,080$	113
7.13	Comparação entre os valores da velocidade axial do líquido previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,80 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,139$	114
7.14	Comparação entre os valores da velocidade axial do líquido previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $1,34 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,204$	114
7.15	Comparação entre os valores da velocidade axial do líquido previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,51 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $4,4 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,102$	115
7.16	Comparação entre os valores da velocidade axial do líquido previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,51 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $3,74 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,105$	115

7.17	Comparação entre os valores da fração média de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para diferentes velocidades superficiais de gás com velocidade superficial do líquido fixada em $5,1 \text{ m s}^{-1}$	116
7.18	Perfil da fração volumétrica da fase gasosa para petróleo Árabe e betume após 25s	121
7.19	Fração volumétrica da fase gasosa central ao longo do tubo após 25s para petróleo Árabe.	122
7.20	Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 1 s para petróleo Árabe.	123
7.21	Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 5 s para petróleo Árabe.	123
7.22	Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 15 s para petróleo Árabe.	124
7.23	Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 25 s para petróleo Árabe.	124
7.24	Fração volumétrica da fase gasosa central ao longo do tubo após 25s para o betume.	125
7.25	Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 1 s para betume do Athabasca.	126
7.26	Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 5 s para betume do Athabasca.	126
7.27	Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 15 s para betume do Athabasca.	127
7.28	Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 25 s para betume do Athabasca.	127
7.29	Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe após 25 s	129
7.30	Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe em corte transversal após 1 s.	129

7.31	Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe em corte transversal após 5 s.	130
7.32	Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe em corte transversal após 15 s.	130
7.33	Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe em corte transversal após 25 s.	131
7.34	Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe em corte transversal após 25 s para o comprimento de 1, 5, 10, 15, 20 e 25 metros.	132
7.35	Perfil de temperatura do líquido para betume do Athabasca após 25 s	132
7.36	Perfil de temperatura do líquido betume do Athabasca em corte transversal após 1 s.	133
7.37	Perfil de temperatura do líquido betume do Athabasca em corte transversal após 5 s.	134
7.38	Perfil de temperatura do líquido betume do Athabasca em corte transversal após 15 s.	134
7.39	Perfil de temperatura do líquido betume do Athabasca em corte transversal após 25 s.	135
7.40	Perfil de temperatura do líquido betume do Athabasca em corte transversal após 25 s para o comprimento de 1, 5, 10, 15, 20 e 25 metros.	136
7.41	Perfis de k para o petróleo Árabe após 25 s.	137
7.42	Perfis de ϵ para o petróleo Árabe após 25 s.	137
7.43	Perfil de k para o betume do Athabasca após 25 s.	138
7.44	Perfil de ϵ para o betume do Athabasca após 25 s.	138
7.45	Linhas de correntes do líquido para o petróleo Árabe.	139
7.46	Linhas de correntes do gás para o petróleo Árabe.	139
7.47	Vetores de velocidade do líquido para o petróleo Árabe.	140
7.48	Vetores de velocidade do gás para o petróleo Árabe.	140
7.49	Perfil de velocidade do líquido para o petróleo Árabe após 25 s para o comprimento de 1, 5, 10, 15, 20 e 25 metros.	140

7.50	Linhas de correntes do líquido para o betume Athabasca.	141
7.51	Linhas de correntes do gás para o betume Athabasca.	141
7.52	Vetores de velocidade do líquido para o betume Athabasca.	142
7.53	Vetores de velocidade do gás para o betume Athabasca.	142
7.54	Perfil de velocidade axial do líquido para o betume Athabasca após 25 s para o comprimento de 1, 5, 10, 15, 20 e 25 metros.	142
7.55	Fração mássica de coque no centro do tubo para petróleo Árabe nos tempos 0; 1; 5; 10; 15e 25 segundos.	143
7.56	Fração mássica de coque no centro do tubo para betume do Athabasca nos tempos 0; 1; 5; 10; 15e 25 segundos.	144
7.57	a)Fração volumétrica de gás após 50s com velocidade de entrada $U_l = 0,5 m s^{-1}$ para amostra 24; b)Fração volumétrica de gás após 50s com velocidade de entrada $U_l = 1,5 m s^{-1}$ para amostra 24 e c)Fração volumétrica de gás após 50s com velocidade de entrada $U_l = 1,5 m s^{-1}$ para a amostra 1.	148
7.58	Perfis de velocidade axial do líquido em função do diâmetro ao longo do tubo após 50 s para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $0,5 m s^{-1}$	149
7.59	Perfis de velocidade axial do líquido em função do diâmetro ao longo do tubo após 50 s para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $1,5 m s^{-1}$	150
7.60	Perfis de velocidade axial do líquido em função do diâmetro ao longo do tubo após 50 s para a simulação com dados da amostra 01 com velocidade inicial na entrada de $1,5 m s^{-1}$	151
7.61	Perfis de temperatura do líquido no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $0,5 m s^{-1}$	152
7.62	Perfis de temperatura do líquido no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $1,5 m s^{-1}$	152

7.63	Perfis de temperatura do líquido no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 01 com velocidade inicial na entrada de $1,5 \text{ m s}^{-1}$	153
7.64	Perfis de temperatura do líquido no centro do tubo em função do comprimento do tubo para diferentes velocidades de entrada.	153
7.65	Perfis de temperatura do líquido no centro do tubo em função do tempo de residência para diferentes velocidades de entrada.	154
7.66	Perfil de concentração de coque após 50s com velocidades de entrada $U_l = 0,5 \text{ m s}^{-1}$ para amostra 24; b)Perfil de concentração de coque após 50s com velocidade de entrada $U_l = 1,5 \text{ m s}^{-1}$ para amostra 24 e c)Perfil de concentração de coque após 50 s com velocidade de entrada $U_l = 1,5 \text{ m s}^{-1}$ para a amostra 1.	155
7.67	Perfis de concentração de coque no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $0,5 \text{ m s}^{-1}$	156
7.68	Perfis de concentração de coque no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $1,5 \text{ m s}^{-1}$	156
7.69	Perfis de concentração de coque no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 01 com velocidade inicial na entrada de $1,5 \text{ m s}^{-1}$	157
7.70	Comparação entre os perfis de concentração de coque no centro do tubo em função de seu comprimento com velocidades de entrada iguais a $1,5 \text{ m s}^{-1}$ para as amostras 24 e 1 e velocidade de entrada igual a $0,5 \text{ m s}^{-1}$ para amostra 1.	158
7.71	Comparação entre os perfis de concentração de coque no centro do tubo em função do tempo de residência com velocidades de entrada iguais a $1,5 \text{ m s}^{-1}$ para as amostras 24 e 1 e velocidade de entrada igual a $0,5 \text{ m s}^{-1}$ para amostra 1.	158
7.72	Gráfico com dados de temperatura do petróleo no interior do tubo adaptado do trabalho de SOUZA <i>et al.</i> (2005) para escoamento turbulento.	159
7.73	Gráfico com dados de fração mássica de coque no interior do tubo adaptado do trabalho de SOUZA <i>et al.</i> (2005) para escoamento turbulento.	160

8.1	Exemplo de um gráfico de ponto de ebulição verdadeiro dividido em grupos de pseudocomponentes SARA.	164
-----	---	-----

Lista de Tabelas

5.1	Coeficientes do modelo $k - \epsilon$ modificado	68
5.2	Valores de energia de ativação e fator de frequência pré exponencial em experimentos DSC.	88
6.1	Equações do modelo a serem resolvidas.	97
7.1	Dados de entrada para as simulações realizadas.	107
7.2	Condições iniciais e de contorno usadas na simulação para validação do escoamento bifásico líquido-gás.	108
7.3	Propriedades físicas das fases líquida e gasosa.	118
7.4	Fração mássica do petróleo Árabe leve para os pseudocomponentes na entrada	118
7.5	Fração mássica do betume do Athabasca para os pseudocomponentes na entrada	119
7.6	Condições iniciais e de contorno usada na simulação para petróleo Árabe. . .	119
7.7	Condições iniciais e de contorno usadas na simulação para betume.	120
7.8	Condições operacionais utilizadas: Velocidade de entrada e amostra utilizada.	146
7.9	Condições iniciais e de contorno usadas na simulação.	146

Nomenclatura

Letras Latinas

a	área interfacial, m^2
A	área, m^2
\mathbf{A}	matriz dos operadores diagonais
A, B	constantes da equação da taxa em função da temperatura
C	concentração de espécie química, $kg\ m^{-3}$
C_p	calor específico, $J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
C	termo de transferência interfase
C_d	coeficiente de arraste, $kg\ m^3\ s^{-1}$
C_i	coeficiente de sustentação
C_{td}	coeficiente de dispersão turbulenta
C_{vm}	coeficiente de massa virtual
$C_\mu, C_{\epsilon 1}, C_{\epsilon 2}$	constantes do modelo k-epsilon
d	diâmetro da partícula, m
\mathbf{d}	vetor distância, m
D	diâmetro do tubo, m
D_l	difusividade da fase líquida, $kg\ m^{-3}$

e	coeficiente de restituição
E	energia de ativação $J mol^{-1}$
E_o	número adimensional de Eötvös
f	fator de fricção
F	fluxo de massa, $kg s^{-1}$
g	aceleração gravitacional, $m s^{-2}$
G	módulo de elasticidade, adimensional
h	coeficiente convectivo de transferência de calor, $W m^{-2} K^{-1}$
H	entalpia, $J kg^{-1}$
\mathbf{H}	matriz dos operadores não diagonais
I	tensor unitário
L	comprimento característico, m
\mathbf{j}	fluxo volumétrico, $m^3 m^{-2} s^{-1}$
k	energia cinética turbulenta, $m^2 s^{-2}$
K	constante cinética de reação, s^{-1}
κ	condutividade térmica, $W m^{-1} K^{-1}$
ℓ	escala de comprimento turbulento, m
\mathbf{M}	transferência de quantidade de movimento interfacial, $kg m^{-2} s^{-2}$
Nu	número adimensional de Nusselt
p	pressão, Pa
P_k	Produção turbulenta, $[Pa s^{-1}]$
Pr	número adimensional de Prandtl
Q	calor recebido pela fase, $J m^{-3}$

R	taxa de reação, $kmol\ m^{-3}\ s^{-1}$
\mathbf{R}	tensor das forças viscosas, $m\ s^{-1}$
Re	número adimensional de Reynolds
S	superfície m^2
S_ϕ	termo fonte das equações de transporte $[\phi]\ m^{-3}\ s^{-1}$
S_r	taxa adimensional de cisalhamento
S_c	número adimensional de Schmidt
t	tempo, s
T	temperatura, K
\mathbf{T}	tensor de tensões, $m\ s^{-1}$
\mathbf{u}	velocidade superficial, $m\ s^{-1}$
\mathbf{U}	velocidade, $m\ s^{-1}$
V	volume, m^3
\mathbf{y}	vetor posição, m
w	porcentagem mássica adimensional

Letras Gregas

α	referente à fase, g ou l
β	referente à outra fase
ϵ	taxa de dissipação de k , $m^2\ s^{-3}$
ε	fração volumétrica
γ	condutividade térmica, $W\ m^{-1}\ K^{-1}$
λ	fator de interpolação linear

μ	viscosidade dinâmica, $kg\ m^{-1}\ s^{-1}$
ν	viscosidade cinemática, $m^2\ s^{-1}$
ϕ	variável genérica
ρ	massa específica, $kg\ m^{-3}$
$\sigma_k, \sigma_\epsilon$	números de Prandtl turbulento
σ	tensão superficial, $J\ m^{-2}$
π	constante matemática

Subscritos e superescritos

0	tempo inicial
<i>cond</i>	condensação
<i>corr</i>	valor de correção para a variável
<i>evap</i>	evaporação
<i>f</i>	face
<i>j</i>	espécie química ou pseudocomponente
<i>lam</i> , <i>turb</i>	laminar, turbulento
<i>k</i>	energia cinética turbulenta
<i>l</i>	fase líquida
<i>m</i>	quantidade de movimento
ρ	massa
<i>v</i>	velocidade
ϕ	variável conservativa
$\alpha\beta$	transferência da fase α para a fase β

<i>g</i>	fase gasosa
<i>i</i>	espécie química
<i>r</i>	relativo
<i>N</i>	ponto central da célula vizinha
<i>p</i>	partícula
<i>P</i>	ponto central da célula de interesse
<i>sat</i>	saturação
<i>wall</i>	parede
<i>vap</i>	vaporização

Siglas

CAD	<i>Computer Aided Design.</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics.</i>
DILU	<i>Diagonal Incomplete LU.</i>
DSC	Calorimetria exploratória derivada.
DTG	Termogravimetria derivada.
FAPESP	Fundo de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo.
FVM	<i>Finite Volume Method.</i>
GAMG	<i>General Algebraic Multi Grid.</i>
HPC	<i>High Performance Computing.</i>
SARA	Saturados, Aromáticos, Resinas e Asfaltenos.
OpenFOAM	<i>Open Field Operation And Manipulation.</i>
PBiCG	<i>Preconditioned Bi-Conjugate Gradient solver for asymmetric matrices.</i>

PEV	Ponto de Ebulição Verdadeiro.
PISO	<i>Pressure Implicit with Splitting of Operators.</i>
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
TBP	<i>True Boiling Point</i>
TG	Termogravimetria.
VOF	<i>Volume of Fluid.</i>

Capítulo 1

Introdução

O escoamento de fluidos é um fenômeno de extrema importância na indústria, já que está presente na maior parte de suas aplicações, onde o escoamento no interior em tubos circulares é, sem dúvida, o mais comum deles. Pode-se citar como exemplos de equipamentos, onde ocorre o escoamento de fluidos, os pré aquecedores utilizados na indústria petroquímica.

Estes pré aquecedores normalmente são utilizados em etapas anteriores ou posteriores a alguma operação no processamento do petróleo como exemplo o processo de destilação, onde é empregado um pré aquecedor no qual o petróleo bruto entra em temperaturas baixas e vai se aquecendo a medida que percorre os tubos dentro do pré aquecedor.

Neste processo devido ao ganho de energia e conseqüente aumento de temperatura o petróleo sofre um processo de vaporização em que as frações de hidrocarbonetos que o compõe vaporizam-se de acordo com seu ponto de ebulição na mistura.

Os fenômenos envolvidos no escoamento em fornos de campanha para o pré-aquecimento de frações de petróleo são muito complexos. Há poucos trabalhos na literatura que tratam de detalhes específicos destes fornos no sentido de se evitar a formação de coque dentro dos mesmos, que é um problema industrial encontrado nas refinarias e muito indesejável, visto que, pode até mesmo causar a parada do equipamento. De um modo geral, a literatura comenta sobre o problema e cita algumas condições operacionais (WAUQUIER, 1995; CHAUDHURI, 2010; MULLINGER e JENKINS, 2008) e procedimentos que visam minimizar o problema, como o uso de aditivos (SALARI *et al.*, 2010).

Modelar e simular esses sistemas é de grande importância para prever diversas características no processo, visto que além da vaporização, ou seja, a mudança de fase,

existem também reações onde os compostos do petróleo são transformados em outros através de reações de craqueamento térmico.

Um dos problemas decorrentes destas reações de craqueamento é a formação de coque no interior das tubulações, que na maioria das operações se encontra sob altas temperaturas. Essa reação de craqueamento é indesejável, já que a deposição de coque nas paredes desses tubos aumenta a perda de carga e faz com que as paradas para limpeza sejam frequentes.

Já que o petróleo é composto por uma mistura complexa de hidrocarbonetos, muitos deles desconhecidos, fica difícil prever as reações que ocorrem para cada espécie química. Uma maneira de contornar esse problema é através do agrupamento desses componentes em grupos de moléculas representativas, com o uso da técnica de pseudocomponentes. Esses grupos são compostos pelas espécies químicas, que são agrupadas conforme semelhança de suas propriedades. Assim, as equações de transporte são aplicadas somente aos pseudocomponentes.

O modelo matemático deverá ser constituído por equações de transporte as quais são obtidas através de balanços de massa; energia e quantidade de movimento para cada fase e no caso dos pseudocomponentes, que correspondem às espécies químicas os balanços são aplicados a cada espécie química existente na fase.

A abordagem multifásica euleriana será adotada na modelagem para descrever o tipo de escoamento de cada fase. Nesta abordagem considera-se que o sistema é constituído de duas fases interdispersas, que interagem entre si. Estas interações são aplicadas em todas as equações de transportes e são calculadas de acordo com a característica de cada sistema.

A fluidodinâmica computacional será adotada, como estratégia numérica para a resolução das equações do modelo, devido a complexidade ou impossibilidade de se obter uma solução analítica das equações parciais que representam o modelo. Dentre os métodos empregados pela fluidodinâmica computacional, pode-se citar o método das diferenças finitas, o método dos elementos finitos e o método dos volumes finitos (MALISKA (2004) e FERZIGER e PERIC (1996)), sendo este último o de maior empregabilidade. No método dos volumes finitos os balanços são aplicados a cada elemento de volume de uma malha computacional gerada a partir da geometria do sistema a ser modelado. Um conjunto de equações diferenciais parciais é obtido o qual é realizada uma discretização para obtenção de um sistema de equações lineares que são resolvidas através de um método de solução de sistemas lineares adequado.

Atualmente inúmeros programas para solução de sistemas em fluidodinâmica estão

disponíveis, como por exemplo, o ANSYS CFX (ANSYS CFX-Solver theory guide (2009)) comercial e o OpenFOAM OpenCFD (2010a,b) que é um software distribuído gratuitamente e de código aberto, o qual possibilita aos usuários ver, modificar ou até mesmo criar rotinas para solução de problemas em fluidodinâmica computacional.

O objetivo deste trabalho foi realizar a modelagem matemática tridimensional do escoamento bifásico de petróleo no interior de tubos de fornos de pré-aquecimento para prever a formação de coque. O trabalho utiliza a fluidodinâmica computacional com técnica numérica de solução e o modelo foi implementado no software gratuito OpenFOAM versão 2.01. O modelo considera os transportes de quantidade de movimento, energia e massa devido ao aquecimento do líquido no interior dos tubos e uma rede cinética foi utilizada para prever as reações de craqueamento térmico e consequente geração de coque.

Capítulo 2

Objetivos do trabalho

2.1 Objetivo Geral

Este trabalho de doutorado tem como objetivo principal o desenvolvimento de um modelo matemático fluidodinâmico para escoamento bifásico Euleriano-Euleriano, gás-líquido, multicomponente, de petróleo bruto no interior de fornos de pré-aquecimento e a partir deste, calcular as transferências de massa multicomponentes, energia e quantidade de movimento, prevendo a formação de coque ao longo do tubo.

2.2 Objetivos Específicos

- Modelagem matemática do escoamento bifásico no interior dos tubos através das equações de quantidade de movimento de Navier-Stokes.
- Modelagem matemática da transferência de energia entre fases no interior do tubo.
- Modelagem matemática da mudança de fase e transferência de massa global devido ao aquecimento do fluido.
- Modelagem matemática do transporte de massa multicomponente no interior dos tubos considerando craqueamento térmico utilizando rede cinética.
- Implementação do modelo no software gratuito e de código aberto OpenFOAM versão 2.01.

- Validação do modelo de escoamento bifásico líquido-gás através da comparação das frações volumétricas e perfil de velocidade calculados com dados experimentais retirados da literatura.
- Simulação de casos referentes ao escoamento de petróleo em fornos.

Capítulo 3

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo será realizada a revisão da literatura abordando os temas que são ponto chave no desenvolvimento do trabalho. Os temas foram divididos em seções para melhor organização do trabalho. As seções descritas no capítulo são: fornos de pré-aquecimento de petróleo; características do petróleo; craqueamento térmico do petróleo e rede cinética; fluidodinâmica computacional e regimes bifásicos no interior de tubos. Salienta-se que, nos demais capítulos desse documento, a revisão da literatura está presente como parte intrínseca dos mesmos.

3.1 Fornos de pré-aquecimento de petróleo

De acordo com THOMAS (2011) uma fornalha ou forno de aquecimento é um equipamento usado para aquecer produtos ou misturas químicas. Estes aquecedores transferem o calor gerado pela queima de algum combustível, como por exemplo: metano; etano; propano ou óleo combustível, ao líquido no interior dos tubos.

Os fornos consistem essencialmente de um conjunto de tubulações que passam através de uma câmara fechada que possui queimadores. Estes tubos percorrem o interior desta câmara ao longo de suas paredes até o teto constituindo uma bateria de tubos. O calor liberado pelos queimadores é transferido através das paredes dos tubos ao fluido em seu interior. O fluido permanece no forno o tempo suficiente até alcançar as condições de operação sendo posteriormente bombeado para uma outra etapa do processamento.

Fornos de pré-aquecimento são usados no processamento de petróleo bruto, craquea-

mento, produção de olefinas, e muitos outros processos da indústria petroquímica. Os fornos chegam a aquecer a matéria prima ao ponto de formar produtos tais como gasolina, óleo, querosene, produtos químicos, plásticos, e borracha. Neste processo a geração de gás devido a volatilidades das frações constituintes do petróleo é um fenômeno presente.

A indústria de transformação química possui uma variedade de processos que utilizam uma vasta variedade de aquecedores ou pré aquecedores que são especificamente projetados de acordo com as necessidades do processo de produção de determinado produto, podendo os projetos dos equipamentos serem complexos e equipados com a mais moderna tecnologia existente de construção e controle de operação.

CAO (2010) destaca as principais aplicações dos fornos de pré-aquecimento em processos industriais listados a seguir:

Pré aquecedores para coluna de destilação fracionada: Um exemplo típico de aplicação de um forno de pré-aquecimento é na alimentação de colunas de destilação atmosférica em refinarias de petróleo. Neste processo, o petróleo bruto entra a aproximadamente 220 °C em estado líquido e sai em torno de 360-370 °C, com cerca de 60 % da carga vaporizada. A mistura bifásica constituída de gás e líquido, em seguida, alimenta uma coluna de destilação (fracionamento). Outras aplicações em refinarias de petróleo podem ser encontradas em unidades de destilação à vácuo ou em unidades de fracionamento através de craqueamento térmico.

Pré aquecedores para alimentação de reatores: Nessa aplicação os pré aquecedores aquecem a carga até atingir as temperaturas necessárias para o controle das reações químicas. Um exemplo é uma unidade de reforma catalítica, onde uma mistura monofásica de hidrogênio e vapores de hidrocarbonetos reagem para produzir compostos aromáticos ou gasolina de alta octanagem. Nesse caso, o aumento da temperatura do aquecedor é em aproximadamente de 100 °C e as pressões operacionais estão na faixa de 20-40 bar. Outro exemplo é o aquecimento de misturas de hidrocarbonetos líquidos e gás hidrogênio reciclado para reação de hidrocraqueamento em refinarias.

Aquecedor de fluido térmico: Muitas plantas fornecem calor para outras unidades por meio de uma transferência de calor intermediária, a qual normalmente utiliza como fluido de troca térmica óleo mineral ou sintético. Uma fornalha é utilizada para elevar a temperatura dos fluidos de transferência de calor. O fluido normalmente permanece no estado líquido durante o processo.

Aquecimento de fluidos viscosos: Aquecedores também podem ser usados para aumentar

a temperatura de óleos pesados que necessitam ser bombeados. Ao aquecer os fluidos, sua viscosidade diminui, o que facilita o bombeamento ao longo das tubulações. Esses tipos de aquecedores podem ser encontrados em estações de bombeamento de gasodutos.

Reatores aquecidos: Esta categoria inclui aquecedores em que uma reação química ocorre dentro de uma tubulação em formato de bobina (espiral). Estes aquecedores normalmente são construídos com a mais sofisticada tecnologia para aquecedores industriais. Eles normalmente operam a pressões e temperaturas muito altas e exigem alta qualidade dos materiais empregados na construção e um controle preciso da temperatura em cada zona do aquecedor. Um exemplo é um aquecedor para regenerador de hidrocarbonetos a vapor, em que os tubos da câmara de combustão funcionam individualmente como um reator vertical recheados de catalisadores de níquel. As temperaturas na saída estão aproximadamente entre 800-900 °C. Um outro exemplo é um aquecedor de pirólise, usado para produzir olefinas de matérias-primas gasosas como etano e propano e de matérias-primas líquidas como nafta e gás de petróleo. Os tubos e queimadores são dispostos de modo a assegurar o controle preciso das temperaturas. As temperaturas de saída também estão na faixa de 800-900 °C.

Há várias configurações de fornos de pré-aquecimento utilizadas em refinarias, nas quais se destacam basicamente os três tipos: caixa; cabine e cilindro vertical, apresentados na Figura 3.1.

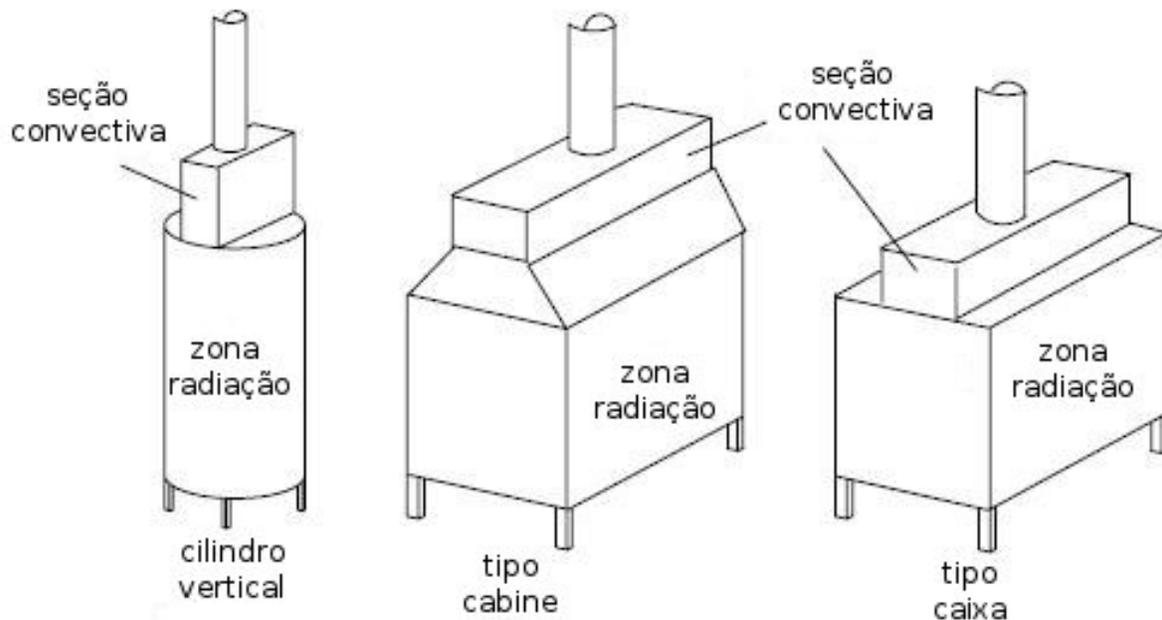


Figura 3.1: Tipos básicos de fornos de pré-aquecimento (Fonte: CAO (2010)).

Em muitos casos, além de serem transportados, os fluidos são submetidos a processos de transformação em seu interior. Desta forma os fornos constituem-se em equipamentos específicos e têm como objetivo fazer com que o fluido passe por transformações durante o processo. Esse é o caso dos fornos de campanha de refinarias, também conhecidos como fornalhas, os quais promovem o craqueamento térmico das frações mais pesadas de uma carga de petróleo para frações mais leves, com valor comercial maior, além de fazer a mudança de fase (vaporização) de uma porcentagem da carga inicial.

A Figura 3.2 apresenta um esquema de um forno de pré-aquecimento de petróleo típico em forma de caixa:

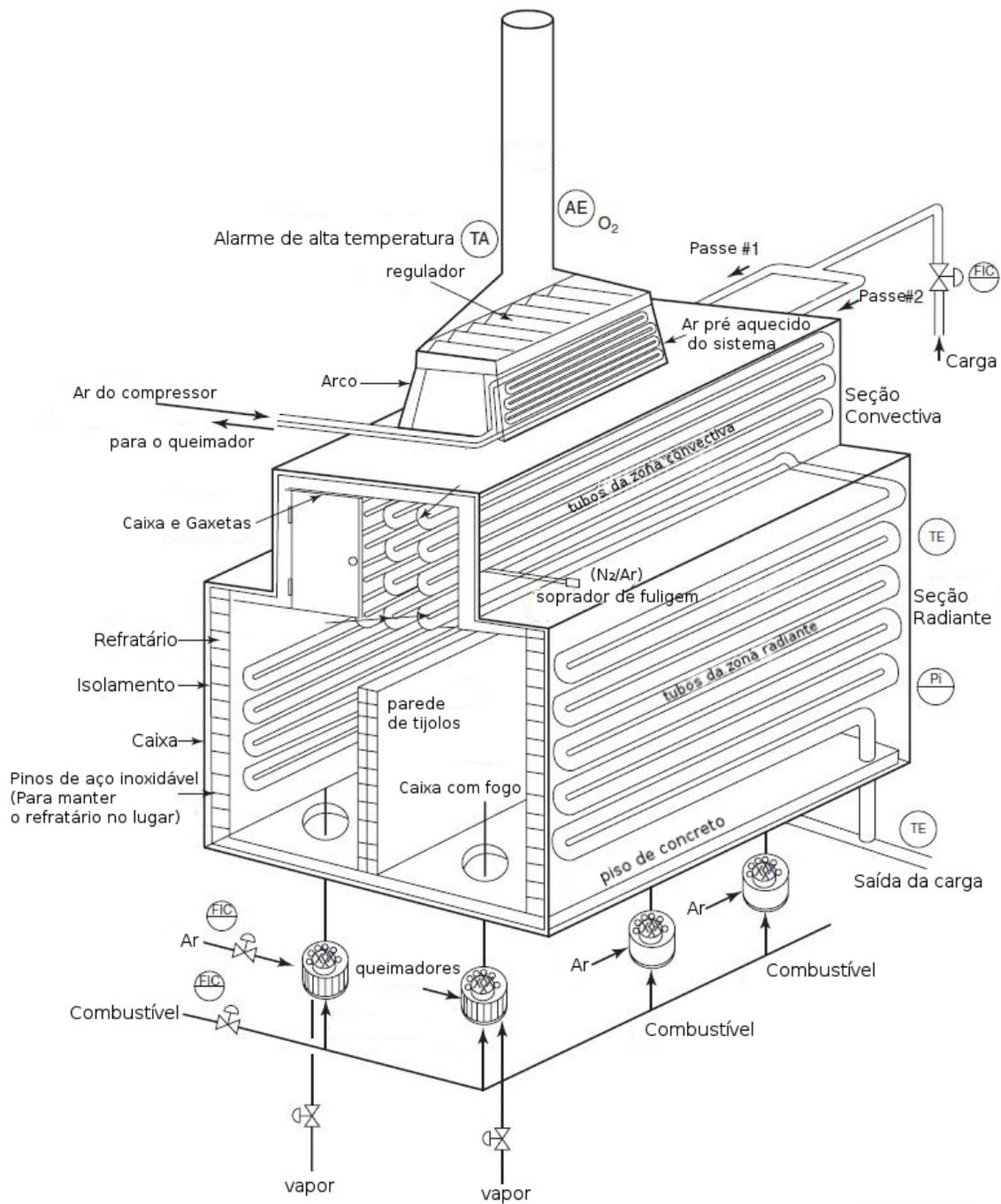


Figura 3.2: Esquema de Fornalha ilustrando os queimadores e a sequência da tubulação em seu interior (Fonte: THOMAS (2011))

Na indústria petroquímica um problema que ocorre durante esse transporte é a formação de coque no interior das tubulações devido às reações de craqueamento térmico do petróleo, que na maioria das operações se encontra sob altas temperaturas. Essa reação de craqueamento é indesejável, já que a deposição de coque nas paredes desses dutos aumenta a perda de carga e faz com que as paradas para limpeza sejam frequentes. A Figura 3.3 ilustra bem como o coque se adere nas paredes das tubulações de dos fornos.

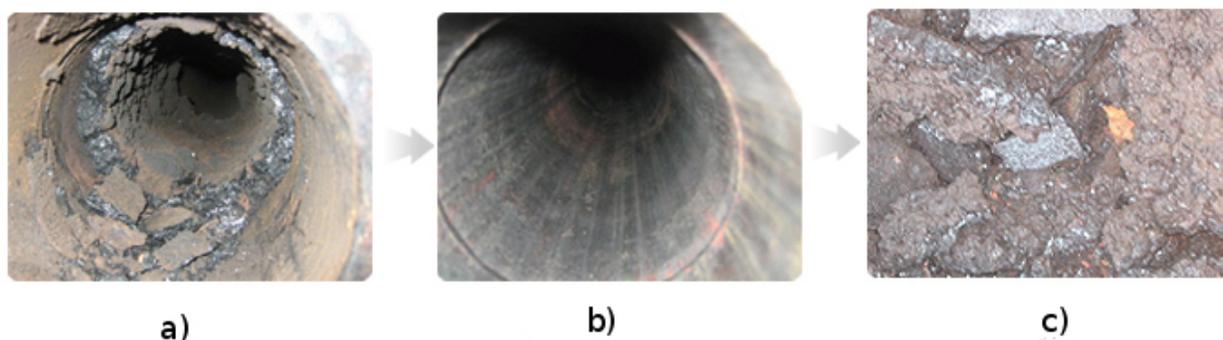


Figura 3.3: Coque formado durante a operação de um forno de pré-aquecimento: a) Coque aderido as paredes; b) Tubo após a limpeza do coque e c) Coque recolhido após a limpeza.

Como exemplos de estudos realizados em aquecedores de refinarias destaca-se o trabalho de PINTO (2004), que simulou trocadores de calor do tipo casco e tubo conforme os existentes em trem de pré-aquecimento em refinarias de petróleo, com objetivo de estudar a formação de incrustações. As propriedades físicas do petróleo cru foram calculadas utilizando os modelos propostos por POLLEY *et al.* (2002) baseados em dados de refinarias. Os autores alertam no trabalho a necessidade de se estabelecer modelos próprios para cada situação devido a variação das propriedades físico químicas para cada tipo de petróleo. O simulador apresentou resultados coerentes para diversos fatores envolvidos nos processos e foi possível verificar o aumento da resistência térmica causada pela formação de incrustação e que a aplicação das condições limite de incrustações pode reduzir os custos no projeto de trocadores de calor. Esse alerta pode ser verificado no decorrer desse trabalho verificando-se em capítulos posteriores a necessidade de se obter modelos de vaporização através de estudos empíricos, visto a dificuldade de um modelo termodinâmico geral.

Pode-se também destacar os trabalhos realizados por (AL-HAJ IBRAHIM e AL-QUASSIMI (2008) e AL-HAJ IBRAHIM e AL-QUASSIMI (2010)) os quais estudaram através da implementação de modelos matemáticos a eficiência térmica e a transferência de calor na seção convectiva de fornos de pré-aquecimento de petróleo.

Utilizando a fluidodinâmica computacional DÍAZ-MATEUS e CASTRO-GUALDRÓN (2011) realizaram simulações em software comercial para o cálculo de picos de temperatura nas paredes externas dos tubos dos fornos de aquecimento. Os autores alertam para a importância de se manter o controle deste parâmetro durante a operação do forno para aumentar a vida útil da tubulação evitando a ruptura do metal que pode ocorrer por volta de $922K$ para algumas ligas metálicas. Destacam a complexa composição do petróleo e a necessidade de se utilizar correlações apropriadas para calcular as propriedades da mistura, assim como utilizar softwares termodinâmicos específicos para o cálculo do equilíbrio líquido-vapor e das propriedades multicomponentes da mistura.

Infelizmente, até o momento, é muito raro encontrar trabalhos na literatura que tem como foco o estudo fluidodinâmico do escoamento de cargas de petróleo, no interior dos tubos dos fornos de campanha, abordando a cinética de craqueamento térmico. Entre os poucos trabalhos, cita-se o de SOUZA *et al.* (2005) que modelaram o escoamento de petróleo no interior do tubo de um forno petroquímico. Utilizaram a fluidodinâmica computacional, com uso de uma malha bidimensional, como técnica para o estudo do problema e as transferências de massa, energia e quantidade de movimento foram consideradas no modelo. Utilizaram uma rede cinética, descrita por MENDONÇA FILHO (1998), com sete pseudocomponentes e, dessa forma, sete equações de balanço de massa para cada espécie foram necessárias, as quais consideravam as taxas de reação fornecidas pela rede cinética. As taxas de reação têm uma dependência exponencial com a temperatura, e portanto, foi necessário calcular o perfil de temperatura no interior do forno através da resolução da equação de balanço de energia. Para prever a precipitação do coque foi utilizado um diagrama ternário apresentado por TAKATSUKA *et al.* (1989). No entanto, o modelo considerou o sistema como sendo inicialmente monofásico e sem geração de uma segunda fase gasosa ao se aquecer.

A partir do trabalho de SOUZA *et al.* (2005) surgiu a proposta de iniciar o desenvolvimento de um modelo fluidodinâmico bifásico líquido-gás e que considere transformação da fase líquida em gasosa ao longo da tubulação do forno à medida que o líquido, no caso alguma carga de petróleo, receba calor proveniente das paredes aquecidas pela queima de combustíveis no lado externo ao tubo. E essa proposta faz com que o presente trabalho desenvolvido nessa Tese seja um dos pioneiros.

3.2 Caracterização e análises do petróleo.

O petróleo é composto por uma mistura complexa de hidrocarbonetos, muitos deles desconhecidos, é extremamente difícil prever as reações que ocorrem para cada espécie química. Uma maneira de contornar esse problema é através do agrupamento desses componentes em grupos de moléculas representativas, com o uso da técnica de pseudocomponentes.

Esses grupos são compostos pelas espécies químicas, que são agrupadas conforme as semelhanças de suas propriedades. Assim, as equações de transporte são aplicadas somente aos pseudocomponentes.

Existem vários padrões de caracterização do petróleo em pseudocomponentes, onde podemos destacar o padrão SARA, o qual é utilizado neste trabalho. O padrão SARA caracteriza o petróleo em 4 pseudo componentes: Saturados; Aromáticos; Resinas e Asfaltenos.

Uma outra classificação utilizada pode ser encontrada no trabalho de MATOS e GUIRARDELLO (2002) que usaram um modelo cinético baseado no proposto por KRISHNA e SAXENA (1989), no qual as espécies químicas envolvidas no processo de hidrocraqueamento de frações pesadas de petróleo, são agrupadas e classificadas como aromáticos, naftalenos e parafinas. Eles concluíram que o modelo cinético baseado nestes pseudocomponentes reproduziu os dados encontrados na literatura e pode ser aplicado para diferentes óleos e em diferentes condições de operação.

Uma classe muito importante de compostos a serem considerados neste trabalho e que estão presentes em petróleos brutos são os asfaltenos. Eles representam uma mistura complexa de hidrocarbonetos que são definidos pela suas características de solubilidade, e não por uma classificação química específica.

Asfaltenos em conjunto com as resinas constituem a fase dispersa dos óleos brutos, enquanto que os maltenos (saturados e aromáticos) constituem a fase contínua. A precipitação dos asfaltenos depende da estabilidade destes complexos sistemas coloidais. A composição atua como a principal responsável pela deposição dos asfaltenos, porém a pressão e a temperatura também são fatores importantes na ocorrência desse processo.

Dessa forma, qualquer variação na pressão, temperatura ou composição das fases em equilíbrio, poderá causar a polimerização das moléculas asfálticas, gerando aglomerados que aumentam em tamanho e se depositam. Estes tendem a se fixar nas superfícies próximas às regiões de baixa agitação ou temperatura. MANSOORI e LEONTARITIS (1992) propuseram um modelo para prever a floculação dos asfaltenos, conhecido como modelo coloidal,

que é baseado na hipótese de que os asfaltenos existem no óleo como partículas sólidas em suspensão coloidal, estabilizada por resinas adsorvidas em sua superfície.

Em um dado sistema, em que são fixados o tipo e a quantidade de óleo e dos asfaltenos contidos nele, uma mudança na concentração das resinas ali presentes causará uma variação na quantidade dessas resinas que estão adsorvidas nas partículas dos asfaltenos. Se esta mudança for tal que a quantidade de resinas seja insuficiente para cobrir toda a superfície das partículas, essas irão se agregar e acabar precipitando.

Por causa da diversidade e complexidade do petróleo, bem como a gradual internacionalização de diferentes métodos para análise e caracterização, ocorreu a necessidade da padronização destes procedimentos. Dentre os métodos de caracterização podemos destacar o método de fracionamento por destilação (PEV, ASTM e Cromatografia gasosa). O método utilizado depende das características do composto a ser analisado e no caso do petróleo quanto mais pesado, ou seja, mais denso, maior será o número de compostos presentes e desta forma métodos mais sofisticados e apropriados devem ser utilizados.

Um passo importante no projeto de equipamentos e processos para refino de petróleo, nos quais, são empregados cálculos cinéticos e termodinâmicos e em muitas vezes empregados técnicas avançadas de simulação é se ter uma caracterização adequada da carga que será processada. A seguir são descritos alguns métodos para a caracterização de compostos de petróleo.

3.2.1 Ponto de Ebulição Verdadeiro (PEV)

De acordo com FARAH (2007) este procedimento, o qual é padronizado pelas normas ASTM D-2892 e D-5236, determina a curva dos Pontos de Ebulição Verdadeiros (PEV) ou TBP (*True Boiling Point*). Esta caracterização permite a separação do petróleo em cortes de frações de acordo com as suas temperaturas de ebulição. Este método fornece um excelente fracionamento com uma distribuição precisa dos componentes constituintes do petróleo analisado. A Figura 3.4 apresenta a curva PEV para petróleo bruto do Kuwait.

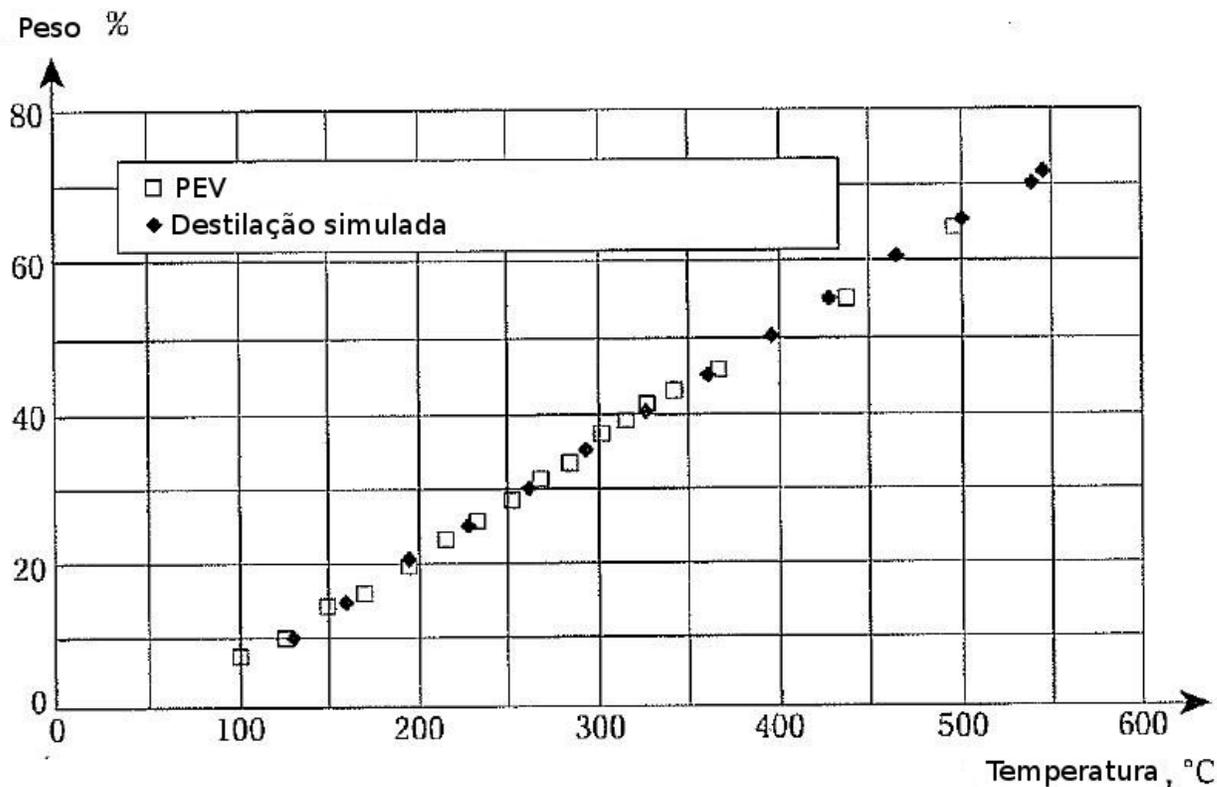


Figura 3.4: Curva PEV para petróleo bruto do Kuwait (Fonte: WAUQUIER (1995)).

Apesar da excelente caracterização da mistura, RIAZI (2005) destaca como desvantagem o fato de ser um método bastante demorado, caro e que utiliza grande quantidade de matéria-prima, sendo um método pouco utilizado na indústria do petróleo para caracterizar os cortes e as frações.

Pelo método D-2892, inicia-se a destilação do petróleo com a desbutanização do mesmo, seguido pela destilação à pressão atmosférica. Quando a temperatura no balão alcança 310 °C o procedimento de destilação é parado e passa-se a trabalhar com a pressão de 100mmHg, baixando sucessivamente a temperatura. Por este método, alcança-se a temperatura equivalente a 400 °C .

No procedimento D-5236, é possível destilar resíduos de petróleos em pressões ainda menores, equivalendo à temperatura de ebulição atmosférica de 580 °C. Estes são compostos que normalmente seriam impossíveis de serem destilados, devido ao craqueamento térmico da amostra (WAUQUIER, 1995).

3.2.2 Destilação diferencial

Os procedimentos ASTM D-86 e ASTM D-1160 são procedimentos de destilação diferencial, sem refluxo e com apenas um estágio de equilíbrio. O ASTM D-86 é realizado a pressão atmosférica em petróleo com frações leves, enquanto o ASTM D-1160 é realizado à pressão de 10mmHg e aplicado para frações pesadas. FARAH (2007) destaca que são métodos menos precisos do que a PEV, mas muito mais simples, rápidos e baratos, por isso sendo de uso muito maior pelas refinarias.

O ASTM D-86 é o único método padronizado para se obter uma curva de destilação devida sua larga utilização e aceitação nos testes diários realizados em refinarias. Este procedimento não apenas é utilizado para a caracterização de uma mistura de petróleo, mas também como base para a maioria das correlações para estimação de propriedades de caracterização de petróleos e suas frações.

3.2.3 Destilação simulada

O procedimento ASTM D-2887, conhecido como Destilação Simulada, é realizado através de cromatografia gasosa em uma coluna que utiliza recheio apolar para eluir os hidrocarbonetos em ordem crescente de pontos de ebulição. É um método simples, de precisão e custos intermediários entre o PEV o D-86, aplicado para todas as frações de petróleo com ponto final de ebulição inferior a $720\text{ }^{\circ}\text{C}$ (RIAZI, 2005).

3.2.4 Métodos térmicos em análise de petróleo.

Métodos analíticos que descrevem o comportamento térmico das substâncias durante mudanças de temperatura programada, como termogravimetria, termogravimetria diferencial ou calorimetria exploratória diferencial, são métodos antigos, que foram aplicados primeiramente à problemas de química inorgânica, principalmente para minerais. A análise de petróleo e produtos petrolíferos tem sua aplicação um pouco mais tarde. Os Petróleos, especialmente crus pesados, são muitas vezes recuperados pelo uso de processos térmicos. O processamento dos produtos de petróleos brutos nas refinarias são geralmente feitos por métodos térmicos em temperaturas muito diferentes. Estes processos são parcialmente realizados por um aquecimento sequencial até que os produtos desejados sejam obtidos. Os parâmetros operacionais para diferentes processos têm sido obtidos, em grande parte, através da experiência

empírica ou parcialmente por simulação de processos em instalações laboratoriais ou em plantas-piloto. Por esse motivo os métodos termoanalíticos são considerados muito úteis na obtenção de dados sobre o comportamento térmico, ou seja, dados descrevendo estabilidade térmica e oxidativa do petróleo e seus produtos; dados prevendo a forma e a quantidade de produtos adquirida nos processos; e dados relativos à cinética de reação, que podem ser usados para otimizar os processos da refinaria. Termogravimetria (TG), termogravimetria derivada (DTG) e a calorimetria exploratória derivada (DSC) são os principais métodos que podem ser usados na análise de petróleo e seus produtos. O método DSC é preferível a DTG, pois, o DSC fornece os valores das energias diretamente, enquanto que o DTA fornece apenas as diferenças de temperatura ((KOPSCH, 1995)). As técnicas de termoanálises citadas podem ser conferidas em (KOPSCH, 1995; BROWN, 1998; GABBOTT, 2008).

Vários autores tem utilizado de termoanálises para retirar dados sobre o petróleo. Dentre eles cita-se o trabalho de LI (2011) que utilizaram a termogravimetria para medir a cinética de vaporização e pressão de vapor de três amostras de petróleo, concluindo que o método é rápido e prático na construção de curvas de pressão de vapor, obtendo dados satisfatórios da energia de ativação e entalpia de vaporização das três amostras. Outro trabalho que se pode citar na utilização da TG na obtenção de dados de vaporização é o trabalho de HAZRA (2002) que também utilizaram a TG para obter os parâmetros da cinética de vaporização para três óleos essenciais. Em KOPSCH (1995) encontram-se vários dados de testes de TG, DTG e DSC para petróleo, os quais podem ser utilizados na obtenção de uma função que prevê a taxa de vaporização ajustada a uma equação de Arrhenius. Os dados deste autor foram utilizados nesse trabalho para obter um modelo de vaporização.

3.3 Craqueamento do petróleo e rede cinética.

O craqueamento térmico consiste na quebra das cadeias de alto peso molecular dos componentes do petróleo em frações de peso molecular menores, provocado por um aumento de temperatura. Uma forma de estudar estas reações é através de redes cinéticas específicas onde a transformação dos compostos devido ao craqueamento térmico é representado através de pseudocomponentes.

Existem atualmente alguns trabalhos nos quais são propostas redes cinéticas para a reação de craqueamento térmico do petróleo em fase líquida.

SOUZA *et al.* (2005) realizaram um estudo de modelagem do escoamento de petróleo

cru no interior de tubos de fornos de pré-aquecimento em unidades de colunas de destilação a vácuo. A proposta do modelo foi a previsão da formação de coque no interior dos tubos. O modelo foi obtido realizando o estudo como uma única fase líquida em abordagem bidimensional. Para o cálculo das frações de petróleo ao longo do tubo uma rede cinética para craqueamento térmico composta por sete pseudo componentes, proposta por MENDONÇA FILHO (1998), foi utilizada na obtenção das taxas de reação as quais são necessárias para o cálculo das concentrações das frações do petróleo ao longo do tubo. A rede cinética pode ser esquematizada na Figura 3.5 a seguir.

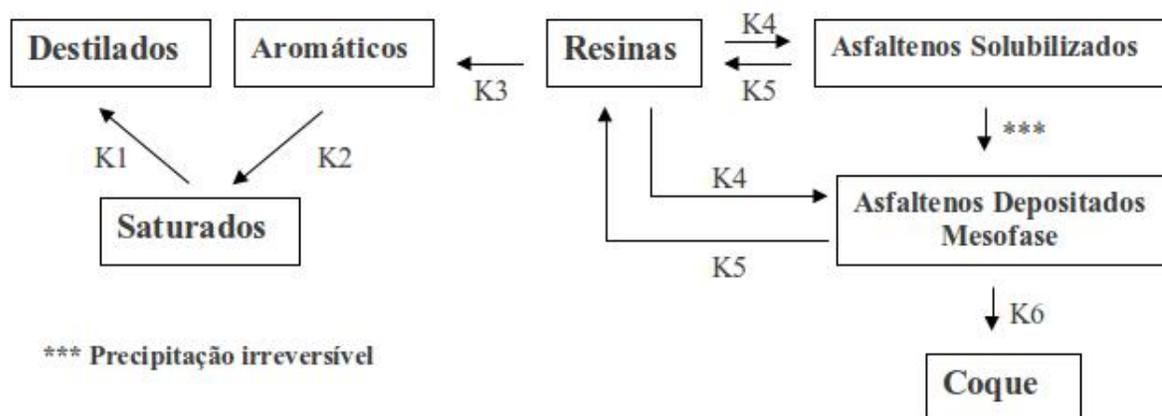


Figura 3.5: Rede cinética para a reação de craqueamento do petróleo (MENDONÇA FILHO (1998))

Na predição da formação de coque foi utilizado um diagrama ternário apresentado por TAKATSUKA *et al.* (1989) ao invés de um modelo termodinâmico devido a complexidade de se obter um modelo adequado. O diagrama ilustrado pela Figura 3.6 indica as regiões onde o coque ainda se encontra solubilizado ou precipitado no petróleo.

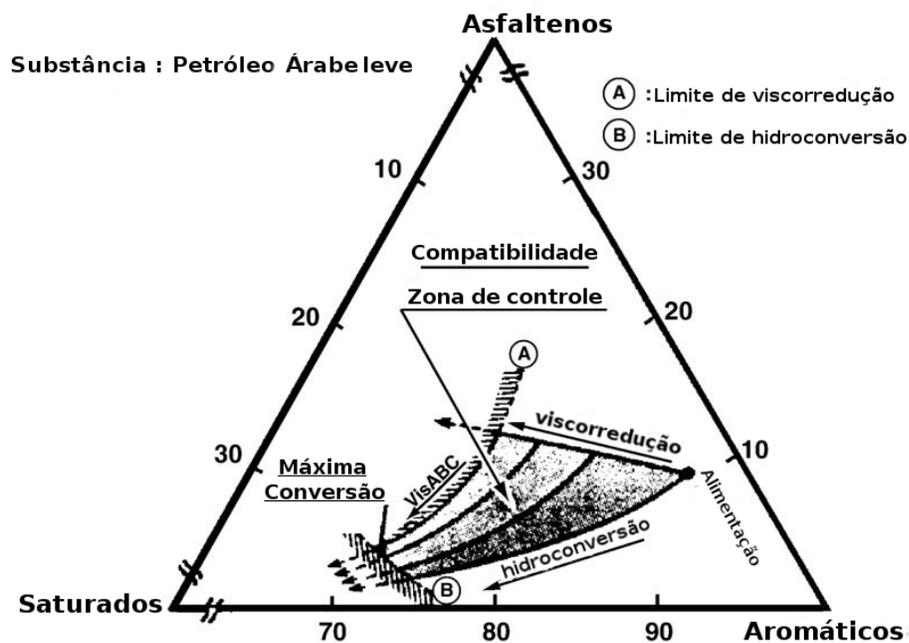


Figura 3.6: Diagrama ternário para previsão de precipitação de coque em petróleo (Fonte: TAKATSUKA *et al.* (1989))

3.4 Regimes bifásico no interior de tubos

3.4.1 Regimes de escoamento vertical

Nos fluxos verticais ocorre a ação da gravidade que produz fluxos simétricos ao eixo central do tubo. Devido a esta característica os fluxos estratificados não são encontrados em escoamentos verticais. A Figura 3.7 apresenta os principais regimes encontrados em escoamentos verticais.

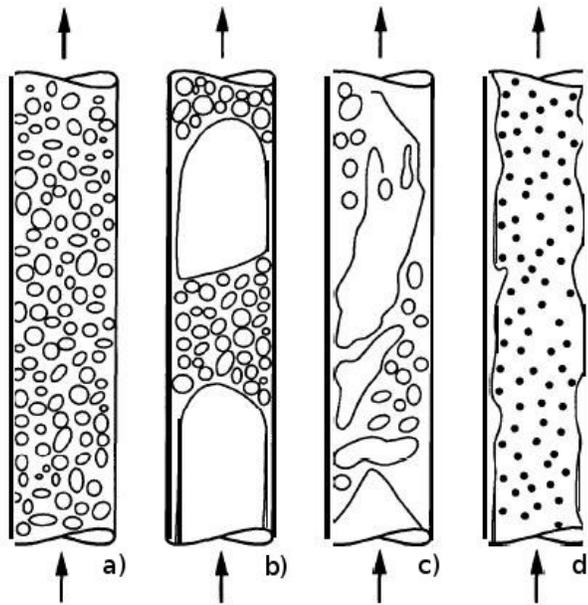


Figura 3.7: Principais regimes de escoamento em tubos verticais: a) Fluxo disperso; b) Fluxo golfante (*slug*); c) Fluxo turbulento ou de transição e d) Fluxo anular.

a) Fluxo disperso (bolhas)

Neste padrão de escoamento a fase gasosa dispersa se encontra distribuída mais ou menos uniformemente na fase líquida contínua sob a forma de pequenas bolhas discretas.

b) Fluxo golfante (*slug*)

THOMAS (2004) descreve que a medida que a mistura se eleva na coluna vertical há uma redução da pressão, resultando em maior liberação do gás que está em solução. A fase líquida é a fase contínua, porém as bolhas de gás coalescem e formam bolsões estáveis, com diâmetro próximo ao da tubulação. Os bolsões de gás são separados por golfadas de líquido que se deslocam para a superfície com velocidades variáveis. Próximo à parede do tubo existe um filme de líquido que se move com velocidade ascendente menor do que a das golfadas.

Os autores TAHA E CUI (1989) apresentam um estudo numérico, em que utilizaram a fluidodinâmica computacional na investigação do escoamento com golfadas observando o

movimento das bolhas se propagando no líquido estagnado e em movimento. A velocidade das bolhas e a distribuição de velocidades e tensões de cisalhamento foram calculadas e comparadas com os resultados experimentais.

c) Fluxo turbulento ou transicional (churn)

O fluxo transicional é similar ao de golfadas, mas muito mais caótico e desordenado. O formato da bolha se torna muito mais estreita e com formato distorcido. As golfadas de líquido entre os bolsões tendem a desaparecer e uma quantidade significativa de líquido fica dispersa no gás. O gás tende a aumentar sua velocidade na parte central da tubulação e o líquido tende a aderir nas paredes iniciando a formação de um anel.

d) Fluxo anular nevoeiro

O fluxo anular nevoeiro é caracterizado pela continuidade na direção axial da fase gasosa na parte central do tubo. O líquido, que forma um anel aderido as paredes, é também disperso na fase gasosa em forma de gotículas e escoam em direção ascendente juntamente com o gás.

Como exemplo de trabalhos realizados no estudo de escoamentos anulares verticais pode-se citar os trabalhos de GHOSH *et al.* (2009); GHOSH *et al.* (2010) e GHOSH *et al.* (2011).

A transição entre os regimes de escoamento no interior dos tubos pode ser expressa através de fluxogramas e uma forma de fluxograma pode ser encontrado em GHIAASIAAN (2008) representado pela Figura 3.8, a qual mostra através de ilustrações o tipo de regime de escoamento de acordo com as faixas de velocidades superficiais das fases para sistema bifásico ar-água em um tubo vertical de 2,6 *cm* de diâmetro.

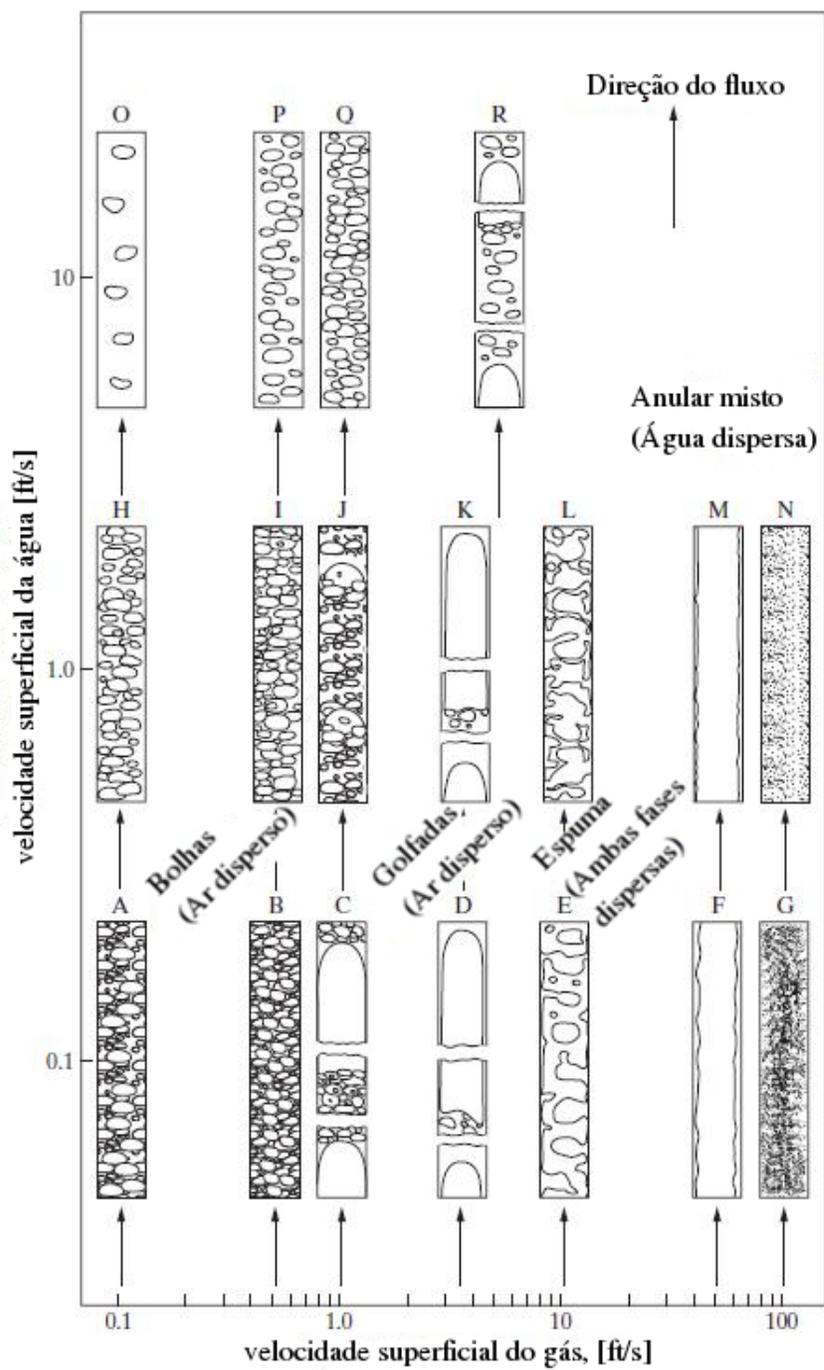


Figura 3.8: Regimes de escoamento sistema ar-água em um tubo vertical de 2,6cm de diâmetro. (Fonte: GOVIER E AZIZ (1972).)

Outra forma de representação é através de um diagrama que ilustra as regiões onde

ocorrem determinado tipo de regime de escoamento e geralmente são função dos fluxos ou das velocidades superficiais das fases envolvidas.

A Figura 3.9 apresenta um diagrama de fluxo para escoamento em tubos verticais com fluxo ascendente co-corrente.

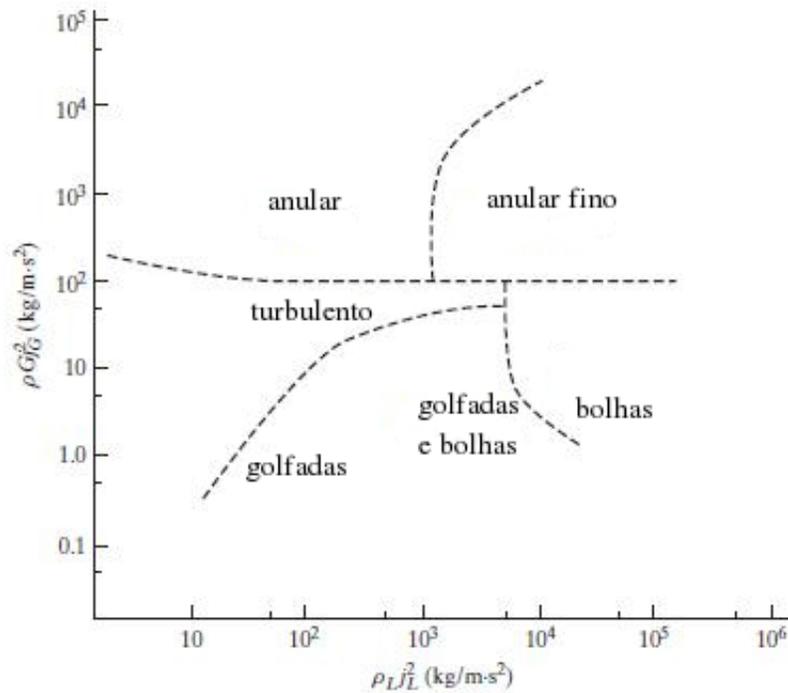


Figura 3.9: Mapa de regime de escoamento para fluxo vertical ascendente co-corrente (Fonte: HEWITT e ROBERTS (1969).)

3.4.2 Regimes de escoamento horizontal

Quando líquido e gás fluem simultaneamente em uma tubulação podem distribuir-se em qualquer um dos padrões de escoamento. A forma do escoamento depende de suas respectivas vazões, propriedades físicas, tamanho do tubo e inclinação.

A Figura 3.10 mostra os principais padrões de fluxos, ou regimes de escoamento, que ocorrem em tubos na horizontal ou ligeiramente inclinados.

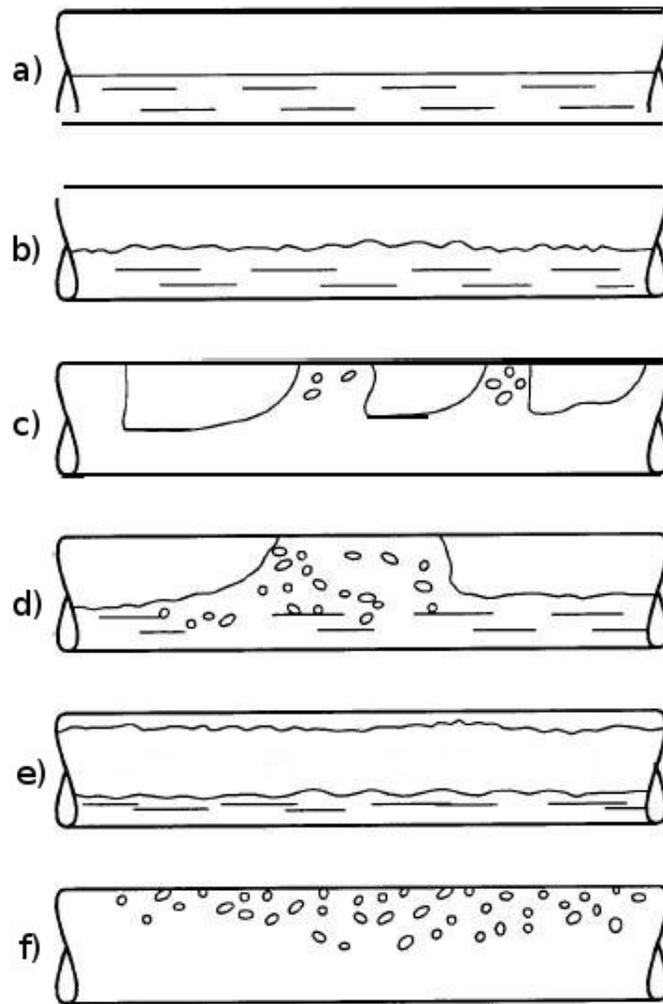


Figura 3.10: Principais regimes de escoamento em tubo horizontal: a) Fluxo estratificado; b) Fluxo estratificado ondulado; c) Fluxo anular; d) Fluxo pistonado; e) Fluxo golfante e f) Fluxo com bolhas dispersas.

a) Fluxo estratificado

Líquido e gás escoando a baixas vazões promovem a segregação das fases. O líquido fluirá ao longo do tubo pela parte inferior e o gás através da parte superior do tubo. A interface entre as fases é suave. Este tipo de fluxo raramente ocorre em processos industriais.

b) Fluxo estratificado ondulado

Com o aumento da velocidade da fase gasosa ondas se formam na superfície do líquido. O líquido tende a subir parcialmente pela parede do tubo formando uma crescente (Figura 3.11).

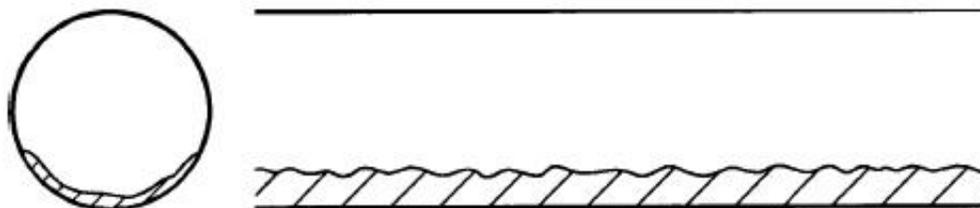


Figura 3.11: Ondas na superfície. Líquido subindo pelas paredes do tubo formando uma crescente.

Este tipo de fluxo é comum em sistemas onde ocorre a condensação da fase gasosa. A amplitude da onda e o nível ao qual o filme líquido sobe pela superfície do tubo, aumentam conforme a velocidade do gás é aumentada. Porções de líquido também são arrancadas das ondas formando gotas que se deslocam até o centro do tubo preenchido pelo gás fluindo como uma fase dispersa como gotas de líquido no gás e posteriormente retornam ao fluxo de líquido.

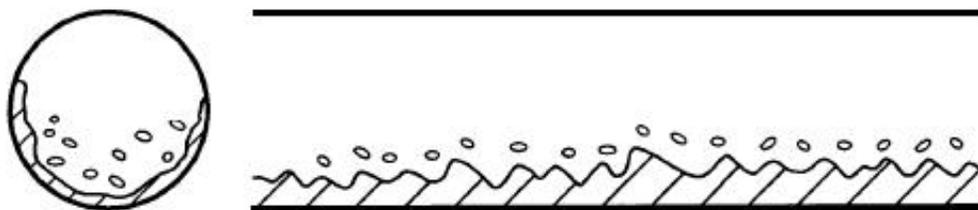


Figura 3.12: Líquido subindo pelas paredes até próximo a parte superior do tubo. Bolhas de líquido se desprendem indo para a parte central.

Observa-se que, que tanto o fluxo estratificado horizontal quanto o estratificado ondulado possuem aproximadamente uma taxa constante da relação líquido e gás. No entanto, se ocorrer alterações na inclinação do tubo, e nesta região houver uma quantidade suficiente de líquido presente, o acúmulo de líquido em pontos mais baixos do sistema podem produzir uma obstrução. Neste caso o líquido será intermitentemente expulso desta região através de golfadas.

MOUZA *et al.* (2001) utilizaram o CFD para simular detalhadamente o escoamento estratificado ondulado aplicados a duas geometrias (tubo e canal). Neste trabalho a geometria foi dividida em dois domínios e as fases foram tratadas separadamente.

Outro trabalho que pode-se citar foi o desenvolvido por VALLÉE *et al.* (2007) os quais utilizaram um modelo Euleriano-Euleriano para fazer a simulação em CFD para investigar o escoamento estratificado de água e ar em canais horizontais com seção retangular. Foram realizados ensaios experimentais em canais feitos de acrílico onde o escoamento característico foi filmado e posteriormente comparado com as simulações realizadas. Verificaram uma ótima qualidade dos resultados obtidos através das simulações após a comparação com os dados experimentais indicando que a fluidodinâmica computacional pode ser uma ferramenta muito útil no estudo de fluxos horizontais bifásicos.

c) Fluxo anular

Aumentando ainda mais a velocidade do gás chega-se a um ponto onde o filme de líquido forma um anel anular completo ao redor da superfície do tubo. O filme de líquido é, obviamente, mais espesso na parte inferior do tubo. Porções do líquido são arrastadas como uma névoa ao núcleo contendo a fase gasosa.

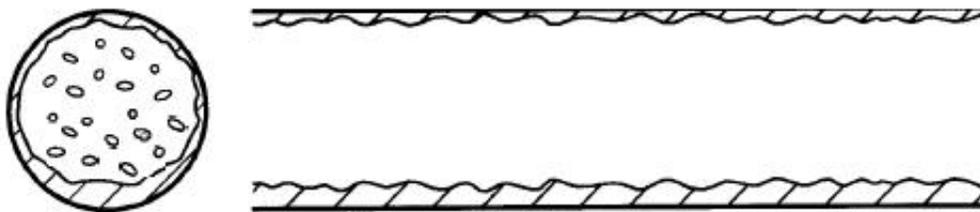


Figura 3.13: Líquido formando um anel completo junto a parede do tubo. Bolhas de líquido se desprendem indo para a parte central.

Este tipo de fluxo pode ocorrer em sistemas onde existe a condensação de gás próximo às paredes. O aparecimento de fluxo anular marca a transição para uma condição onde a parede do tubo está totalmente molhada.

Pode-se destacar o trabalho de KAUSHIK *et al.* (2012) os quais utilizaram a fluidodinâmica computacional para investigar o escoamento horizontal anular quando o fluxo é submetido a uma súbita contração ou expansão. Os fluidos utilizados na simulação foram óleo e água utilizando um modelo VOF (volume of fluid).

d) Fluxo pistonado

Fluxo pistonado ocorre em velocidades moderadas da fase líquida e baixas da gasosa, caracteriza-se por bolhas alongadas de gás distribuídas em uma fase líquida contínua. Este tipo de fluxo normalmente não causa transtornos significativos ao processo, pois as tomadas de gás são relativamente curtas e são produzidas regularmente e como exemplo de trabalho desenvolvido aplicando CFD cita-se o trabalho de LEVY (2000) que utilizou o modelo Euleriano bifásico como aproximação para modelar o escoamento pistonado em uma linha horizontal de transporte pneumático de partículas sólidas. As simulações numéricas demonstraram a formação e deformação do pistão de ar ao longo do tubo horizontal. Em seu trabalho também foram examinadas as pressões nas direções radial e axial e qualitativamente comparadas com a experimental concluindo que é impossível se obter a velocidade do pistão de ar através de correlações entre as perdas de carga radial e axial.

e) Fluxo golfante

Os fluxos golfantes ocorrem sobre uma ampla gama de condições e, portanto, é frequentemente encontrado em linhas multifásicas. Nos regimes de fluxos golfantes os fluidos são ordenados como golfadas alternadas de líquido e bolhas de vapor. As variações nas taxas de produção de líquido e gás associadas a este regime podem causar perturbações no processo industrial. A extensão das perturbações associadas a este regime de escoamento dependerá do comprimento das golfadas. Os fluxos pistonados e golfantes são frequentemente denominados de fluxos intermitentes.

f) Fluxo disperso - bolhas dispersas

Fluxo ou escoamento com bolhas dispersas ocorre quando se tem altas vazões provocando um fluxo turbulento que faz com que as fases líquida e gasosa estejam muito bem misturadas.

Assim como apresentado para escoamento em tubulações verticais, GHIAASIAAN (2008) mostra o fluxograma de transição de regimes de escoamentos ilustrado pela Figura 3.14. Os parâmetros para definir o tipo de regime neste fluxograma também são as velocidades superficiais das fases.

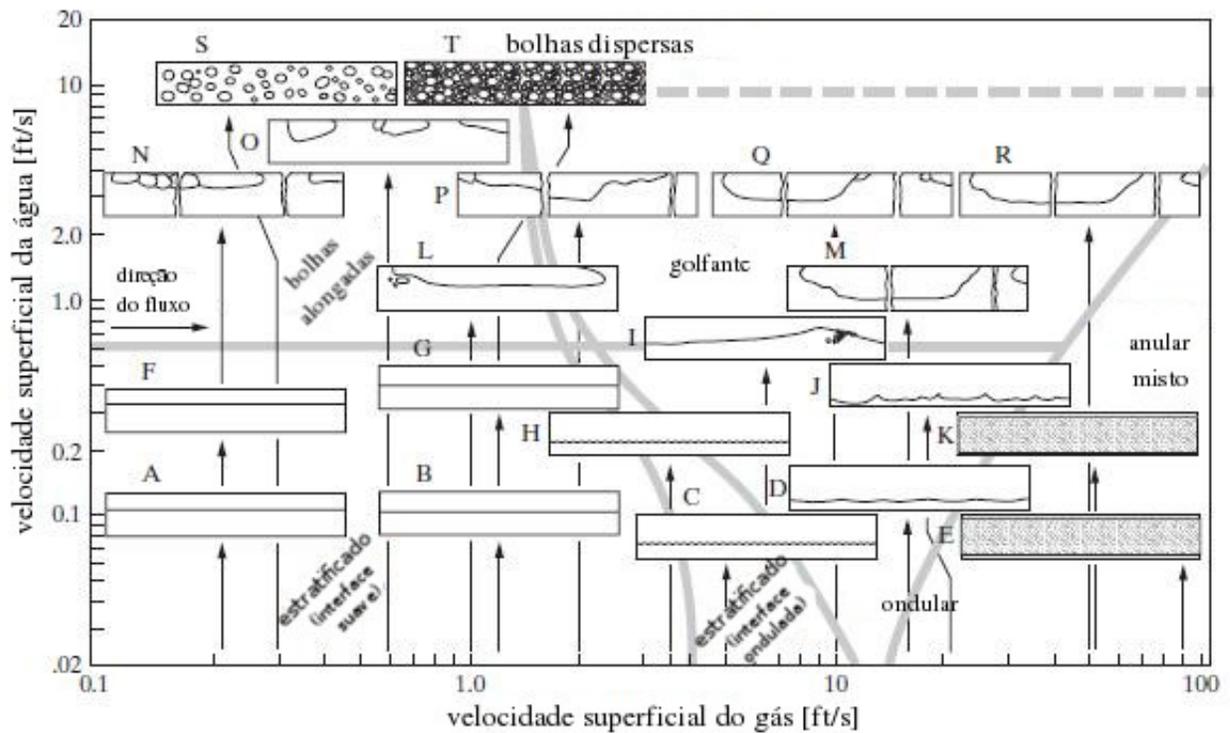


Figura 3.14: Regimes de escoamento sistema ar-água em um tubo horizontal de 2,6 cm de diâmetro. (Fonte: GOVIER E AZIZ (1972).)

BAKER (1954) apresenta um diagrama de regime de escoamento para o escoamento em tubos horizontais ilustrado pela Figura 3.15 em que a base preliminar para a construção deste diagrama foi a mistura ar-água.

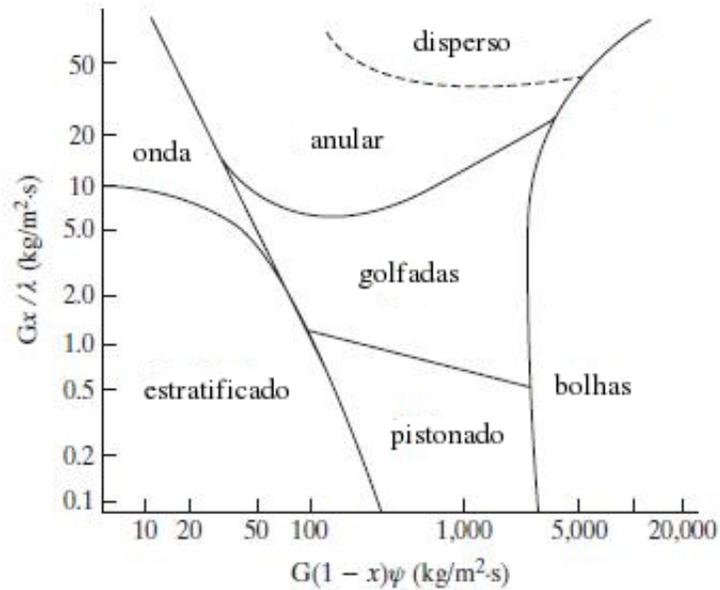


Figura 3.15: Mapa de regime de escoamento para fluxo horizontal co-corrente (Fonte: BAKER (1954).)

3.5 Fluidodinâmica computacional aplicados a processos petroquímicos.

A fluidodinâmica computacional ou CFD (abreviação em inglês para *Computational Fluid Dynamics*) é uma área específica da fluidodinâmica que estuda os fenômenos de transferência de quantidade de movimento, energia e massa de fluidos em movimento através da resolução numérica de sistemas complexos de equações de transporte, utilizando o poder computacional para cálculo. As equações são baseadas nos estudos dos cientistas Cloud-Louis Marie Henri Navier (NAVIER, 1823) e George Grabiell Stokes, e portanto conhecidas como equações de Navier-Stokes para escoamentos viscosos.

Como exemplos de métodos numéricos que podem ser aplicados ao estudo da fluidodinâmica computacional destacam-se o método das diferenças finitas, descrito em HARLOW e SCANNAPIECO (1995); o método dos elementos finitos, descrito em HUTTON (2004) e o método dos volumes finitos (PATANKAR, 1980; FERZIGER e PERIC, 1996; MALISKA, 2004; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007), sendo este último o mais uti-

lizado.

Devido a extrema complexidade ou até mesmo a impossibilidade de se resolver esse sistema de equações analiticamente, tais métodos transformam o sistema de equações diferenciais parciais em um sistema de equações lineares discretas, o que possibilita prever e calcular parâmetros e variáveis de modelos matemáticos, que representam a mais ampla variedade de sistemas físicos, em sistemas bidimensionais (2D) e tridimensionais (3D), sendo o cálculo tridimensional de maior expressão na utilização da técnica.

O domínio físico do sistema a ser estudado é representado em modelo CAD que constitui a geometria do sistema. Esse modelo geométrico pode ser extremamente fiel ao sistema real, descrevendo os detalhes, ou ser uma representação aproximada, onde detalhes que supostamente não implicariam na física do problema podem ser omitidos.

Atualmente existem inúmeros softwares CAD (*Computer Aided Design*), como por exemplo (*AutoCad* e *SolidWorks*) que se habilitam a esse propósito e alguns são específicos à aplicação de desenho em engenharia para aplicação em fluidodinâmica computacional como exemplo: ICEM CFD, que é uma ferramenta CAD da ANSYS e o SALOME que é um software CAD gratuito de código aberto sobre licença GPL desenvolvido pela Agência Espacial Europeia.

O software OpenFOAM possui um aplicativo chamado blockMesh que tem como função produzir malhas representadas por geometrias simples. Outro software agregado ao OpenFOAM para geração de malhas é o snappyHexMesh, o qual constrói malhas não estruturadas formadas por blocos que se adaptam a superfície da geometria a ser estudada.

A grande vantagem dos softwares citados é possuir uma extensa biblioteca com vários algoritmos para construir, a partir da geometria, a malha numérica onde serão aplicados os métodos numéricos de discretização.

Aplicando o método de volumes finitos à malha, um sistema linear é formado, onde seu tamanho é proporcional ao tamanho da malha gerada. Atualmente problemas com malhas de aproximadamente um milhão ou mais são comuns e a resolução destes sistemas somente se torna possível com o avanço da informática e computação científica nos fornecendo máquinas com processadores cada vez mais poderosos.

A fluidodinâmica computacional pode ser empregada em diversas áreas como por exemplo: Aeroespacial, automobilística, petroquímica, mineração, engenharia ambiental, turbomáquinas, sistemas de agitação e mistura entre outros.

Na indústria petroquímica pode-se destacar os trabalhos dos autores LOPES *et al.* (2011a,b,c) e ROSA (2002, 2008) que utilizaram CFD em seus estudos de modelagem de risers em refinarias de petróleo.

Em meio ambiente cita-se o trabalho de MACHADO (2006) que utilizou a fluidodinâmica computacional na modelagem da dispersão de poluentes em rios.

Com trabalhos na área de agitação e mistura destacam-se os trabalhos de RUDINGER; SPOGIS e NUNHEZ (2003) e SPOGIS (2002, 2007) com simulações em sistemas de tanques de mistura.

Na modelagem de sistemas bifásico gás-líquido pode-se destacar o trabalho de EKAMBARA *et al.* (2008) o qual modelaram a distribuição do fluxo bifásico ar-água co-corrente escoando no interior de um tubo horizontal. Eles compararam os resultados obtidos com dados experimentais retirados de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991), KOCAMUSTAFAOGULLARI e HUANG (1994) e ISKANDRANI e KOJASOY (2001) obtendo resultados quantitativamente bons para dois modelos aplicados, um utilizando a técnica de balanço populacional e o outro modelo considerando o tamanho das bolhas constantes. O modelo de balanço populacional obteve melhores previsões em relação ao outro e pode-se verificar que a fração volumétrica possui um máximo na parte superior do tubo.

Capítulo 4

Discretização em volumes finitos (MVF) no software OpenFOAM

A seguir é apresentado o método dos volumes finitos (MVF), o qual, é o mais utilizado para a discretização das equações de transporte nos atuais softwares de fluidodinâmica computacional, como por exemplo, OpenFOAM.

Existem vários autores que descrevem detalhadamente o método dos volumes finitos entre eles cita-se FERZIGER e PERIC (1996); HIRSCH (1991); VERSTEEG e MALALASEKERA (2007), PATANKAR (1980) e MALISKA (2004). Neste trabalho a discretização em volumes finitos será apresentada conforme OpenCFD (2010b), e é a forma com a qual o software foi programado e reconhece as equações de transporte na sua resolução.

4.1 Discretização no domínio de cálculo

O termo discretização refere-se à aproximação de um problema contínuo, o qual é representado por equações diferenciais parciais, em quantidades discretas. O método dos volumes finitos utiliza-se desta técnica e faz uma discretização dos domínios do espaço, do tempo e das equações de transporte. A discretização no domínio do espaço divide o domínio físico em um conjunto de subdomínios, ou seja, de volumes de controle, conhecidos como células, os quais estão conectados entre si dividindo uma mesma face ou conectados ao limite do domínio, ou seja, ao seu contorno e desta forma criam o que se chama de malha computacional. As células são contíguas, ou seja, elas não coincidem umas com as outras e

preenchem completamente o domínio de cálculo.

A discretização do domínio temporal é utilizada em problemas transientes e pode ser obtida dividindo o espaço de tempo em um conjunto de intervalos de tempo, ou passos de tempo δt . O intervalo de tempo pode mudar durante a solução numérica, manter-se em um valor pré especificado ou até mesmo ser calculado durante a simulação através de critérios de convergência pré estabelecidos, como por exemplo utilizar o critério de convergência baseado no número de Courant-Friedrich-Lewy ou simplesmente número de Courant apresentado por COURANT; FRIEDRICHS e LEWY (1967).

A Figura 4.1 apresenta a discretização no domínio de cálculo, o qual é constituído pelos domínios temporal e espacial discretizados.

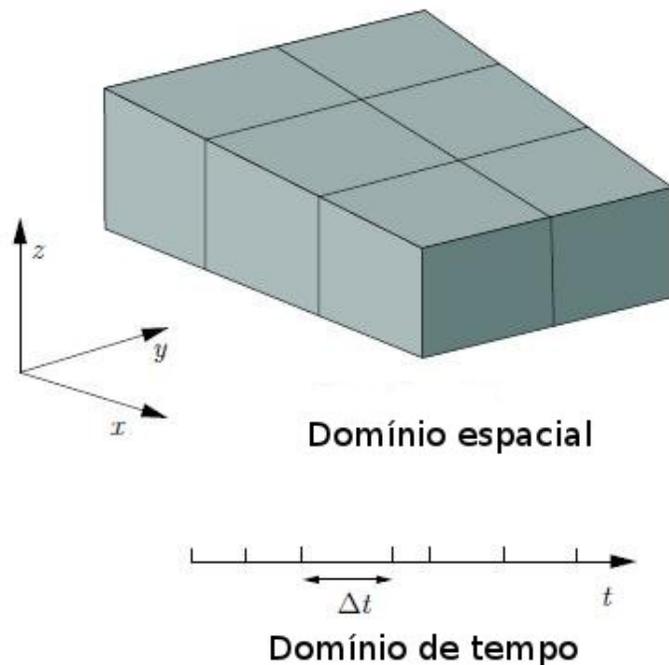


Figura 4.1: Discretização do domínio de cálculo. (Fonte: RUSCHE (2002))

Juntamente com as discretizações do domínio físico e espacial realiza-se a discretização das equações de transporte que governam as leis físicas do problema, gerando um sistema de equações algébricas em termos de quantidades discretas definidos em locais específicos no domínio do espaço.

Na Figura 4.2 são mostradas duas células típicas. Uma das células é delimitada por um conjunto de faces, dando o rótulo genérico f . As faces da célula são divididas em dois grupos: faces internas (entre duas células) e faces do contorno, que coincidem com os limites do domínio espacial. O vetor posição no centro de uma face plana \mathbf{x}_f é definido pela Equação 4.1:

$$\int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) dS = 0 \quad (4.1)$$

No método dos volumes finitos as variáveis dependentes e outras propriedades são armazenadas no centro P da célula conforme pode-se ver através da Figura 4.2.

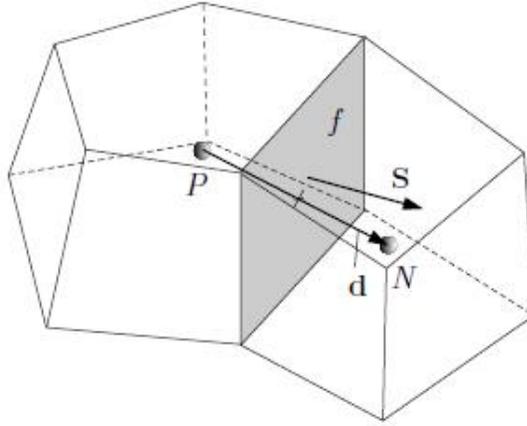


Figura 4.2: Parâmetros utilizados na discretização por volumes finitos (Fonte: RUSCHE (2002))

Na Figura 4.2 é possível definir um vetor posição do centro da célula \mathbf{x}_P conforme a Equação 4.2:

$$\int_{V_p} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV = 0 \quad (4.2)$$

Pode-se também definir o vetor \mathbf{S} como sendo um vetor normal a face e sua magnitude é igual a área da face. Este vetor aponta da célula de interesse P para a célula vizinha N . O vetor unitário normal a face n é definido de acordo com a Equação 4.3:

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{S}}{|\mathbf{S}|} \quad (4.3)$$

E na Figura 4.2 tem-se o vetor \mathbf{d} que aponta do centro da célula de interesse P ao centro da célula vizinha N conforme a Equação 4.4:

$$\mathbf{d} = (\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_P) \quad (4.4)$$

Pode-se dizer que uma malha computacional é ortogonal quando o vetor \mathbf{d} é ortogonal a face plana, ou seja, paralelo ao vetor \mathbf{S} , para cada face na malha.

As bibliotecas do OpenFOAM apresentadas em OpenCFD (2010a) e OpenCFD (2010b), não impõe uma limitação ao número de faces delimitadoras para cada célula. O único requisito é que cada célula deva ser convexa. Este tipo de malha é muitas vezes referida como não estruturada e oferece uma grande liberdade em sua geração e manipulação, em particular, quando a geometria do domínio espacial é complexa ou muda com o tempo, define-se a malha computacional como sendo uma malha não estruturada. Nota-se, no entanto, que no presente estudo apenas malhas estáticas são empregadas. A geometria de uma malha estática não altera com tempo.

O primeiro ponto quando se discretiza as equações é escolher os locais no domínio onde os valores das variáveis dependentes e independentes serão armazenadas.

Existem várias alternativas para se realizar este armazenamento e duas que são típicas para o método dos volumes finitos estão representados na Figura 4.3. Na primeira, as variáveis são armazenadas no centro de cada célula. Esta forma de armazenagem é denominado como campo de volumes (*volume field*). A segunda maneira de armazenagem é denominado (*face field*) campo de faces e as variáveis são armazenadas no centro de cada face. Há ainda uma terceira forma que é mais empregada no método dos elementos finitos onde as variáveis são armazenadas nos pontos nodais do domínio espacial.

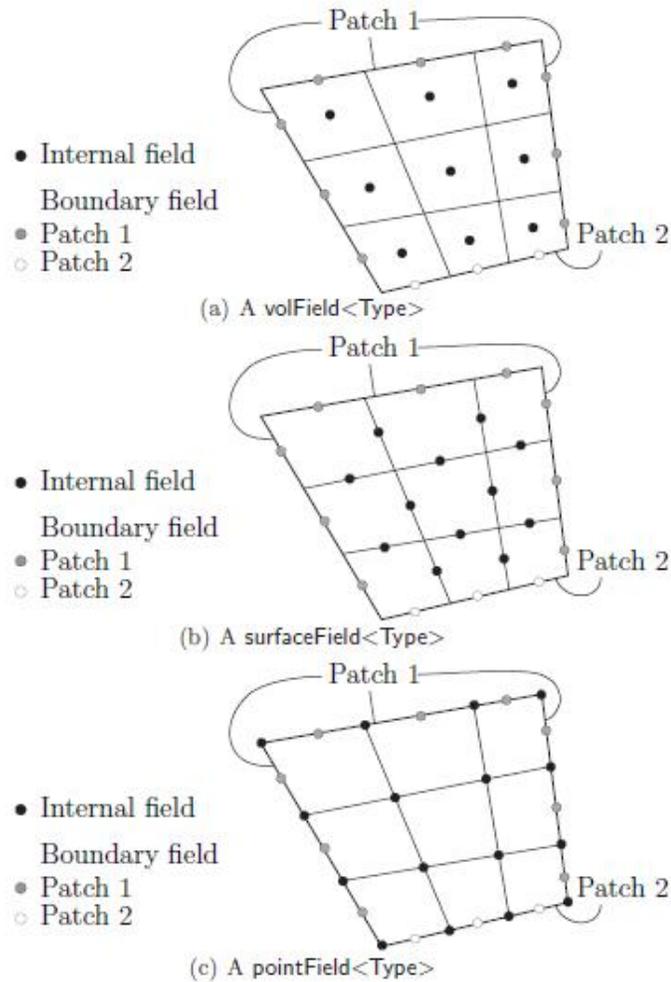


Figura 4.3: Três tipos de argumentos de armazenagem de variáveis. a) Campo de volumes: valores são armazenados no centro das células. b) Campo de faces: valores são armazenados no centro das faces. c) Campo de pontos: valores são armazenados nos pontos nodais.

Enquanto a maioria das propriedades são definidas nos centros das células, algumas são definidas nas faces das células. Existem dois tipos de faces das células pertencentes ao domínio espacial. O primeiro tipo é a face interna que compõe as faces que ligam duas células e o segundo tipo são as faces pertencentes as fronteiras e compreendem as faces que pertencem a uma célula adjacente ao limite do domínio e coincidem com esse limite. As condições de contorno são aplicadas a essas faces definidas nas fronteiras do domínio de cálculo.

4.2 Discretização das equações

A discretização das equações destina-se a transformar uma ou mais equações diferenciais em um sistema de equações algébricas que são expressadas na forma matricial apresentada pela Equação 4.5.

$$[A][X] = [b] \quad (4.5)$$

onde $[A]$ é uma matriz quadrada, $[X]$ é vetor de variáveis dependentes e $[b]$ é o vetor de termos fontes.

A solução deste sistema aproxima-se da solução para as equações originais nos locais pré-determinados no espaço e no tempo. Considere a forma genérica da equação de transporte padrão para qualquer quantidade tensorial ϕ dada pela Equação 4.6.

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi(\phi) \quad (4.6)$$

onde ρ é a densidade do fluido, \mathbf{U} é a velocidade, Γ é a difusividade e $S_\phi(\phi)$ é o termo fonte. Os termos do lado esquerdo na equação padrão representam respectivamente a taxa de mudança por unidade de volume (derivada no tempo) e o fluxo convectivo por unidade de volume (termo convectivo) e os termos do lado direito representam a taxa de transporte devido a difusão (termo difusivo) e a taxa de geração e/ou consumo por unidade de volume (termo fonte).

A discretização em volumes finitos da Equação 4.6 é obtida através da integração sobre o volume de controle V_p e o tempo como mostrado pela Equação 4.7.

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\delta t} \left[\int_{V_P} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV \right] dt \\ = & \int_t^{t+\delta t} \left[\int_{V_P} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV + \int_{V_P} S_\phi(\phi) dV \right] dt \end{aligned} \quad (4.7)$$

As integrais em volume V do termos derivativos são convertidos em integrais na

superfície S no contorno empregando o teorema de Gauss expresso pela Equação 4.8.

$$\int_V (\nabla \cdot \phi) dV = \int_S dS \cdot \phi \quad (4.8)$$

Este teorema é utilizado na Equação 4.7 para discretização de seus termos. A discretização de cada termo será apresentada a seguir.

4.2.1 Derivada temporal

A discretização da derivada temporal $\frac{\partial \rho \phi}{\partial t}$ tal como a descrita na Equação (4.6) é obtida através da integração no volume de controle. Neste estudo o esquema de discretização temporal Euler implícito é utilizado. Este esquema é incondicionalmente estável, mas possui apenas uma precisão de primeira ordem no tempo. Para malhas estáticas empregadas neste estudo e supondo uma variação linear de ϕ dentro de um passo de tempo tem-se para o método de Euler que:

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV \approx \frac{\rho_P^n \phi_P^n - \rho_P^o \phi_P^o}{\Delta t} V_P \quad (4.9)$$

onde

$$\phi^n \equiv \phi(t + \Delta t) \quad (4.10)$$

é o novo valor da variável no passo de tempo que está sendo resolvido e

$$\phi^o \equiv \phi(t) \quad (4.11)$$

é o valor da variável no tempo anterior ao atual passo de tempo.

4.2.2 Termo convectivo

O termo convectivo $\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi)$ é integrado sobre o volume de controle e linearizado transformando a integral de volume em integral de superfície utilizando o Teorema de Gauss

conforme a Equação 4.12.

$$\int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV = \int_S dS \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) \approx \sum_f S \cdot (\rho \mathbf{U})_f \phi_{f(F,S)} = \sum_f F \phi_{f(F,S)} \quad (4.12)$$

onde F é o fluxo de massa através da face f definido como $F = \mathbf{S} \cdot (\rho \mathbf{U})_f$ e pode ser avaliado usando uma variedade de esquemas descritos as seguir:

Diferenças centrais: É um esquema de interpolação de segunda ordem considerado de alta precisão. Este esquema pode ser conferido pela Equação 4.13.

$$\phi_{f(CD)} = f_x \phi_P + (1 - f_x) \phi_N \quad (4.13)$$

onde

$$f_x \equiv \frac{|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_N|}{|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_N| + |\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_P|} \quad (4.14)$$

em que x_N é a distância entre f e o centro da célula N e x_P é a distância entre o centro da célula P e N . O subíndice CD significa que o fluxo foi discretizado por diferenças centrais.

Apesar de ser esquema de discretização de alta ordem é um esquema que pode ocasionar instabilidades numéricas dificultando a convergência durante a simulação do problema.

Upwind: Este esquema determina ϕ_f de acordo com a direção do fluxo conforme descrito pela Equação 4.15.

$$\phi_{f(F,UD)} = \begin{cases} \phi_P & \text{se } F \geq 0 \\ \phi_N & \text{se } F < 0 \end{cases} \quad (4.15)$$

em que UD representa a discretização aplicando o esquema upwind.

Diferença mistas: Esse esquema combina os esquema upwind e diferenças centrais na tentativa de preservar a delimitação e manter uma razoável precisão.

$$\phi_{f(F,BD,\gamma)} = (1 - \gamma)(\phi_{f(F,UD)}) + \gamma(\phi_{f(CD)}) \quad (4.16)$$

Nesta função o fator $0 < \gamma < 1$ determina o quanto a difusão numérica será introduzida. Várias expressões tem sido propostas para o coeficiente γ em que se destacam os trabalhos de JASAK (1996) e JASAK *et al.* (1999).

4.2.3 Termo difusivo

O termo difusivo $\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)$ é integrado sobre um volume de controle e linearizado de forma similar ao termo convectivo aplicando o Teorema de Gauss de acordo com a Equação 4.17.

$$\int_V \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV = \int_S dS \cdot (\Gamma \nabla \phi) \approx \sum_f \Gamma_f S \cdot (\nabla \phi)_f \quad (4.17)$$

Esta operação somente é possível pelo fato de Γ ser um escalar.

Para malhas ortogonais podemos tomar a discretização do gradiente na face de forma implícita quando o vetor distância \mathbf{d} entre o centro da célula de interesse P e o centro da célula vizinha N é ortogonal a superfície plana da face, isto é:

$$S_f \cdot (\nabla \phi)_f = |S_f| \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}|} \quad (4.18)$$

Entretanto para malhas não ortogonais um termo adicional para a correção da não-ortogonalidade deve ser introduzido.

$$S \cdot \nabla_f \phi = |\Delta| \nabla_f^\perp \phi + \mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f \quad (4.19)$$

em que $|\Delta| \nabla_f^\perp \phi$ e $\mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f$ são as contribuições ortogonal e não ortogonal respectivamente.

Neste estudo a aproximação descrita por JASAK (1996) é utilizada.

4.2.4 Gradiente

O gradiente pode ser avaliado de várias maneiras, a se destacar as duas a seguir:

Integração gaussiana: Esta operação produz um gradiente no centro da célula. A discretização é obtida aplicando método padrão do Teorema de Gauss para a integral no volume de controle.

$$\int_V \nabla \phi dV = \int_S dS \phi \approx \sum_f S \phi_f \quad (4.20)$$

onde o valor ϕ_f na face f pode ser avaliado de várias formas.

Gradiente normal a face: É o produto interno do gradiente na face e o vetor unitário \mathbf{n} normal a face, isto é:

$$\nabla_f^\perp \phi = \mathbf{n} \cdot \nabla_f \phi \quad (4.21)$$

O gradiente normal a face pode ser aproximado usando o seguinte esquema:

$$\nabla_f^\perp \phi = \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}|} \quad (4.22)$$

Esta aproximação de segunda ordem é precisa quando o vetor \mathbf{d} entre o centro da célula de interesse P e o centro de uma célula vizinho N é ortogonal a superfície da face, ou seja, paralelo a S . No caso de malhas não-ortogonais, um termo de correção poderia ser introduzido.

4.2.5 Termo fonte

Termos fonte $S_\phi(\phi)$ podem ser geralmente representados com uma função de ϕ . Antes da discretização, o termo é linearizado conforme a Equação 4.23.

$$S_\phi(\phi) = \phi S_I + S_E \quad (4.23)$$

onde S_E e S_I dependem de ϕ . O termo é então integrado no volume de controle de acordo com a Equação 4.24.

$$\int_V S_\phi(\phi) dV = S_I V_P \phi_P + S_E V_P \quad (4.24)$$

4.3 Discretização temporal

Para a discretização no domínio do tempo tomemos a equação de transporte padrão na sua forma integral apresentada pela Equação 4.7.

Substituindo as Equações 4.9, 4.12, 4.17 e 4.24 e assumindo que os volumes são fixos ao longo do tempo, pode-se reescrever a Equação 4.7 obtendo-se a Equação 4.25.

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\delta t} \left[\frac{\rho_P^n \phi_P^n - \rho_P^o \phi_P^o}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_{f(F,S)} \right] dt \\ = & \int_t^{t+\delta t} \left[\sum_f \Gamma_f S \cdot (\nabla \phi)_f + S_I V_P \phi_P + S_E V_P \right] dt \end{aligned} \quad (4.25)$$

Capítulo 5

Formulação do modelo.

Neste capítulo serão apresentadas as equações de transporte de quantidade de movimento, energia e massa que descrevem o modelo de escoamento de petróleo no interior do forno de pré-aquecimento.

Além das equações de transporte, outras equações que descrevem modelos para cálculo de alguns parâmetros também foram aplicadas quando tal parâmetro foi considerado com alguma dependência em relação à variável de interesse. Outros parâmetros foram considerados constantes devido a dificuldade de se ajustar um modelo adequado para sua previsão ou pelo fato de não se encontrar na literatura modelos que descrevam o comportamento adequado a propriedade.

São exemplos de parâmetros utilizados a viscosidade, condutividade térmica, difusividade térmica, difusividade mássica, coeficiente convectivo de transferência de energia, entre outros.

As equações são descritas para o sistema bifásico e multicomponente, levando-se em consideração uma rede cinética para craqueamento térmico baseada na especificação SARA para caracterizar as frações dos sete pseudocomponentes que compõe o petróleo bruto.

O sistema bifásico será constituído por uma fase líquida representada pelo petróleo bruto e por uma fase gasosa que corresponde aos gases gerados durante o processo de aquecimento do petróleo. Nesse sistema as fases são tratadas como duas fases contínuas interdispersas e uma aproximação através de uma modelagem euleriana-euleriana será utilizada.

A rede cinética corresponde ao craqueamento dos componentes do petróleo em fase

líquida e portanto o cálculo das concentrações dos pseudocomponentes devem ser aplicadas somente na fase líquida. A característica multicomponente não será abordada na fase gasosa nesse estudo e portanto somente sua fração volumétrica será calculada. Em estudos futuros é aconselhável caracterizar a composição da fase gasosa gerada, e se possível utilizar uma rede cinética que descreva as reações envolvendo os componentes que constituem o gás formado.

No transporte de energia as equações serão descritas para calcular a temperatura como variável de análise. A geração e consumo de energia devido ao craqueamento térmico não serão levados em consideração, onde somente a energia devido a mudança de fase causada pela vaporização dos pseudocomponentes constituirão o termo fonte.

Nas equações de transporte de massa multicomponentes, as frações mássicas dos pseudocomponentes serão as variáveis a serem calculadas. Seu termo fonte é representado pela geração e consumo das frações devido à reação de craqueamento térmico, a qual é representada através de uma rede cinética que foi utilizada por MENDONÇA FILHO (1998).

A mudança de fase será considerada aplicando modelos de vaporização. A ideia é poder simular o escoamento do petróleo bruto entrando no forno somente em fase líquida e ao longo do tubo, com o ganho de calor proveniente das paredes, se aquecer atingindo as temperaturas de saturação que permitem as frações de pseudocomponentes constituintes do petróleo vaporizar.

Esses modelos de vaporização são extremamente complexos, pois devem abordar a vaporização devido ao contato do líquido com o sólido quente, que nesse caso é a parede interna do tubo e assim ser descrito por um modelo de ebulição na parede (*wall boiling*), que basicamente deve levar em consideração as energias de formação e desprendimento das bolhas. Esses modelos de ebulição podem ser conferidos em (TONG e TANG, 1997; GHIAASIAAN, 2008; BERGMAN, 2011). Além da característica multicomponente do petróleo onde cada fração de hidrocarbonetos que o constitui possui uma temperatura de saturação e é dependente de um equilíbrio termodinâmico ao gerar a fase gasosa, levando em consideração as temperaturas, pressões e composições das fases. Devida a essa complexidade, nesse trabalho a mudança de fase será tratada de uma forma mais simples. Primeiramente utilizará uma abordagem simplificada para a vaporização considerando o petróleo como uma substância simples e posteriormente utilizar um modelo ajustado a dados experimentais de termoanálises para caracterizar a mudança de fase. Nos dois casos como simplificação não serão consideradas as energias referentes à ebulição na parede e nem o equilíbrio termodinâmico será abordado.

5.1 Modelo de dois fluidos

Segundo ISHII e HIBIKI (2011) o modelo de dois fluidos anteriormente descrito em ISHII (1975) e ISHII e MISHIMA (1984) foi formulado para considerar cada fase separadamente. Assim, o modelo é expressado em termos de dois conjuntos de equações que descrevem o transporte de massa, quantidade de movimento e energia de cada fase. Apesar de serem consideradas separadamente, a dependência entre elas são consideradas nos termos de interação nas equações de balanço.

Na formulação matemática foram utilizados como referências BIRD *et al.* (2004), MALISKA (2004), ANSYS CFX-Solver theory guide (2009), BRENNEN (2005), GIDASPOW (1994), PROSPERETTI e TRYGGVASON (2007).

Consideram-se duas fases (gasosa e líquida) escoando simultaneamente no interior de um tubo cilíndrico. A fase líquida é a fase contínua e a fase gasosa a fase dispersa. Essa abordagem é definida como modelo de dois fluidos.

Nesta abordagem a fase dispersa é tratada como uma segunda fase contínua interligada e interagindo com a fase contínua. Ou seja, é considerado que as fases podem coexistir na mesma posição interpenetradas em que uma fração volumétrica ε é introduzida no conjunto de variáveis da equação, sendo definida como a probabilidade de cada fase estar presente em certo instante de tempo e região do espaço. As equações de conservação efetivas (massa, quantidade de movimento e energia) são desenvolvidas para os dois fluidos, incluindo nessas equações as trocas de massa, quantidade de movimento e energia entre as duas fases. Desta maneira o modelo de dois fluidos negligencia a natureza discreta da fase dispersa aproximando seus efeitos a uma fase contínua.

Na modelagem do sistema bifásico de dois fluidos é definida a fração volumétrica das fases segundo a Equação 5.1:

$$\varepsilon_l + \varepsilon_g = 1 \quad (5.1)$$

O Fluxo Volumétrico por unidade de área é dado pela Equação 5.2 a seguir:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_l + \mathbf{j}_g = \sum \mathbf{j}_\alpha \quad (5.2)$$

No qual \mathbf{j} é o fluxo volumétrico total, o qual é a soma do fluxo volumétrico da fase

líquida \mathbf{j}_l e do fluxo volumétrico da fase gasosa \mathbf{j}_g .

O fluxo de massa de cada fase é apresentado pela Equação 5.3:

$$\phi_\alpha = \rho_\alpha \mathbf{j}_\alpha \quad (5.3)$$

onde ρ_α representa a massa específica da fase.

Para um elemento infinitesimal de volume pode-se definir o fluxo volumétrico através da Equação 5.4:

$$\mathbf{j}_\alpha = \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \quad (5.4)$$

onde \mathbf{U}_α representa a velocidade da fase.

Então reescrevendo a equação do fluxo de massa para a fase obtêm-se a Equação 5.5:

$$\phi_\alpha = \rho_\alpha \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \quad (5.5)$$

Portanto, na obtenção das equações diferenciais efetivas devem-se realizar os balanços de massa, quantidade de movimento e energia para cada fase em um elemento de volume.

5.2 Conservação de massa da fase

As simulações de escoamentos turbulentos são geralmente realizadas pela solução das equações de conservação médias, as quais descrevem as propriedades médias do fluxo.

Pode-se escrever a equação da continuidade para cada fase em termos da derivada substantiva conforme a Equação 5.6

$$\frac{D(\varepsilon_\alpha \rho_\alpha)}{Dt} + \varepsilon_\alpha \rho_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{U}_\alpha) = \Gamma_\alpha \quad (5.6)$$

Pode-se definir a taxa mássica total para mudança de fase como:

$$\Gamma_\alpha = \Gamma_{cond} - \Gamma_{evap} \quad (5.7)$$

onde Γ_{cond} e Γ_{evap} são respectivamente a taxa de mudança de fase por condensação e por vaporização.

Abrindo a derivada substantiva escreve-se a Equação 5.8.

$$\varepsilon_\alpha \frac{D(\rho_\alpha)}{Dt} + \rho_\alpha \frac{D(\varepsilon_\alpha)}{Dt} + \varepsilon_\alpha \rho_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{U}_\alpha) = \Gamma_\alpha \quad (5.8)$$

Nesse ponto pode-se escrever o termo para a derivada substantiva da fração volumétrica conforme a Equação 5.9.

$$\frac{D(\varepsilon_\alpha)}{Dt} = \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla(\varepsilon_\alpha) \quad (5.9)$$

agora é necessário fazer a operação conforme a Equação 5.10

$$\nabla(\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{U}_\alpha) + \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla(\varepsilon_\alpha) \quad (5.10)$$

da Equação 5.10 isola-se o termo $\mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla(\varepsilon_\alpha)$

$$\mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla(\varepsilon_\alpha) = \nabla(\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) - \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{U}_\alpha) \quad (5.11)$$

Substituindo a Equação 5.11 na Equação 5.9 tem-se

$$\frac{D(\varepsilon_\alpha)}{Dt} = \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) - \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{U}_\alpha) \quad (5.12)$$

E finalmente substituindo a Equação 5.12 na Equação 5.8 obtêm-se a Equação 5.13

$$\varepsilon_\alpha \frac{D(\rho_\alpha)}{Dt} + \rho_\alpha \left[\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) - \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{U}_\alpha) \right] + \varepsilon_\alpha \rho_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{U}_\alpha) = \Gamma_\alpha \quad (5.13)$$

Desta forma podemos escrever a equação de conservação de massa para um sistema incompressível com mudança de fase conforme a Equação 5.14:

$$\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = \frac{\Gamma_\alpha}{\rho_\alpha} \quad (5.14)$$

Tomando a equação de conservação de massa podemos escrevê-la para para as duas fases

$$\frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \mathbf{U}_l) = \frac{\Gamma_l}{\rho_l} \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \mathbf{U}_g) = \frac{\Gamma_g}{\rho_g} \quad (5.16)$$

Substituindo a relação da fração volumétrica $\varepsilon_l = 1 - \varepsilon_g$ na equação de conservação de massa da fase líquida podemos reescrevê-la através dos passos a seguir.

$$\frac{\partial(1 - \varepsilon_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}_l(1 - \varepsilon_g)) = \frac{\Gamma_l}{\rho_l} \quad (5.17)$$

$$\frac{\partial(1)}{\partial t} + \frac{\partial(-\varepsilon_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}_l) + \nabla \cdot (-\mathbf{U}_l \varepsilon_g) = \frac{\Gamma_l}{\rho_l} \quad (5.18)$$

Simplificando a Equação 5.18 tem-se.

$$-\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{U}_l \varepsilon_g) + \nabla \cdot (\mathbf{U}_l) = \frac{\Gamma_l}{\rho_l} \quad (5.19)$$

Subtraindo a Equação 5.19 da 5.16 obtêm-se

$$2\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}_g \varepsilon_g) + \nabla \cdot (\mathbf{U}_l \varepsilon_g) - \nabla \cdot (\mathbf{U}_l) = \frac{\Gamma_g}{\rho_g} - \frac{\Gamma_l}{\rho_l} \quad (5.20)$$

Organizando o lado direito da Equação 5.20 referente ao termo fonte de geração e consumo de massa da fase.

$$\frac{\Gamma_g}{\rho_g} - \frac{\Gamma_l}{\rho_l} = \frac{\rho_l \Gamma_g - \rho_g \Gamma_l}{\rho_g \rho_l} \quad (5.21)$$

Sabe-se que na vaporização a massa perdida pela fase líquida é convertida em massa da fase gasosa ou seja $\Gamma_l = -\Gamma_g$ e portanto.

$$\frac{\Gamma_g}{\rho_g} - \frac{\Gamma_l}{\rho_l} = \frac{\rho_l \Gamma_g + \rho_g \Gamma_g}{\rho_g \rho_l} \quad (5.22)$$

Finalmente

$$\frac{\Gamma_g}{\rho_g} - \frac{\Gamma_l}{\rho_l} = \frac{(\rho_l + \rho_g) \Gamma_g}{\rho_g \rho_l} \quad (5.23)$$

Substituindo a Equação 5.23 na 5.20 chega-se a:

$$2\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}_g \varepsilon_g) + \nabla \cdot (\mathbf{U}_l \varepsilon_g) - \nabla \cdot (\mathbf{U}_l) = \frac{(\rho_l + \rho_g) \Gamma_g}{\rho_g \rho_l} \quad (5.24)$$

Essa forma de se escrever a equação de conservação de massa para as fases tem como objetivo dar maior estabilidade numérica. A Equação 5.24 não será utilizada nesse trabalho e todo o equacionamento anteriormente apresentado até chegar à Equação 5.24 constará nesse trabalho como um exemplo que pode ser utilizado.

A seguir é apresentada a formulação da equação de massa das fases que foi utilizada no cálculo da fração volumétrica.

Em RUSCHE (2002) é adota a formulação descrita por WELLER (2002) o qual reorganizou a equação da continuidade para fase gasosa da seguinte forma.

Primeiramente utiliza-se o conceito de velocidade relativa das fases a seguir.

$$\mathbf{U}_r = \mathbf{U}_g - \mathbf{U}_l \quad (5.25)$$

Através da Equação 5.25 isola-se a velocidade do líquido (\mathbf{U}_l).

$$\mathbf{U}_l = \mathbf{U}_g - \mathbf{U}_r \quad (5.26)$$

Nesse ponto adota-se o conceito da velocidade média das fases juntas.

$$\mathbf{U} = \varepsilon_g \mathbf{U}_g + \varepsilon_l \mathbf{U}_l \quad (5.27)$$

Substituindo a velocidade do líquido dada pela Equação 5.26 na Equação 5.27 obtêm-se

$$\mathbf{U} = \varepsilon_g \mathbf{U}_g + \varepsilon_l (\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_r) \quad (5.28)$$

Agrupando os termos referentes à velocidade do gás \mathbf{U}_g tem-se.

$$\mathbf{U} = (\varepsilon_g \mathbf{U}_g + \varepsilon_l \mathbf{U}_g) - \varepsilon_l \mathbf{U}_r \quad (5.29)$$

E através da propriedade distributiva obtêm-se.

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}_g (\varepsilon_g + \varepsilon_l) - \varepsilon_l \mathbf{U}_r \quad (5.30)$$

Como $\varepsilon_g + \varepsilon_l = 1$ chega-se finalmente a relação da velocidade do gás em função das velocidades relativas e médias.

$$\mathbf{U}_g = \mathbf{U} + \varepsilon_l \mathbf{U}_r \quad (5.31)$$

Finalmente substituindo a Equação 5.31 em 5.16.

$$\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} + \nabla \cdot ((\mathbf{U} + \varepsilon_l \mathbf{U}_r) \varepsilon_g) = \frac{\Gamma_g}{\rho_g} \quad (5.32)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \varepsilon_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_l \mathbf{U}_r \varepsilon_g) = \frac{\Gamma_g}{\rho_g} \quad (5.33)$$

Substituindo $\varepsilon_l = 1 - \varepsilon_g$ na Equação 5.33 finalmente chega-se a expressão final para o cálculo da fração volumétrica da fase gasosa.

$$\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \varepsilon_g) + \nabla \cdot (\mathbf{U}_r \varepsilon_g (1 - \varepsilon_g)) = \frac{\Gamma_g}{\rho_g} \quad (5.34)$$

Após o cálculo da fração volumétrica do gás pela Equação 5.34 calcula-se a fração volumétrica do líquido através da relação.

$$\varepsilon_l = 1 - \varepsilon_g \quad (5.35)$$

5.3 Transporte de quantidade de movimento gás-líquido

O equacionamento utilizado para descrever o transporte de quantidade de movimento é apresentado nessa seção. RUSCHE (2002) descreve em detalhes a modelagem para sistema bifásico Euleriano-Euleriano aplicado a sistemas dispersos levando-se em consideração altas frações volumétricas, mas seu sistema não considerava a mudança de fase. Seu trabalho gerou um solver bifásico conhecido como *twoPhaseEulerFoam* o qual foi implementado no software de CFD OpenFOAM. O *twoPhaseEulerFoam* foi o código base para a implementação do código utilizado neste trabalho.

As equações médias para o transporte de quantidade de movimento são apresentadas pela Equação 5.36:

$$\frac{\partial \varepsilon_\alpha \rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha \mathbf{U}_\alpha) + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \rho_\alpha \mathbf{R}_\alpha^{ef}) = -\varepsilon_\alpha \nabla p + \varepsilon_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} + \mathbf{M}_\alpha \quad (5.36)$$

em que o subscrito α denota a fase, ε é a fração volumétrica, \mathbf{R}_α^{ef} é a combinação das tensões viscosas e turbulentas, \mathbf{M}_α é o termo de transferência de quantidade de movimento médio entre as fases.

A troca de quantidade de quantidade de movimento entre as fases se relacionam de maneira oposta, como $\mathbf{M}_g = -\mathbf{M}_l$ e pode ser aplicada para todas as forças.

5.3.1 Transferência de quantidade de movimento interfacial

Nesta seção será apresentada uma breve descrição das forças de quantidade de movimento interfacial que são consideradas no modelo deste trabalho. Assim a transferência de quantidade de movimento entre as fases pode ser representada pelas suas devidas componentes como indicado na Equação 5.37:

$$\frac{\mathbf{M}_\alpha V}{\varepsilon} = F_d + F_l + F_{vm} + F_o \quad (5.37)$$

onde V indica o volume nas equações diferenciais parciais e F_d , F_l e F_{vm} são respectivamente as forças de arraste, sustentação e massa virtual respectivamente representadas pelas

Equações 5.38, 5.42 e 5.44, enquanto as outras forças F_o podem na maioria das vezes serem negligenciadas.

Dentre as demais forças pode-se destacar a força interfacial de dispersão turbulenta F_{td} , a qual foi utilizada na seção de validação do escoamento disperso e, por isso, será comentada nesse capítulo.

Força de arraste

Uma partícula imersa em um fluido em movimento sofre o efeito de uma força de arraste a qual é causada por dois mecanismos. O primeiro mecanismo é provocado pelas tensões cisalhantes viscosas ao redor da partícula conhecida como fricção por contato e o outro mecanismo é conhecido como arraste de forma provocada por uma distribuição de pressão desigual que envolve a partícula em movimento, e está associado com o tamanho da bolha e sua forma.

RUSCHE (2002) destaca que um dos trabalhos mais importantes de Newton foi sobre as leis que governam a queda livre de partículas no ar medindo a velocidade terminal de partículas com diferentes diâmetros lançadas da catedral de St. Paul em Londres (NEWTON, 1686).

A força de arraste sobre uma bolha é usualmente representada como uma função da velocidade relativa (\mathbf{U}_r); de sua área projetada (A) e de um coeficiente adimensional de arraste C_d como a seguir.

$$F_d = \frac{1}{2} \rho_l A C_d |\mathbf{U}_r| \mathbf{U}_r \quad (5.38)$$

A área projetada é definida como a área normal à velocidade relativa dividida pelo volume da esfera de mesmo volume que a partícula. Para uma partícula esférica pode-se definir A como:

$$A = \frac{A_p}{V_p} = \frac{\pi d^2 / 4}{\pi d^3 / 6} \quad (5.39)$$

O movimento de partículas em um meio contínuo tem sido estudado por diversos

autores como por exemplo PEEBLES e GRABER (1953), HARMATHY (1960) e WALLIS (1974)

A Figura 5.1 apresenta o coeficiente de arraste em função do número de Reynolds.

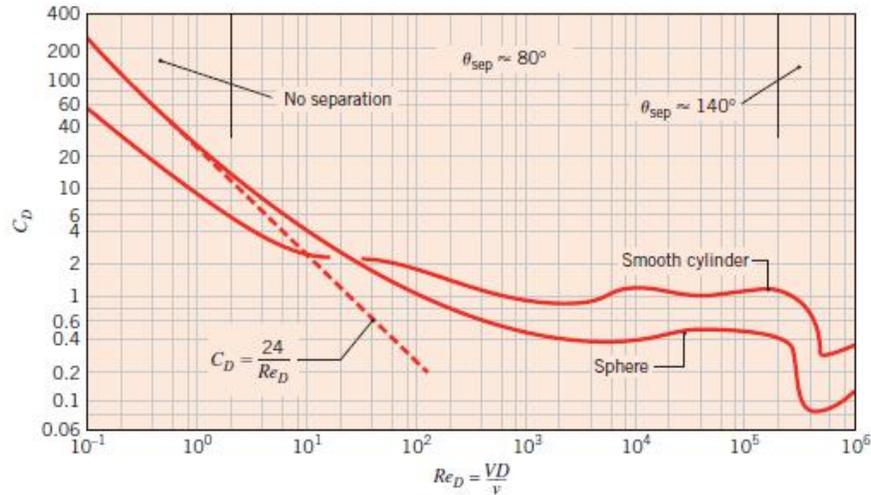


Figura 5.1: Coeficiente de arraste na seção transversal de um cilindro e em uma partícula esférica. Os ângulos de separação da camada limite são para o cilindro (retirado de SCHLICHTING (2000) e modificado por BERGMAN (2011)).

O coeficiente de arraste C_d depende das características do escoamento ao redor da partícula e é uma função do número de Reynolds baseado no diâmetro da partícula (Re_p) definido pela Equação 5.40.

$$Re_p = \frac{\rho_l |\mathbf{U}_r| d_p}{\mu_l} \quad (5.40)$$

O coeficiente de arraste C_d é calculado pelo modelo para coeficiente de arraste apresentado por SCHILLER e NAUMANN (1933) e é descrito pela Equação 5.41

$$C_d = \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,687}) \quad (5.41)$$

Força de sustentação ou ascensão

Em escoamentos sob corpos, a variação repentina dos respectivos campos de velocidade e pressão acaba induzindo a um movimento rotacional no eixo do corpo, acarretando em uma drástica mudança nas forças cisalhantes nesta localização. Os vórtices que estão na interface entre fluidos provocam assim uma ação de empuxo, correspondente a sustentação ou ascensão, dependendo da direção do movimento (KULKARNI, 2008).

RUSCHE (2002) e SILVA (2008) descrevem como uns dos primeiros registros de atuação da força de sustentação sobre uma partícula o trabalho de POISEUILLE (1841) ao constatar que as células do sangue permaneciam afastadas dos capilares. As causas deste fenômeno ficaram por muitos anos sem explicação, até que SEGRÉ e SILBERBERG (1961, 1962) realizaram estudos com esferas de diversos tamanhos suspensas em um tubo com condições de escoamento de Poiseuille e observaram um leve escoamento radial a qual atribuíram ser provocado por uma força lateral atuando nas partículas.

HILL (1998) descreve os trabalhos de DREW; CHENG e LAHEY (1979) e (DREW e LAHEY, 1987, 1990) que derivaram uma expressão para o cálculo da força de sustentação apresentada pela Equação 5.42.

$$F_l = C_l \varepsilon_\alpha \rho_\alpha V \mathbf{U}_r \times (\nabla \times \mathbf{U}_r) \quad (5.42)$$

em que C_l é o coeficiente de sustentação adimensional.

A Figura 5.2 mostra a variação do coeficiente de sustentação sobre uma esfera lisa e esférica em função do número de Reynolds.

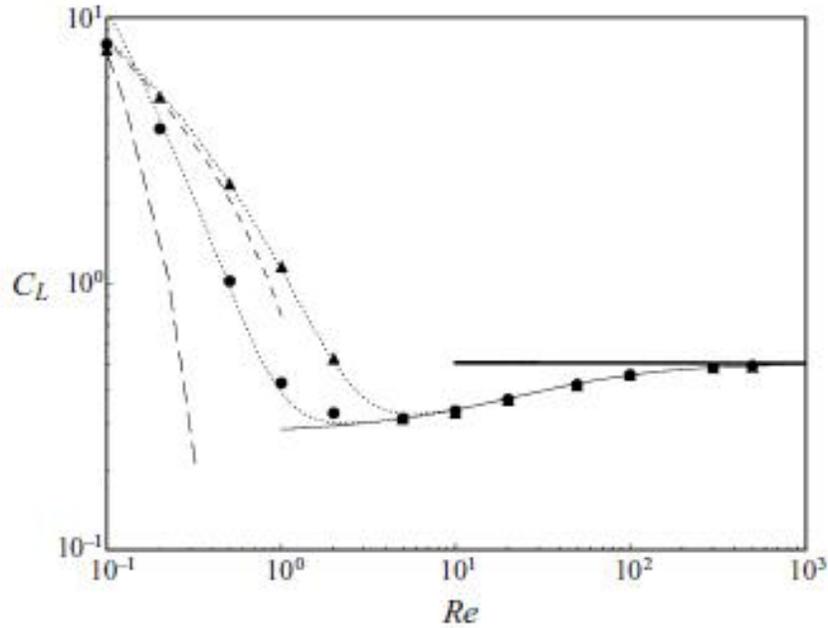


Figura 5.2: Coeficiente de sustentação para uma esfera rígida e lisa em função do número de Reynolds. Linha sólida: solução analítica para escoamento invíscido; linhas pontilhadas: ajuste da curva para os resultados numéricos com $S_r = 0,02(\bullet)$ e $S_r = 0,2(\blacktriangle)$; linhas tracejadas: solução analítica para *creeping flow* com $S_r = 0,02$ e $S_r = 0,2$ (retirado de LEGENDRE e MAGNAUDET (1998))

De acordo com os experimentos de LEGENDRE e MAGNAUDET (1998) para uma bolha esférica em escoamento invíscido ($Re > 10^2$) pode-se adotar um coeficiente de sustentação igual a 0,5. Para escoamentos com número de Reynolds menores que 10^2 o coeficiente de sustentação passa a depender das características do escoamento ao redor da bolha passando a depender do número de Reynolds e da taxa de cisalhamento adimensional S_r .

A taxa de cisalhamento adimensional S_r pode ser descrita conforme a Equação 5.43.

$$S_r = \frac{|\nabla \mathbf{U}_c| d}{\mathbf{U}_r} \quad (5.43)$$

em que \mathbf{U}_c é a velocidade da fase contínua, \mathbf{U}_r é a velocidade relativa entre a fase contínua e a fase dispersa e d é o diâmetro da fase dispersa.

WANG *et al.* (1987) estudaram a distribuição de fração volumétrica em um tubo vertical com fluxos de ar e água nas direções ascendentes e descendentes. Os autores fazem

uma análise da magnitude de C_l para fluxos turbulentos a altos números de Reynolds. Simplificando as equações de quantidade de movimento bifásico eles obtiveram uma equação da distribuição da fração volumétrica no tubo para escoamento totalmente desenvolvido. Utilizando os valores medidos das frações volumétricas e das distribuições de tensões foi possível inferir os valores de C_l . Analisando os dados para um grande número de casos eles observaram que o coeficiente de sustentação (C_l) é função da fração volumétrica local; do número de Reynolds da partícula (Re_p); do gradiente de velocidade; do diâmetro da bolha e da velocidade relativa. Encontraram valores para C_l variando entre 0,01 e 0,1.

Já nos estudos de LANCE e LOPEZ de BERTODANO (1992) os quais mediram a força de sustentação em uma bolha isolada sobre a influência de um fluxo turbulento, obtiveram um valor para o coeficiente de sustentação de aproximadamente 0,25.

Devido as incertezas no cálculo e a inexistência de um modelo que possa fazer uma previsão satisfatória do coeficiente de sustentação o valor clássico de 0,5 é adotado neste trabalho.

Força de massa virtual

A força de massa virtual pode ser definida como a quantidade de movimento necessária para deslocar a massa da fase contínua pela passagem de uma bolha. Esta parcela de massa deverá ser acelerada em relação à aceleração que tinha originalmente dentro da fase contínua, para atingir a velocidade da bolha. Desta forma, o fenômeno pode ser visto como se a bolha virtualmente aumentasse a sua massa, daí o nome dado a esta força. (PALADINO, 2005).

A forma geral da força de massa virtual com a precisão de um coeficiente empírico pode ser inicialmente encontrada em LAMB (1945), PRANDTL (1952) e MILNE-THOMSON (1968) podendo ser descrita matematicamente conforme a Equação 5.44

$$F_{vm} = C_{vm}\rho_l V \left(\frac{D_l \mathbf{U}_l}{Dt} - \frac{D_g \mathbf{U}_g}{Dt} \right) \quad (5.44)$$

onde C_{vm} é o coeficiente de massa virtual e o operador $\frac{D(\cdot)}{Dt}$ é conhecido como derivada

substantiva ou material. A Equação 5.45 indica derivada substantiva:

$$\frac{D(\cdot)}{Dt} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla(\cdot) \quad (5.45)$$

Para partículas esféricas usualmente é adotado o valor de $C_{vm} = 0,5$. DHOTRE *et al.* (2009) destaca que o coeficiente de massa virtual geralmente é dependente do formato para fases dispersas. Nestes casos pode-se adotar um modelo específico como por exemplo o proposto por TOMIYAMA *et al.* (1995) onde o valor do coeficiente de massa virtual é função do número de Eötvös definido pela Equação 5.46

$$E_o = \frac{\Delta\rho \mathbf{g} L^2}{\sigma} \quad (5.46)$$

em que E_o é o número de Eötvös, $\Delta\rho$ é a diferença de densidade entre as duas fases, \mathbf{g} é a aceleração da gravidade, L é um comprimento característico e σ é a tensão superficial.

Força de dispersão turbulenta

Nesse trabalho será utilizada a mesma formulação da força de dispersão turbulenta do trabalho de EKAMBARA *et al.* (2012), os quais utilizaram a formulação derivada de LOPEZ de BERTODANO (1992). Destacam que esta força é baseada fazendo uma analogia com o movimento molecular do fluido. A turbulência induz a dispersão e é uma função da energia cinética turbulenta k e do gradiente de da fração volumétrica do líquido como apresentado pela Equação 5.47.

$$F_{td} = C_{td}\rho_l k \nabla \alpha_l \quad (5.47)$$

5.3.2 Fechamento das forças interfaciais

Nesse trabalho foi utilizado um modelo proposto por WELLER *et al.* (1998) para maiores faixas de frações volumétricas com o objetivo de aumentar a estabilidade no cálculo

para situações onde $\varepsilon_\alpha \rightarrow 0$ mostrado a seguir na Equação 5.46.

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_\alpha = & \frac{3}{4}\varepsilon_l\varepsilon_g \left(f_g \frac{C_{dg}\rho_l}{d_g} + f_l \frac{C_{dl}\rho_g}{d_l} \right) |\mathbf{U}_r| \mathbf{U}_r && \text{arrasto} \\
& + \varepsilon_g \varepsilon_l f_g (C_{lift,g}\rho_l \mathbf{U}_r \times (\nabla \times \mathbf{U}_g)) \\
& + \varepsilon_g \varepsilon_l f_l (C_{lift,l}\rho_g \mathbf{U}_r \times (\nabla \times \mathbf{U}_l)) && \text{lift} \\
& + \varepsilon_g \varepsilon_l (f_g C_{vm,g}\rho_l + f_l C_{vm,l}\rho_g) \left(\frac{D_l \mathbf{U}_l}{Dt} - \frac{D_g \mathbf{U}_g}{Dt} \right) && \text{massa virtual}
\end{aligned} \tag{5.48}$$

Na seção onde se trata da validação do escoamento líquido-gás, também deve-se considerar na implementação do modelo a força de dispersão turbulenta.

5.3.3 Formulação intensiva na fase.

Quando alguma das frações volumétricas tende a zero $\varepsilon_\alpha \rightarrow 0$ pode-se dizer que as equações de conservação de movimento tornam-se singulares. Para evitar este problema RUSCHE (2002) descreve o procedimento apresentado por WELLER (2002) que propõe resolver a equação de quantidade de movimento na forma intensa da fase. Este procedimento baseia-se em utilizar uma forma não conservativa da equação de transporte de quantidade de movimento. Uma das maneiras de obter a equação na forma intensa da fase é reescrever a equação de transporte em termos de derivada substantiva. Esta forma da equação é denominada forma não conservativa e pode ser encontrada nos trabalhos de (RUSCHE, 2002; LOPES, 2008; CHO *et al.*, 2010; JEONG *et al.*, 2008a,b; PARK *et al.*, 2009; YOON *et al.*, 2009). Os detalhes da formulação não conservativa também podem ser conferidos em ISHII e HIBIKI (2011)

Inicialmente pode-se considerar o sistema como sendo incompressível e desta forma reescrever a Equação 5.36 e obter a Equação 5.49.

$$\frac{\partial \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \mathbf{U}_\alpha) + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{R}_\alpha^{ef}) = -\frac{\varepsilon_\alpha}{\rho_\alpha} \nabla p + \varepsilon_\alpha g + \frac{\mathbf{M}_\alpha}{\rho_\alpha} \tag{5.49}$$

Posteriormente fatoriza-se o termo temporal da Equação 5.49.

$$\frac{\partial \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha}{\partial t} = \varepsilon_\alpha \frac{\partial \mathbf{U}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} \quad (5.50)$$

Em seguida a componente de transporte convectivo é fatorizada como apresentado pela Equação 5.51

$$\nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (\mathbf{U}_\alpha) + \mathbf{U}_\alpha \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) \quad (5.51)$$

O mesmo procedimento é realizado para o laplaciano como mostrado pela Equação 5.52

$$\nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{R}_\alpha^{ef}) = \nabla \varepsilon_\alpha \cdot (\mathbf{R}_\alpha^{ef}) + \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{R}_\alpha^{ef}) \quad (5.52)$$

Tomando a Equação 5.14 e multiplicando por \mathbf{U}_α tem-se

$$\mathbf{U}_\alpha \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = \mathbf{U}_\alpha \Omega_\alpha \quad (5.53)$$

em que

$$\Omega_\alpha = \frac{\Gamma_\alpha}{\rho_\alpha} \quad (5.54)$$

Substituindo as Equações 5.50, 5.51 e 5.52 em 5.36 obtêm-se a Equação 5.56.

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\alpha \frac{\partial \mathbf{U}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} + \\ & \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (\mathbf{U}_\alpha) + \mathbf{U}_\alpha \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) + \\ & \nabla \varepsilon_\alpha \cdot (\mathbf{R}_\alpha^{ef}) + \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{R}_\alpha^{ef}) = \\ & -\frac{\varepsilon_\alpha}{\rho_\alpha} \nabla p + \varepsilon_\alpha g + \frac{\mathbf{M}_\alpha}{\rho_\alpha} \end{aligned} \quad (5.55)$$

Substituindo a Equação 5.53 na Equação 5.56 chega-se a Equação 5.57:

$$\begin{aligned} \varepsilon_\alpha \frac{\partial \mathbf{U}_\alpha}{\partial t} + \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (\mathbf{U}_\alpha) + \\ \nabla \varepsilon_\alpha \cdot (\mathbf{R}_\alpha^{ef}) + \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (\mathbf{R}_\alpha^{ef}) + \mathbf{U}_\alpha \Omega_\alpha = \\ -\frac{\varepsilon_\alpha}{\rho_\alpha} \nabla p + \varepsilon_\alpha g + \frac{\mathbf{M}_\alpha}{\rho_\alpha} \end{aligned} \quad (5.56)$$

Para se obter a equação na forma intensa da fase divide-se a Equação 5.57 por ε_α e obtém-se a Equação 5.58

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{U}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (\mathbf{U}_\alpha) + \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (\mathbf{R}_\alpha^{ef}) + \nabla \cdot (\mathbf{R}_\alpha^{ef}) + \frac{\mathbf{U}_\alpha \Omega_\alpha}{\varepsilon_\alpha} = \\ -\frac{\nabla p}{\rho_\alpha} + g + \frac{\mathbf{M}_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} \end{aligned} \quad (5.57)$$

Definindo o tensor de forças viscosas como

$$\mathbf{R}_\alpha^{ef} = \nu_\alpha^{ef} \left(\nabla \mathbf{U}_\alpha + \nabla \mathbf{U}_\alpha^T - \frac{2}{3} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha \right) + \frac{2}{3} \mathbf{I} k_\alpha \quad (5.58)$$

É conveniente dividir o tensor em uma componente difusiva e outra complementar.

$$\mathbf{R}_\alpha^{ef} = \mathbf{R}_\alpha^D + \mathbf{R}_\alpha^C \quad (5.59)$$

onde

$$\mathbf{R}_\alpha^D = \nu_\alpha^{ef} \nabla \mathbf{U}_\alpha \quad (5.60)$$

e

$$\mathbf{R}_\alpha^C = \nu_\alpha^{ef} \left(\nabla \mathbf{U}_\alpha^T - \frac{2}{3} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha \right) + \frac{2}{3} \mathbf{I} k_\alpha \quad (5.61)$$

Substituindo as Equações 5.60 e 5.61 na Equação 5.55 tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{U}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla(\mathbf{U}_\alpha) - \nabla \cdot (\nu_\alpha^{ef} \nabla \mathbf{U}_\alpha) + \nabla \cdot (\mathbf{R}_\alpha^C) - \\ \nu_\alpha^{ef} \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot \nabla(\mathbf{U}_\alpha) + \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (\mathbf{R}_\alpha^C) + \frac{\mathbf{U}_\alpha \Omega_\alpha}{\varepsilon_\alpha} = \\ -\frac{\nabla p}{\rho_\alpha} + g + \frac{\mathbf{M}_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} \end{aligned} \quad (5.62)$$

É proposto por WELLER (2002) combinar os termos convectivos definindo uma velocidade total da fase como a seguir.

$$\mathbf{U}_\alpha^t = \mathbf{U}_\alpha - \nu_\alpha^{ef} \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \quad (5.63)$$

E finalmente pode-se reescrever a Equação 5.63 da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{U}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha^t \cdot \nabla(\mathbf{U}_\alpha) - \nabla \cdot (\nu_\alpha^{ef} \nabla \mathbf{U}_\alpha) + \nabla \cdot (\mathbf{R}_\alpha^C) + \\ \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (\mathbf{R}_\alpha^C) + \frac{\mathbf{U}_\alpha \Omega_\alpha}{\varepsilon_\alpha} = \\ -\frac{\nabla p}{\rho_\alpha} + g + \frac{\mathbf{M}_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} \end{aligned} \quad (5.64)$$

Ao final observa-se que a equação está na forma intensa da fase para um sistema com mudança de fase.

O termo $\mathbf{U}_\alpha \Omega_\alpha$ representa o ganho ou perda de quantidade de movimento devido a geração ou consumo para a fase.

Para sistemas com mudança de fase, é necessário considerar a transferência da propriedade pela interface. Portanto, para a quantidade de movimento deve-se adicionar o termo da força interfacial provocada pela mudança de fase definida como F_{mf} . Este termo é avaliado na superfície da fase e é representado através da Equação 5.65

$$F_{mf} = \frac{\mathbf{U}_\beta}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} \Gamma_\alpha \quad (5.65)$$

em que β é referente à outra fase que está sendo gerada.

E assim obtem-se a forma final implementada no OpenFOAM descrita pela Equação 5.66

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{U}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha^t \cdot \nabla(\mathbf{U}_\alpha) - \nabla \cdot (\nu_\alpha \nabla \mathbf{U}_\alpha) + \nabla \cdot (\mathbf{R}_\alpha^C) + \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (\mathbf{R}_\alpha^C) = \\ - \frac{\nabla p}{\rho_\alpha} + g + \frac{\mathbf{M}_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} + (\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha) \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} \end{aligned} \quad (5.66)$$

5.4 Tratamento do termo ε_α no denominador.

Como mencionado anteriormente a utilização da formulação não conservativa tem como objetivo retirar o termo da fração volumétrica (ε_α) dos termos derivativos para dar estabilidade numérica em situações em que $\varepsilon_\alpha \rightarrow 0$. No entanto, ao escrever a equação nessa formulação, alguns termos apresentam ε_α no denominador. Este termo no denominador é praticamente indesejável, pois, quando ele for zero, a equação tornar-se-á singular promovendo um erro de cálculo com conseqüente finalização da simulação. Os termos que apresentam esta característica são o termo $\frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha}$ que vem do tratamento algébrico do laplaciano e os termos fonte $\frac{S_{\phi,\alpha}}{\varepsilon_\alpha}$. Geralmente os termos fonte representados pela interação entre as fases possuem ε_α em sua formulação e cancela-se com o denominador, mas esta observação não é uma regra e quando não há como cancelar deve-se mantê-lo.

Para contornar esse problema é utilizada uma estratégia numérica, a mesma de RUSCHE (2002), somando um pequeno valor a ε_α , quando o mesmo se encontra no denominador. Esta estratégia pode ser conferida pela Equação 5.67 para o termo proveniente do tratamento algébrico do laplaciano.

$$\frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \approx \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{(\varepsilon_\alpha + \delta)} \quad (5.67)$$

Caso necessário, pode-se adotar a mesma estratégia do termo que é derivado do tratamento do laplaciano para aproximar termos fonte que apresentam a fração volumétrica

no denominador. Esta aproximação pode ser conferida através da Equação 5.68.

$$\frac{S_{\phi,\alpha}}{\varepsilon_\alpha} \approx \frac{S_{\phi,\alpha}}{(\varepsilon_\alpha + \delta)} \quad (5.68)$$

Portanto, em todas as equações em que a fração volumétrica aparecer no denominador considera-se a aproximação somando o pequeno valor (δ). Nesse trabalho foi utilizado o valor para δ igual à 0,0001.

5.5 Acoplamento pressão-velocidade

O método utilizado na resolução da equação da pressão foi o PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) apresentado por ISSA (1986). Este método é aplicado de forma a obter um campo de pressão que garanta a continuidade do sistema.

No caso do problema bifásico Euleriano-Euleriano, o método é aplicado com objetivo de garantir a continuidade da mistura, a qual é gerada somando as equações da continuidade da fases.

Aplicando a equação da continuidade para a fase líquida e para a fase gasosa tem-se.

$$\frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \mathbf{U}_l) = \frac{\Gamma_l}{\rho_l} \quad (5.69)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \mathbf{U}_g) = \frac{\Gamma_g}{\rho_g} \quad (5.70)$$

Somando as Equações 5.69 e 5.70 tem-se

$$\frac{\partial(\varepsilon_g + \varepsilon_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \mathbf{U}_g + \varepsilon_l \mathbf{U}_l) = \frac{\Gamma_g}{\rho_g} + \frac{\Gamma_l}{\rho_l} \quad (5.71)$$

Sabendo-se que $\varepsilon_g + \varepsilon_l = 1$ chega-se finalmente a equação da continuidade para a mistura.

$$\nabla \cdot (\varepsilon_g \mathbf{U}_g + \varepsilon_l \mathbf{U}_l) = \Omega \quad (5.72)$$

onde

$$\Omega = \Omega_l + \Omega_g \quad (5.73)$$

em que

$$\Omega_l = \frac{\Gamma_l}{\rho_l} \quad (5.74)$$

e

$$\Omega_g = \frac{\Gamma_g}{\rho_g} \quad (5.75)$$

Diferentemente da equação implementada no OpenFOAM que considera que a continuidade em termos volumétricos não tem mudança de fase e seus termos são igualados a 0, nesse caso há de se considerar o termo de geração/ou consumo na equação da continuidade e a necessidade de uma modificação levando a considerar o termo. A seguir será apresentado o equacionamento para implementação do método.

Utilizando a continuidade da mistura, podemos obter uma única equação da pressão. Esta formulação da equação inicia-se tomando a equação da continuidade da mistura aplicada ao centro das faces f como a seguir.

$$\nabla \cdot (\phi) = \nabla \cdot (\varepsilon_{g,f} \phi_g + \varepsilon_{l,f} \phi_l) = \Omega \quad (5.76)$$

As equações de quantidade de movimento podem ser reescritas na forma semi discretizada conforme as Equações 5.77 e 5.78.

$$\mathbf{A}_g \mathbf{U}_g = \mathbf{H}_g - \frac{\nabla p}{\rho_g} \iff \mathbf{U}_g = \frac{\mathbf{H}_g}{\mathbf{A}_g} - \frac{\nabla p}{\rho_g \mathbf{A}_g} \quad (5.77)$$

$$\mathbf{A}_l \mathbf{U}_l = \mathbf{H}_l - \frac{\nabla p}{\rho_l} \iff \mathbf{U}_l = \frac{\mathbf{H}_l}{\mathbf{A}_l} - \frac{\nabla p}{\rho_l \mathbf{A}_l} \quad (5.78)$$

onde \mathbf{A}_l e \mathbf{A}_g são as matrizes de operadores diagonais e \mathbf{H}_l e \mathbf{H}_g são as matrizes dos demais operadores para o líquido e gás respectivamente.

Interpolando as Equações 5.77 e 5.78 para os fluxos de cada fase nas faces da célula obtêm-se as Equações 5.79 e 5.80:

$$\phi_g = \phi_g^* - \frac{1}{\rho_g \mathbf{A}_g} \Big|_f |S_f| \nabla_f^\perp p \quad (5.79)$$

$$\phi_l = \phi_l^* - \frac{1}{\rho_l \mathbf{A}_l} \Big|_f |S_f| \nabla_f^\perp p \quad (5.80)$$

onde

$$\phi_g^* = \frac{\mathbf{H}_g}{\mathbf{A}_g} \Big|_f \cdot S_f + \phi_{drag,g} \quad (5.81)$$

$$\phi_l^* = \frac{\mathbf{H}_l}{\mathbf{A}_l} \Big|_f \cdot S_f + \phi_{drag,l} \quad (5.82)$$

O efeito da gravidade e a parte explícita da força de arraste são consideradas através das Equações 5.83 e 5.84.

$$\phi_{drag,g} = \frac{\varepsilon_l C_D}{\rho_g \mathbf{A}_g} \Big|_f \phi_l^* + \frac{\mathbf{g} \cdot S_f}{\mathbf{A}_g} \quad (5.83)$$

$$\phi_{drag,l} = \frac{\varepsilon_g C_D}{\rho_l \mathbf{A}_l} \Big|_f \phi_g^* + \frac{\mathbf{g} \cdot S_f}{\mathbf{A}_l} \quad (5.84)$$

Substituindo as Equações 5.79 e 5.80 na Equação 5.76 obtêm-se

$$\nabla \cdot \left(\varepsilon_{g,f} \left(\phi_g^* - \frac{1}{\rho_g \mathbf{A}_g} \Big|_f |S_f| \nabla_f^\perp p \right) + \varepsilon_{l,f} \left(\phi_l^* - \frac{1}{\rho_l \mathbf{A}_l} \Big|_f |S_f| \nabla_f^\perp p \right) \right) = \Omega \quad (5.85)$$

Reorganizando a Equação 5.85 chega-se à equação para o cálculo da pressão.

$$\nabla \cdot (\varepsilon_{g,f} \phi_g^* + \varepsilon_{l,f} \phi_l^*) - \nabla \cdot (D_p \nabla p) = \Omega \quad (5.86)$$

onde

$$D_p = \varepsilon_{g,f} \left(\frac{1}{\rho_g \mathbf{A}_g} \Big|_f \right) + \varepsilon_{l,f} \left(\frac{1}{\rho_l \mathbf{A}_l} \Big|_f \right) \quad (5.87)$$

5.6 Modelo de turbulência

O modelo de turbulência utilizado neste trabalho é o modelo $k - \epsilon$ para sistemas bifásicos descrito por GOSMAN *et al.* (1992). Este modelo foi utilizado no trabalho de RUSCHE (2002) e é uma modificação do modelo $k - \epsilon$ padrão apresentado por LAUNDER e SPALDING (1974). O modelo foi modificado por GOSMAN *et al.* (1992) para incluir os efeitos da fase dispersa. O modelo $k - \epsilon$ modificado é representado pelas Equações 5.88 e 5.89 a seguir:

$$\frac{\partial k_l}{\partial t} + (\mathbf{U}_l \cdot \nabla) k_l - \nabla \cdot \left(\frac{\nu_l^{ef}}{\sigma_k} \nabla k_l \right) = P_k - \epsilon_l + S_k \quad (5.88)$$

$$\frac{\partial \epsilon_l}{\partial t} + (\mathbf{U}_l \cdot \nabla) \epsilon_l - \nabla \cdot \left(\frac{\nu_l^{ef}}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_l \right) = \frac{\epsilon_l}{k_l} (C_1 P_k - C_2 \epsilon_l) + S_\epsilon \quad (5.89)$$

em que σ_k e σ_ϵ são números de Schmidt e C_1 e C_2 são constantes do modelo e P_k é a produção de energia cinética turbulenta e é descrita pela Equação 5.90:

$$P_k = 2\nu_l^{ef} (\nabla \mathbf{U}_l \cdot dev(\nabla \mathbf{U}_l + (\nabla \mathbf{U}_l)^T)) \quad (5.90)$$

A viscosidade efetiva da fase contínua é dada pela soma da viscosidade laminar ν_l com a viscosidade turbulenta ν^{turb} a qual é calculada através da Equação 5.91 a seguir:

$$\nu_l^{ef} = \nu_l + \nu^{turb} \quad (5.91)$$

onde a viscosidade turbulenta pode ser calculada através da Equação 5.92:

$$\nu_{turb} = C_\mu \frac{k_l^2}{\epsilon_l} \quad (5.92)$$

O valores dos parâmetros σ_k , σ_ϵ , C_1 e C_2 podem ser encontrados na Tabela 5.1

Tabela 5.1: Coeficientes do modelo $k - \epsilon$ modificado

C_μ	C_1	C_2	C_3	σ_k	σ_ϵ	σ_α	C_i
0,09	1,44	1,92	1,0	1,0	1,3	1,0	C_t

os termos fonte S_k e S_ϵ são apresentados pelas Equações 5.93 e 5.94 respectivamente:

$$S_k = \frac{2k_l \epsilon_\alpha A_d (C_i - 1)}{\rho_l} + \frac{A_d \nu^{turb}}{\rho_l \sigma_\alpha} \frac{\nabla \epsilon_l}{\epsilon_l} \mathbf{U}_r \quad (5.93)$$

$$S_\epsilon = \frac{2C_3 \epsilon_l \epsilon_l A_d (C_i - 1)}{\rho_l} \quad (5.94)$$

onde A_d é o termo de arraste, o qual pode ser substituído pelo termo apresentado por WELLER *et al.* (1998) descrito pela Equação 5.95 a seguir:

$$\epsilon_g \epsilon_l \frac{3}{4} \left(f_g \frac{C_{dg} \rho_l}{d_g} + f_l \frac{C_{dl} \rho_g}{d_l} \right) |\mathbf{U}_r| \quad (5.95)$$

em que o coeficiente C_i é igual a uma função de resposta turbulenta, ou seja, $C_i = C_t$ e pode ser calculado de acordo com a Equação 5.96:

$$C_t = \frac{3 + \beta}{1 + \beta + 2 \frac{\rho_d}{\rho_l}} \quad (5.96)$$

onde β é dado pela Equação 5.97 a seguir:

$$\beta = \frac{2A_d L_e^2}{\rho_l \nu_l Re_t} \quad (5.97)$$

onde ν_b é a viscosidade cinemática da fase contínua e Re_t (Equação 5.98) é o número de Reynolds turbulento baseado na escala de comprimento turbulento L_e e nas flutuações da velocidade do líquido \mathbf{U}'_l .

$$Re_t = \frac{\mathbf{U}'_l L_e}{\nu_l} \quad (5.98)$$

A escala de comprimento turbulento L_e pode ser expressa pela Equação 5.99 como uma função de C_μ , k e ϵ_l .

$$L_e = C_\mu \frac{k^{1,5}}{\epsilon_l} \quad (5.99)$$

As flutuações da velocidade do líquido \mathbf{U}'_l são obtidas através da Equação 5.100.

$$\mathbf{U}'_l = \sqrt{\frac{2k_l}{3}} \quad (5.100)$$

A energia cinética turbulenta (k_g) e a viscosidade efetiva (ν_g^{ef}) da fase dispersa podem ser calculadas através das Equações 5.101 e 5.102 respectivamente:

$$k_g = C_t^2 k_l \quad (5.101)$$

$$\nu_g^{ef} = \nu_g + C_t^2 \nu^{turb} \quad (5.102)$$

A tensão de Reynolds é formada pela combinação das tensões médias viscosa e turbulenta para a fase α como descrita pela Equação 5.103

$$\mathbf{R}_\alpha^{ef} = (\mathbf{R}_\alpha^{lam} + \mathbf{R}_\alpha^{turb}) \quad (5.103)$$

Portanto, pode-se obter a tensão de Reynolds \mathbf{R}_α^{ef} para a fase genérica α de acordo com a hipótese de BOUSSINESQ (1877) apresentada pela Equação 5.104:

$$\mathbf{R}_\alpha^{ef} = -\nu_\alpha^{ef}(\nabla\mathbf{U}_\alpha + \nabla\mathbf{U}_\alpha^T - \frac{2}{3}I\nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha) + \frac{2}{3}Ik_\alpha \quad (5.104)$$

RUSCHE (2002) no desenvolvimento de seu trabalho considerou que os termos fontes S_k e S_ϵ são nulos. Esta consideração foi adotada pelo autor devido a problemas de singularidades encontradas na implementação do modelo de dois fluidos. O autor ainda destaca que mais testes numéricos devem ser realizados para avaliar o modelo de GOSMAN *et al.* (1992). Nesse trabalho essa consideração também foi adotada.

5.7 Transferência de energia

Considerando a formulação para o modelo de dois fluidos pode-se escrever a Equação para transporte de energia total através da Equação 5.105

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\varepsilon_\alpha \rho_\alpha \left(e_\alpha + \frac{\mathbf{U}_\alpha^2}{2} \right) \right) + \nabla \cdot \left(\varepsilon_\alpha \rho_\alpha \left(e_\alpha + \frac{\mathbf{U}_\alpha^2}{2} \right) \mathbf{U}_\alpha \right) \\ = -\nabla \cdot (\varepsilon_\alpha (q_\alpha + q_\alpha^{turb})) + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{T}_\alpha \cdot \mathbf{U}_\alpha) \\ + \varepsilon_\alpha \rho_\alpha g_\alpha \cdot \mathbf{U} + \varepsilon_\alpha \rho_\alpha E_\alpha + \varepsilon_\alpha \rho_\alpha E_{\alpha, reac} \end{aligned} \quad (5.105)$$

Onde e_α é a energia total da fase q_α é o calor por condução molecular transferido \mathbf{T}_α é o tensor das tensões e E_α é a transferência interfacial de energia e agrupa o processo de transporte das duas fases como mostrado pela Equação 5.106 a seguir:

$$\sum_{\alpha=1}^2 E_\alpha = E_m \quad (5.106)$$

O termo $E_{\alpha, reac}$ é a energia total devido as reações e pode ser representado através da Equação 5.107.

$$E_{\alpha, reac} = \sum_{reac} \Delta H_{reac} R_{\alpha, j}^{reac} \quad (5.107)$$

Através dos dados da rede cinética pode-se verificar que para o craqueamento térmico as taxas de reação são muito baixas. Além desta observação, não foram encontrados os dados das entalpias de reação nos trabalhos que apresentaram a rede. Os autores SOUZA *et al.* (2005) também não consideraram as energias de reação no balanço de energia. Portanto nesse trabalho, as energias de reação para craqueamento térmico não foram consideradas no cálculo das temperaturas.

Tomando a equação de energia mecânica descrita em BIRD *et al.* (2004) e aplicando ao modelo de duas fases tem-se a Equação 5.108:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_\alpha \frac{1}{2} \rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha^2) = & -(\nabla \cdot \varepsilon_\alpha \frac{1}{2} \rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha^2) - (\nabla \cdot \varepsilon_\alpha p \mathbf{U}_\alpha) - p(-\nabla \cdot \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) \\ & -(\nabla \cdot [\varepsilon_\alpha \mathbf{T}_\alpha \cdot \mathbf{U}_\alpha]) - (-\varepsilon_\alpha \mathbf{T}_\alpha : \nabla \mathbf{U}_\alpha) + \varepsilon_\alpha \rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha \cdot g \end{aligned} \quad (5.108)$$

Substituindo a Equação 5.108 da energia mecânica da Equação 5.105 da energia irá conduzir a Equação 5.109 de balanço da energia interna a seguir:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}\frac{Du_{\alpha}}{Dt} = & -\nabla \cdot \varepsilon_{\alpha}(q_{\alpha} + q_{\alpha}^{turb}) \\ & -p(\nabla \cdot \varepsilon_{\alpha}\mathbf{U}_{\alpha}) - (\varepsilon_{\alpha}\mathbf{T}_{\alpha} : \nabla\mathbf{U}_{\alpha}) \\ & +\Gamma_{\alpha}H_{\beta} + a_i q_{\alpha}'' \end{aligned} \quad (5.109)$$

Nesta etapa do desenvolvimento das equações é necessário transformar a energia interna em entalpia de acordo com a Equação 5.110

$$u_{\alpha} = h_{\alpha} - (p/\rho_{\alpha}) \quad (5.110)$$

Reescrevendo a Equação 5.109 em termos de entalpia obtêm-se a Equação 5.111:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}\frac{Dh_{\alpha}}{Dt} = & -\nabla \cdot \varepsilon_{\alpha}(q_{\alpha} + q_{\alpha}^{turb}) \\ & -(\varepsilon_{\alpha}\mathbf{T}_{\alpha} : \nabla\mathbf{U}_{\alpha}) + \frac{Dp}{Dt} \\ & +\Gamma_{\alpha}H_{\beta} + a_i q_{\alpha}'' \end{aligned} \quad (5.111)$$

Presumindo que a entalpia é uma função da temperatura e pressão (SMITH e VAN NESS, 2007) tem-se a seguinte relação apresentada pela Equação 5.112:

$$\varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}\frac{Dh_{\alpha}}{Dt} = \varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}Cp_{\alpha}\frac{DT_{\alpha}}{Dt} + \left[1 + \left(\frac{\partial \ln \rho_{\alpha}}{\partial \ln T_{\alpha}} \right)_p \right] \frac{Dp}{Dt} \quad (5.112)$$

Igualando os lados direitos das Equações 5.112 e 5.111 podemos obter a Equação da temperatura em termos de temperatura descrita pela Equação 5.113 a seguir:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_\alpha \rho_\alpha C_{p_\alpha} \frac{DT_\alpha}{Dt} = & -\nabla \cdot \varepsilon_\alpha (q_\alpha + q_\alpha^{turb}) \\
& -(\varepsilon_\alpha \mathbf{T}_\alpha : \nabla \mathbf{U}_\alpha) - \left(\frac{\partial \ln \rho_\alpha}{\partial \ln T_\alpha} \right)_p \frac{Dp}{Dt} \\
& + \Gamma_\alpha (H_\beta - H_\alpha) + a_i q_\alpha''
\end{aligned} \tag{5.113}$$

Considerando o fluido escoando a densidade constante pode-se fazer $(\partial \ln \rho_\alpha / \partial \ln T)_p = 0$ e negligenciando o aquecimento do fluido devido à dissipação viscosa podemos descrever que $(\varepsilon_\alpha \mathbf{T}_\alpha : \nabla \mathbf{U}_\alpha) = 0$.

Definindo o fluxo de calor por condução efetivo q_α^{ef} como a soma do transferência de calor molecular e a transferência de calor turbulenta calculado pela Equação 5.114:

$$q_\alpha^{ef} = q_\alpha + q_\alpha^{turb} \tag{5.114}$$

A transferência de energia total por condução pode ser representada pela lei de Fourier descrita pela Equação 5.115 a seguir:

$$q_\alpha^{ef} = -\kappa_\alpha^{ef} \nabla(T_\alpha) \tag{5.115}$$

onde κ_α^{ef} é a condutividade térmica efetiva da fase.

q_α'' é o fluxo convectivo de calor entre as fases através da área interfacial a_i .

Para modelo de dois fluidos interdispersos podemos definir a área interfacial conforme a Equação 5.116

$$a_i = \frac{6\varepsilon_l \varepsilon_g}{\varepsilon_l d_l + \varepsilon_g d_g} \tag{5.116}$$

E podemos calcular o fluxo de calor convectivo entre as fases através da Equação 5.117:

$$q_\alpha'' = h_{i,g}^c (T_{sat} - T_\alpha) \tag{5.117}$$

Substituindo a Equação 5.115 na Equação 5.113 tem-se:

$$\varepsilon_\alpha \rho_\alpha C p_\alpha \frac{DT_\alpha}{Dt} = -\nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \kappa_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + \Gamma_\alpha H_\beta + a_i q_\alpha'' \quad (5.118)$$

Considerando fluido incompressível e dividindo a Equação 5.118 por $\rho_\alpha C p_\alpha$ e abrindo a derivada substantiva em termos de derivada temporal e fluxo convectivo chega-se à Equação 5.119 em termos de temperatura:

$$\frac{\partial \varepsilon_\alpha T_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha T_\alpha) - \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) = \frac{\Gamma_\alpha}{\rho_\alpha C p_\alpha} H_\beta + \frac{a_i h_{l,g}^c (T_{sat} - T_\alpha)}{\rho_\alpha C p_\alpha} \quad (5.119)$$

em que:

$$\lambda_\alpha^{ef} = \frac{\kappa_\alpha^{ef}}{\rho_\alpha C p_\alpha} \quad (5.120)$$

onde λ_α^{ef} é conhecido como difusividade térmica efetiva da fase.

Neste ponto há necessidade de rearranjar a equação da energia para se obter a Equação de transporte na forma adotada na formulação do transporte de quantidade de movimento.

Para isso vamos dividir a Equação 5.119 em duas partes, sendo o lado direito da Equação (LDE) representado pelo termo fonte que consiste na transferência de energia entre as fases, mudança de fase e o calor recebido através das paredes.

Portanto tem-se:

$$LDE = \frac{\Gamma_\alpha}{\rho_\alpha C p_\alpha} H_\beta + \frac{a_i h_{l,g}^c (T_{sat} - T_\alpha)}{\rho_\alpha C p_\alpha} \quad (5.121)$$

O lado esquerdo da Equação (LEE) será composta pelas componentes temporal, convectivo e laplaciano.

$$LEE = \frac{\partial \varepsilon_\alpha T_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha T_\alpha) - \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) \quad (5.122)$$

Tomando-se o LEE primeiramente realiza-se a fatorização da componente temporal da Equação de transporte apresentado a seguir pela Equação 5.123

$$\frac{\partial \varepsilon_\alpha T_\alpha}{\partial t} = \varepsilon_\alpha \frac{\partial T_\alpha}{\partial t} + T_\alpha \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} \quad (5.123)$$

Em seguida a componente de transporte convectivo é desmembrado como apresentado pela Equação 5.124

$$\nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha T_\alpha) = \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (T_\alpha) + T_\alpha \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) \quad (5.124)$$

O mesmo procedimento é realizado para o laplaciano mostrado na Equação 5.125

$$\nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) = \nabla \varepsilon_\alpha \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) \quad (5.125)$$

Substituindo as Equações 5.123, 5.124 e 5.125 na Equação 5.122 obtêm-se a Equação 5.125 a seguir:

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\alpha \frac{\partial T_\alpha}{\partial t} + T_\alpha \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} + \\ & \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (T_\alpha) + T_\alpha \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) - \\ & \nabla \varepsilon_\alpha \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) = LEE \end{aligned} \quad (5.126)$$

Tomando a equação da continuidade para fluido incompressível e multiplicando por T_α pode-se ter a seguinte expressão descrita pela Equação 5.127.

$$T_\alpha \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} + T_\alpha \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = T_\alpha \frac{\Gamma_\alpha}{\rho_\alpha} \quad (5.127)$$

Substituindo a Equação 5.127 na Equação 5.125 tem-se a Equação 5.128.

$$\varepsilon_\alpha \frac{\partial T_\alpha}{\partial t} + \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (T_\alpha) - \nabla \varepsilon_\alpha \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + T_\alpha \frac{\Gamma_\alpha}{\rho_\alpha} = LEE \quad (5.128)$$

Dividindo a Equação 5.128 por ε_α obtêm-se a Equação 5.129.

$$\frac{\partial T_\alpha}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla(T_\alpha) - \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + \nabla \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + T_\alpha \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} = \frac{LEE}{\varepsilon_\alpha} \quad (5.129)$$

O termo $\mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla T$ deve ser trabalhado através da aplicação das propriedades de cálculo tensorial descritas em BIRD *et al.* (2004) apresentada pela Equação 5.130 a seguir.

$$\mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla T_\alpha = \nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha T_\alpha - T_\alpha (\nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha) \quad (5.130)$$

Substituindo a Equação 5.130 na Equação 5.129 chega-se a forma final da Equação de energia em termos de temperatura com formulação de fase intensa apresentada a seguir pela Equação 5.132.

$$\frac{\partial T_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha T_\alpha - T_\alpha (\nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha) - \quad (5.131)$$

$$\frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + \nabla \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + T_\alpha \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} = \frac{LEE}{\varepsilon_\alpha} \quad (5.132)$$

Dividindo o LDE por ε_α tem-se por fim

$$\frac{LDE}{\varepsilon_\alpha} = \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha C p_\alpha} H_\beta + \frac{a_i h_{l,g}^c (T_{sat} - T_\alpha)}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha C p_\alpha} \quad (5.133)$$

Reconstruindo o $\frac{LEE}{\varepsilon_\alpha} = \frac{LDE}{\varepsilon_\alpha}$ apresenta-se a Equação 5.132 na forma de fase intensiva a seguir.

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha T_\alpha - T_\alpha (\nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha) - \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + \nabla \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) = \\ -T_\alpha \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} + \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha C p_\alpha} H_\beta + \frac{a_i h_{l,g}^c (T_{sat} - T_\alpha)}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha C p_\alpha} \end{aligned} \quad (5.134)$$

Para finalizar tem-se a necessidade de reorganizar o termo a seguir.

$$\frac{Cp_\alpha}{Cp_\alpha} T_\alpha \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} = \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha Cp_\alpha} H_\alpha \quad (5.135)$$

em que

$$Cp_\alpha T_\alpha = H_\alpha \quad (5.136)$$

E finalmente

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha T_\alpha - T_\alpha (\nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha) - \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) + \nabla \cdot (\lambda_\alpha^{ef} \nabla T_\alpha) = \\ \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha Cp_\alpha} H_{vap} + \frac{a_i h_{l,g}^c (T_{sat} - T_\alpha)}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha Cp_\alpha} \end{aligned} \quad (5.137)$$

O termo $(H_\beta - H_\alpha)$ representa a variação de entalpia durante a mudança de estado do líquido para vapor e pode ser representado por:

$$H_{vap} = (H_\beta - H_\alpha) \quad (5.138)$$

5.8 Transferência de massa multicomponente da fase líquida.

O petróleo é um composto formado por uma enorme quantidade de outras substâncias. Cada substância, ou componente do petróleo possui propriedades distintas ao serem analisadas. Um equacionamento de todas as substâncias é praticamente impossível. Para resolver este problema é utilizada a técnica de pseudocomponentes, em que grupos de componentes com características parecidas são descritos como se fossem uma única substância. Desta forma, é possível realizar os estudos considerando uma quantidade muito menor de elementos gerando uma quantidade menor de equações a serem resolvidas. Nesse trabalho essa característica multicomponente é representada ao se utilizar a rede cinética para previsão da formação de coque no meio líquido através do craqueamento térmico. Essa rede é composta por sete pseudocomponentes, os quais compõe as espécies envolvidas nos balanços de massa. A seguir será apresentado o equacionamento de cada espécie envolvida na rede cinética para descrever a formação do coque através do cálculo de suas concentrações.

Adotando a interpretação de média volumétrica para fluido incompressível pode-se considerar o balanço de massa para o componente i presente na fase α através da Equação 5.139 a seguir.

$$\frac{\partial \varepsilon_\alpha C_{\alpha,j}}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha C_{\alpha,j}) + \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,i}) = \varepsilon_\alpha R_{\alpha,j}^{react} + Y_{\beta,j} \Gamma_\alpha \quad (5.139)$$

Tomando-se o LEE primeiramente realiza-se o desmembramento da componente temporal da Equação de transporte apresentado a seguir pela Equação 5.140

$$\frac{\partial \varepsilon_\alpha C_{\alpha,j}}{\partial t} = \varepsilon_\alpha \frac{\partial C_{\alpha,j}}{\partial t} + C_{\alpha,j} \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} \quad (5.140)$$

Em seguida a componente de transporte convectivo é desmembrado como apresentado pela Equação 5.141

$$\nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha C_{\alpha,j}) = \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (C_{\alpha,j}) + C_{\alpha,j} \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) \quad (5.141)$$

O mesmo procedimento é realizado para o laplaciano como mostrado na Equação 5.142

$$\nabla \cdot (\varepsilon_\alpha D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) = \nabla \varepsilon_\alpha \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) + \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) \quad (5.142)$$

Substituindo as Equações 5.140, 5.141 e 5.142 na Equação 5.139 obtemos a Equação 5.141 a seguir:

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\alpha \frac{\partial C_{\alpha,j}}{\partial t} + C_{\alpha,j} \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} + \\ & \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (C_{\alpha,j}) + C_{\alpha,j} \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) - \\ & \nabla \varepsilon_\alpha \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) + \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) = LEE \end{aligned} \quad (5.143)$$

Tomando a equação da continuidade para fluido incompressível e multiplicando por $C_{\alpha,j}$ pode-se ter a seguinte expressão

$$C_{\alpha,j} \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} + C_{\alpha,j} \nabla \cdot (\varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = C_{\alpha,j} \frac{\Gamma_\alpha}{\rho_\alpha} \quad (5.144)$$

Substituindo a Equação 5.144 na Equação 5.141 tem-se a Equação 5.145.

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\alpha \frac{\partial C_{\alpha,j}}{\partial t} + \varepsilon_\alpha \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (C_{\alpha,j}) - \\ & \nabla \varepsilon_\alpha \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) + \varepsilon_\alpha \nabla \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) + C_{\alpha,j} \frac{\Gamma_\alpha}{\rho_\alpha} = LEE \end{aligned} \quad (5.145)$$

Dividindo a Equação 5.145 por ε_α obtêm-se a Equação 5.146.

$$\frac{\partial C_{\alpha,j}}{\partial t} + \mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla (C_{\alpha,j}) - \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) + \nabla \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) + C_{\alpha,j} \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} = \frac{LEE}{\varepsilon_\alpha} \quad (5.146)$$

O termo $\mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla C_{\alpha,j}$ deve ser trabalhado através da aplicação das propriedades de cálculo tensorial descritas em BIRD *et al.* (2004) apresentada pela Equação 5.147 a seguir.

$$\mathbf{U}_\alpha \cdot \nabla C_{\alpha,j} = \nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha C_{\alpha,j} - C_{\alpha,j} (\nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha) \quad (5.147)$$

Substituindo a Equação 5.147 na Equação 5.146 chega-se à equação de energia em termos de temperatura com formulação de fase intensa apresentada pela Equação 5.148.

$$\frac{\partial C_{\alpha,j}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha C_{\alpha,j} - C_{\alpha,j}(\nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha) - \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) + \nabla \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) + C_{\alpha,j} \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha \rho_\alpha} = \frac{LEE}{\varepsilon_\alpha} \quad (5.148)$$

Dividindo o LDE por ε_α tem-se por fim

$$\frac{LDE}{\varepsilon_\alpha} = R_{\alpha,j}^{react} + Y_{\beta,j} \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \quad (5.149)$$

Reconstruindo o $\frac{LEE}{\varepsilon_\alpha} = \frac{LDE}{\varepsilon_\alpha}$ apresenta-se a Equação 5.151 na forma de fase intensiva a seguir.

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{\alpha,j}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha C_{\alpha,j} - C_{\alpha,j}(\nabla \cdot \mathbf{U}_\alpha) - \frac{\nabla \varepsilon_\alpha}{\varepsilon_\alpha} \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,i}) + \nabla \cdot (D_{\alpha,j}^{ef} \nabla C_{\alpha,j}) \\ = \\ (Y_{\beta,j} - Y_{\alpha,j}) \frac{\Gamma_\alpha}{\varepsilon_\alpha} + R_{\alpha,j}^{react} \end{aligned} \quad (5.150)$$

5.8.1 Rede cinética

Para a modelagem do craqueamento térmico no interior do tubo uma rede cinética apresentada por (KÖSEGLU e PHILLIPS, 1988a,b,c,d,e) e KOMATSU *et al.* (1986) descrita pela Figura 3.5 foi utilizada na obtenção das equações de taxas de reação.

Esta rede adota como base a classificação SARA para petróleo bruto e é composta por sete pseudocomponentes que são saturados, aromáticos, resinas e asfaltenos, os quais são oriundos da classificação SARA e mais os destilados, asfaltenos em mesofase e o coque. As equações constituintes do modelo cinético são apresentadas a seguir:

$$R_{l,destilados}^{react} = K_1 C_{l,saturados} \quad (5.151)$$

$$R_{l,saturados}^{reac} = K_2 C_{l,aromaticos} - K_1 C_{l,saturados} \quad (5.152)$$

$$R_{l,aromaticos}^{reac} = K_3 C_{l,resinas} - K_2 C_{l,aromaticos} \quad (5.153)$$

$$R_{l,resinas}^{reac} = K_5 (C_{l,asf sol} + C_{l,asf meso}) - (K_2 + K_4) C_{l,resinas} \quad (5.154)$$

$$R_{l,asf sol}^{reac} = K_4 C_{l,resinas} - K_5 C_{l,asf sol} \quad (5.155)$$

$$R_{l,asf meso}^{reac} = K_4 C_{l,resinas} - (K_5 + K_6) C_{l,asf meso} \quad (5.156)$$

$$R_{l,coque}^{reac} = K_6 C_{l,asf meso} \quad (5.157)$$

As taxas de reação para os sete pseudocomponentes são expressas em função da temperatura conforme MERCADO *et al.* (2001) e são apresentadas a seguir:

$$K_1 = \frac{1}{3600} \exp \left(29,9 - \frac{175000}{RT_l} \right) \quad (5.158)$$

$$K_2 = \frac{1}{3600} \exp \left(23,43 - \frac{136000}{RT_l} \right) \quad (5.159)$$

$$K_3 = \frac{1}{3600} \exp \left(13,57 - \frac{85000}{RT_l} \right) \quad (5.160)$$

$$K_4 = \frac{1}{3600} \exp \left(17,7 - \frac{96000}{RT_l} \right) \quad (5.161)$$

$$K_5 = \frac{1}{3600} \exp \left(19,34 - \frac{103000}{RT_l} \right) \quad (5.162)$$

$$K_6 = \frac{1}{3600} \exp \left(27,54 - \frac{168000}{RT_l} \right) \quad (5.163)$$

5.8.2 Difusividade mássica

Conforme BIRD *et al.* (2004) a difusividade turbulenta não é uma propriedade física característica do fluido. Esta propriedade depende da posição, direção e do campo de velocidades. A difusividade turbulenta e a viscosidade turbulenta têm as mesmas dimensões [m^2/s] e podem ser relacionadas conforme a Equação 5.164.

$$Sc = \frac{\nu_l}{D_{l,j}} \quad (5.164)$$

Onde Sc é conhecido como número de Schmidt.

Para fluxos turbulentos o número de Schmidt é da ordem de grandeza unitária, podendo aproximá-lo a unidade $Sc \approx 1$.

Assim, a difusividade mássica pode ser estimada através da viscosidade cinemática, a qual, será calculada através

$$D_{l,j}^{ef} = \nu_l^{ef} \quad (5.165)$$

A Equação 5.165 foi utilizada nesse trabalho como uma aproximação no cálculo das difusividades mássicas dos pseudocomponentes.

5.9 Mudança de fase

É de conhecimento que o petróleo é constituído de inúmeros compostos orgânicos formados por hidrocarbonetos com diferentes tamanhos e arranjos de suas cadeias carbônicas e conseqüentemente suas propriedades, dentre elas o ponto de ebulição na mistura, se diferem.

Obter um modelo que descreva os fenômenos envolvidos durante a mudança de fase não é uma tarefa simples, pois um modelo completo deveria considerar o petróleo composto por uma mistura de inúmeras frações de hidrocarbonetos e sua taxa de vaporização será dependente da composição deste petróleo, da temperatura e da pressão a qual está submetido.

Outra característica de um escoamento de líquido em contato com uma parede metálica aquecida é um fenômeno conhecido com ebulição nas paredes. BERGMAN (2011) destaca que quando a evaporação ocorre entre uma interface líquido-sólido o processo é conhecido como ebulição. Este processo é caracterizado pela formação de bolhas de vapor na superfície do sólido, que ao crescerem se destacam desta superfície. O autor também destaca que a ebulição ocorre em diversas condições de acordo com as características fluidodinâmicas existentes em determinada região, sendo um dos fenômenos mais complexos de prever segundo GHIAASIAAN (2008). Os mecanismos e o equacionamento dos modelos de ebulição podem ser conferidos em (TONG e TANG, 1997; GHIAASIAAN, 2008; BERGMAN, 2011). Neste trabalho a modelagem de ebulição nas paredes não foi adotada como simplificação.

Portanto, nesse trabalho serão abordados dois modelos vaporização como forma de caracterizar a mudança de fase e formação do gás. O primeiro é um modelo simplificado, o qual é concebido considerando o petróleo como uma substância simples, em que a vaporização ocorre quando a temperatura do líquido ultrapassa uma temperatura média de saturação. Esta abordagem é uma grande simplificação para petróleo. No entanto, as simulações que serão realizadas consideram que apenas um segmento do tubo será simulado, com a diferença de temperatura do fluido entre o início e o final do tubo não maior que $20K$ e desta forma possível se utilizar esta aproximação nesta etapa do desenvolvimento.

Para o segundo modelo, foi proposto uma abordagem numérica utilizando dados de termoanálises de amostras de petróleo retiradas de KOPSCH (1995) que fornecem dados de energia de ativação e do fator de frequência pré exponencial, através dos quais é possível ajustar uma equação de Arrhenius para a previsão de taxa de vaporização em função da temperatura do líquido.

5.9.1 Modelo simplificado de vaporização

Pode-se considerar que a vaporização ocorre quando a temperatura do líquido, ou seja, do petróleo atinge uma temperatura média de ebulição, isto é, $T_l \geq T_{sat}$. A taxa de

vaporização é dada pela Equação 5.166.

$$M_{vap} = \frac{Q'''_{w,l}}{H_{vap}} \quad (5.166)$$

Para o petróleo escoando no interior do tubo, considera-se que apenas o calor recebido pela parede interna do tubo $Q'''_{w,l}$ é responsável pelo seu aquecimento como mostrada na Figura 5.3 e portando a vaporização ocorre próximo as paredes.

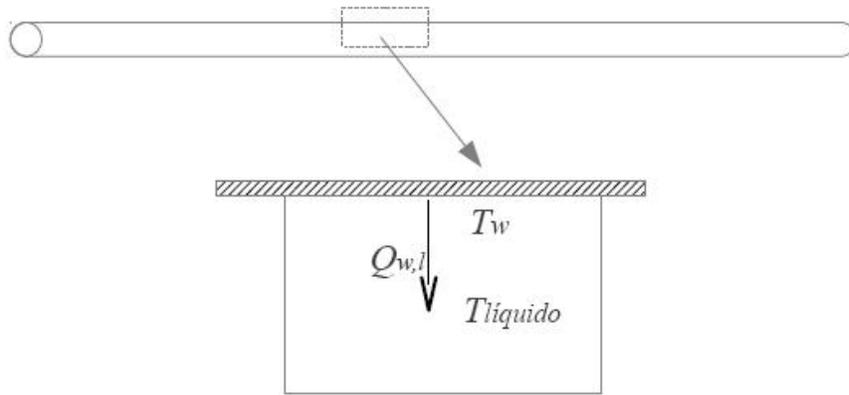


Figura 5.3: Calor convectivo transferido da parede interna do tubo ao fluido.

Na implementação no OpenFOAM o calor recebido pelo fluido é proveniente da parede interna e é adicionado a célula adjacente ao contorno. Neste caso é necessário se ter um calor recebido por unidade de volume. Para isso podemos fazer a seguinte relação através do calor total adicionado ao fluido.

$$Q = Q'' A_t = Q''' V_t \quad (5.167)$$

A relação mostra que o calor total adicionado ao sistema é igual ao calor por unidade de área Q'' multiplicado pela área total A_t da superfície aquecida do tubo. Por sua vez o calor total poderia ser descrito como o calor por unidade de volume Q''' multiplicado pelo volume do tubo V_t . A temperatura da parede T_w neste estudo será mantida constante.

Através desta relação tem-se o calor recebido pelo fluido por unidade de volume a

seguir.

$$Q''' = Q'' \frac{A_t}{V_t} \quad (5.168)$$

onde a área da parede interna do tubo A_t é dada por

$$A_t = 2\pi RL = \pi DL \quad (5.169)$$

e o volume total do tubo V_t é:

$$V_t = \pi R_2 L = \pi \left(\frac{D^2}{4} \right) L \quad (5.170)$$

Portanto, o calor transferido por convecção da parede interna do tubo a uma temperatura T_w ao líquido pode ser calculado através da Equação 5.171

$$Q'''_{w,l} = \varepsilon_\alpha h_l^{conv} \left(\frac{4}{D_t} \right) (T_w - T_l) \quad (5.171)$$

onde o coeficiente convectivo de transferência de calor no interior de tubos para fluxos turbulentos pode ser expresso de acordo com INCROPERA (1998) através da Equação 5.172.

$$h_l^{conv} = \frac{k_l^{ef} Nu_l}{D_t} \quad (5.172)$$

em que Nu_l é o número adimensional de Nusselt obtido pela Equação 5.173.

$$Nu_l = \frac{(f/8)(Re - 1000)Pr}{1 + 12,7(f/8)^{1/2}(Pr^{2/3} - 1)} \quad (5.173)$$

em que Re e Pr são os números adimensionais de Reynold e Prandtl e f é o fator de fricção obtido pela Equação 5.174.

$$f = (0,7 \ln Re - 1,64)^{-2} \quad (5.174)$$

5.9.2 Taxa de vaporização por termoanálises

Ao escoar no interior das tubulações do pré aquecedor, o petróleo em estado líquido passa a receber energia proveniente do meio externo através das paredes do tubo. Esta energia transferida ao fluido provoca o aumento em sua temperatura ocasionando entre outros fenômenos a mudança de fase devido a vaporização das frações dos componentes do petróleo. Como esses componentes possuem pontos de ebulição diferentes, em que as frações mais leves de hidrocarbonetos vaporizam-se antes que as mais pesadas, é de muita complexidade a obtenção e previsão de um modelo termodinâmico para o cálculo da taxa de vaporização.

Como alternativa a um modelo termodinâmico, a ideia neste trabalho foi adotar dados de análises térmicas, como por exemplo: Termogravimetria (TGA); Termogravimetria Diferencial (DTG) e Calorimetria Diferencial Exploratória (DSC) (KOPSCH, 1995; BROWN, 1998; GABBOTT, 2008) na obtenção de uma equação de taxa de mudança de fase para o petróleo.

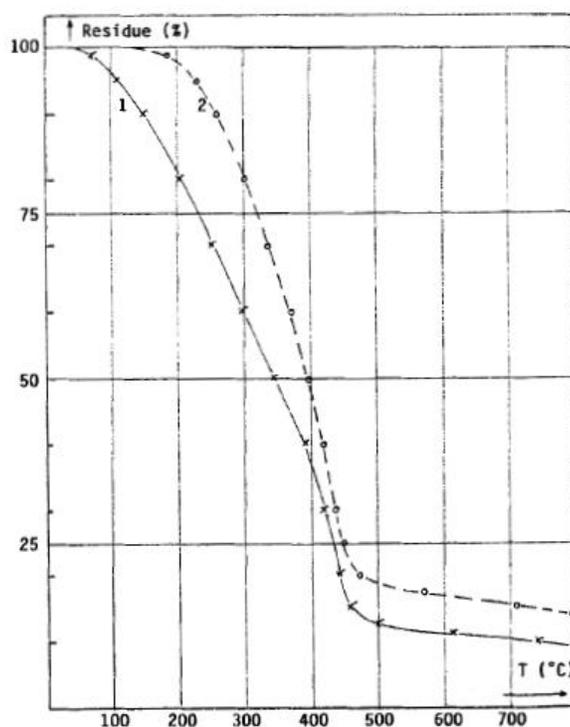


Figura 5.4: Termogravimetria de petróleo bruto do Campo Venezuelano de Laguna Once: Curva 1 - Petróleo bruto; Curva 2 - Resíduo de vácuo (Fonte: KOPSCH (1995))

A utilização destas termoanálises, para cálculos de taxas de vaporização, pode ser encontrada no trabalho de HAZRA (2002), os quais caracterizaram as características de

vaporização para três óleos essenciais e LI (2011) o qual utilizou a análise TGA para medir a cinética de vaporização e pressão de vapor para três amostras de petróleo. Estes testes fornecem parâmetros termodinâmicos ajustados a uma função de Arrhenius descrita pela Equação 5.175.

$$-\frac{dw}{dt} = A \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) w^n \quad (5.175)$$

em que w é a porcentagem mássica de líquido no instante atual em relação a massa inicial, A é o fator de frequência pré exponencial, E_a é a energia de ativação, R é a constante universal dos gases, T é a temperatura aplicada ao meio e n é a ordem da taxa de vaporização, a qual neste trabalho foi considerada de primeira ordem ($n = 1$).

Ao linearizar a Equação 5.175 obtém-se a Equação 5.176.

$$\ln\left(-\frac{dw}{dt}\right) = \ln(A) + \left(\frac{-E_a}{RT}\right) + \ln(w) \quad (5.176)$$

A partir dos dados gerados pelas termoanálises mostradas na Figura 5.4 é possível plotar $[\ln(-dw/dt) - \ln(w)] \times [-1/T]$ e assim calcular o fator de frequência pré exponencial (A) e a energia de ativação (E_a).

Portando pode-se definir uma variação de massa por volume total de amostra representada por \dot{m} de acordo com a Equação 5.177.

$$\dot{m} = -\rho_l \alpha_l \frac{dw}{dt} = \rho_l \alpha_l A \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) w \quad (5.177)$$

Ao utilizar esta abordagem as características termodinâmicas para cada tipo de petróleo estão intrínsecas nas curvas obtidas pelas análises as quais ajustam-se o modelo para uma estimativa da taxa de vaporização global. Neste trabalho os parâmetros para a Equação de Arrhenius de taxa de vaporização foram retirados de KOPSCH (1995) o qual descreve os experimentos realizados com 25 amostras onde os coeficientes da Equação de Arrhenius, energia de ativação E_a e o fator de frequência pré exponencial A foram ajustados e são apresentados pela Tabela 5.2

Tabela 5.2: Valores de energia de ativação e fator de frequência pré exponencial em experimentos DSC.

Amostra	Vaporização		Craqueamento		W[%]
	$E_{a,v}[kJ/Mol]$	$\log A_v[min^{-1}]$	$E_{a,c}[kJ/Mol]$	$\log A_c[min^{-1}]$	
1	74,6	5,971	226,7	15,973	82,8
2	-	-	204,4	14,390	78,7
3	-	-	165,9	11,492	81,5
4	-	-	211,6	14,903	79,7
5	-	-	197,4	13,707	82,0
6	-	-	235,9	16,577	69,2
7	-	-	159,8	10,975	69,9
8	-	-	181,5	12,560	77,1
9	-	-	-	-	-
10	-	-	180,6	12,514	69,5
11	-	-	215,8	17,927	68,2
12	-	-	167,3	18,538	79,1
13	-	-	174,1	12,123	78,4
14	61,7	5,258	171,4	11,827	83,9
15	125,4	11,372	177,1	12,341	84,8
16	71,1	6,224	174,2	12,237	84,1
17	124,0	10,449	187,0	13,038	77,1
18	171,9	14,134	-	-	85,5
19	76,1	6,120	206,8	14,542	76,1
20	-	-	217,0	9,855	63,8
21	-	-	190,4	11,299	72,0
22	-	-	199,6	13,707	63,6
23	40,3	2,969	-	-	100
24	70,3	5,400	-	-	100
25	59,7	5,063	-	-	100

5.9.3 Condensação

Seguindo o mesmo raciocínio descrito para a vaporização simplificada do petróleo a condensação também será inserida considerando um modelo simplificado onde o gás será tratado como uma substância simples.

A condensação ocorre quando o gás em contato com a fase líquida em menor temperatura atinge a temperatura média de saturação, ou seja, $T_g \leq T_{sat}$. A taxa de condensação pode ser expressa pela Equação 5.178

$$M_{cond} = \frac{Q_{g,l}}{H_{vap}} \quad (5.178)$$

O calor ganho pelo líquido ou perdido pelo gás devido a condensação é dado pela Equação 5.179.

$$Q_{g,l} = a_i h_g^{conv} (T_g - T_{sat}) \quad (5.179)$$

aqui h_g^{conv} é o coeficiente de transferência de calor durante a condensação na interface descrito por WOLFERT (1978). Esta forma de calcular o coeficiente de transferência de calor também foi utilizado no trabalho de MICHITA (2011) assumindo que as bolhas estão nas condições de saturação. O coeficiente de transferência de calor na interface pode ser calculado através da Equação 5.180

$$h_g^{conv} = \rho_l C_{pl} \sqrt{\frac{\pi \|\mathbf{U}_r\|}{4} \frac{\kappa_l}{d_g \rho_l C_{pl}} \frac{1}{1 + (\kappa_l^{turb}/\kappa_l)}} \quad (5.180)$$

A área interfacial entre os dois fluidos interdispersos é obtida pela Equação 5.116.

Capítulo 6

Geração das malhas e procedimento numérico.

Este capítulo trata da metodologia utilizada na construção das geometrias, geração das malhas, do sistema de equações a ser resolvido, do equipamento utilizado como ferramenta computacional e da metodologia numérica como: processamento paralelo, passo de tempo e critério de convergência, esquema de interpolação, métodos utilizados para resolução dos sistemas lineares e relaxação.

6.1 Construção das geometrias

Em CFD a determinação e geração da geometria pode ser considerada a etapa inicial do trabalho. Para tal, softwares específicos, comerciais ou livres, para geração e importação de geometrias são utilizados.

A geometria compreende o domínio físico de cálculo e deve ser gerada a partir de uma observação criteriosa do sistema a ser simulado. Uma geometria contendo poucos detalhes, ou seja, omitindo partes características importantes pode levar a simulação a obter resultados inconsistentes com a realidade, enquanto que, uma geometria extremamente detalhada pode tornar o trabalho em uma simulação de difícil execução ou até mesmo impossível de ser realizada.

O SALOME foi o programa escolhido para a construção da geometria. Ele é um software gratuito de código aberto que teve seu início de desenvolvimento no ano de 2000

sob a liderança da OPEN CASCADE. Esse programa permite não apenas criar a geometria em seu próprio ambiente, como também possui ferramentas de importação de geometrias construídas em outros programas. Também possui um ambiente com rotinas de geração de malhas hexaédricas e tetraédricas.

A escolha do SALOME teve como motivação principal manter a característica na utilização de programas livres neste trabalho. A Figura 6.1 a seguir mostra a tela com a interface gráfica do SALOME para construção da geometria:

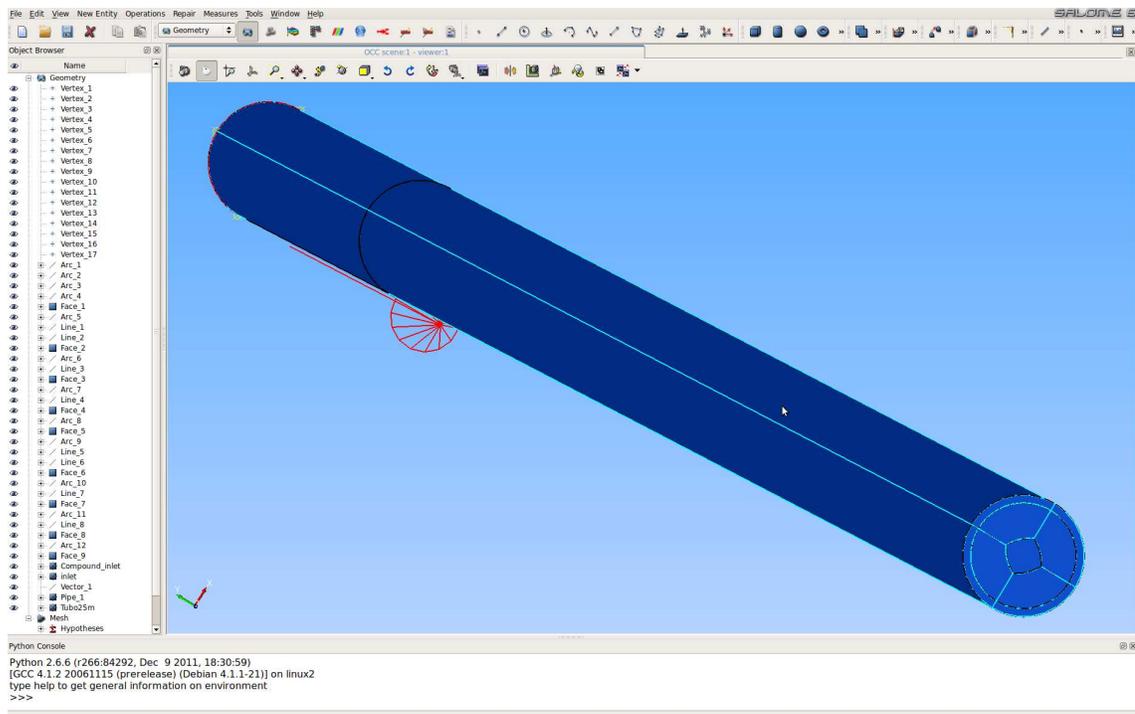


Figura 6.1: Ilustração da interface gráfica do SALOME para construção de geometrias

Nesse trabalho foi utilizada uma geometria muito simples, pois, foi basicamente representada pela parede interna de uma tubulação de 0,152 m (6 polegadas) de diâmetro com comprimento de 25 metros, ou seja, um cilindro de 0,152 m de diâmetro por 25 m de comprimento. Essa geometria representa uma segmento correspondente ao comprimento inicial de um tubo de um forno de pré-aquecimento característico de indústria petroquímica. Uma característica muito importante na construção da geometria foi sua direção horizontal como é mostrada pela Figura 6.2 a seguir:

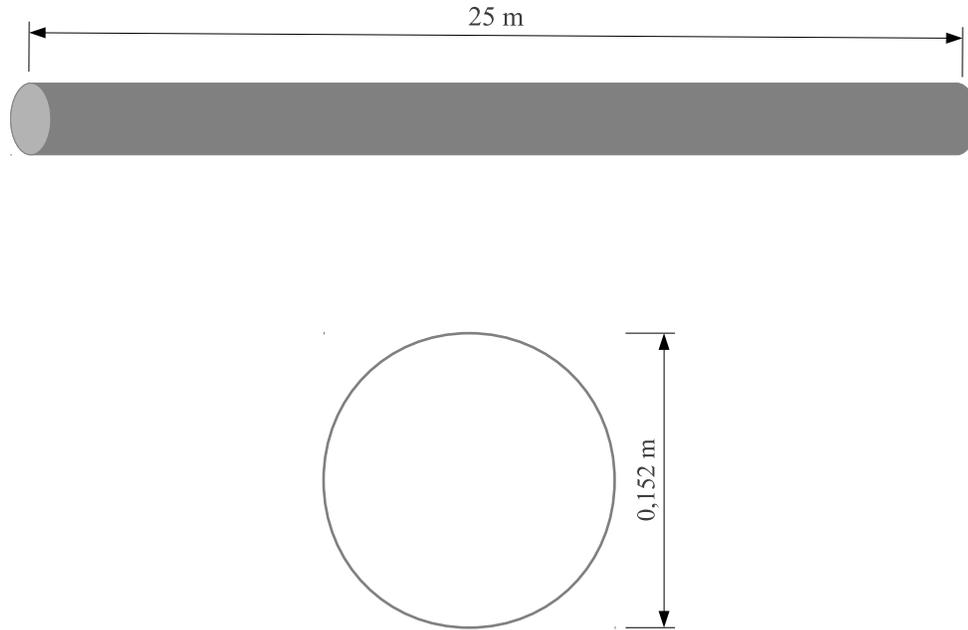


Figura 6.2: Geometria representando o tubo de um forno. a)Tubo na horizontal; b)Corte da secção transversal.

Após a construção da geometria foi necessário identificar corretamente as superfícies externas para as condições de contorno do problema. Para a geometria do tubo as superfícies no início, no final e nas paredes do tubo foram identificadas como *entrada*; *saída* e *parede* respectivamente. Ao final desta etapa segue-se a fase de geração da malha computacional.

6.2 Malha computacional

As gerações das malhas computacionais utilizadas nas simulações dos casos foram realizadas através do software SALOME, o qual contém vários algoritmos específicos para geração de malhas hexaédricas e/ou tetraédricas.

A topologia de malha, foi construída utilizando a técnica O-grid, a qual através da construção de uma zona específica de formato retangular no centro do tubo tem como objetivo obter apenas hexaédros na formação da malha e melhorar a ortogonalidade. Esta

malha também foi construída a partir da geometria do tubo de 25 *m* de comprimento por 0,152 *m* de diâmetro e pode ser observada através da Figura 6.3 a seguir:

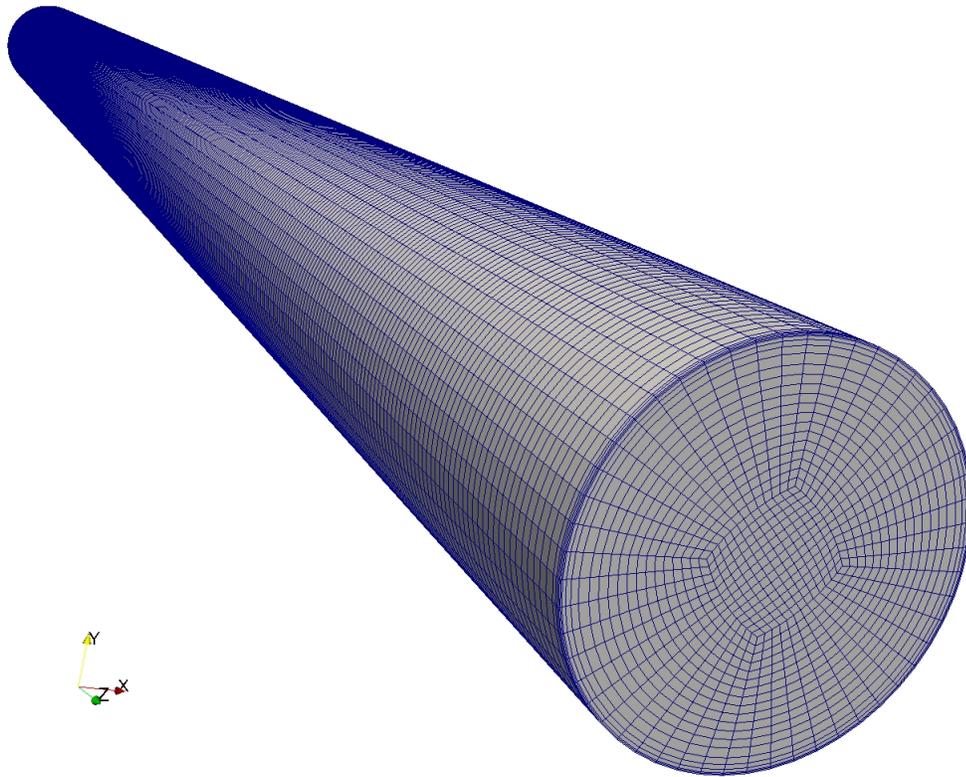


Figura 6.3: Malha computacional com topologia O-Grid

Os contornos foram devidamente definidos através da criação de grupos de faces sendo uma etapa muito importante para a definição das condições de contorno ao se realizar as simulações.

Foi necessário definir somente três grupos de faces. Duas destas faces indicam o início e o final do tubo sendo nomeadas como *entrada* e *saída* respectivamente e um terceiro grupo de faces que representa a parede do tubo nomeado como *parede*.

Inicialmente foi feito um teste de independência de malha (apresentado na seção 7.1) com três malhas hexaédricas contendo 442.000, 552.000 e 663.000 células. Três simulações, uma para cada malha, foram realizadas e então foi comparado o erro relativo para a perda de carga entre as três, para definir a malha a ser utilizada nas simulações seguintes.

Após o software gerar as malhas, elas foram exportadas em formato unv. O OpenFOAM possui em suas utilidades diversos conversores de malhas e entres eles um que converte o formato unv para o formato de malha OpenFOAM.

Além do software SALOME o construtor de malhas nativo do OpenFOAM conhecido como *blockMesh* foi utilizado na construção das malhas utilizadas na validação do escoamento multifásico. Esse gerador de malhas é fornecido como uma utilidade do software.

De acordo com OpenCFD (2010a) o *blockMesh* pode criar malhas paramétricas com taxa de expansão das células e contornos curvos. A malha é gerada a partir de um arquivo dicionário, chamado *blockMeshDict*, localizado no diretório do caso em estudo (*constant/polyMesh*).

O *blockMesh* lê o arquivo *blockMeshDict*, o interpreta e gera a malha. A malha gerada é representada por um conjunto de arquivos de dados com as informações dos pontos, faces, células e dos contornos da geometria. Este conjunto encontra-se nos arquivos *points*, *faces*, *cellZones* e *boundary* respectivamente, no mesmo diretório.

A malha gerada, constituída somente de blocos hexaédricos, foi convertida a uma malha poliédrica com o uso do algoritmo *polyDualMesh*, produzindo um malha poliédrica com melhorias em sua ortogonalidade.

A malha gerada para a validação pode ser conferida pela Figura 6.4.

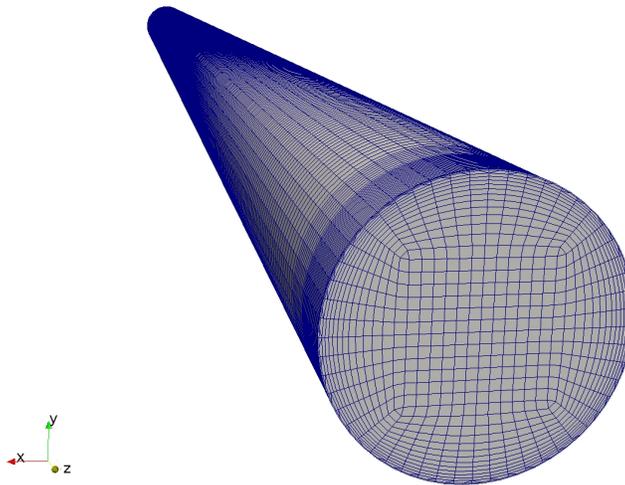


Figura 6.4: Malha utilizada nas simulações do escoamento bifásico em tubo horizontal para validação do modelo.

O princípio por trás do blockMesh é decompor o domínio da geometria em um conjunto de um ou mais blocos tridimensionais hexaédricos. Os contornos desses blocos podem ser linhas retas, arcos ou *splines*. A malha é gerada definindo número de células (divisões) em cada direção do bloco, informações suficientes para blockMesh gerar os dados de malha. Cada bloco da geometria é definido por 8 vértices, um em cada canto do hexaedro. Os vértices são escritos em uma lista, para que cada vértice possa ser acessado de acordo com sua posição na lista.

6.3 Sistema de equações

O modelo matemático foi constituído por 15 equações diferenciais parciais a se saber:

- 1 equação de transporte de massa global para o cálculo do campo de frações volumétricas do gás;
- 2 equações de transporte de quantidade de movimento para o cálculo do campo de velocidades das fases gasosa e líquida.
- 1 equação no método PISO para o cálculo da pressão.
- 2 equações de transporte para o cálculo de k e ϵ .
- 2 equações de transporte de energia para o cálculo do campo de temperaturas das fases gasosa e líquida.
- 7 equações de transporte de massa para espécies envolvidas na reação de craqueamento em fase líquida para o cálculo das frações mássicas.

Cada equação é linearizada pelo método dos volumes finitos aplicados a malhas poliédricas como descrito no Capítulo 3 gerando uma matriz de tamanho $n \times n$, onde n é o número de células que constituem a malha computacional.

O algoritmo do método PISO, para estimativa dos campos de pressão e correção das velocidades, permite que tanto a equação de pressão quanto a correção da fração volumétrica seja resolvida mais de uma vez. Desta forma a quantidade de equações resolvidas em um mesmo passo de tempo geralmente ultrapassa o número base de 15 equações.

A resolução desse sistema de equações demanda um grande esforço computacional comparado a sistemas monofásicos com modelos de turbulência RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*). A atenção à malha gerada também é muito importante, para evitar instabilidades durante a resolução numérica da grande quantidade de equações. O erro numérico aliado à esses sistemas geralmente são muito maiores.

Há de se ressaltar que nem todas as simulações geram bons resultados. Portanto a necessidade de ajuste é frequente. Inúmeras simulações são realizadas até chegar no resultado almejado. Visto a complexidade e a necessidade de poder de cálculo, foi sugerido a aquisição de um *cluster* de computadores (aglomerado ou conjunto de computadores) para tornar possível a resolução do sistema em tempo viável. Esse equipamento é descrito na próxima seção.

A Tabela 6.1 apresenta o sistema de equações do modelo matemático que deve ser resolvido.

Tabela 6.1: Equações do modelo a serem resolvidas.

Variável	Equação
Fração de gás	$\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \varepsilon_g) + \nabla \cdot (\mathbf{U}_r \varepsilon_g (1 - \varepsilon_g)) = \frac{\Gamma_g}{\rho_g}$
Velocidade do gás	$\frac{\partial \mathbf{U}_g}{\partial t} + \mathbf{U}_g^t \cdot \nabla (\mathbf{U}_g) - \nabla \cdot (\nu_g^{ef} \nabla \mathbf{U}_g) + \nabla \cdot (\mathbf{R}_g^C) + \frac{\nabla \varepsilon_g}{\varepsilon_g} \cdot (\mathbf{R}_g^C) = -\frac{\nabla p}{\rho_g} + g + \frac{M_g}{\varepsilon_g \rho_g} + \frac{\mathbf{U}_g \cdot i}{\varepsilon_g \rho_g} \Gamma_g - \frac{\mathbf{U}_g}{\varepsilon_g \rho_g} \Gamma_g$
Velocidade do líquido	$\frac{\partial \mathbf{U}_l}{\partial t} + \mathbf{U}_l^t \cdot \nabla (\mathbf{U}_l) - \nabla \cdot (\nu_l^{ef} \nabla \mathbf{U}_l) + \nabla \cdot (\mathbf{R}_l^C) + \frac{\nabla \varepsilon_l}{\varepsilon_l} \cdot (\mathbf{R}_l^C) = -\frac{\nabla p}{\rho_l} + g + \frac{M_l}{\varepsilon_l \rho_l} + \frac{\mathbf{U}_l \cdot i}{\varepsilon_l \rho_l} \Gamma_l - \frac{\mathbf{U}_l}{\varepsilon_l \rho_l} \Gamma_l$
Pressão (método PISO)	$\nabla \cdot \left(\varepsilon_{g,f} \left(\phi_g^* - \frac{1}{\rho_g \mathbf{A}_g} f S_f \nabla_f^\perp p \right) + \varepsilon_{l,f} \left(\phi_l^* - \frac{1}{\rho_l \mathbf{A}_l} f S_f \nabla_f^\perp p \right) \right) = \Omega$
k	$\frac{\partial k_l}{\partial t} + (\mathbf{U}_l \cdot \nabla) k_l - \nabla \cdot \left(\frac{\nu_l^{ef}}{\sigma_k} \nabla k_l \right) = P_k - \varepsilon_l$
$epsilon$	$\frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} + (\mathbf{U}_l \cdot \nabla) \varepsilon_l - \nabla \cdot \left(\frac{\nu_l^{ef}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon_l \right) = \frac{\varepsilon_l}{k_l} (C_1 P_k - C_2 \varepsilon_l)$
Temperatura do gás	$\frac{\partial T_g}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_g T_g + T_g (\nabla \cdot \mathbf{U}_g) - \frac{\nabla \varepsilon_g}{\varepsilon_g} \cdot (\lambda_g^{ef} \nabla T_g) + \nabla \cdot (\lambda_g^{ef} \nabla T_g) = \frac{\Gamma_g}{\varepsilon_g \rho_g C p_g} H_{vap} + \frac{a_i h_{l,g}^c (T_{sat} - T_g)}{\varepsilon_g \rho_g C p_g}$
Temperatura do líquido	$\frac{\partial T_l}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_l T_l + T_l (\nabla \cdot \mathbf{U}_l) - \frac{\nabla \varepsilon_l}{\varepsilon_l} \cdot (\lambda_l^{ef} \nabla T_l) + \nabla \cdot (\lambda_l^{ef} \nabla T_l) = \frac{\Gamma_l}{\varepsilon_l \rho_l C p_l} H_{vap} + \frac{a_i h_{l,g}^c (T_{sat} - T_l)}{\varepsilon_l \rho_l C p_l}$
Concentração de destilados (1)	$\frac{\partial C_{l,1}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_l C_{l,1} + C_{l,1} (\nabla \cdot \mathbf{U}_l) - \frac{\nabla \varepsilon_l}{\varepsilon_l} \cdot (D_{l,1}^{ef} \nabla C_{l,1}) + \nabla \cdot (D_{l,1}^{ef} \nabla C_{l,1}) = (Y_{l,1}^i - Y_{l,1}) \frac{\Gamma_l}{\varepsilon_l} + R_{l,1}^{react}$
Concentração de saturados (2)	$\frac{\partial C_{l,2}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_l C_{l,2} + C_{l,2} (\nabla \cdot \mathbf{U}_l) - \frac{\nabla \varepsilon_l}{\varepsilon_l} \cdot (D_{l,2}^{ef} \nabla C_{l,2}) + \nabla \cdot (D_{l,2}^{ef} \nabla C_{l,2}) = (Y_{l,2}^i - Y_{l,2}) \frac{\Gamma_l}{\varepsilon_l} + R_{l,2}^{react}$
Concentração de aromáticos (3)	$\frac{\partial C_{l,3}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_l C_{l,3} + C_{l,3} (\nabla \cdot \mathbf{U}_l) - \frac{\nabla \varepsilon_l}{\varepsilon_l} \cdot (D_{l,3}^{ef} \nabla C_{l,3}) + \nabla \cdot (D_{l,3}^{ef} \nabla C_{l,3}) = (Y_{l,3}^i - Y_{l,3}) \frac{\Gamma_l}{\varepsilon_l} + R_{l,3}^{react}$
Concentração de resinas (4)	$\frac{\partial C_{l,4}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_l C_{l,4} + C_{l,4} (\nabla \cdot \mathbf{U}_l) - \frac{\nabla \varepsilon_l}{\varepsilon_l} \cdot (D_{l,4}^{ef} \nabla C_{l,4}) + \nabla \cdot (D_{l,4}^{ef} \nabla C_{l,4}) = (Y_{l,4}^i - Y_{l,4}) \frac{\Gamma_l}{\varepsilon_l} + R_{l,4}^{react}$
Concentração de asfaltenos solúveis (5)	$\frac{\partial C_{l,5}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_l C_{l,5} + C_{l,5} (\nabla \cdot \mathbf{U}_l) - \frac{\nabla \varepsilon_l}{\varepsilon_l} \cdot (D_{l,5}^{ef} \nabla C_{l,5}) + \nabla \cdot (D_{l,5}^{ef} \nabla C_{l,5}) = (Y_{l,5}^i - Y_{l,5}) \frac{\Gamma_l}{\varepsilon_l} + R_{l,5}^{react}$
Concentração de asfaltenos em mesofase (6)	$\frac{\partial C_{l,6}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_l C_{l,6} + C_{l,6} (\nabla \cdot \mathbf{U}_l) - \frac{\nabla \varepsilon_l}{\varepsilon_l} \cdot (D_{l,6}^{ef} \nabla C_{l,6}) + \nabla \cdot (D_{l,6}^{ef} \nabla C_{l,6}) = (Y_{l,6}^i - Y_{l,6}) \frac{\Gamma_l}{\varepsilon_l} + R_{l,6}^{react}$
Concentração de coque (7)	$\frac{\partial C_{l,7}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}_l C_{l,7} + C_{l,7} (\nabla \cdot \mathbf{U}_l) - \frac{\nabla \varepsilon_l}{\varepsilon_l} \cdot (D_{l,7}^{ef} \nabla C_{l,7}) + \nabla \cdot (D_{l,7}^{ef} \nabla C_{l,7}) = (Y_{l,7}^i - Y_{l,7}) \frac{\Gamma_l}{\varepsilon_l} + R_{l,7}^{react}$

6.4 Metodologia numérica de resolução

O método dos volumes finitos foi utilizado na discretização das equações diferenciais do sistema. Aliás este é o método padrão e único empregado pelo OpenFOAM.

Para aumentar a eficiência nos cálculos foi utilizada a técnica de computação de alta performance HPC (sigla do inglês *High Performance Computing*) em processamento paralelo. O processamento paralelo consiste em dividir o domínio de cálculo, formado pela malha computacional, em um determinado número de subdomínios. Cada subdomínio gerado é destinado a uma unidade de processamento, que se comunicam entre si, para sua solução. O *cluster* de computadores adquirido possibilitou a resolução de cada simulação em 12 processos paralelos. A divisão em 12 processos corresponde ao número de processadores em um nó do *cluster*. Testes foram realizados com mais de 12 processos, mas ganhos na eficiência do processamento não foram observados. Isso pode ocorrer devido ao *delay* (atraso) existente na comunicação entre os nós, que apesar de ser uma comunicação de alta taxa de transferência por serem interligados por um *switch infiniband*, ainda é muito menor que a transferência entre os processadores da mesma unidade de processamento e entre processadores de uma mesma placa mãe. Portanto, para o tamanho de malha utilizada nesse trabalho, foi fixado 12 processos paralelos como a quantidade ótima na resolução dos casos estudados.

O passo de tempo utilizado foi variável, limitado ao máximo de 0,0001s, respeitando o critério de convergência através do número de Courant (COURANT; FRIEDRICHS e LEWY, 1967) máximo igual a 0,5. A simulação foi considerada convergida ao verificar que a fração volumétrica média não sofresse uma variação maior que 0,0001.

O método de interpolação utilizado foi o *upwind* para o termo advectivo. Inicialmente diversas simulações foram realizadas utilizando o método de alta ordem linear, mas devido as instabilidades e dificuldades para a convergência foi escolhido manter somente o método *upwind*, que, apesar de ser um método que gera uma difusão numérica, se mostrou um método muito mais estável concordando com MALISKA (2004) entre outros autores.

Após a discretização de cada equação gerou-se um sistema linear que foi resolvido com métodos adequados para resolução de sistemas lineares. Na resolução da matriz de pressão foi utilizado o método GAMG (*General Algebraic Multi Grid*) descrito em WESSELING (1992) e na resolução das demais matrizes foi utilizado o método PBiCG (*Preconditioned Bi-Conjugate Gradient solver for asymmetric matrices*) com DILU (*Diagonal Incomplete LU*) como pré-condicionador.

Nas simulações para a validação foi utilizado o valor para a relaxação igual a 0,7 para todas as variáveis com exceção da variável pressão. RUSCHE (2002) em seu trabalho sugere utilizar o valor de 0,3 de relaxação para a pressão. No entanto, ao utilizar qualquer valor de relaxação foi constatado uma enorme dificuldade para atingir a convergência. Desta forma, definiu-se não utilizar relaxação para a pressão e a melhora na convergência foi imediatamente observada. A adoção de não se utilizar de relaxação para pressão, em escoamento horizontal bifásico, foi posteriormente conferida ao estudar o trabalho de EKAMBARA *et al.* (2012), os quais não utilizaram da relaxação para pressão em suas simulações. Destaca-se que RUSCHE (2002) realizou suas simulações em geometrias bidimensionais simulando condições de operação de uma coluna borbulhante com o fluxo volumétrico na mesma direção vertical da gravidade, mas em sentido oposto, enquanto o presente trabalho utiliza-se de geometria tridimensional com fluxo volumétrico na direção horizontal. As demais simulações dos estudos de casos foram realizadas no transiente sem utilizar relaxações.

6.5 Equipamento computacional

Inicialmente o equipamento computacional utilizado para a resolução do modelo era constituído de um computador com uma unidade de processamento de 4 processos de 2,8GHz e memória RAM de 8GB.

Como o modelo gerado é formado por uma grande quantidade de equações de transporte a serem resolvidas, e o sistema a ser estudado foi constituído por geometrias que geraram malhas que variavam de 200.000 (duzentos mil) a 2.000.000 (dois milhões) de células, o tempo em obter resultados estava muito elevado e o trabalho se tornava inviável.

A demora de um a três meses para se obter resultados com tempos de simulação que giravam entre 10 e 50 segundos indicou a necessidade da obtenção de um sistema com maior capacidade de processamento para a resolução do problema em menor tempo.

Com a colaboração da FAPESP foi obtido um *cluster* de computadores com a seguinte especificação:

- 6 Nós computacionais contidos em 3 servidores SGI Altix XE 340 sendo cada nó configurado com:
- 12 Núcleos compostos por 2 sockets Intel Xeon Six Core 5650 de 2.66 GHz, com 12MB cache, 6.4 GT/s;

- 24 GB de memória DDR3 1333 MHz;
- 1 disco de 500 GB SATA2;
- 2 portas Gigabit Ethernet;
- 1 portas Infiniband QDR 4x;
- 1 master node SGI Altix XE 270 configurado com;
- 8 Núcleos compostos por 2 sockets Intel Xeon Quad Core 5620 de 2.4 GHz, com 12MB cachê, 5.86 GT/s;
- 24 GB de memória DDR3 1333 MHz;
- 5 discos de 2000 GB SATA2;
- Fonte Redundante;
- 2 portas Gigabit Ethernet;
- 1 porta Infiniband QDR 4x;
- 1 Switch Gigabit Ethernet de 24 portas;
- 1 Switch Infiniband QDR 4x de 36 portas

Com o *cluster* o tempo computacional foi reduzido drasticamente e uma maior quantidade de simulações pude ser realizada, a identificação e correção de erros, além de mudanças no código foram realizadas em menor tempo e o trabalho se desenvolveu com maior agilidade e praticidade.

6.6 Procedimento de solução

A seguir apresenta-se a sequência para a solução do acoplamento pressão e velocidades, frações volumétricas, equação de energia, transporte de massa multicomponentes e modelo de turbulência.

- Resolver a equação da continuidade para a fase.
- Atualizar os coeficientes de arraste, sustentação, massa virtual e dispersão turbulenta.
- Construir a matriz da equação de quantidade de movimento.
- Predizer os campos de velocidades, sem considerar o gradiente de pressão nesta etapa.
- Resolver a equação da pressão.
- Corrigir as velocidades considerando o novo campo de pressão calculado.
- Atualizar as frações volumétricas.
- Resolver as equações de energia.
- Resolver as equações de massa para os pseudocomponentes
- Resolver as equações de transporte para as quantidades turbulentas.

6.7 Método gráfico para previsão de precipitação do coque.

Usando a mesma estratégia de SOUZA *et al.* (2005) para prever a precipitação de coque, um diagrama ternário (TAKATSUKA *et al.*, 1989) apresentado pela Figura 6.5 foi utilizado ao invés de um modelo termodinâmico. O modelo considera que o pseudocomponente asfalteno é o único que está relacionado com a formação de coque, sendo portanto, o coque associado a quantidade de asfaltenos formado.

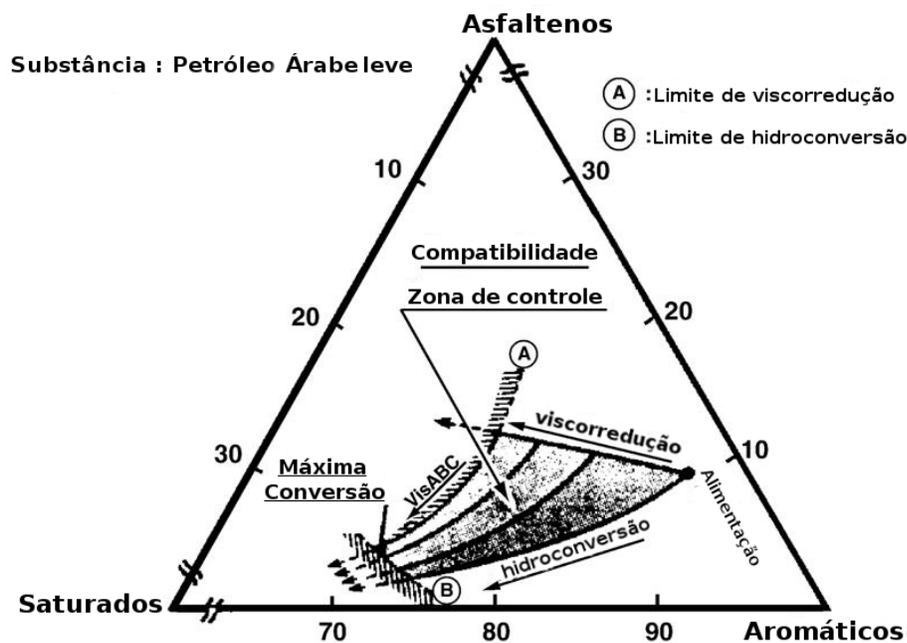


Figura 6.5: Diagrama ternário adaptado de TAKATSUKA *et al.* (1989).

Analisando o diagrama podemos observar que a formação de coque não é possível nos intervalos de fração mássica a seguir.

$$0,17 < Y_{aromaticos} + Y_{resinas} < 0,88$$

$$0,05 < Y_{saturados} < 0,25$$

Pode-se notar também que a região escura corresponde a região onde todos os pseudocomponentes são solúveis na fase líquida e a região clara é a região onde os asfaltenos solúveis se precipitam. Portanto, as linhas que limitam a região escura do diagrama representam as frações mássicas de asfaltenos solúveis na saturação, e isto não é constante. As condições são apresentadas a seguir.

Se $Y_{asf\ sol} < Y_{asf\ sol}^{sat}$, então todos os pseudocomponentes estão dissolvidos na mesma fase.

Se um dos dois intervalos de frações mássicas apresentados forem violados ou se $Y_{asf\ sol} \geq Y_{asf\ sol}^{sat}$, então o excesso $(Y_{asf\ sol} - Y_{asf\ sol}^{sat})$ precipita como asfalteno em mesofase e $Y_{asf\ sol} = Y_{asf\ sol}^{sat}$.

Capítulo 7

Resultados e discussões

7.1 Validações aplicadas ao modelo de escoamento bifásico

Nessa seção serão apresentados os resultados obtidos durante a fase de geração da malha através de um teste de independência de malha e em seguida a validação do modelo de escoamento através dos dados obtidos de fração volumétrica e velocidade ao longo da posição vertical com referência ao diâmetro do tubo.

Primeiramente o modelo de escoamento foi avaliado em uma condição limite em que somente a fase contínua escoava pelo tubo com número de Reynolds igual a 50.000 e os dados obtidos comparados aos dados experimentais retirados de LAUFER (1952). Posteriormente seis simulações foram realizadas para diversos fluxos de ar e água na entrada de um tubo horizontal e comparados com os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991). As simulações serão descritas com mais detalhes a seguir.

7.1.1 Teste de independência e consistência de malha

Nas três simulações do teste de independência e consistência de malha, a velocidade do petróleo líquido na entrada foi de $1,5 \text{ m s}^{-1}$. Nessas simulações não foram consideradas as equações de transferência de energia e massa multicomponentes e foram resolvidas apenas as equações que dizem respeito a transferência de quantidade de movimento e a turbulência. Nos testes não foi considerada a mudança de fase e portanto nenhum gás foi gerado. Foi verificado um erro relativo para perda de carga de aproximadamente 3,6% ao se comparar a primeira e segunda malha e de aproximadamente 1,7% entre a segunda e a terceira. Considerou-se que

a malha contendo 552.000 elementos seria adequada para realizar as simulações dos casos. Esta malha foi gerada a partir da geometria de um tubo cilíndrico com 25 *m* de comprimento e 0,152 *m* de diâmetro. A malha é constituída por 500 divisões na direção axial, 13 divisões em cada direção do bloco interno central do O-grid e 18 elementos na região radial para cada um dos outros quatro blocos externos compondo O-grid. A análise de qualidade da malha, fornecida pela utilidade *checkMesh* do OpenFOAM, indicou uma não-ortogonalidade média de 4,74, *aspect ratio* máximo de 56,55 e o *skewness* máximo foi em torno de 0,48. Esta malha foi utilizada em todas as simulações dos casos estudados, ficando de fora das simulações de validação do escoamento, as quais a malha gerada pelo *blockMesh* contendo 499.656 elementos foi empregada.

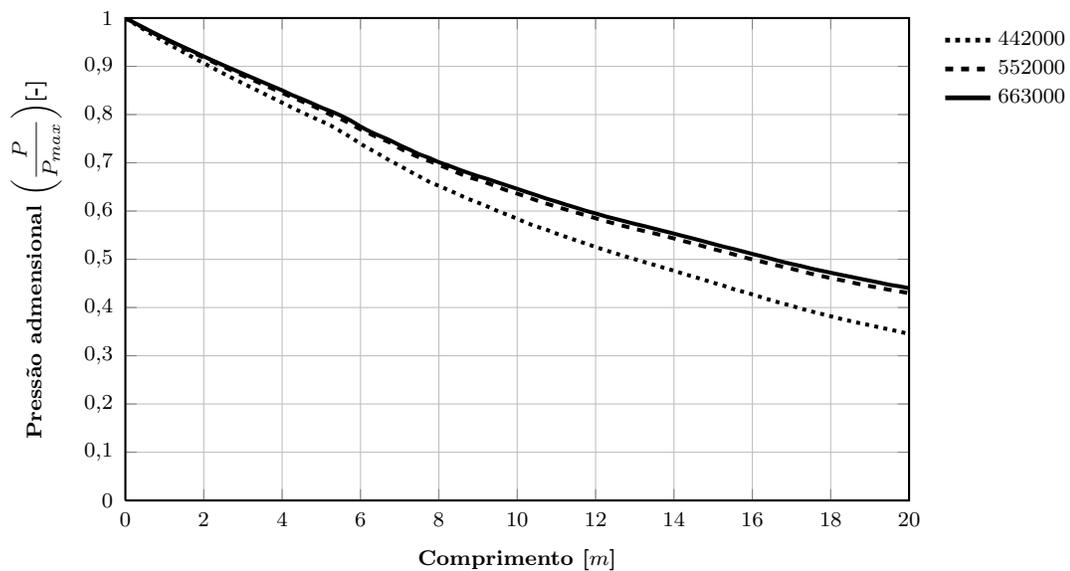


Figura 7.1: Comparação entre as pressões no centro do tubo para três tamanhos de malha.

7.1.2 Resultados da validação do escoamento em uma condição limite.

Para validar as simulações foi utilizada uma correlação teórica para o cálculo do gradiente de pressão baseada no fator de atrito calculado pela Equação de Blasius utilizando propriedades médias (BHRAMARA *et al.*, 2009) e comparado com os resultados obtidos pelo modelo fluidodinâmico. A comparação entre os valores teóricos e os calculados pelo modelo CFD são apresentados na Figura 7.2.

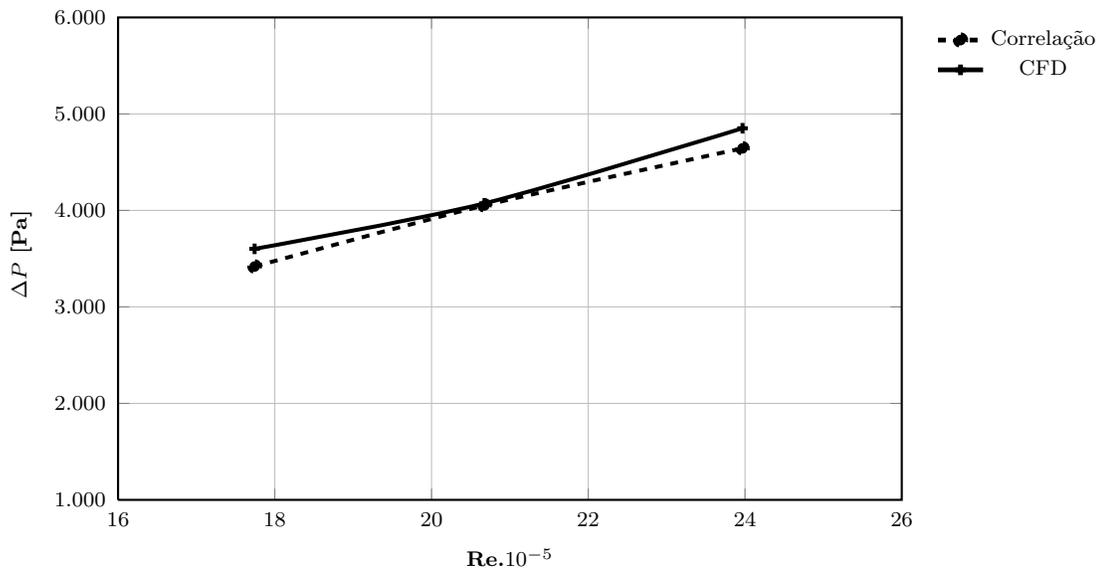


Figura 7.2: Comparação da perda de carga estimada pelo modelo fluidodinâmico e pela correlação usando fator de fricção para escoamento turbulento.

O erro percentual na comparação do gradiente de pressão ficou abaixo de 5% em todos os pontos analisados. Este valor apresenta uma boa aproximação entre os dados obtidos pela correlação e o previsto pelo modelo CFD.

Em uma primeira avaliação, o perfil de velocidade definido apenas em uma fase contínua, foi comparado com os dados experimentais retirados de LAUFER (1952) para o escoamento turbulento dentro de um tubo. Para isso, a fração volumétrica da fase contínua foi definida como sendo 1,0. Os resultados em termos adimensionais estimados pelo modelo CFD mostraram uma boa aproximação com os dados experimentais e podem ser vistos na Figura 7.3.

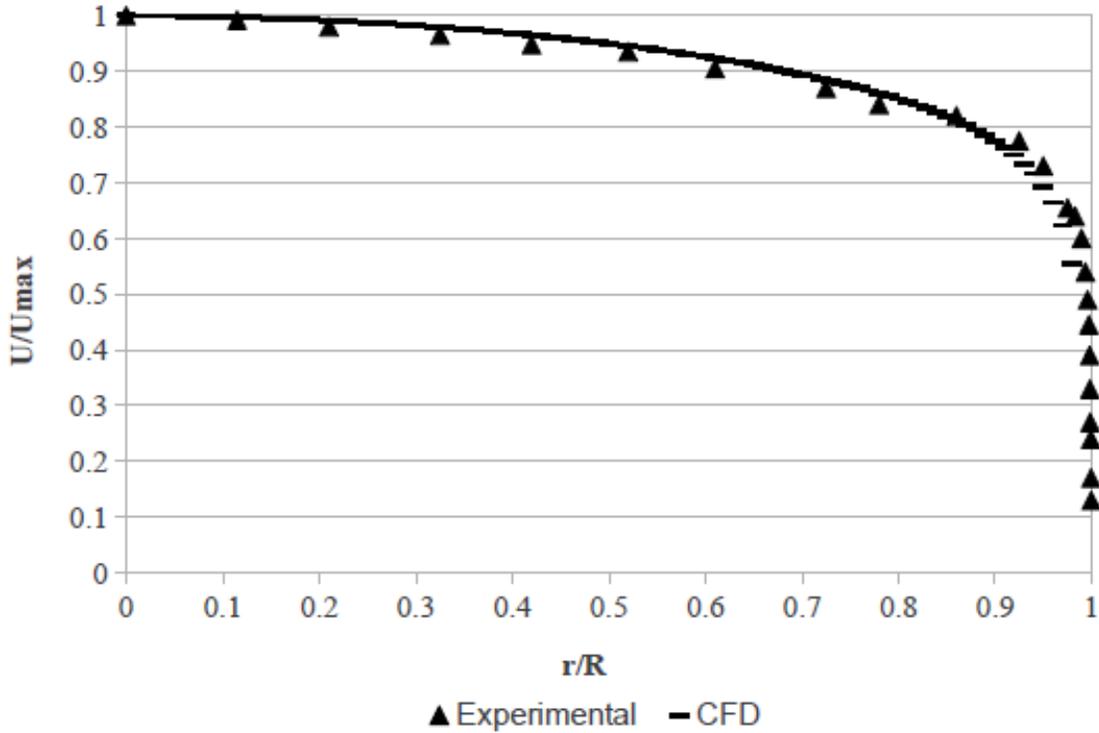


Figura 7.3: Comparação entre a velocidade estimada pelo modelo CFD e os dados experimentais na posição radial para regime turbulento monofásico plenamente desenvolvido.

Nos gráficos r é a posição radial a partir do centro do tubo; R é o raio; P é a pressão, P_{max} é a pressão máxima, U é a magnitude da velocidade e U_{max} é a maior magnitude atingida da velocidade, ΔP é a perda de carga e Re é o número adimensional de Reynolds. Pode-se verificar uma ótima previsão dos perfis de velocidade através do modelo CFD em comparação aos dados experimentais.

7.1.3 Resultados da validação do escoamento bifásico líquido-gás.

a) Definição das simulações para validação do escoamento bifásico líquido-gás.

Com o objetivo de validar o modelo foram realizadas 6 simulações com diferentes fluxos de ar e água na entrada de um tubo com $0,0503\text{ m}$ de diâmetro por 13 m de comprimento. Essas dimensões foram escolhidas de acordo com o trabalho de EKAMBARA *et al.* (2012), os quais utilizaram os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para validar a implementação de um modelo de escoamento bifásico ar-água

escoando no interior de um tubo horizontal. A geometria pode ser conferida através da Figura 7.4

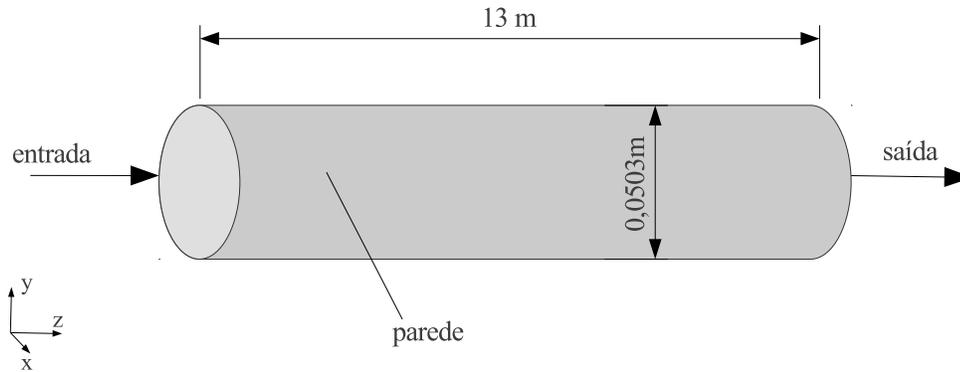


Figura 7.4: Geometria do tubo utilizada nas simulações para validação do escoamento líquido-gás de acordo com EKAMBARA *et al.* (2012).

O gerador de malha nativo do OpenFOAM chamado *blockMesh* foi utilizado na construção da malha computacional para as simulações de validação.

A Tabela 7.1 apresenta os dados utilizados nas simulações realizadas através do modelo CFD.

Tabela 7.1: Dados de entrada para as simulações realizadas.

Simulação	velocidades superficiais [$m s^{-1}$]		fração volumétrica do gás [-]
N ^o	\mathbf{u}_l	\mathbf{u}_g	ε_g
1	5,1	0,25	0,043
2	5,1	0,50	0,080
3	5,1	0,80	0,139
4	5,1	1,34	0,204
5	3,74	0,51	0,105
6	4,4	0,51	0,102

A Tabela 7.2 apresenta as condições de contorno utilizadas nas seis simulações do

escoamento gás-líquido.

Tabela 7.2: Condições iniciais e de contorno usadas na simulação para validação do escoamento bifásico líquido-gás.

Variável	entrada	saída	parede
\mathbf{U}_l [$m\ s_{-1}$]	$(0\ 0\ \mathbf{U}_{z,l})$	$\nabla\mathbf{U}_l = 0$	$(0\ 0\ 0)$
\mathbf{U}_g [$m\ s_{-1}$]	$(0\ 0\ \mathbf{U}_{z,g})$	$\nabla\mathbf{U}_g = 0$	$(0\ 0\ 0)$
ε_g [-]	0	$\nabla\varepsilon_g = 0$	$\nabla\varepsilon_g = 0$
p [Pa]	$\nabla p = 0$	$p_{ref} + \rho(gh + gy_{ref})$	$\nabla p = 0$

em que $\mathbf{U}_{z,l}$ e $\mathbf{U}_{z,g}$ são as velocidades do líquido e do gás na direção (z) normal a face na entrada do tubo e corresponde a velocidade superficial multiplicada pela fração volumétrica na entrada conforme a Equação 7.1

$$\mathbf{U}_{z,\alpha} = \varepsilon_\alpha \mathbf{u}_{z,\alpha} \quad (7.1)$$

Os dados obtidos da fração volumétrica de gás e da velocidade axial do líquido no comprimento $z/D = 253$ ao longo da posição vertical y/D serão comparados com os dados experimentais. Em que z é a posição no comprimento do tubo, y é a posição vertical no diâmetro do tubo e D é o diâmetro do tubo.

b) Dados de fração volumétrica do gás obtidos pelo CFD e comparados com o experimental.

Na avaliação do escoamento bifásico líquido-gás (contínuo-disperso) o perfil da fração volumétrica ao longo da posição vertical do tubo retirada na posição axial $z/D = 253$ e foi comparado com os dados experimentais retirados do trabalho de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991). Os resultados das simulações e a comparação entre os dados experimentais podem ser conferidos através das Figuras 7.5; 7.6; 7.7; 7.8; 7.9 e 7.10.

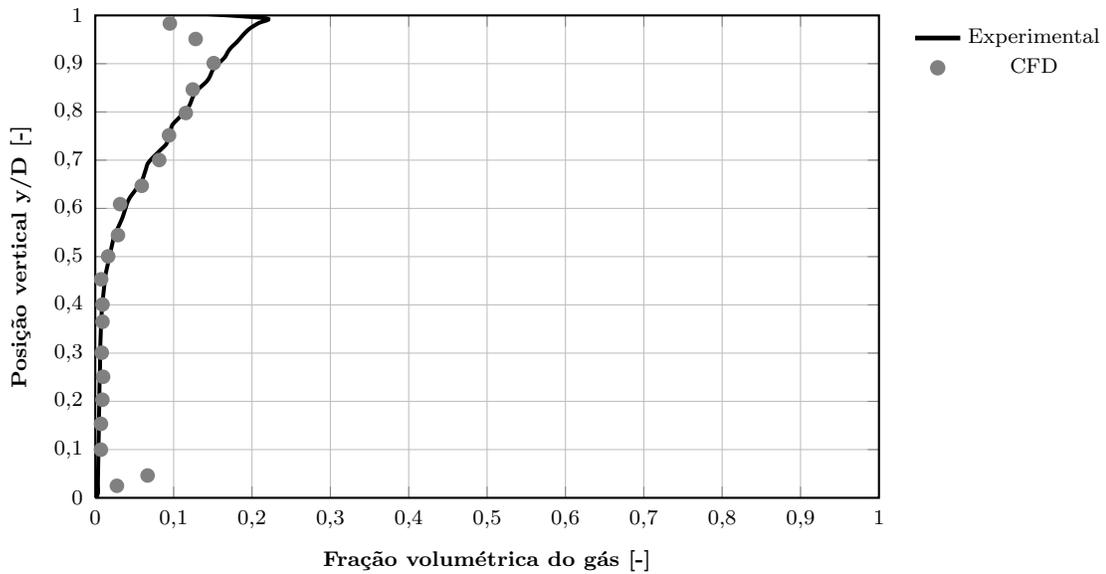


Figura 7.5: Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,25 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,043$.

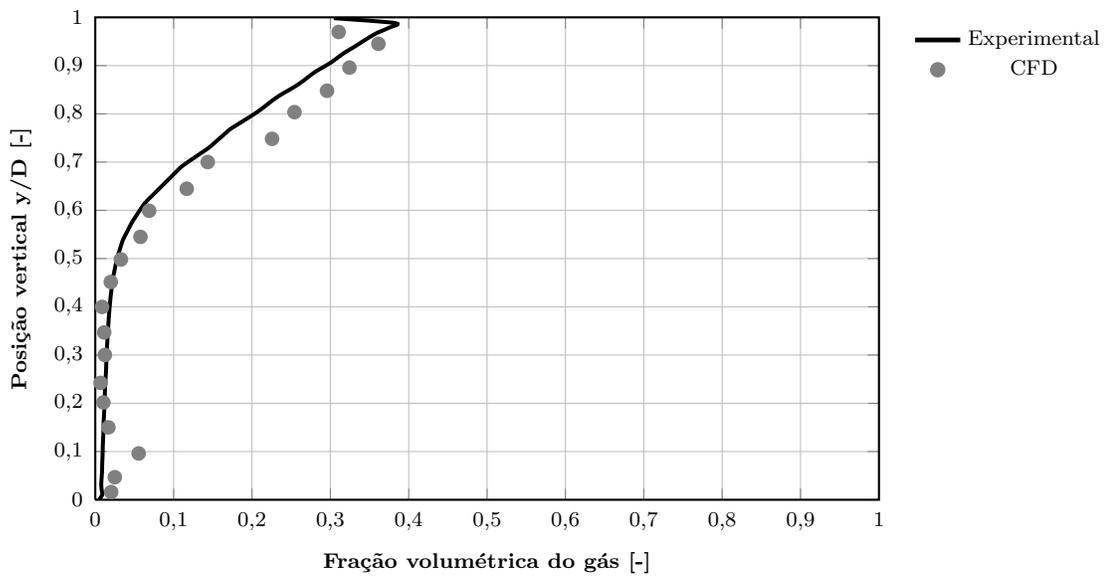


Figura 7.6: Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,50 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,080$.

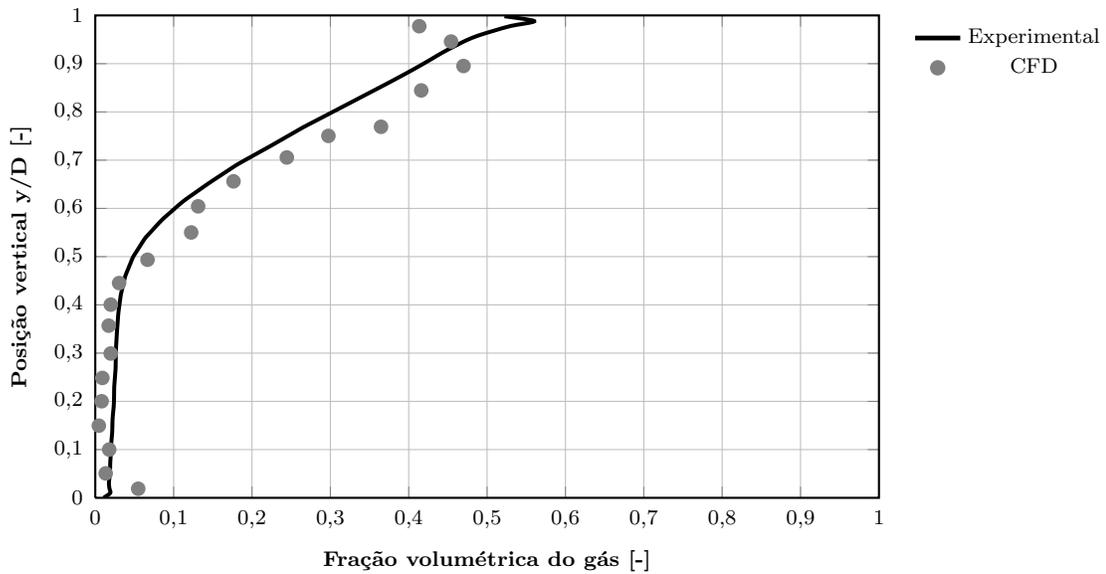


Figura 7.7: Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,80 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,139$.

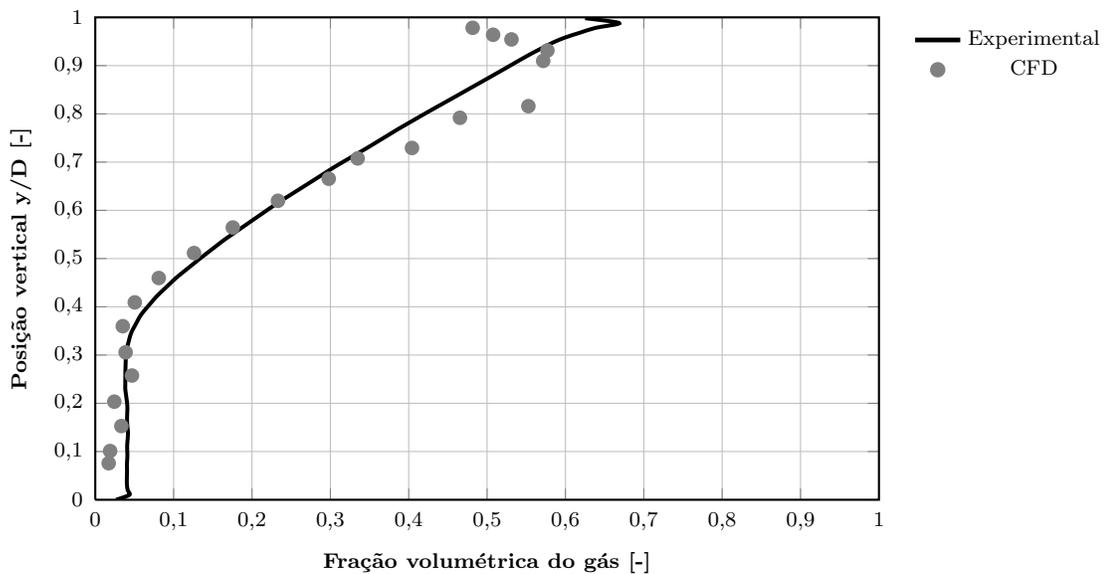


Figura 7.8: Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $1,34 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,204$.

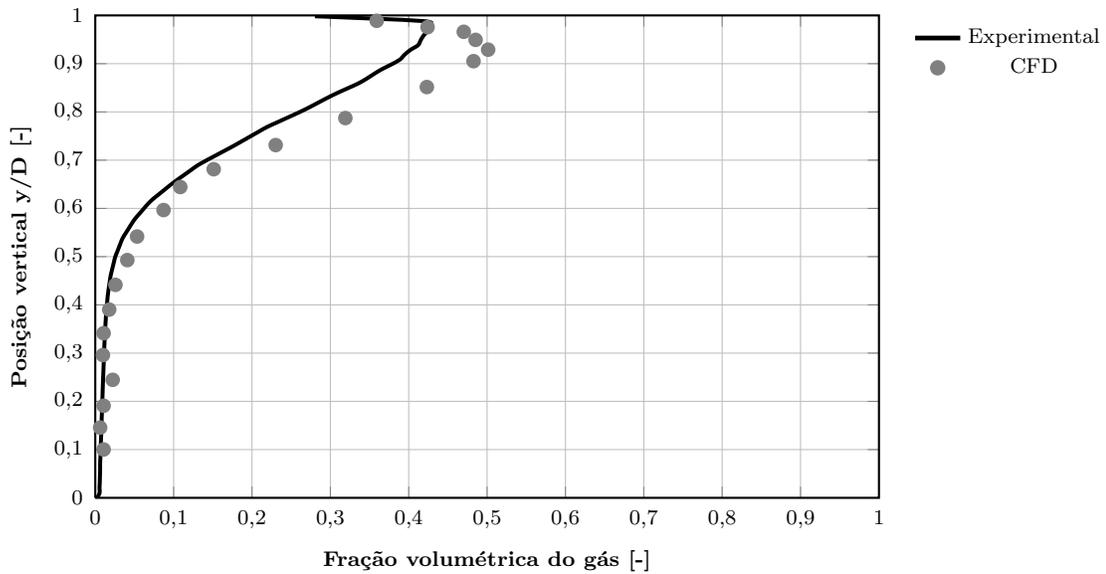


Figura 7.9: Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,51 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $4,4 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a 0,102.

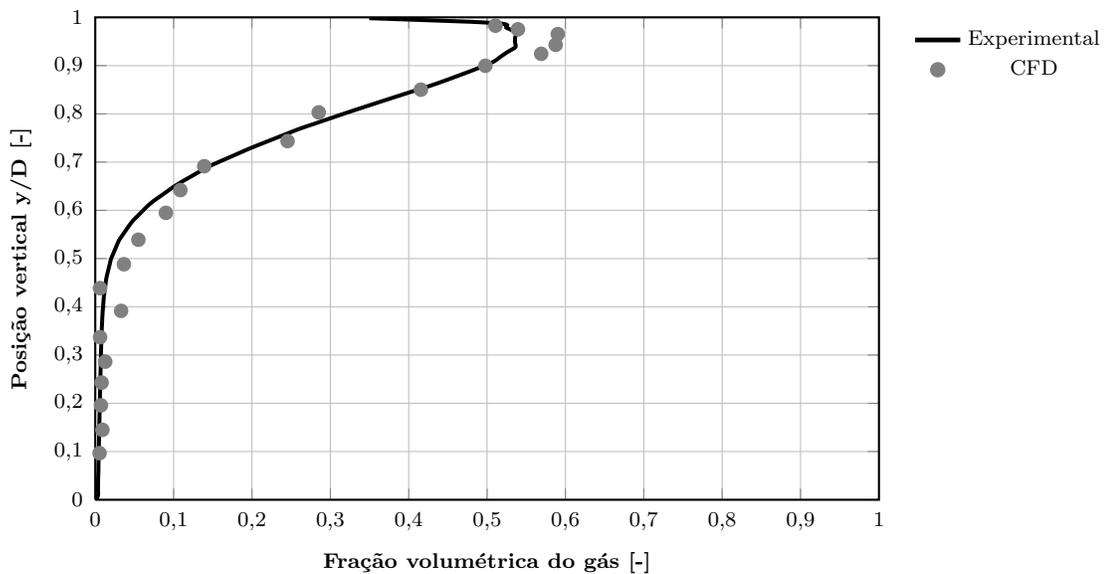


Figura 7.10: Comparação entre os valores da fração de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,51 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $3,74 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a 0,105.

Pode-se observar uma boa aproximação entre os resultados previstos pelo CFD e os dados experimentais retirados de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991). Verifica-se um maior desvio entre os dados experimentais e o CFD na região superior da tubulação onde há uma tendência de acúmulo da fase gasosa e portanto, maior fração volumétrica de gás. No trabalho de EKAMBARA *et al.* (2012) obtiveram boas aproximações, mas em seu estudo, adotaram o balanço populacional considerando o diâmetro das partículas variável e não utilizou a formulação na conservativa. Outro fator de desvio, pode ser a necessidade de um maior estudo na malha para aumentar a precisão nessa região. Mesmo com esses pequenos desvios, a previsão pode ser considerada muito boa para um sistema bifásico escoando na horizontal.

c) Dados de velocidade axial do líquido obtidos pelo CFD e comparados com o experimental.

Os perfis de velocidade axial do líquido também foram avaliados ao longo da posição vertical do tubo retirada na posição axial $z/D = 253$. Os perfis obtidos através das simulações também foram comparados com os dados experimentais retirados do trabalho de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991). Os resultados das simulações e a comparação entre os dados experimentais podem ser conferidos através das Figuras 7.11; 7.12; 7.13; 7.14; 7.15 e 7.16.

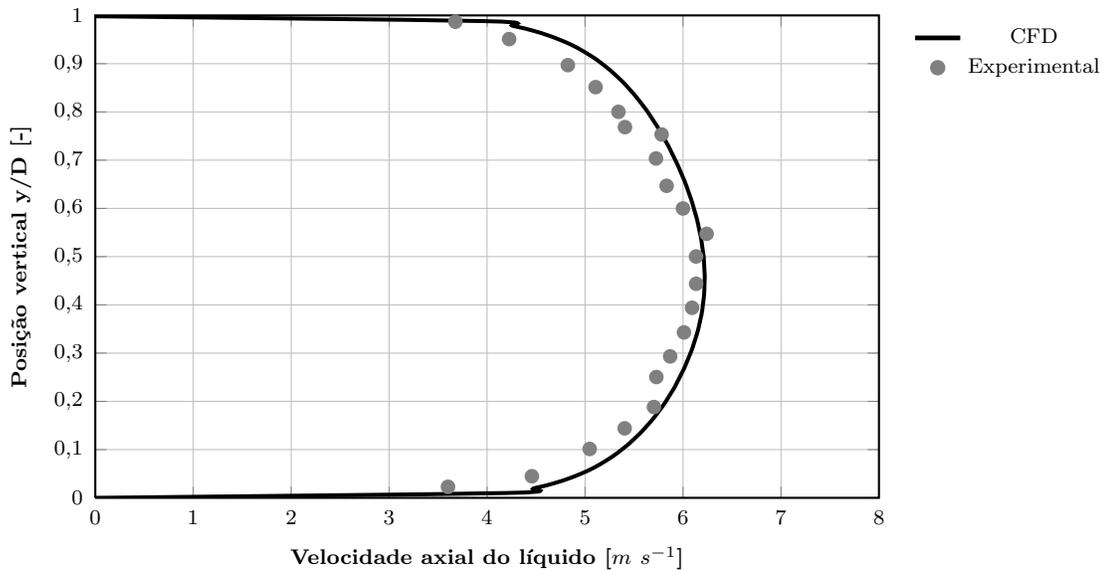


Figura 7.11: Comparação entre os valores da velocidade axial do líquido previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,25 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,043$.

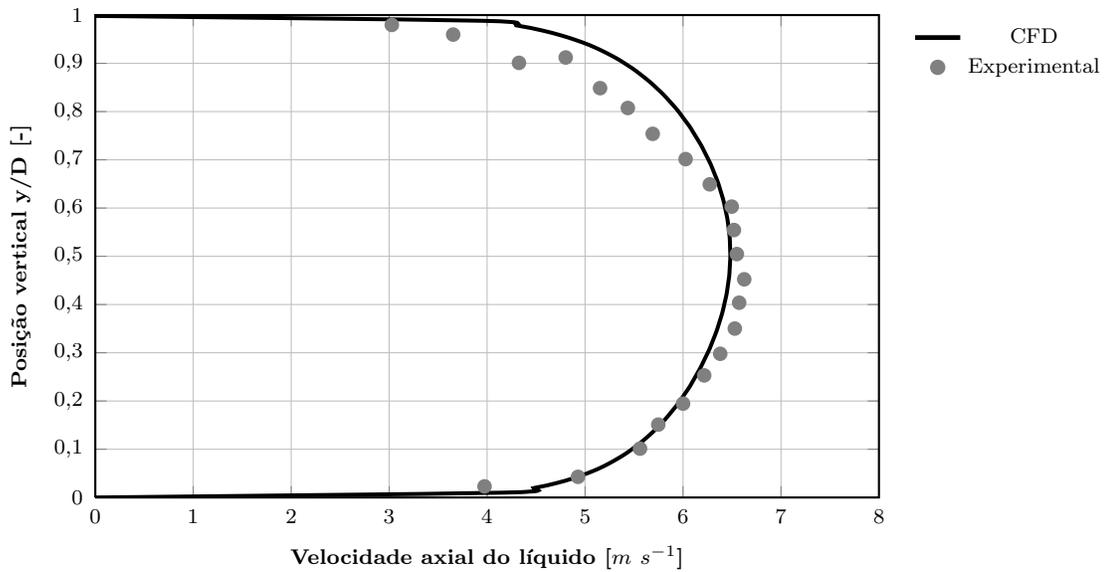


Figura 7.12: Comparação entre os valores da velocidade axial do líquido previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,50 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,080$.

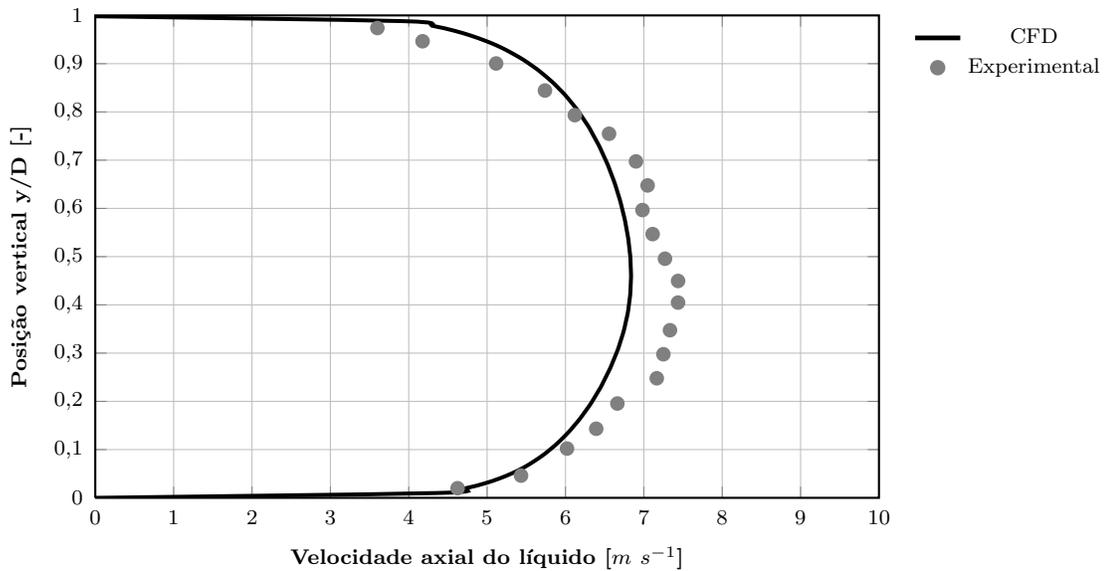


Figura 7.13: Comparação entre os valores da velocidade axial do líquido previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $0,80 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,139$.

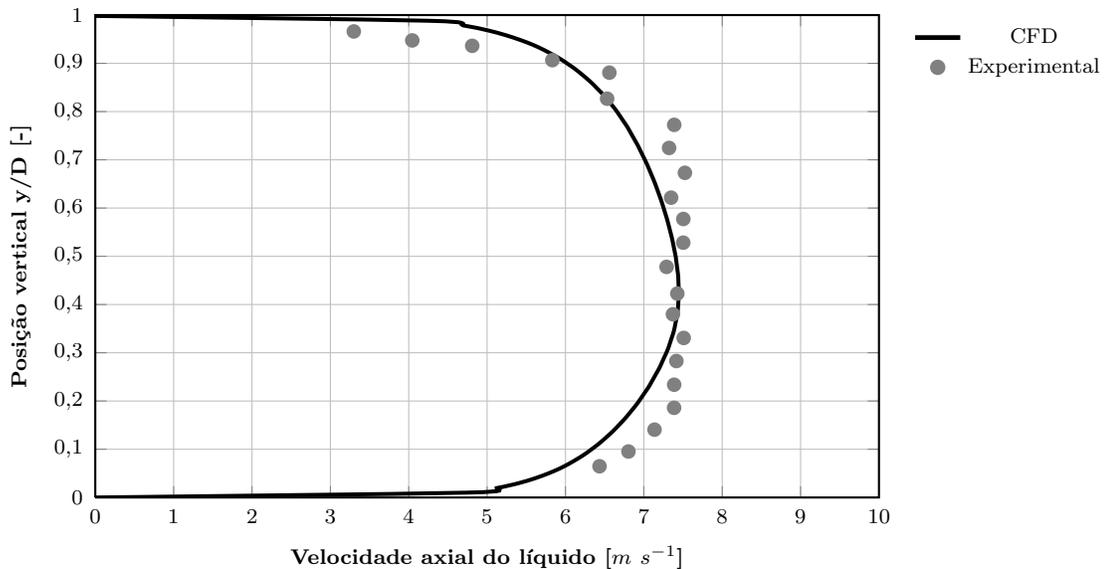


Figura 7.14: Comparação entre os valores da velocidade axial do líquido previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para velocidade superficial do gás de $1,34 \text{ m s}^{-1}$, velocidade superficial do líquido de $5,1 \text{ m s}^{-1}$ e fração gasosa na entrada igual a $0,204$.

Observou-se uma boa aproximação entre os dados obtidos pela simulação através do modelo e os dados experimentais retirados do trabalho de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) o que indica que a formulação não conservativa utilizada não somente é válida como também fornece excelentes resultados.

d) Dados da fração volumétrica média obtidos pelo CFD e comparados com o experimental.

Outro dado que se pode utilizar como parâmetro para avaliar a validade do modelo é a fração volumétrica média do gás no interior do tubo. Pode-se verificar através da Figura 7.17 a comparação entre os dados da fração volumétrica média de gás previstos pelo modelo CFD e o dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991).

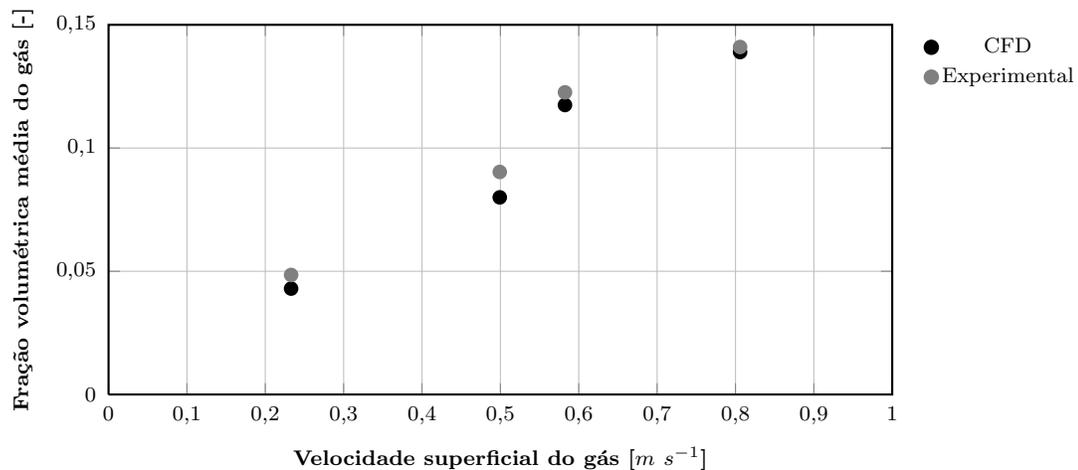


Figura 7.17: Comparação entre os valores da fração média de gás previstos pelo modelo CFD e os dados experimentais de KOCAMUSTAFAOGULLARI e WANG (1991) para diferentes velocidades superficiais de gás com velocidade superficial do líquido fixada em $5,1 m s^{-1}$.

No trabalho de EKAMBARA *et al.* (2012), utilizaram um modelo para o cálculo da concentração de área interfacial, e o diâmetro das partículas neste caso foi considerado variável. Também utilizaram o balanço populacional em seu trabalho. A adoção do balanço populacional e do cálculo da concentração de área interfacial no modelo de EKAMBARA *et al.* (2012) indicam uma melhor estimativa na região em que se tem maior concentração de gás. Entretanto, as simulações realizadas nesse trabalho, também apresentaram uma boa estimativa, não se distanciando muito dos dados experimentais e das simulações realizadas pelos autores.

7.2 Simulações realizadas para o escoamento bifásico com um modelo de vaporização simplificado.

Para realizar as simulações do escoamento de petróleo no interior dos tubos foram considerados dois tipos de petróleo de regiões diferentes. O primeiro corresponde ao petróleo leve Árabe e o outro corresponde ao petróleo betuminoso da região do rio Athabasca no Canadá. O petróleo Árabe possui uma quantidade maior de pseudocomponentes com peso molecular menor, ou seja, frações mais leves enquanto o betume possui em sua composição uma quantidade maior de frações mais pesadas, que no caso são representados pelo pseudocomponente asfalteno. As variações das concentrações das frações de hidrocarbonetos que formam o petróleo agrupadas em pseudocomponentes são descritas por uma rede cinética implementada no modelo.

A mudança de fase é descrita pelo modelo de vaporização simplificado, que considera a vaporização do petróleo como se fosse uma substância simples em que uma temperatura de vaporização média é definida para estabelecer o ponto onde ocorre a mudança de fase. Essa simplificação foi adotada como forma de conseguir caracterizar a mudança de fase nesta etapa do desenvolvimento do trabalho, visto a complexidade em se obter e adaptar um modelo termodinâmico que descreva as características multicomponente do sistema durante a vaporização.

A seguir serão apresentadas as condições operacionais utilizadas nas simulações e posteriormente os resultados obtidos.

7.2.1 Definição das simulações para escoamento bifásico com um modelo de vaporização simplificado.

Foram realizadas duas simulações com o modelo simplificado. Nas duas simulações foi considerado que o petróleo entra apenas em fase líquida, e ao longo do tubo recebe calor proveniente das paredes, se aquecendo. Este aquecimento promoverá a formação de gases no decorrer do processo, diminuindo a fração volumétrica do líquido e formando uma fração volumétrica para o gás.

Portanto, para todas as simulações realizadas neste trabalho, a fração volumétrica de gás ε_g no tempo inicial da simulação será considerada 0 na condição de contorno na entrada do tubo como também no interior do tubo, ou seja, em todas as células do domínio.

A temperatura da parede T_w foi considerada constante em 723, 15K conforme SOUZA *et al.* (2005). A temperatura na parede é um parâmetro muito importante para o cálculo da quantidade de energia que está sendo adicionado ao fluido.

Os fluidos escolhidos para serem simulados escoando no interior do tubo foram o petróleo Árabe leve e o betume do Athabasca. As propriedades densidade, viscosidade molecular, condutividade térmica para a fase líquida e gasosa são apresentadas na Tabela 7.3 a seguir.

Tabela 7.3: Propriedades físicas das fases líquida e gasosa.

Propriedade	petróleo Árabe	Betume	Gás
Densidade [$Kg\ m^{-3}$]	1000	960	1,0
Viscosidade dinâmica [$m^2\ s^{-1}$]	$1\ 10^{-6}$	$1,02\ 10^{-6}$	$1,6\ 10^{-5}$
Diâmetro de partícula [m]	0,0001	0,0001	0,003
Condutividade térmica [$W\ m^{-1}\ K^{-1}$]	POLLEY <i>et al.</i> (2002) *	0,17	0,084
Capacidade Calorífica [$J\ kg^{-1}\ K^{-1}$]	3813	3813	14320
Temperatura de ebulição [K]	603	615	

* referência onde se encontra a correlação para o cálculo da condutividade térmica

As Tabelas 7.4 e 7.5 apresentam a composição destas misturas de acordo com a classificação SARA.

Tabela 7.4: Fração mássica do petróleo Árabe leve para os pseudocomponentes na entrada

Pseudocomponente i	Y_i
Destilados	0,00
Resinas	0,37
Saturados	0,15
Aromáticos	0,37
Asfaltenos	0,11
Coque	0,00

Tabela 7.5: Fração mássica do betume do Athabasca para os pseudocomponentes na entrada

Pseudocomponente i	Y_i
Destilados	0,00
Resinas	0,17
Saturados	0,05
Aromáticos	0,23
Asfaltenos	0,55
Coque	0,00

Os dados das frações mássicas de pseudocomponentes das cargas estudadas foram retiradas de SOUZA *et al.* (2005) e RAHIMI e GENTZIS (2006) para o petróleo Árabe e para o betume do Athabasca respectivamente.

A Tabela 7.6 apresenta as condições de contorno utilizadas na simulação do petróleo Árabe leve.

Tabela 7.6: Condições iniciais e de contorno usada na simulação para petróleo Árabe.

Variável	entrada	saída	parede
\mathbf{U}_l [$m\ s_{-1}$]	(0 0 1,5)	$\nabla\mathbf{U}_l = 0$	(0 0 0)
\mathbf{U}_g [$m\ s_{-1}$]	(0 0 1,5)	$\nabla\mathbf{U}_g = 0$	(0 0 0)
ε_g [-]	0	$\nabla\varepsilon_g = 0$	$\nabla\varepsilon_g = 0$
p [Pa]	$\nabla p = 0$	$p_{ref} + \rho(gh + gx_{ref})$	$\nabla p = 0$
T_l [K]	583	$\nabla T_l = 0$	$\nabla T_l = 0$
T_g [K]	603	$\nabla T_g = 0$	$\nabla T_g = 0$

A Tabela 7.7 apresenta as condições de contorno utilizadas para o betume Athabasca.

Tabela 7.7: Condições iniciais e de contorno usadas na simulação para betume.

Variável	entrada	saída	parede
\mathbf{U}_l [$m\ s^{-1}$]	(0 0 1,5)	$\nabla\mathbf{U}_l = 0$	(0 0 0)
\mathbf{U}_g [$m\ s^{-1}$]	(0 0 1,5)	$\nabla\mathbf{U}_g = 0$	(0 0 0)
ε_g [-]	0	$\nabla\varepsilon_g = 0$	$\nabla\varepsilon_g = 0$
p [Pa]	$\nabla p = 0$	$p_{ref} + \rho(gh + gy_{ref})$	$\nabla p = 0$
T_l [K]	595	$\nabla T_l = 0$	$\nabla T_l = 0$
T_g [K]	615	$\nabla T_g = 0$	$\nabla T_g = 0$

Mesmo que não haja gás no início das simulações deve-se definir as condições iniciais e de contorno para a fase gasosa, pois, suas equações são resolvidas juntamente com as equações da fase líquida. O valor adotado para a temperatura do gás no início foi o mesmo valor definido para a temperatura de vaporização, pois, considera-se que o gás gerado está na mesma temperatura de vaporização do líquido. O modelo prevê a formação de gás somente quando a temperatura do líquido atinge a temperatura de vaporização, ou seja, somente quando $T_l \geq T_{sat}$. Para o petróleo Árabe a temperatura de vaporização foi definida em 603 K enquanto que para o betume foi 615 K

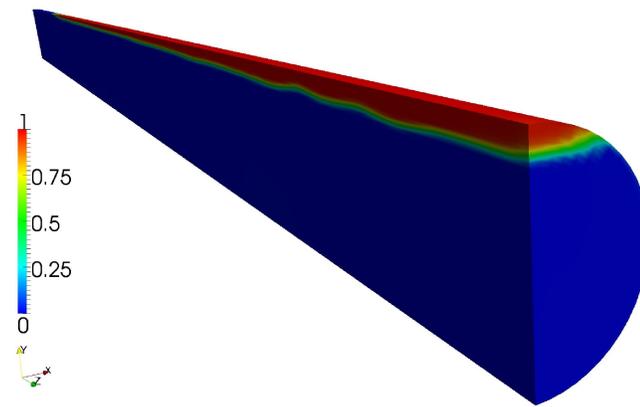
7.2.2 Resultados das simulações com modelo de vaporização simplificado.

Nessa seção são apresentados os resultados obtidos através da simulação do escoamento de petróleo Árabe e de betume do Athabasca no interior de um tubo aquecido do forno. Os resultados foram obtidos pela resolução do modelo bifásico que leva em consideração a mudança de fase através de um modelo de vaporização simplificado. Os resultados para fração volumétrica, temperaturas do petróleo, k e ϵ , perfil de velocidade do petróleo e concentração de coque são apresentados a seguir:

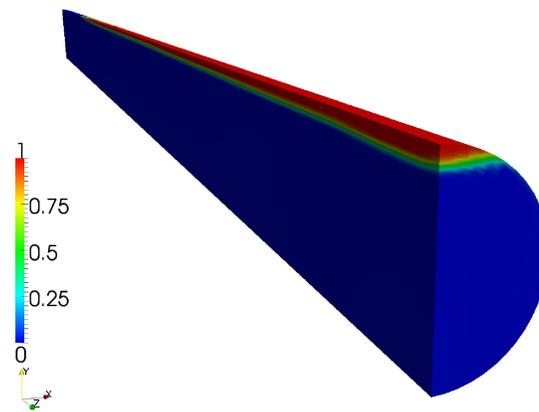
a) Fração volumétrica

A Figura 7.18 apresenta a fração volumétrica de gás após 25s. Este foi o tempo necessário para a simulação transiente alcançar uma condição de estado estacionário. O estado estacionário foi atingido quando a fração volumétrica média no interior do tubo não

apresentou alteração significativa a partir da quarta casa decimal.



(a) Fração volumétrica de gás para petróleo Árabe



(b) Fração volumétrica de gás para betume Athabasca

Figura 7.18: Perfil da fração volumétrica da fase gasosa para petróleo Árabe e betume após 25s

Pode-se observar o acúmulo do volume de gás na parte superior do tubo. Este acúmulo é esperado devido a posição horizontal do tubo e as diferenças de densidades entre as fases.

Após 25 s a fração volumétrica média do gás dentro do tubo se encontra em torno de 2,9% para o petróleo Árabe e aproximadamente 1,86% para o Athabasca betume. Como esperado, a fração volumétrica do gás para o petróleo leve Árabe foi maior que o calculado para o betume Athabasca. Isso se deve a consideração de um ponto de ebulição maior para a carga mais pesada, que no caso foi o betume.

A Figura 7.19 apresenta a variação da fração volumétrica de gás no centro do tubo ao longo de seu comprimento após 25 s para o escoamento de petróleo Árabe.

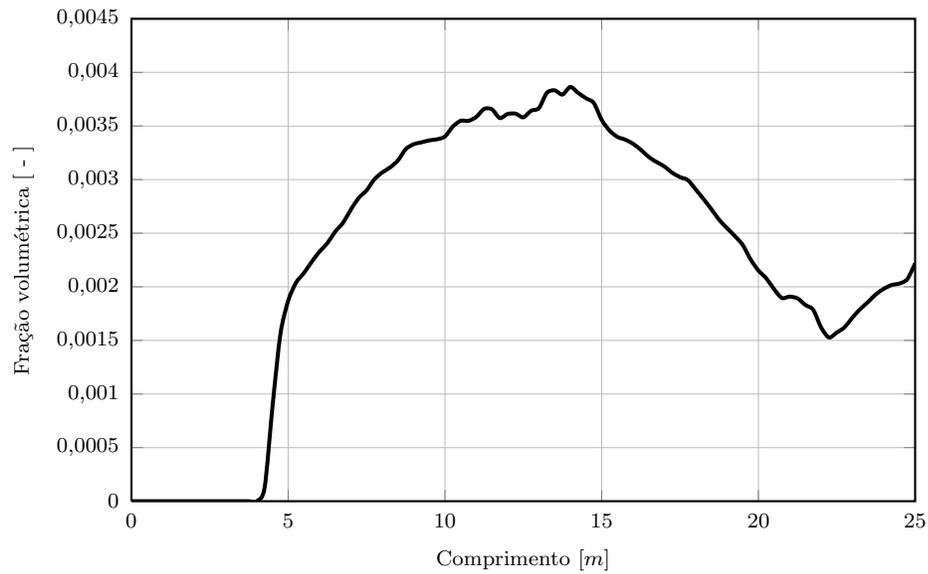


Figura 7.19: Fração volumétrica da fase gasosa central ao longo do tubo após 25s para petróleo Árabe.

Observa-se que somente após 4 m o gás foi detectado no centro do tubo. Verifica-se um aumento na geração de gás até aproximadamente 14 m indicando uma região onde a vaporização é dominante. A partir desse ponto há uma oscilação na fração volumétrica de gás. Essa oscilação pode ser consequência do aumento de gás na região o que causa uma maior taxa de condensação.

As Figuras 7.20, 7.21, 7.22 e 7.23 apresentam os perfis de fração volumétrica da fase gasosa em cortes em 1 m, 10 m, 15 m e 25 m da seção transversal do tubo ao longo do tempo para o petróleo Árabe.

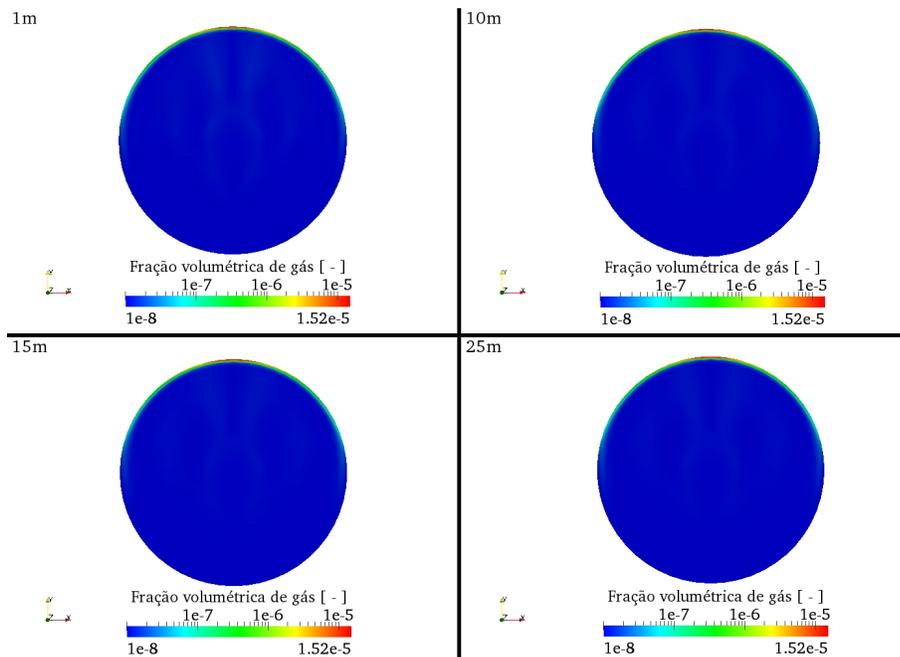


Figura 7.20: Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 1 s para petróleo Árabe.

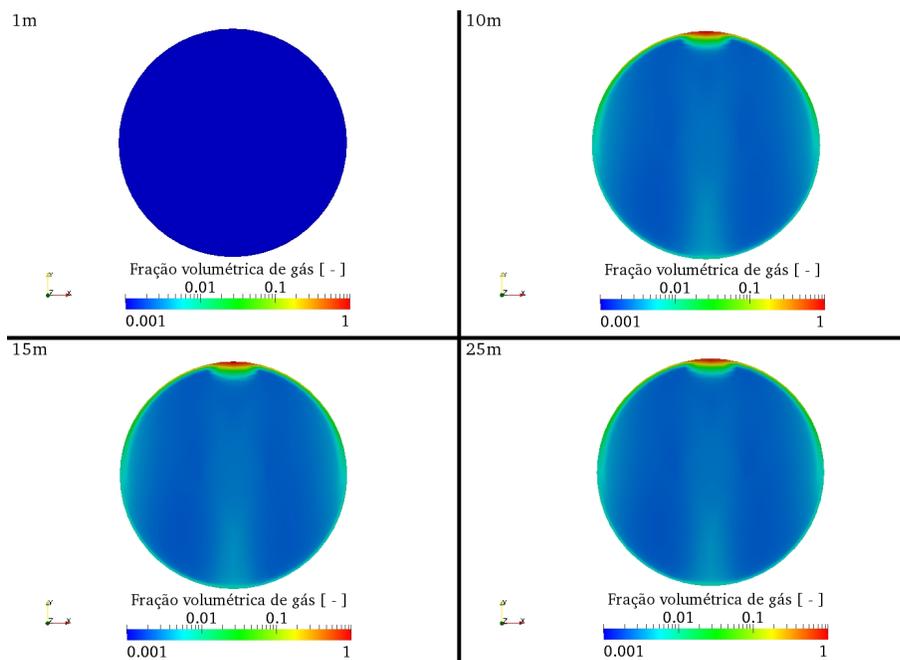


Figura 7.21: Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 5 s para petróleo Árabe.

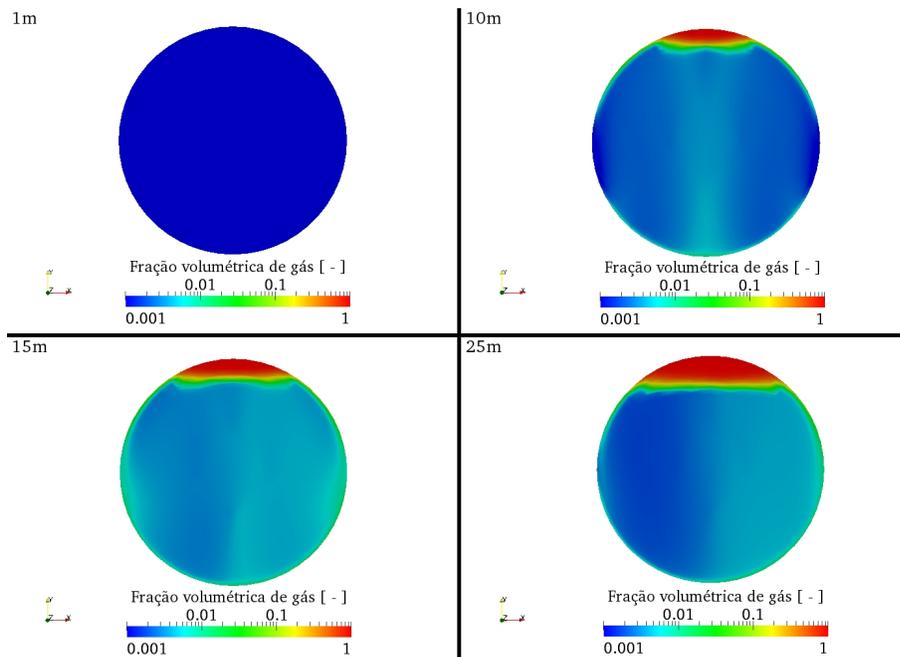


Figura 7.22: Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 15 s para petróleo Árabe.

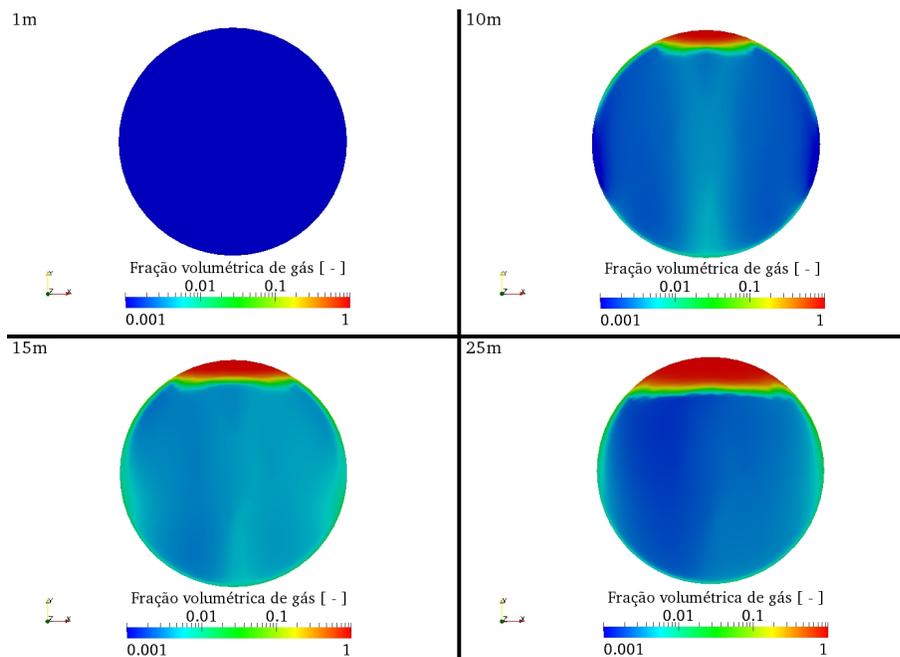


Figura 7.23: Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 25 s para petróleo Árabe.

Através das figuras pode-se verificar claramente a formação de gás próximo as paredes

e sua trajetória ascendente rumo a parte superior do tubo. A Figura 7.24 apresenta a variação da fração volumétrica de gás no centro do tubo ao longo de seu comprimento após 25 s para o escoamento do betume do Athabasca.

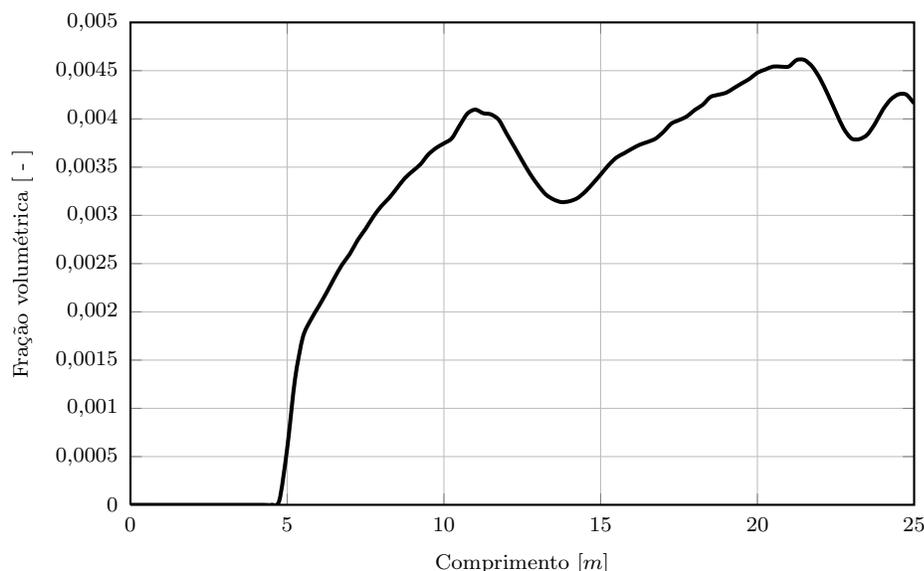


Figura 7.24: Fração volumétrica da fase gasosa central ao longo do tubo após 25s para o betume.

Para o betume observou-se a presença de gás após 4,5 m. Assim como para o petróleo Árabe essa observação sugere que a formação de gás inicia-se aproximadamente próximo a esse comprimento. Nesse caso, verificou-se um aumento na geração de gás até aproximadamente 11 m indicando uma região onde a vaporização é dominante. A partir desse ponto verifica-se também uma oscilação na fração de gás indicando o ponto em que há uma ação maior da taxa de condensação. A condensação maior pode ser explicada pela maior quantidade de gás. Através desse gráfico pode-se verificar essa dinâmica entre a vaporização e a condensação. A fração volumétrica de gás ao oscilar no sentido de aumentar indica que está gerando uma maior quantidade de gás e assim a vaporização está prevalecendo sobre a condensação e ao oscilar no sentido de diminuir indica que a condensação começa a prevalecer sobre a vaporização.

As Figuras 7.25, 7.26, 7.27 e 7.28 apresentam os perfis de fração volumétrica da fase gasosa em cortes em 1 m, 10 m, 15 m e 25 m da seção transversal do tubo ao longo do tempo para o betume do Athabasca.

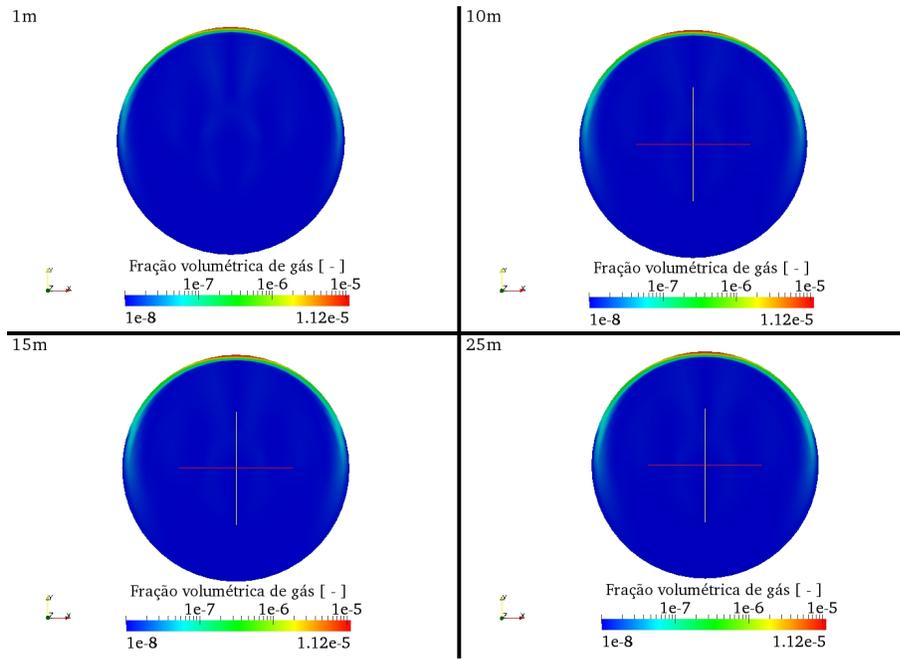


Figura 7.25: Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 1 s para betume do Athabasca.

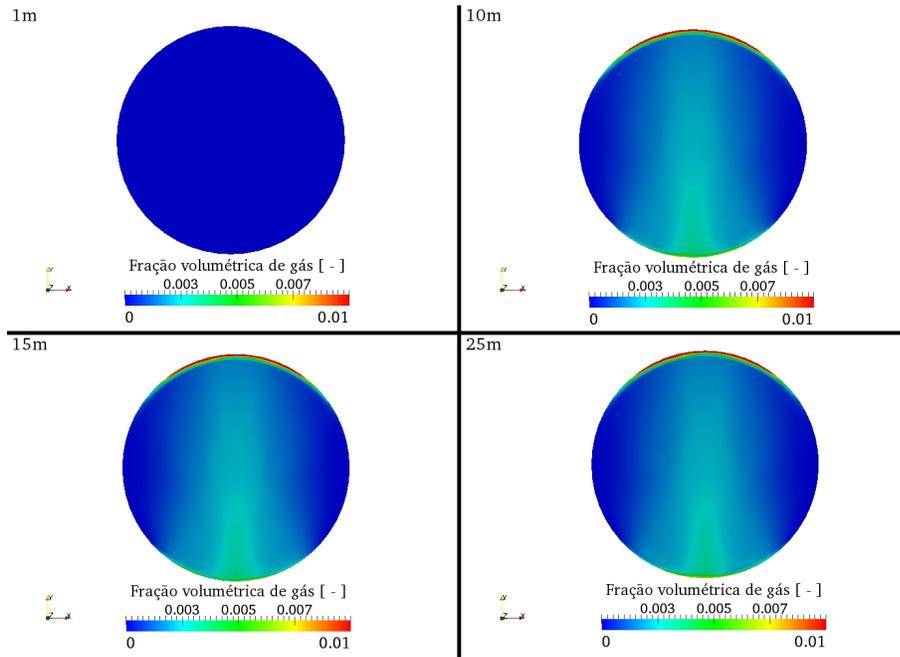


Figura 7.26: Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 5 s para betume do Athabasca.

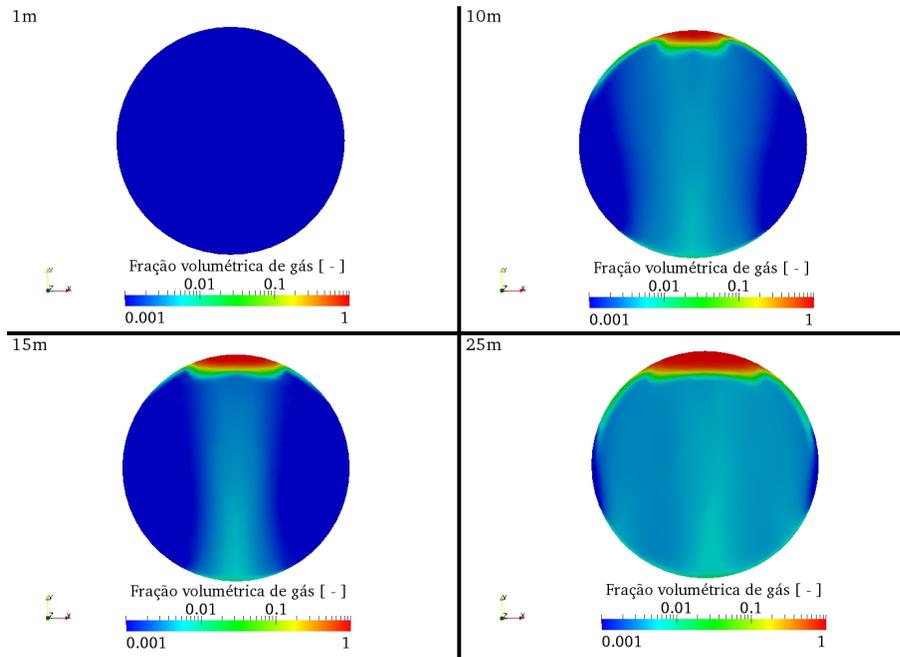


Figura 7.27: Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 15 s para betume do Athabasca.

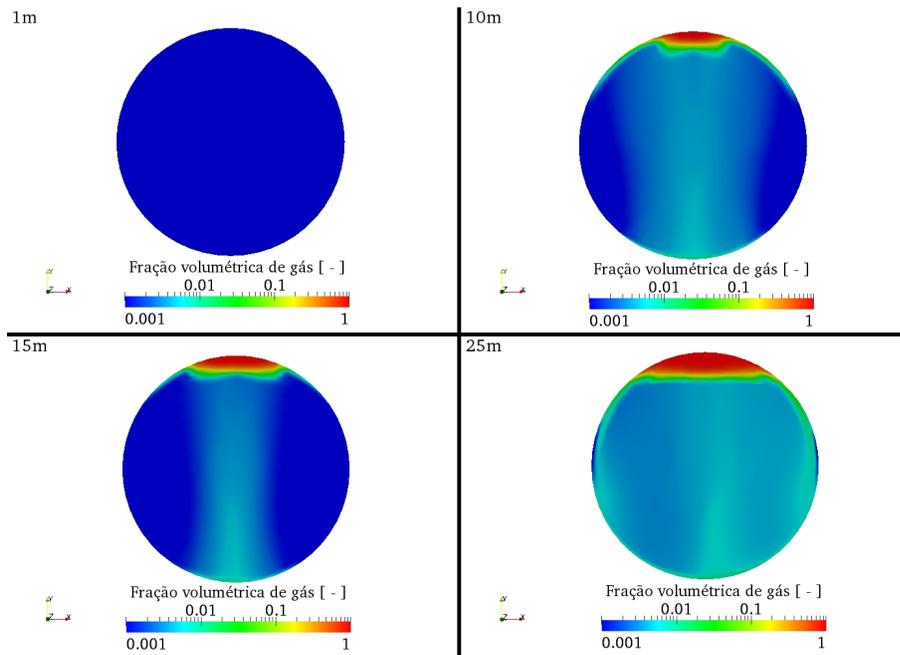


Figura 7.28: Perfil da fração volumétrica de gás em corte transversal após 25 s para betume do Athabasca.

Também é possível verificar para o betume o mesmo comportamento ascendente do

gás gerado próximo as paredes com tendência a se acumular na parte superior do tubo.

Através dos gráficos é demonstrada a vantagem de se ter um modelo Euleriano multifásico. Pode-se observar ao centro do tubo uma região de gás disperso na fase líquida e com perfil ascendente. Este comportamento já não seria possível se obter, por exemplo, ao utilizar um modelo VOF, pois, esse modelo é formulado para representar dois ou mais fluidos sem interpenetração. Somada a vantagem da modelagem euleriana multifásica, a formulação não conservativa na forma intensiva da fase possibilita uma maior estabilidade numérica para altas frações volumétricas. Esta formulação permite ao modelo calcular uma região gasosa na parte superior do tubo. Para isso, nas equações de transporte, o termo referente à fração volumétrica foi retirado dos operadores de transporte convectivo e difusivo e também do operador de variação temporal como apresentado no Capítulo 5.

Portanto, ao utilizar a abordagem multifásica euleriana com formulação não conservativa da fase, foi possível calcular um escoamento inicialmente monofásico, que ao longo de seu escoamento no interior do tubo gerou uma segunda fase tornando-se um escoamento bifásico. O escoamento bifásico consiste de uma região de gás disperso no líquido e também uma região praticamente estratificada de gás na parte superior.

b) Temperaturas

A seguir são apresentados os resultados referentes aos perfis de temperatura obtidos para os dois casos estudados.

Pode-se observar que as mais altas temperaturas estão próximas as paredes devido ao calor recebido através delas. O perfil de temperatura do petróleo Árabe em fase líquida é mostrado pela Figura 7.29.

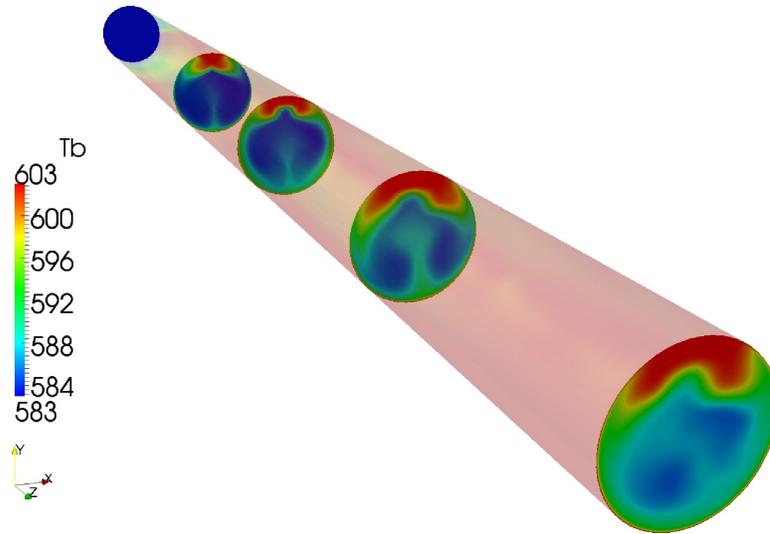


Figura 7.29: Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe após 25 s

As Figuras 7.30, 7.31, 7.32 e 7.33 apresentam os perfis de temperaturas da fase líquida em cortes em 1 m, 10 m, 15 m e 25 m da seção transversal do tubo ao longo do tempo.

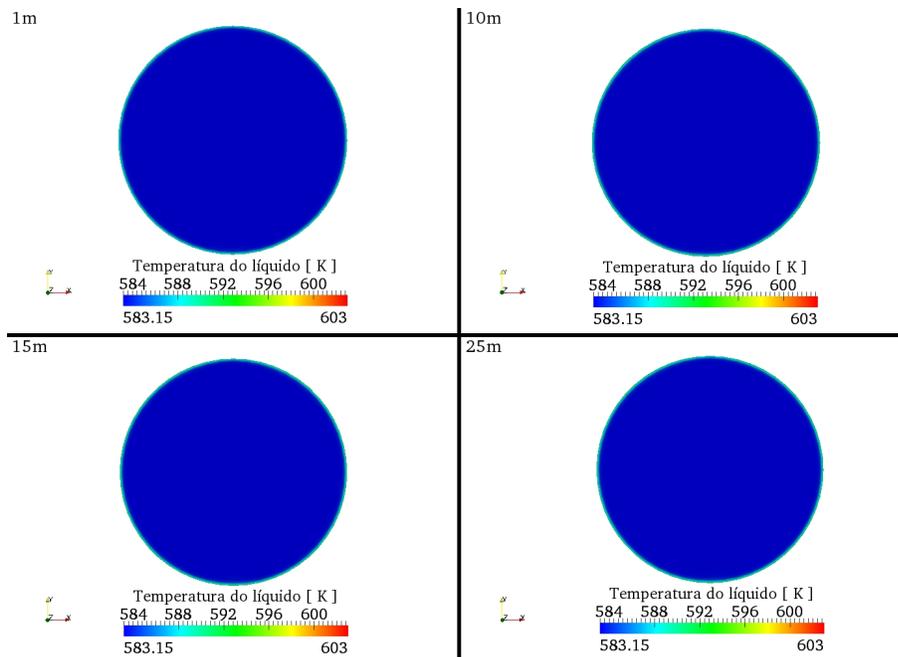


Figura 7.30: Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe em corte transversal após 1 s.

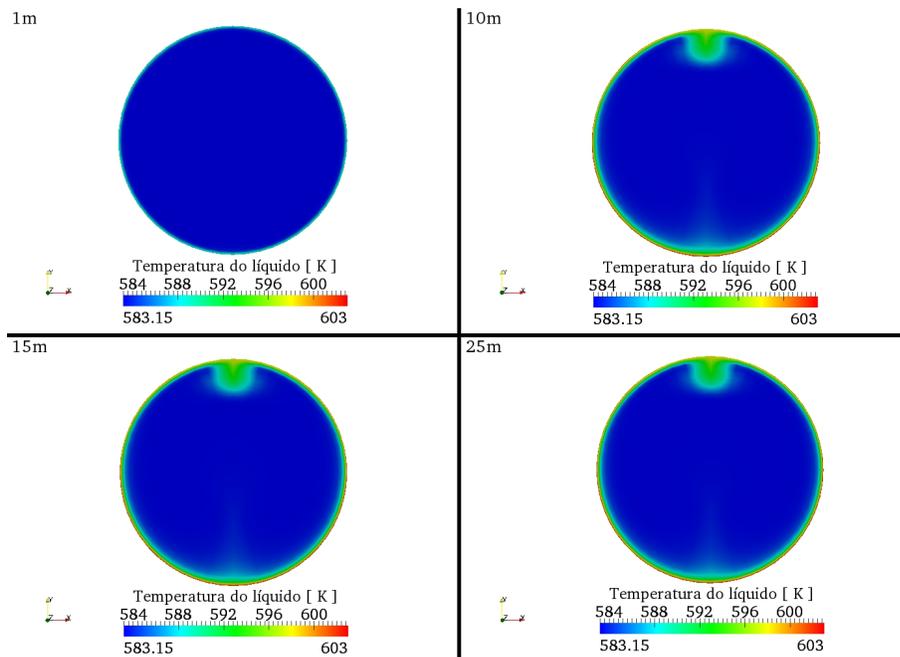


Figura 7.31: Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe em corte transversal após 5 s.

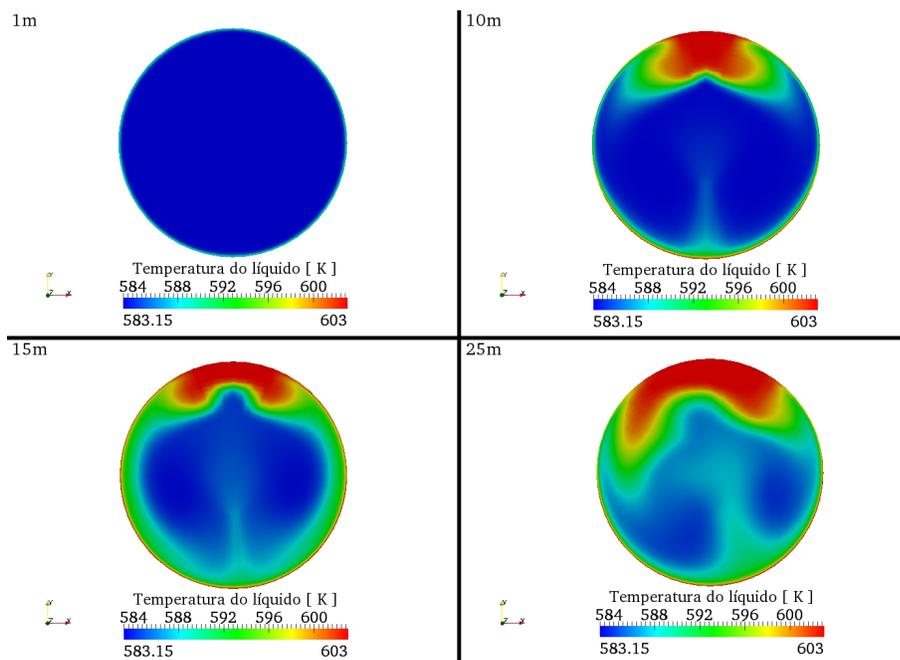


Figura 7.32: Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe em corte transversal após 15 s.

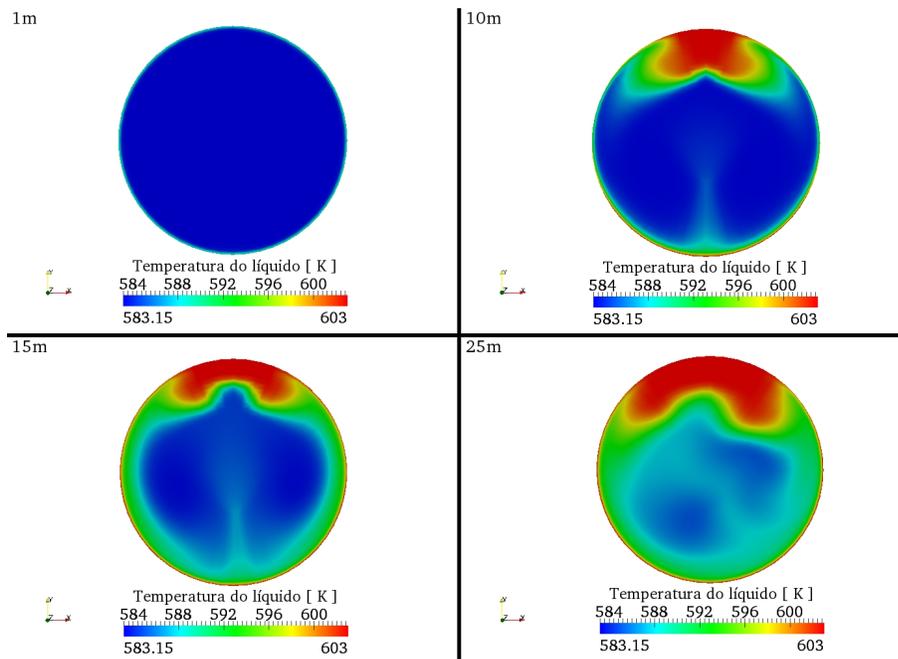


Figura 7.33: Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe em corte transversal após 25 s.

Verifica-se uma região de maior temperatura na parte superior e nas proximidades do casco. Esta região corresponde àquela onde se tem o acúmulo de gás que está próximo a temperatura de saturação.

Através da Figura 7.34 pode-se verificar o desenvolvimento do perfil de temperatura em função do diâmetro em diferentes posições do tubo após 25 s para o petróleo Árabe.

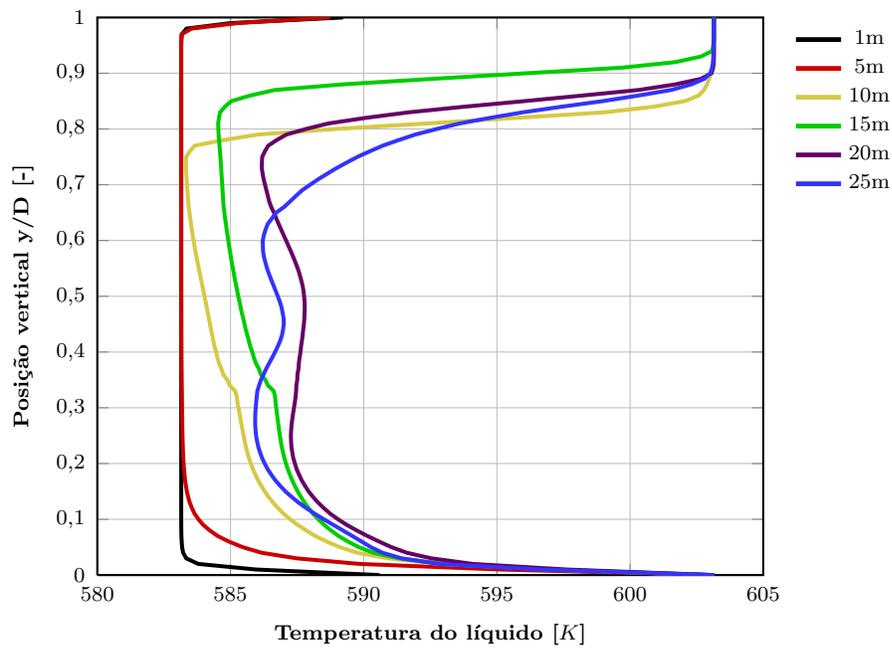


Figura 7.34: Perfil de temperatura do líquido para petróleo Árabe em corte transversal após 25 s para o comprimento de 1, 5, 10, 15, 20 e 25 metros.

O perfil de temperatura do betume em fase líquida pode ser observado na Figura 7.35.

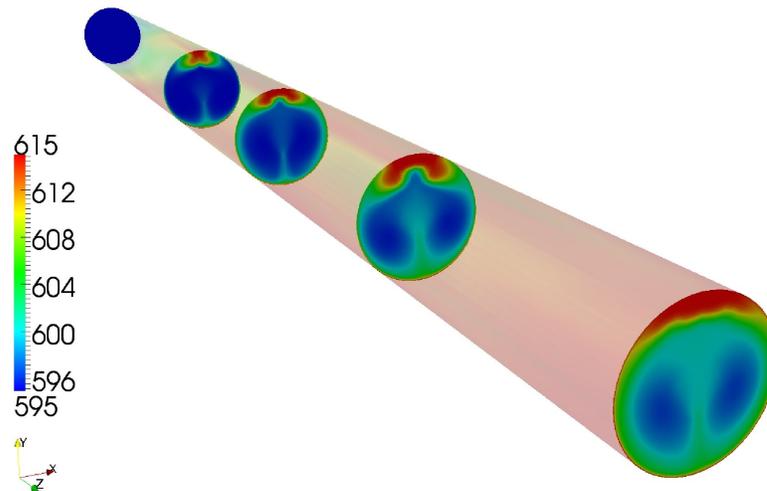


Figura 7.35: Perfil de temperatura do líquido para betume do Athabasca após 25 s

As Figuras 7.36, 7.37, 7.38 e 7.39 apresentam os perfis de temperaturas da fase

líquida em cortes em 1 m, 10 m, 15 m e 25 m da seção transversal do tubo ao longo do tempo.

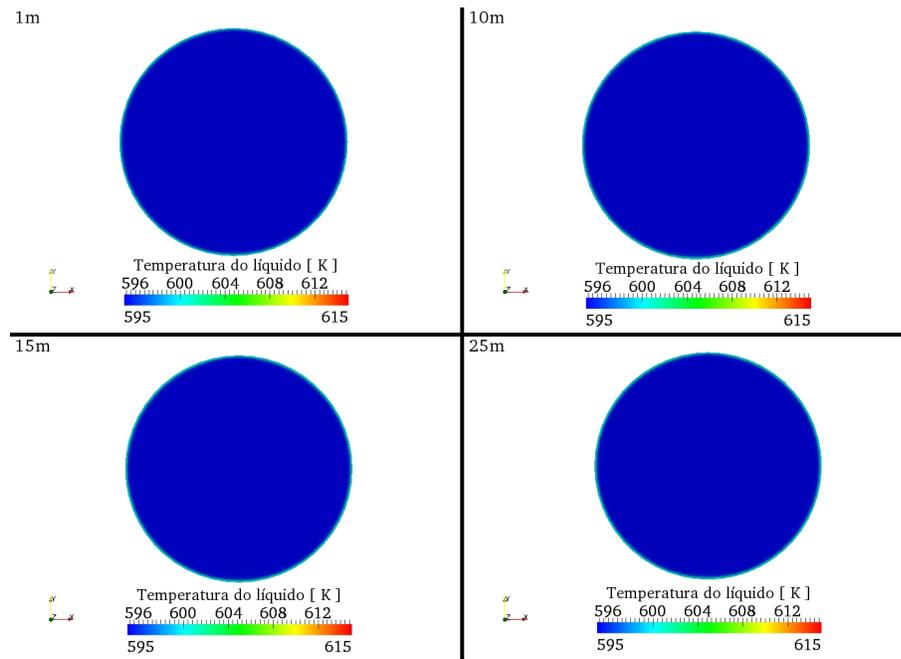


Figura 7.36: Perfil de temperatura do líquido betume do Athabasca em corte transversal após 1 s.

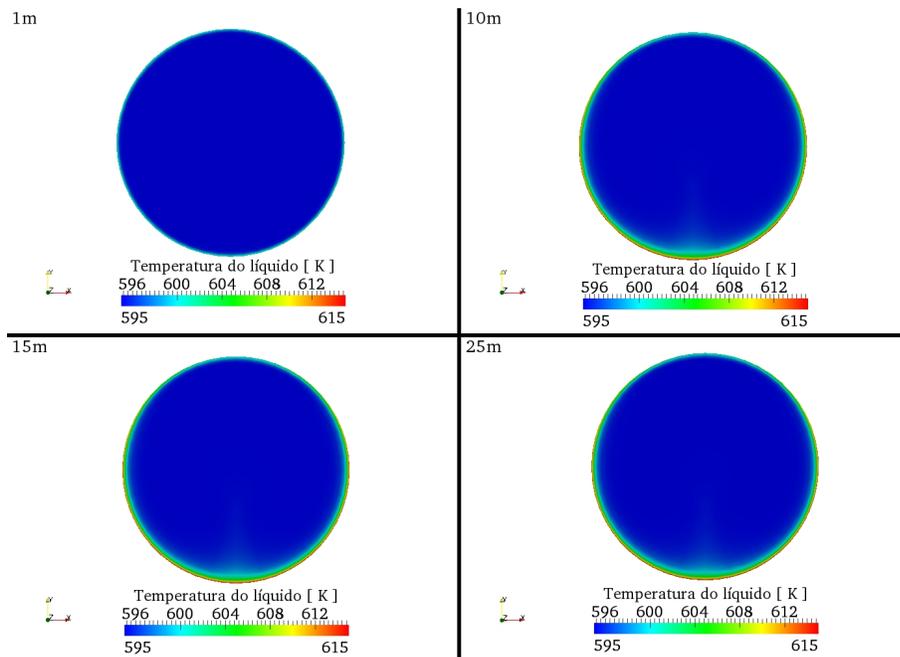


Figura 7.37: Perfil de temperatura do líquido betume do Athabasca em corte transversal após 5 s.

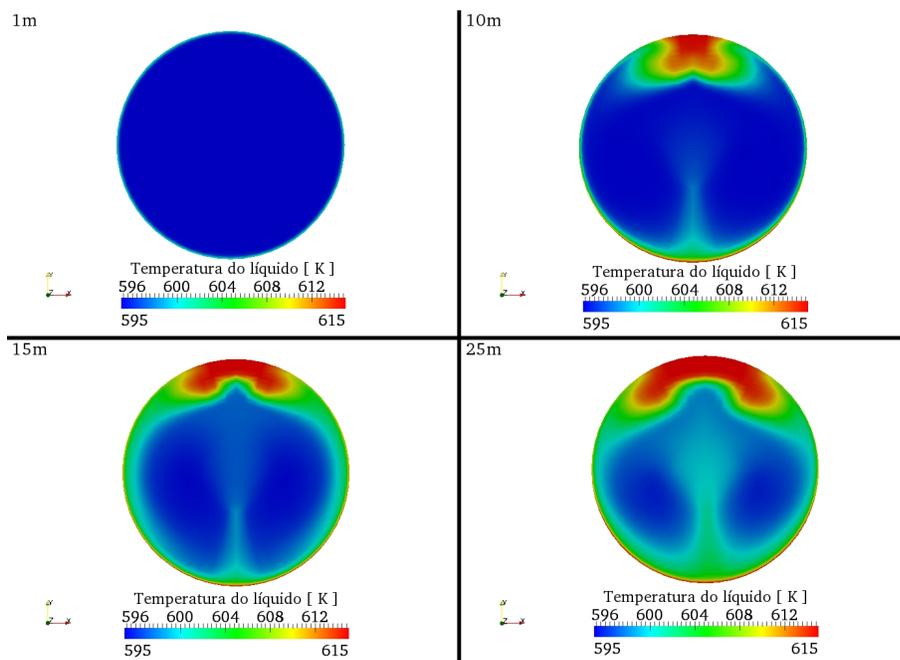


Figura 7.38: Perfil de temperatura do líquido betume do Athabasca em corte transversal após 15 s.

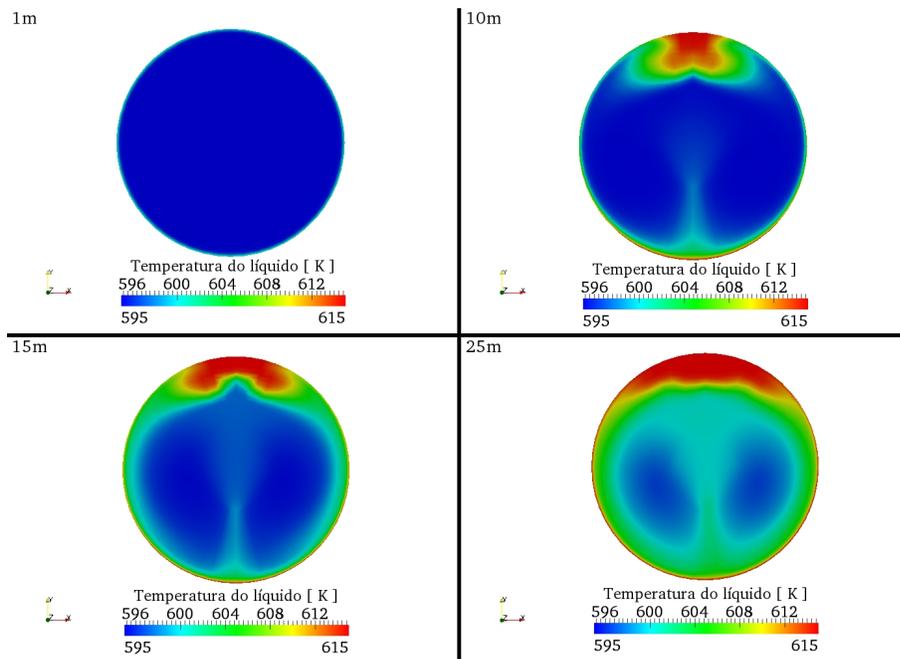


Figura 7.39: Perfil de temperatura do líquido betume do Athabasca em corte transversal após 25 s.

Igualmente ao petróleo árabe pode-se para o betume através da Figura 7.40 observar o desenvolvimento do perfil de temperatura em função do diâmetro em diferentes posições do tubo após 25 s.

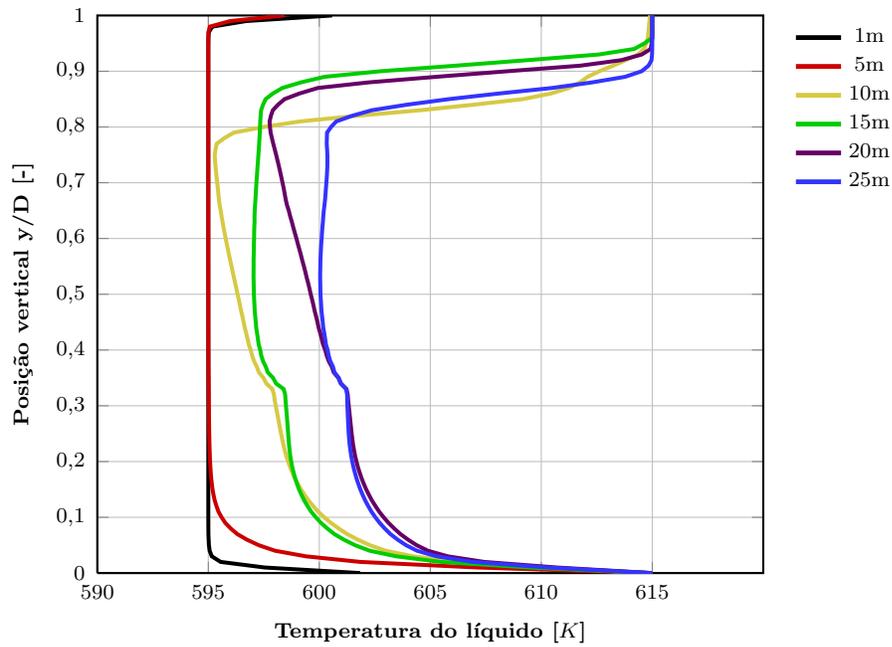


Figura 7.40: Perfil de temperatura do líquido betume do Athabasca em corte transversal após 25 s para o comprimento de 1, 5, 10, 15, 20 e 25 metros.

Assim, como o petróleo Árabe, é observada uma região de maior temperatura na parte superior do tubo. Além dessa região, percebe-se o transporte energético pelo seio do fluido promovido pelo gás ascendente e transferido interfacialmente à fase líquida. Esse comportamento é característico de um modelo Euleriano multifásico e novamente verifica-se a vantagem em utilizar esse tipo de modelagem.

c) k e ϵ

O valores de k e ϵ estimados para o petróleo Árabe são apresentados a seguir pelas Figuras 7.41 e 7.42 respectivamente através de perspectivas transversais em relação ao comprimento do tubo após 25 s.

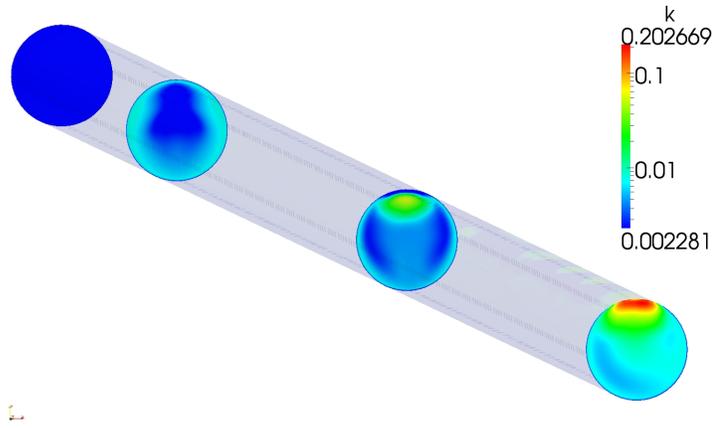


Figura 7.41: Perfis de k para o petróleo Árabe após 25 s.

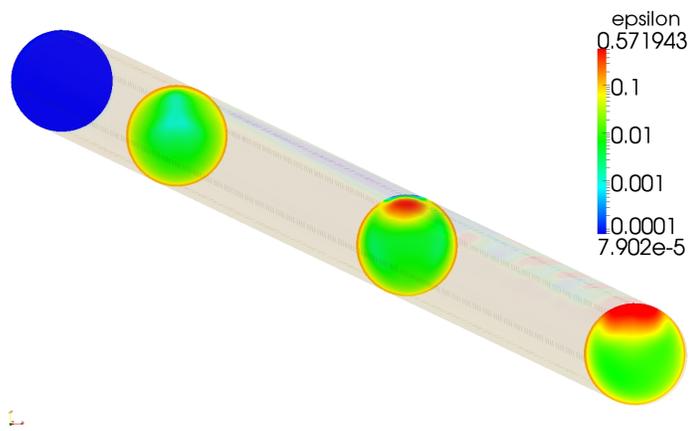


Figura 7.42: Perfis de ϵ para o petróleo Árabe após 25 s.

O valores de k e ϵ estimados para o betume do Athabasca são apresentados a seguir pelas Figuras 7.43 e 7.44 respectivamente através de perspectivas transversais em relação ao comprimento do tubo após 25 s.

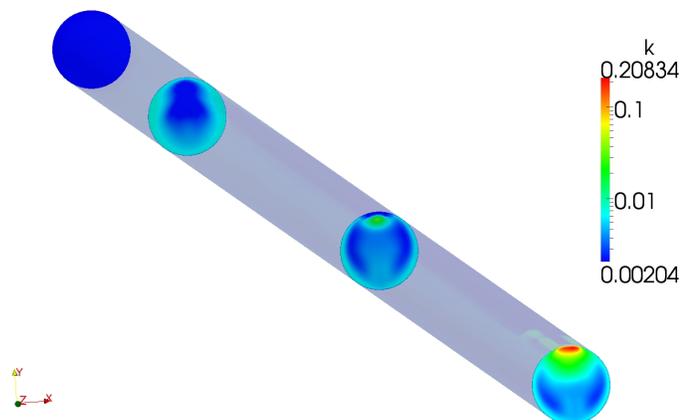


Figura 7.43: Perfil de k para o betume do Athabasca após 25 s.

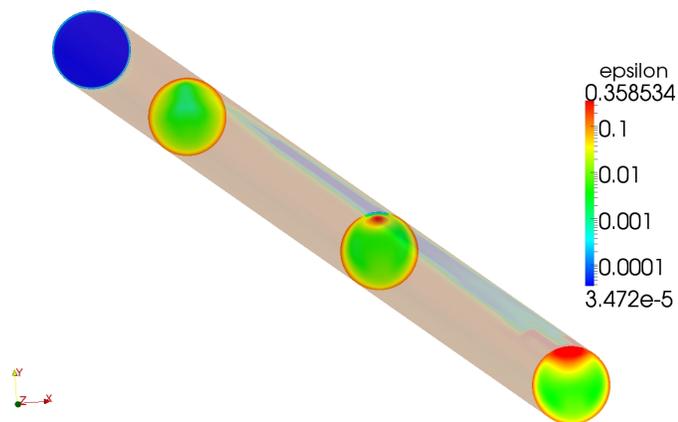


Figura 7.44: Perfil de ϵ para o betume do Athabasca após 25 s.

d) Velocidades.

Pode-se observar na Figura 7.45a o movimento turbulento do líquido mostrando a interação com a fase gasosa. A Figura 7.46b mostra o gás sendo formado e subindo rapidamente para a parte superior do tubo.

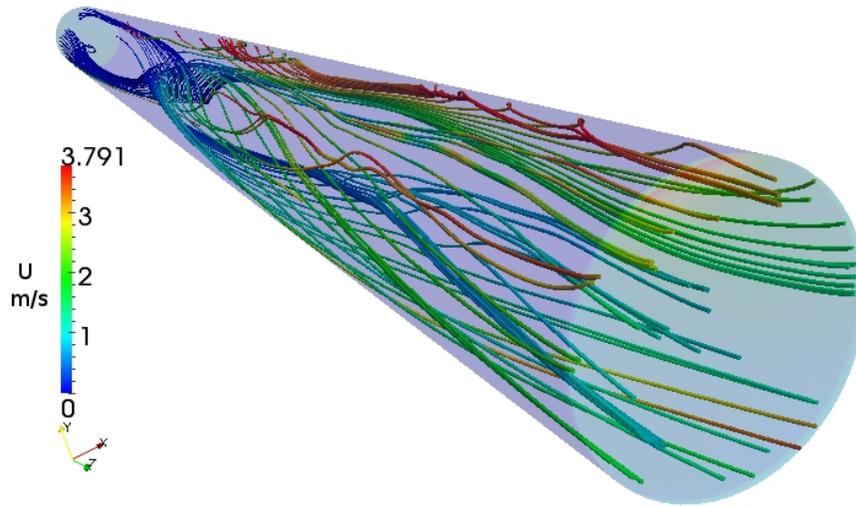


Figura 7.45: Linhas de correntes do líquido para o petróleo Árabe.

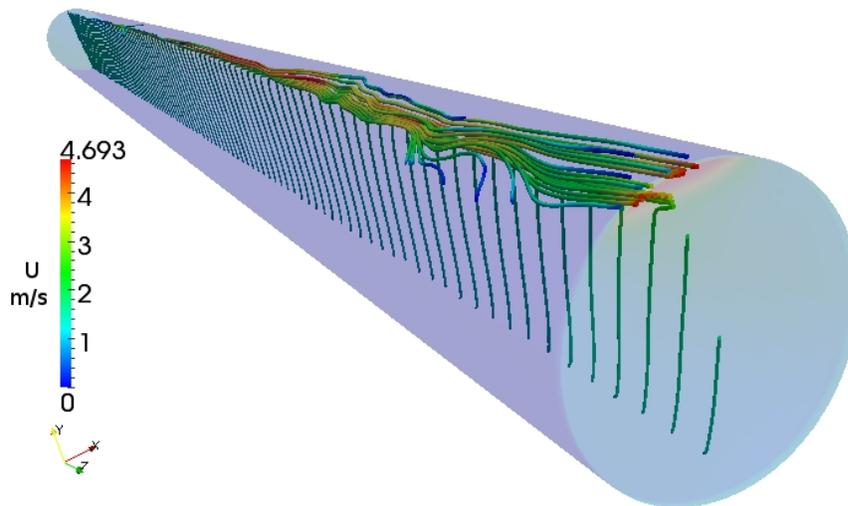


Figura 7.46: Linhas de correntes do gás para o petróleo Árabe.

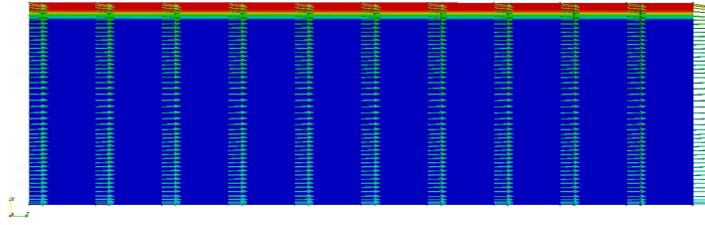


Figura 7.47: Vetores de velocidade do líquido para o petróleo Árabe.

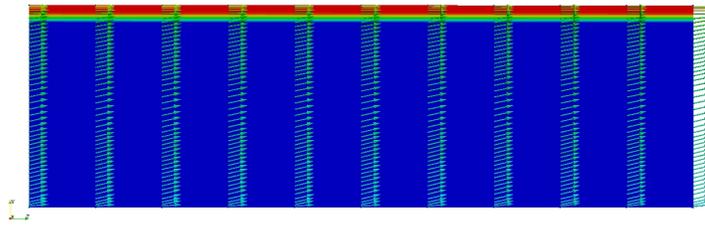


Figura 7.48: Vetores de velocidade do gás para o petróleo Árabe.

Os perfis de velocidades para o petróleo Árabe em relação ao diâmetro do tubo pode ser conferido nas posições 1, 5, 10, 15, 20 e 25 metros, referentes ao comprimento do tubo através da Figura 7.49.

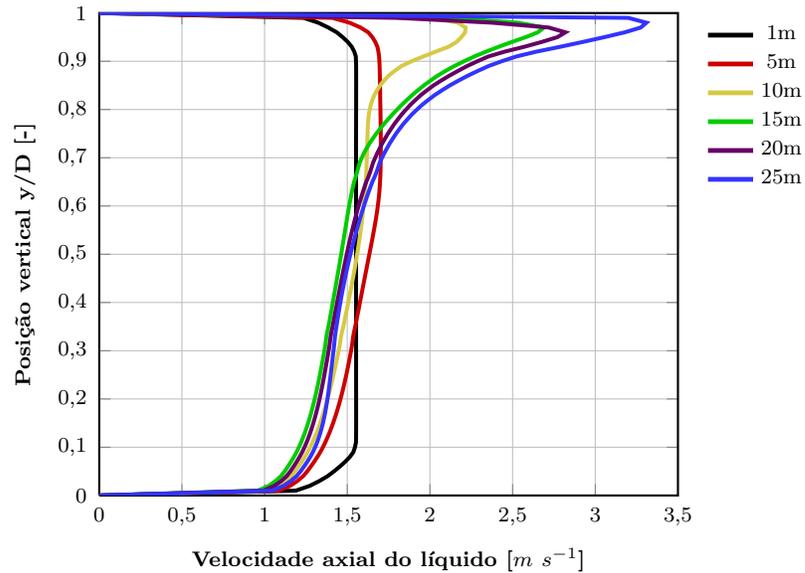


Figura 7.49: Perfil de velocidade do líquido para o petróleo Árabe após 25 s para o comprimento de 1, 5, 10, 15, 20 e 25 metros.

A Figura 7.50 mostra as linhas de corrente do líquido e gás para o betume Athabasca. O mesmo comportamento, anteriormente comentado para o petróleo Árabe, é observado para o betume Athabasca. Entretanto, uma menor fração volumétrica de gás é verificada.

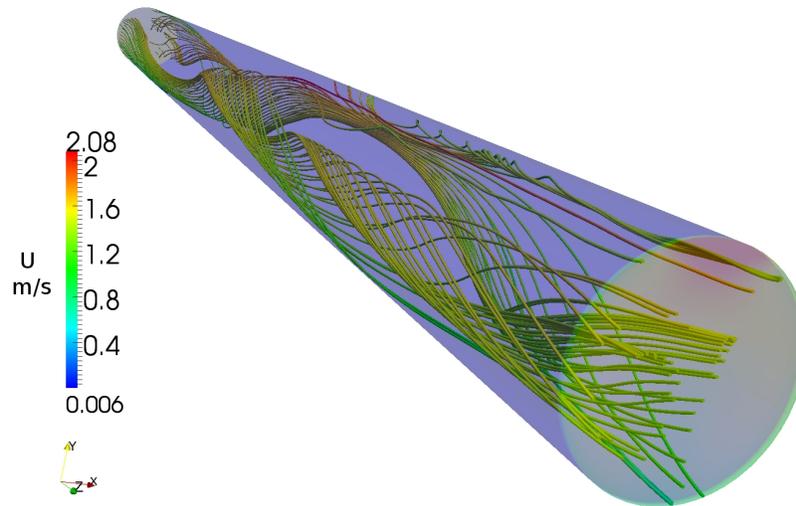


Figura 7.50: Linhas de correntes do líquido para o betume Athabasca.

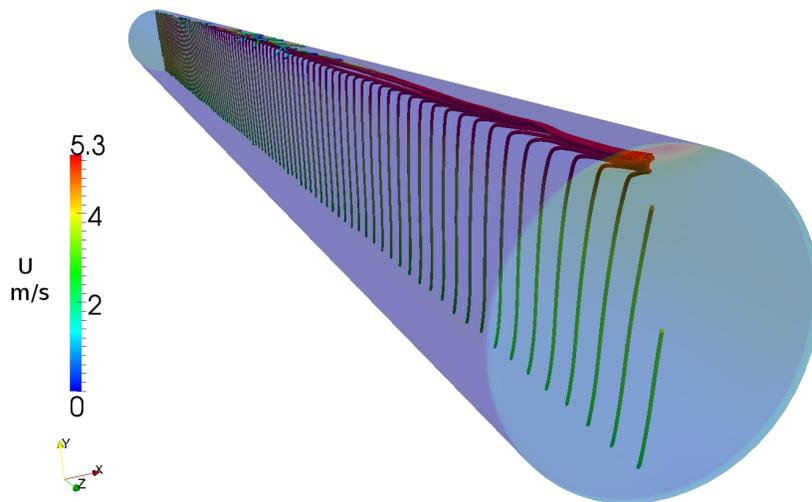


Figura 7.51: Linhas de correntes do gás para o betume Athabasca.

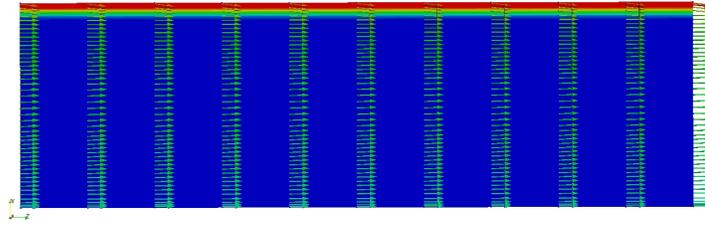


Figura 7.52: Vetores de velocidade do líquido para o betume Athabasca.

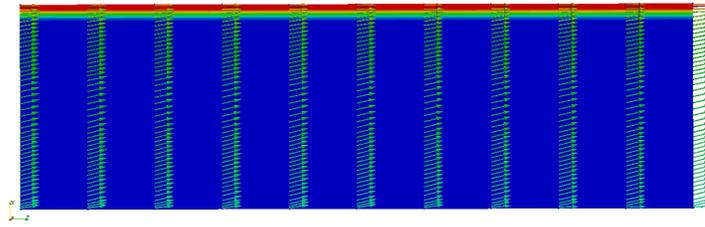


Figura 7.53: Vetores de velocidade do gás para o betume Athabasca.

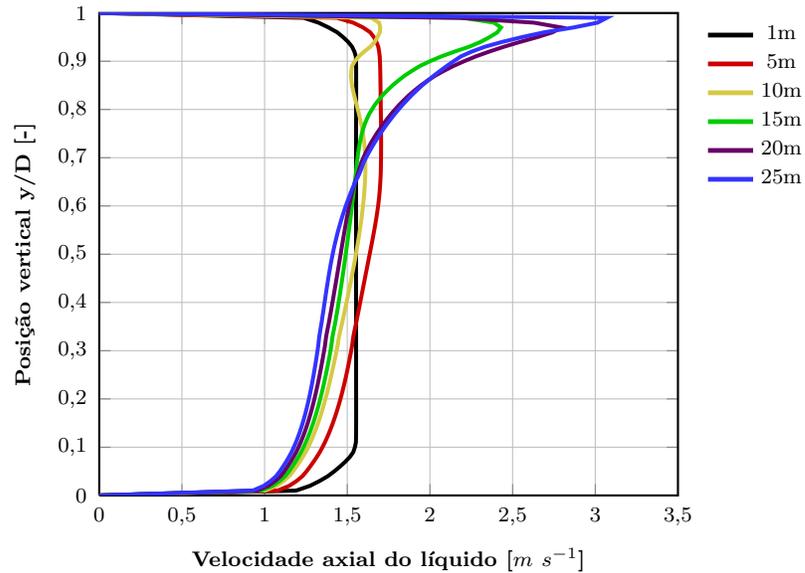


Figura 7.54: Perfil de velocidade axial do líquido para o betume Athabasca após 25 s para o comprimento de 1, 5, 10, 15, 20 e 25 metros.

Observa-se claramente o perfil de velocidade gerado pelo modelo Euleriano bifásico para a fase líquida. Verifica-se uma região com perfil de velocidades mais elevadas na parte

superior do tubo, correspondente a região onde se encontra o acúmulo de gás. Nessa região a pequena fração líquida sofre os efeitos da transferência de quantidade de movimento interfacial entre as fases ao ser arrastada pelo grande volume de gás. Esse perfil é muito parecido com o perfil encontrado na literatura (BIRD *et al.*, 2004) para escoamento estratificado em tubos horizontais, em que o fluido de menor densidade acumula-se na parte superior e assume um perfil de maior velocidade devido sua menor viscosidade molecular.

Novamente pode-se verificar a vantagem do modelo Euleriano ao prever um perfil de velocidade englobando a região onde se encontra o gás disperso no líquido e a região de gás acumulado.

e) Concentração de coque.

Os resultados de concentração de coque são apresentados em termos de fração mássica. As simulações indicaram que não foram verificadas quantidades significativas de coque formado com as condições operacionais utilizadas nas simulações. As Figuras 7.55 e 7.56 apresentam a variação do coque formado no centro do tubo ao longo de seu comprimento no regime transiente nos tempos 0, 1, 5, 10, 15, e 25 segundos.

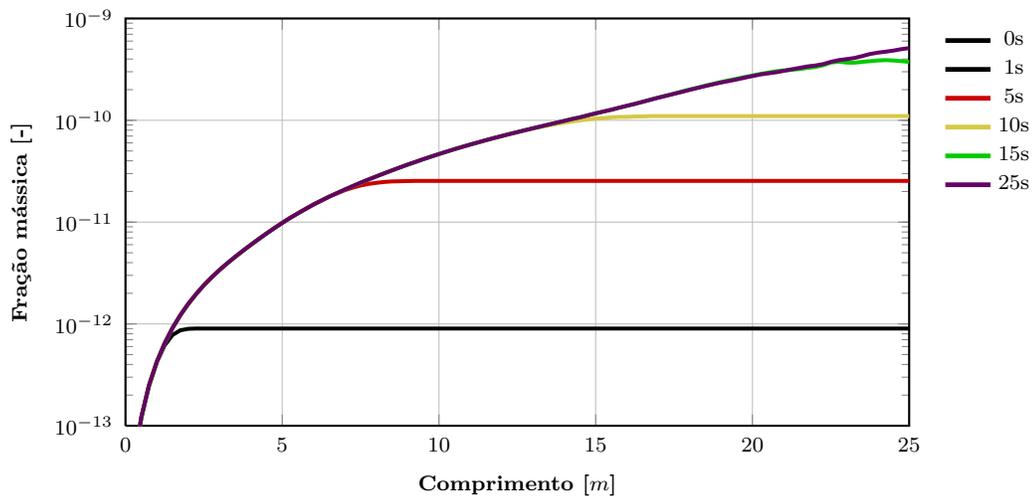


Figura 7.55: Fração mássica de coque no centro do tubo para petróleo Árabe nos tempos 0; 1; 5; 10; 15e 25 segundos.

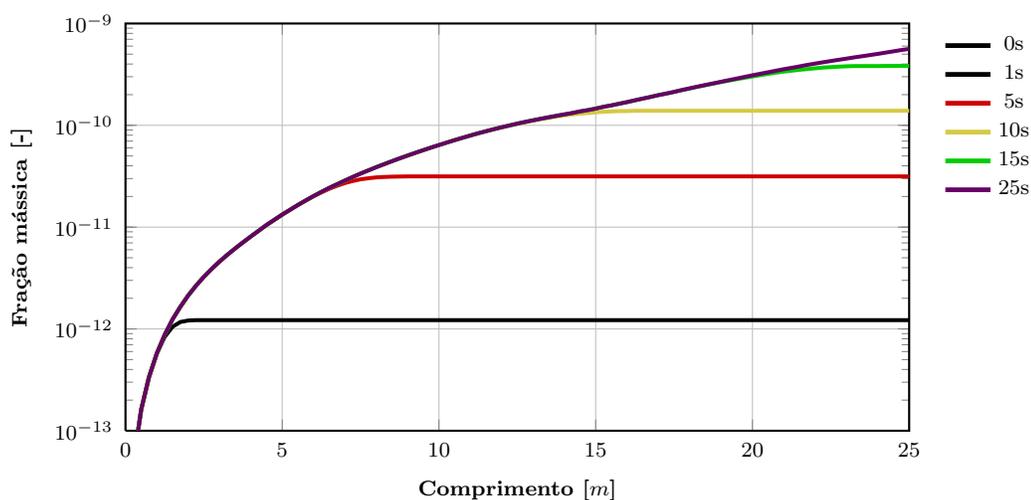


Figura 7.56: Fração mássica de coque no centro do tubo para betume do Athabasca nos tempos 0; 1; 5; 10; 15e 25 segundos.

Embora as simulações não tenham previsto quantidades representativas de coque, pode-se verificar a dinâmica de formação de coque ao longo do tempo. As temperaturas atingidas nas simulações não foram suficientes para formar quantidades significativas de coque. Como dito anteriormente as taxas de reação referentes aos pseudocomponentes da rede cinética utilizada são altamente dependentes da temperatura apresentando um comportamento exponencial. O coque como parte da rede cinética também possui o mesmo comportamento. Este comportamento também é observado nos resultados obtidos por SOUZA *et al.* (2005). É esperado que em estudos simulando um comprimento maior da tubulação as cargas de petróleo alcancem temperaturas maiores, e dessa forma, maiores concentrações de coque devem ser previstas. Entretanto, os gráficos apresentam com clareza esse comportamento exponencial, o qual pode ser observado para o tempo de 25 s.

7.3 Simulações realizadas para escoamento bifásico através de um modelo de vaporização ajustados aos dados experimentais por termoanálises.

Nesta seção serão apresentadas as definições das condições de contorno e iniciais para as simulações e os resultados obtidos através destas simulações ao considerar um modelo de vaporização ajustado a dados experimentais por termoanálises.

Foram realizadas três simulações com o objetivo de observar as variações de temperatura, velocidades e concentrações. Inicialmente, foram feitas duas simulações em que o fluxo volumétrico de petróleo na entrada, através da variação da velocidade de entrada, foi modificado. Posteriormente, para um mesmo fluxo volumétrico, foi realizada uma simulação modificando os parâmetros do modelo de vaporização.

Os dados dos parâmetros do modelo de vaporização foram retirados de KOPSCH (1995) que fornece os dados ajustados para várias amostras de petróleo. Nesse trabalho os dados das amostras 1 e 24 foram escolhidos aleatoriamente para as simulações. Deve-se destacar que as amostras de petróleo possuem composições diferentes, mas estas não foram fornecidas pelo autor e portanto para todas as simulações adotou-se a composição descrita em pseudocomponentes igual a do betume do Athabasca.

Nesse modelo de vaporização não é definida uma temperatura média de saturação (vaporização) para que se inicie a mudança de fase, pois, o modelo ajustado a dados experimentais prevê uma taxa de vaporização em função da temperatura do petróleo líquido. A seguir serão apresentados as condições utilizadas nas simulações e posteriormente os resultados obtidos através delas.

7.3.1 Definição das simulações para escoamento bifásico através de um modelo de vaporização ajustado aos dados experimentais por termoanálises.

A metodologia numérica utilizada nas simulações dessa seção foi a mesma utilizada para o modelo simplificado de vaporização. Foram definidas três simulações com o objetivo de se avaliar a influência da quantidade de vapor gerado e na quantidade de coque formado.

Para a realização da primeira e a segunda simulação variou-se o fluxo de petróleo

na alimentação do tubo do forno, através da variação da velocidade de entrada, para uma mesma amostra de petróleo com os dados da cinética de vaporização retirados da Tabela 5.2 correspondente a amostra 24. Já para a realização da terceira simulação manteve-se o mesmo fluxo de alimentação utilizado na segunda simulação, mas nesse caso variou-se os dados cinéticos do modelo de vaporização adotando os valores da amostra 1. A Tabela 7.8 apresenta as condições operacionais utilizadas na realização das três simulações.

Tabela 7.8: Condições operacionais utilizadas: Velocidade de entrada e amostra utilizada.

Simulação	$U_{z,l}$	amostra
1	0,5	24
2	1,5	24
3	1,5	1

Na Tabela 7.8, $U_{z,l}$, representa a velocidade normal a face na entrada do tubo, gerando dessa forma um fluxo de entrada na direção normal a entrada do tubo.

As condições de contorno utilizadas nas três simulações podem ser conferidas na Tabela 7.9

Tabela 7.9: Condições iniciais e de contorno usadas na simulação.

Variável	<i>entrada</i>	<i>saída</i>	<i>parede</i>
$\mathbf{U}_l [m s_{-1}]$	$(0 \ 0 \ U_{z,l})$	$\nabla \mathbf{U}_l = 0$	$(0 \ 0 \ 0)$
$\mathbf{U}_g [m s_{-1}]$	$(0 \ 0 \ U_{z,g})$	$\nabla \mathbf{U}_g = 0$	$(0 \ 0 \ 0)$
$\varepsilon_g [-]$	0	$\nabla \varepsilon_g = 0$	$\nabla \varepsilon_g = 0$
$p [Pa]$	$\nabla p = 0$	$p_{ref} + \rho(gh + gx_{ref})$	$\nabla p = 0$
$T_l [K]$	615	$\nabla T_l = 0$	$T_l = 723$

Os demais parâmetros, coeficientes e propriedades físico-químicas são os mesmos utilizados na simulação para betume.

7.3.2 Resultados das simulações utilizando um modelo de vaporização ajustado a dados de termoanálises.

Para avaliar a influência dos fluxos volumétricos na geração de gás e coque no interior dos tubos, inicialmente foram simulados dois casos com velocidades de 0,5 e 1,5 $m s^{-1}$ e com dados cinéticos de vaporização referentes ao teste 24 da Tabela 5.2. Posteriormente para avaliar a influência da cinética de vaporização uma simulação adicional foi realizada com o uso dos dados do teste 1 da Tabela 5.2. Nessa simulação foram adotados os mesmos parâmetros utilizados na simulação com velocidade de entrada de 1,5 $m s^{-1}$.

a) Fração volumétrica

O valor da fração volumétrica média do gás (percentual volumétrico total de gás acumulado no interior do tubo) previsto pela simulação com a velocidade de entrada de 0,5 $m s^{-1}$ foi de 1,9 % enquanto que para a velocidade de 1,5 $m s^{-1}$ esse valor ficou em 1,5 % após 50s. Observa-se que a fração volumétrica média é maior para fluxos menores. Isso em parte, deve-se ao maior tempo de residência da mistura no interior do tubo aumentando dessa maneira o acúmulo de gás.

Observa-se claramente as diferenças nas taxas de vaporização no interior do tubo previstas pelo modelo para as diferentes amostras. A comparação demonstra que a amostra 1 previu a fração volumétrica média do gás em torno de 0,56 %, valor aproximadamente 3 vezes menor que o previsto pela simulação com o uso dos dados da cinética de vaporização para a amostra 24. Ambas as simulações foram realizadas com velocidade de entrada igual a 1,5 $m s^{-1}$, variando-se apenas os dados do modelo de vaporização.

Os resultados para a fração volumétrica de gás são apresentados pela Figura 7.57.

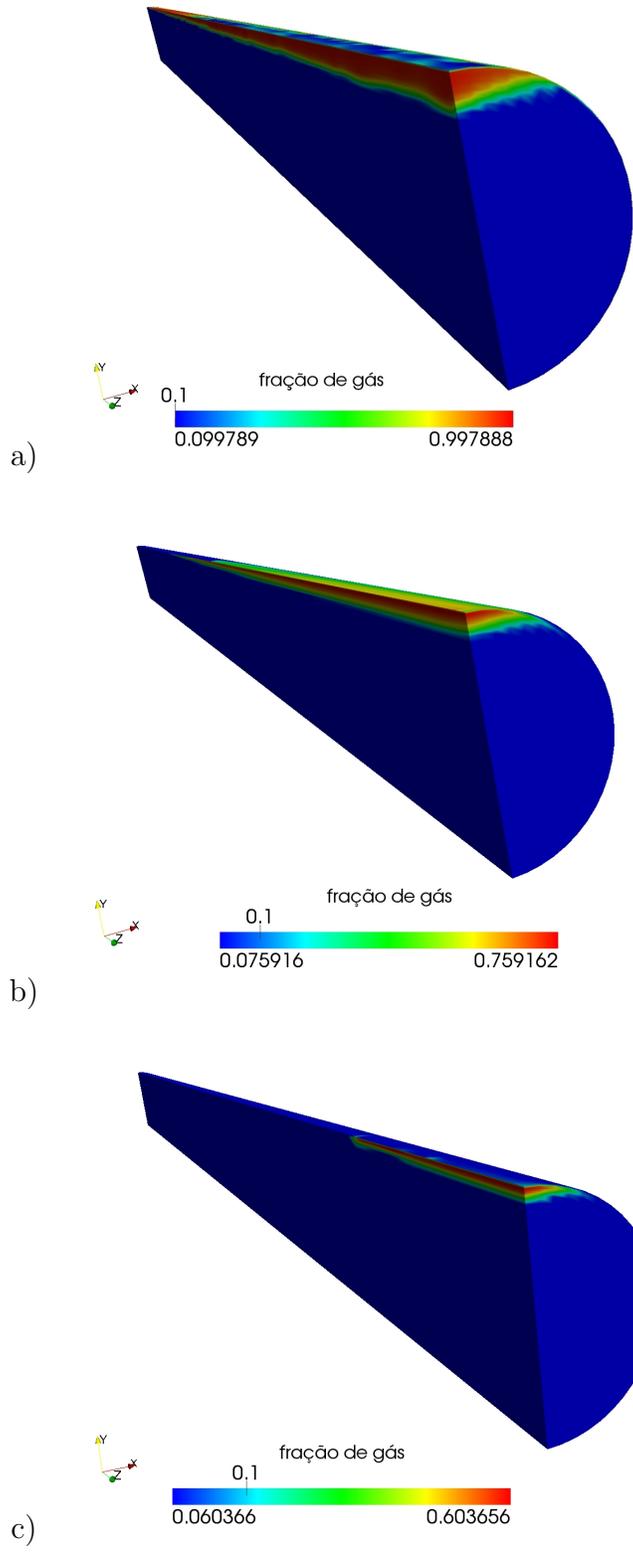


Figura 7.57: a) Fração volumétrica de gás após 50s com velocidade de entrada $U_l = 0,5 \text{ m s}^{-1}$ para amostra 24; b) Fração volumétrica de gás após 50s com velocidade de entrada $U_l = 1,5 \text{ m s}^{-1}$ para amostra 24 e c) Fração volumétrica de gás após 50s com velocidade de entrada $U_l = 1,5 \text{ m s}^{-1}$ para a amostra 1.

b) Velocidades

As Figuras 7.58, 7.59 e 7.60 apresentam a variação da velocidade axial do líquido em função do diâmetro do tubo após 50 s nas posições de comprimento iguais a 1, 5, 10, 15, 20, e 25 m.

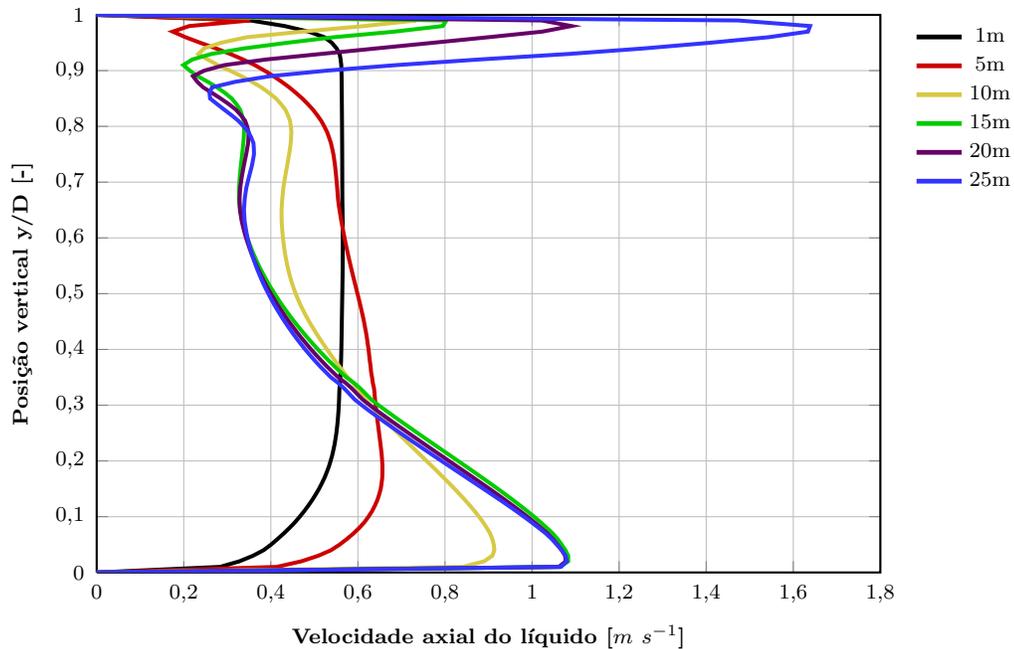


Figura 7.58: Perfis de velocidade axial do líquido em função do diâmetro ao longo do tubo após 50 s para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $0,5 m s^{-1}$.

Analisando os resultados de velocidades pode-se verificar um comportamento assimétrico do perfil em relação a posição vertical correspondente ao diâmetro do tubo. Esse comportamento é característico de sistemas bifásicos gás-líquido, pois o perfil de uma fase é influenciado pelo movimento da outra fase, que geralmente possui um comportamento fluidodinâmico um pouco diferente. Nesse caso, podemos destacar que o gás formado, por possuir menor densidade, tende a subir, acumulando-se na parte superior do tubo. Outro fator é a presença da mudança de fase. Este fenômeno também afeta os perfis de velocidade e pressão e são considerados em suas equações. Pode-se observar que esta assimetria acentua-se ao longo do tubo, pois, nas partes mais afastadas do início tem-se uma maior quantidade de gás, além de uma maior dinâmica de mudança de fase. Esses fatores afetam diretamente os perfis como claramente pode ser observado através dos gráficos de perfis de velocidade para as três simulações realizadas.

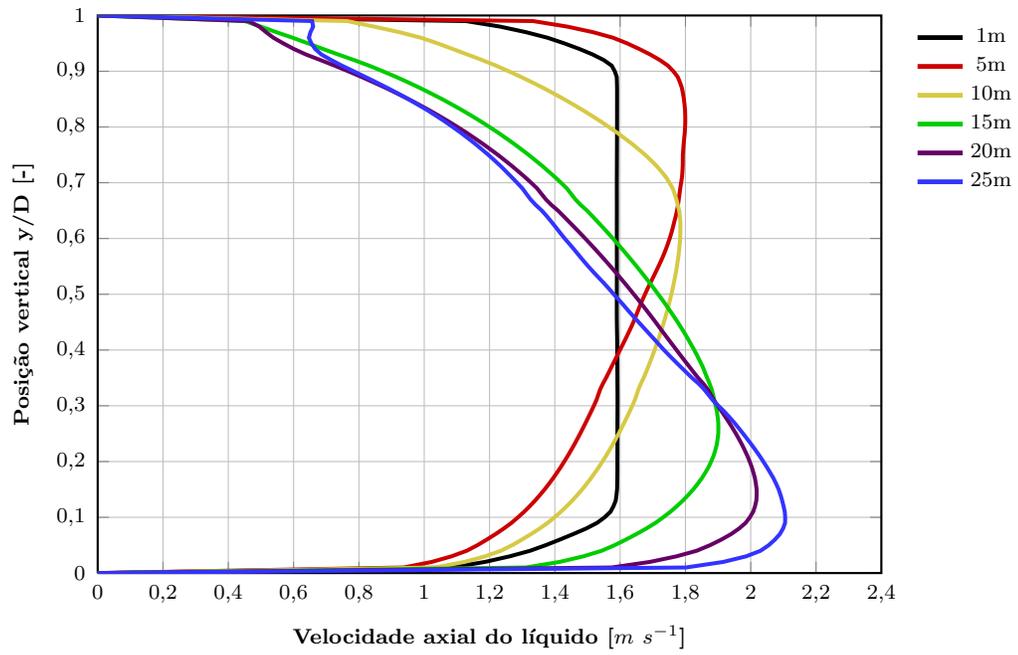


Figura 7.59: Perfis de velocidade axial do líquido em função do diâmetro ao longo do tubo após 50 s para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $1,5 m s^{-1}$.

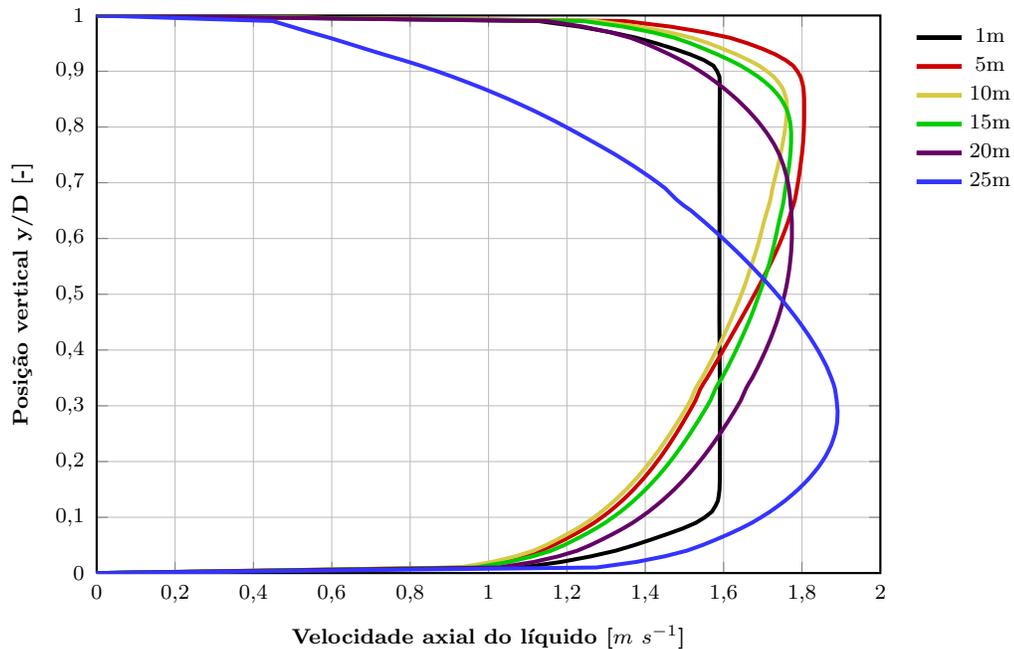


Figura 7.60: Perfis de velocidade axial do líquido em função do diâmetro ao longo do tubo após 50 s para a simulação com dados da amostra 01 com velocidade inicial na entrada de $1,5 \text{ m s}^{-1}$.

Ao comparar os perfis de velocidade do líquido obtidos pelas simulações utilizando o modelo de vaporização ajustado as termoanálises em relação aos perfis obtidos pelas simulações utilizando o modelo simplificado, verifica-se uma diferença entre eles. Pode-se explicar essa diferença analisando as equações de conservação de quantidade de movimento. Nas equações estão presentes os termos de transferência de quantidade de movimento interfacial devido à mudança de fase e portanto onde ocorrer a mudança de fase os perfis de velocidades respondem a essa variação. No caso de se utilizar o modelo de vaporização simplificado, a vaporização ocorre próxima as paredes do tubo, pois, é nas proximidades das paredes que o líquido atinge a temperatura média de ebulição e ocorre a vaporização. Assim, não há vaporização nas regiões afastadas das paredes do tubo, pois, a temperatura do líquido nessas regiões não atinge a temperatura necessária para evaporar. Entretanto o modelo de vaporização ajustado aos dados de termoanálise trata a taxa de vaporização como uma função da temperatura do líquido e portanto ocorre a vaporização em todas as regiões no interior do tubo afetando diretamente o perfil de velocidade do líquido.

c) Temperaturas

As Figuras 7.61, 7.62 e 7.63 apresentam a variação da temperatura de líquido no centro do tubo em função de seu comprimento para os tempos 0, 1, 5, 10, 15, 20, 30, 40 e 50 s.

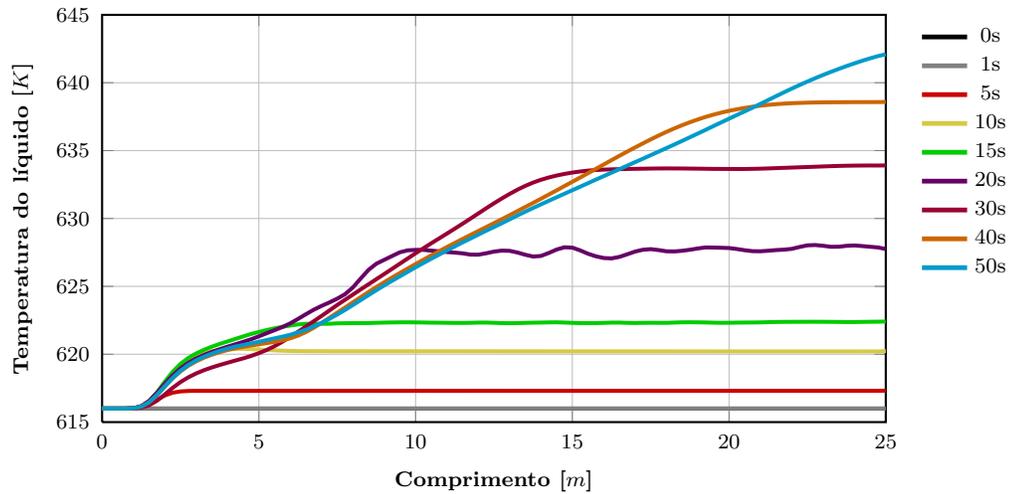


Figura 7.61: Perfis de temperatura do líquido no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $0,5 \text{ m s}^{-1}$.

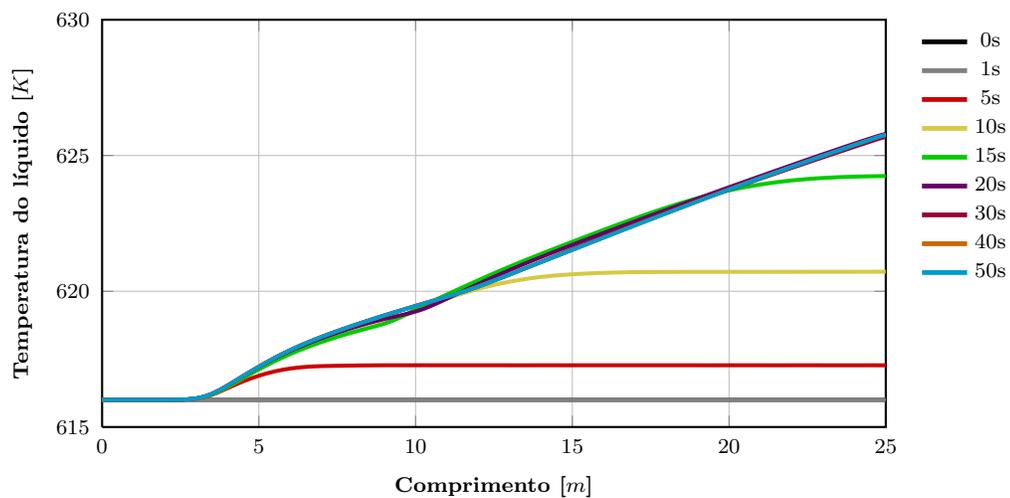


Figura 7.62: Perfis de temperatura do líquido no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $1,5 \text{ m s}^{-1}$.

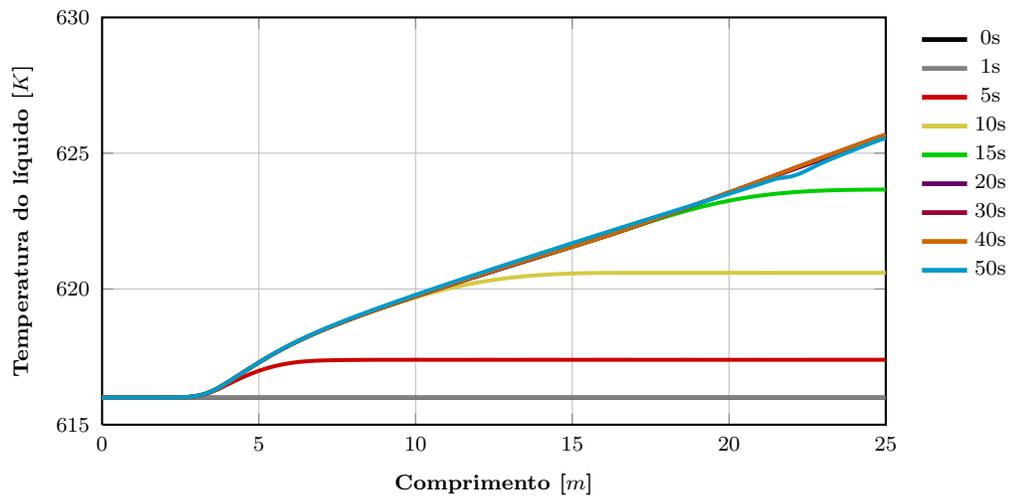


Figura 7.63: Perfis de temperatura do líquido no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 01 com velocidade inicial na entrada de $1,5 \text{ m s}^{-1}$.

Pode-se citar como fator que contribuiu para uma maior fração volumétrica média obtido pela simulação 1 em comparação a simulação 2 foi a maior temperatura atingida pelo fluido com menor velocidade de entrada (menor vazão) em relação ao de maior velocidade. A Figura 7.64 apresenta a comparação entre as temperaturas no centro do tubo ao longo de seu comprimento para os fluxos de entrada com velocidade de $0,5 \text{ m s}^{-1}$ e $1,5 \text{ m s}^{-1}$.

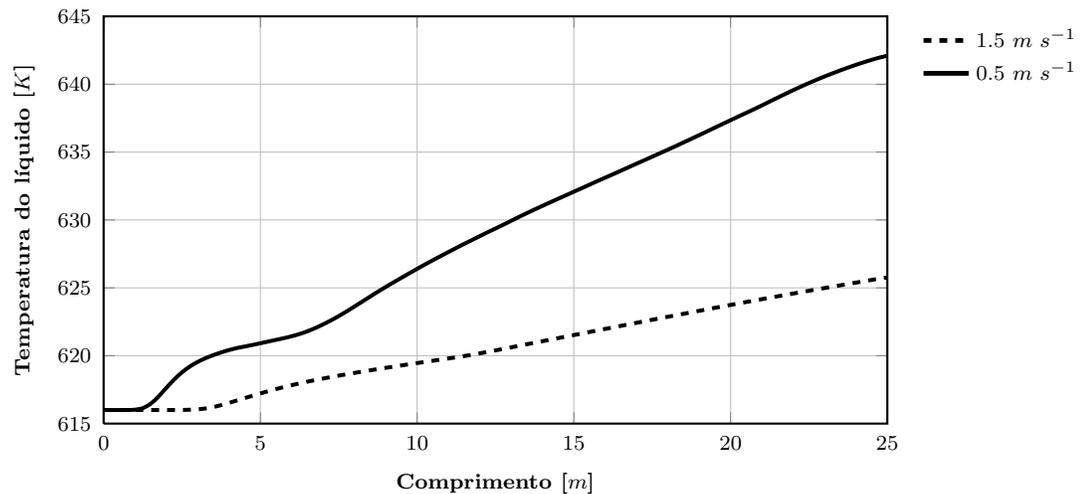


Figura 7.64: Perfis de temperatura do líquido no centro do tubo em função do comprimento do tubo para diferentes velocidades de entrada.

Pode-se também avaliar o perfil de temperatura do líquido no centro tubo em função do tempo de residência conforme a Figura 7.65.

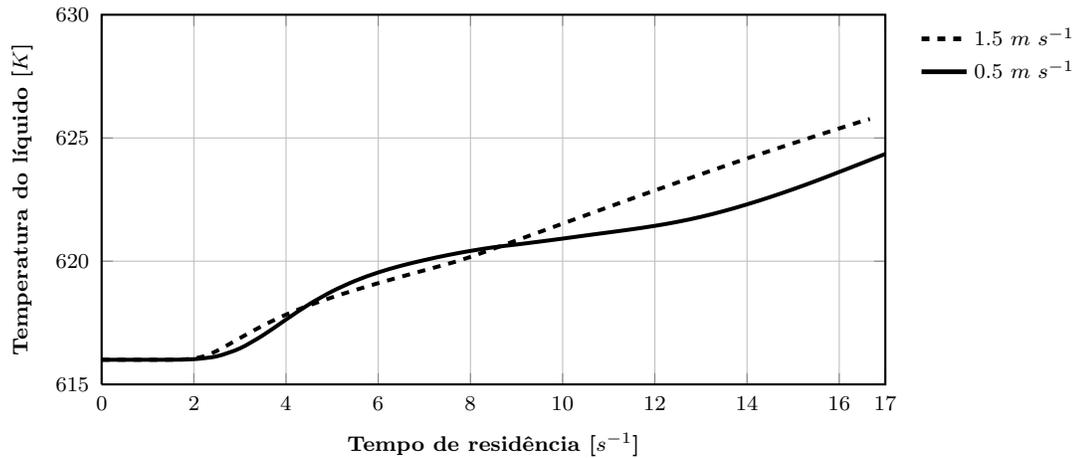


Figura 7.65: Perfis de temperatura do líquido no centro do tubo em função do tempo de residência para diferentes velocidades de entrada.

Ao utilizar o tempo de residência como parâmetro de avaliação, verificou-se uma tendência inversa, em que a simulação considerando maior fluxo possui uma tendência em ter maior temperatura. Mesmo, assim a diferença é muito pequena, não ultrapassando $2K$. Simulações com um tamanho maior de tubo devem ser realizadas para verificar se o comportamento entre as duas temperaturas se mantém.

d) Concentração de coque

Verifica-se uma pequena formação de coque no tubo para as três condições de simulação. O dados obtidos com a velocidade de entrada de $0,5 m s^{-1}$ indicam uma tendência maior na formação de coque em comparação as simulações realizadas com velocidade de entrada de $1,5 m s^{-1}$. Esse comportamento demonstra que, quanto menor o tempo de residência maior a concentração de coque no interior da tubulação, visto que o fluido nessa condição atinge uma maior temperatura, o que é esperado de acordo com as equações da taxa que expressam uma dependência exponencial da taxa de reação em relação a temperatura. Comparando as concentrações das simulações de mesma velocidade inicial ($1,5 m s^{-1}$) e diferentes amostras (Figura 7.66b e Figura 7.66c), observa-se perfis de concentrações próximas, mas com uma tendência para maior geração de coque ao utilizar os dados da cinética de vaporização para a amostra 1.

A Figura 7.66 apresenta os resultados das frações mássicas de coque para os três casos estudados.

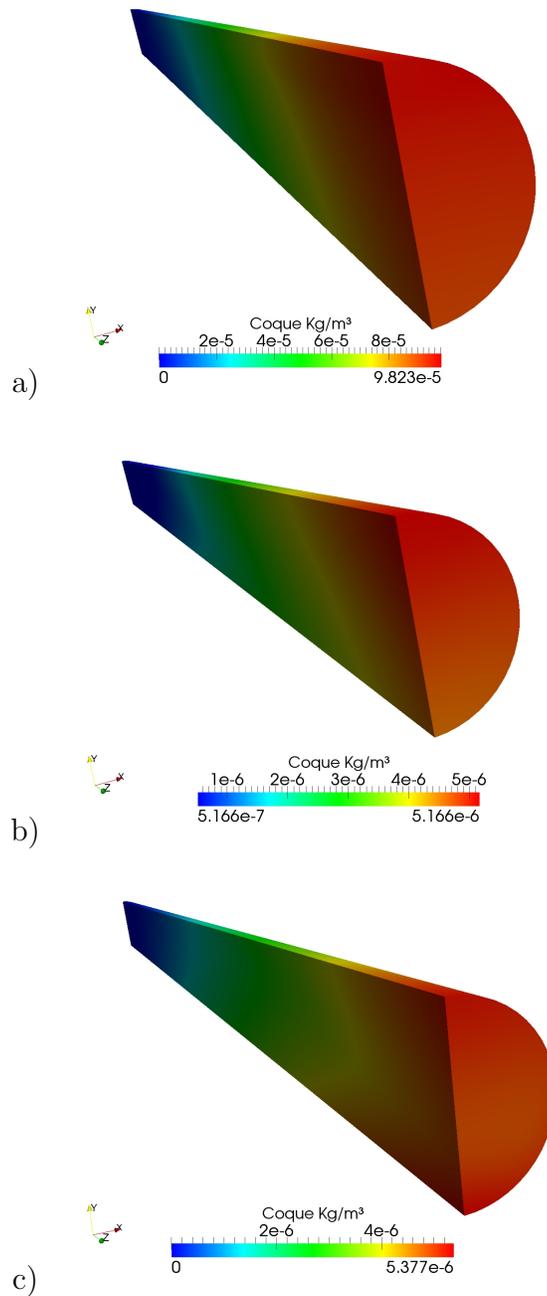


Figura 7.66: Perfil de concentração de coque após 50s com velocidades de entrada $U_l = 0,5 \text{ m s}^{-1}$ para amostra 24; b) Perfil de concentração de coque após 50s com velocidade de entrada $U_l = 1,5 \text{ m s}^{-1}$ para amostra 24 e c) Perfil de concentração de coque após 50 s com velocidade de entrada $U_l = 1,5 \text{ m s}^{-1}$ para a amostra 1.

As Figuras 7.67, 7.68 e 7.69 apresentam a variação da concentração de coque no centro do tubo em função de seu comprimento para os tempos 0, 1, 5, 10, 15, 20, 30, 40 e 50 segundos.

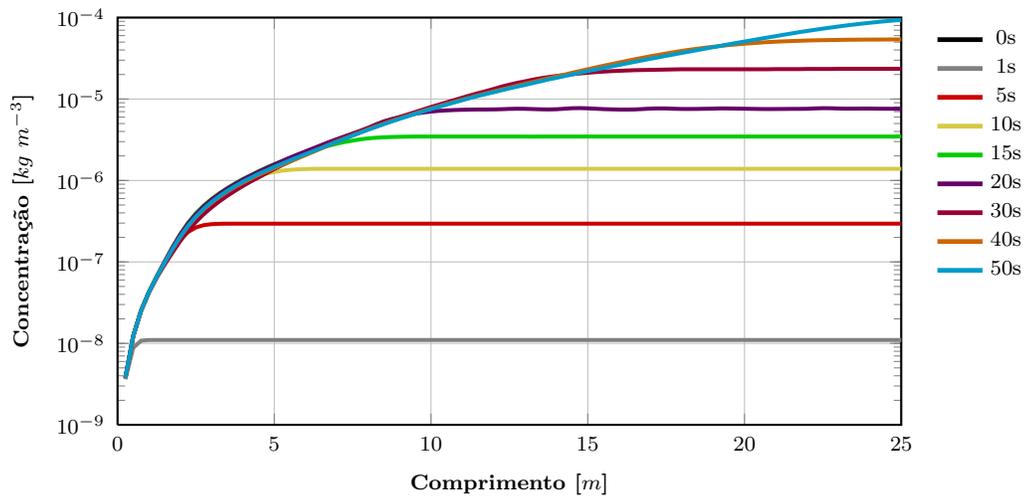


Figura 7.67: Perfis de concentração de coque no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $0,5\ m\ s^{-1}$.

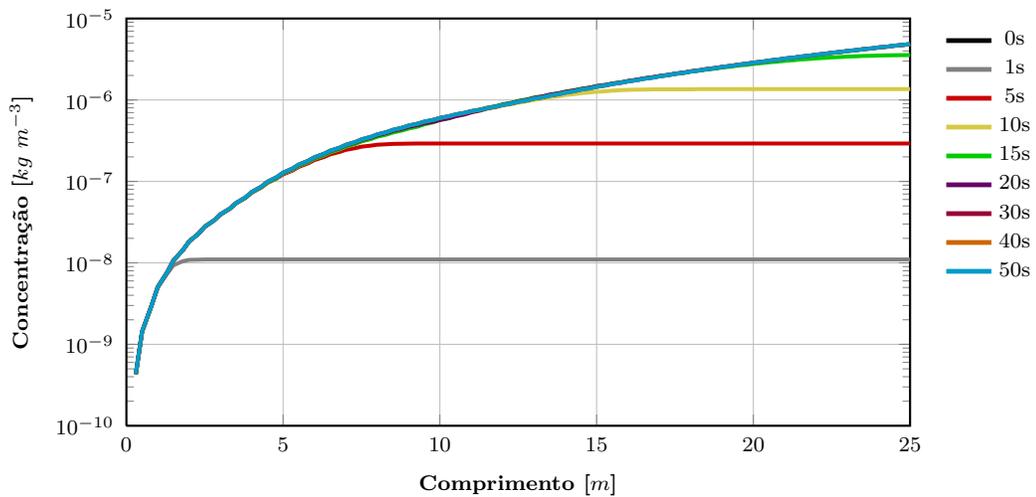


Figura 7.68: Perfis de concentração de coque no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 24 com velocidade inicial na entrada de $1,5\ m\ s^{-1}$.

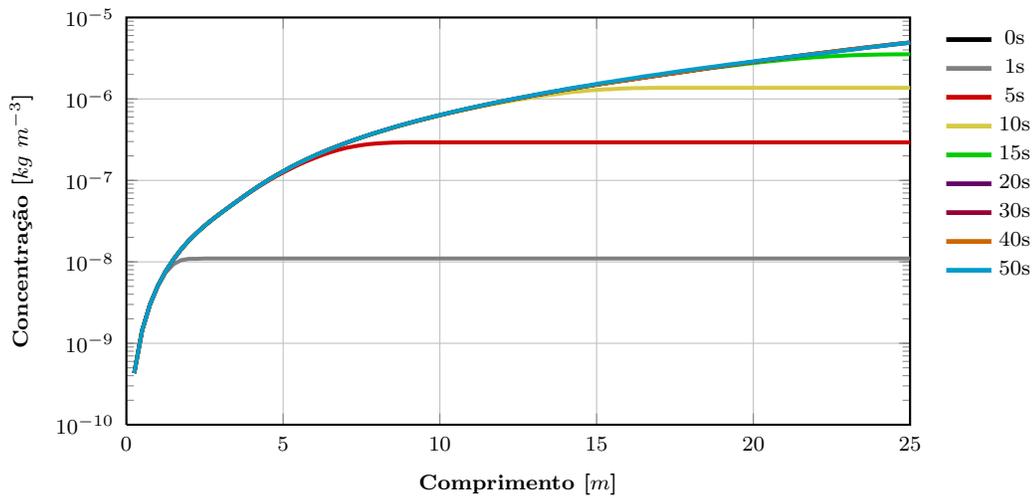


Figura 7.69: Perfis de concentração de coque no centro do tubo em função de seu comprimento ao longo do tempo para a simulação com dados da amostra 01 com velocidade inicial na entrada de $1,5\ m\ s^{-1}$.

Pode-se também fazer uma comparação da concentração de coque no centro do tubo ao longo de seu comprimento após 50 s. Verificou-se uma maior formação de coque na simulação considerando o petróleo com velocidade inicial de $0,5\ m\ s^{-1}$. A maior concentração atingida foi consequência das maiores temperaturas atingidas em relação as simulações com velocidades iniciais menores. A comparação entre os perfis de concentração pode ser verificada na Figura 7.70.

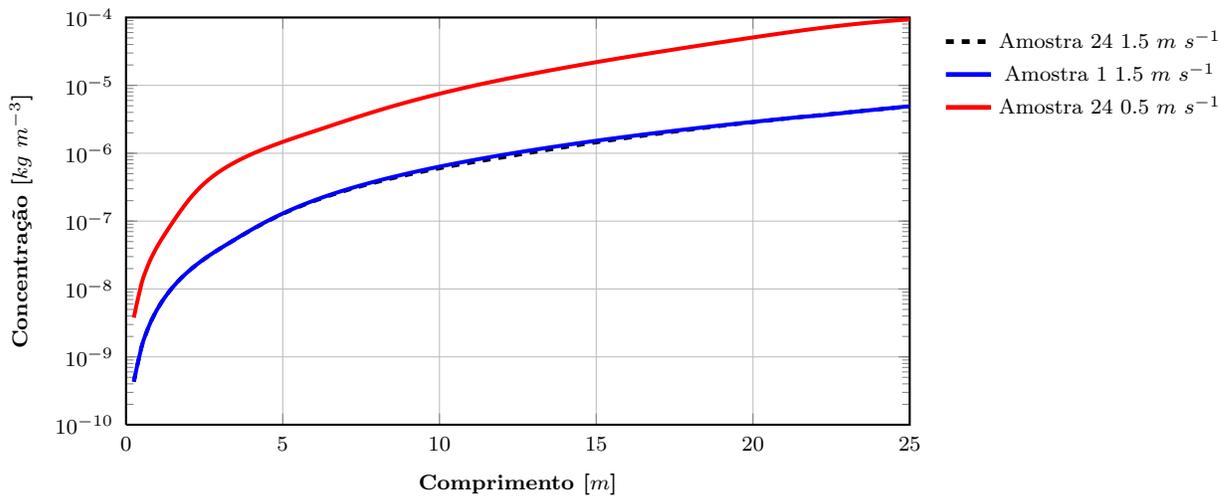


Figura 7.70: Comparação entre os perfis de concentração de coque no centro do tubo em função de seu comprimento com velocidades de entrada iguais a $1,5 \text{ m s}^{-1}$ para as amostras 24 e 1 e velocidade de entrada igual a $0,5 \text{ m s}^{-1}$ para amostra 1.

Foi realizada uma avaliação da concentração de coque em função do tempo de residência como apresentado pela Figura 7.71.

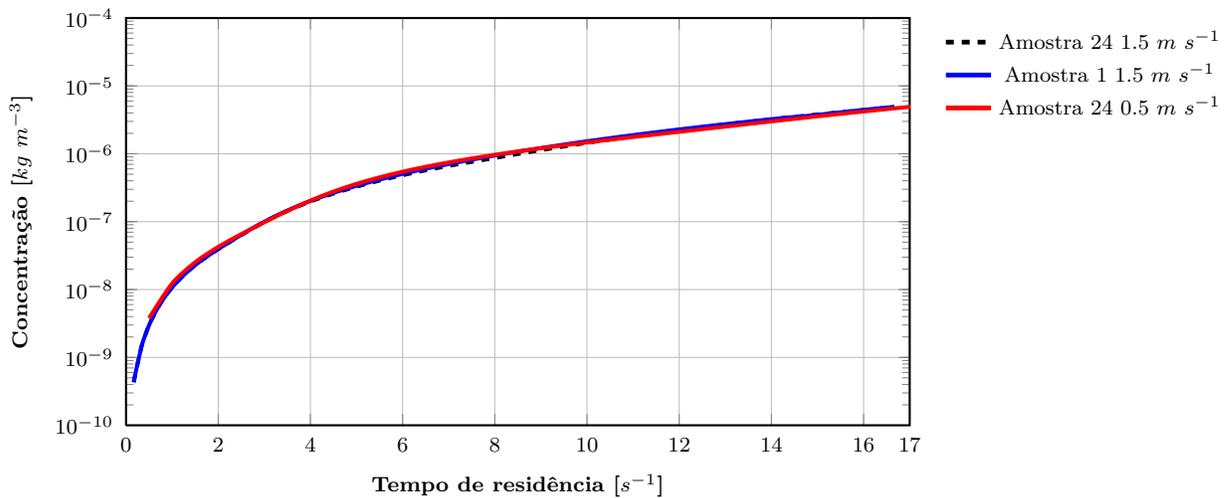


Figura 7.71: Comparação entre os perfis de concentração de coque no centro do tubo em função do tempo de residência com velocidades de entrada iguais a $1,5 \text{ m s}^{-1}$ para as amostras 24 e 1 e velocidade de entrada igual a $0,5 \text{ m s}^{-1}$ para amostra 1.

Avalia-se que praticamente não houve uma diferença expressiva na concentração de coque entre as três simulações ao levar em consideração o tempo de residência. Um

dos motivos foi a utilização de uma mesma concentração de entrada. Outro fator foi a temperatura alcançada pelas três simulações, que ficaram muito próximas quando avaliadas em função do tempo de residência, como pode ser verificado pela Figura 7.65.

Devido a dificuldade de se encontrar dados experimentais para fazer uma verificação da concentração gerada pelo modelo bifásico, toma-se como base os dados gerados pelo modelo de SOUZA *et al.* (2005). Apesar de serem modelos bem diferentes a tentativa é avaliar, na mesma temperatura prevista pelos dois modelos, os valores calculados da concentração de coque.

Através do modelo bifásico, pode-se estimar um valor de temperatura de aproximadamente $642K$ ao final de $25m$, correspondente ao comprimento do tubo simulado. A esta temperatura ao final do tubo foi previsto um valor de concentração de coque de aproximadamente $0,0001kg\ m^{-3}$.

A Figura 7.72 apresenta o perfil de temperatura do líquido ao longo do tubo previsto pelo modelo de SOUZA *et al.* (2005).

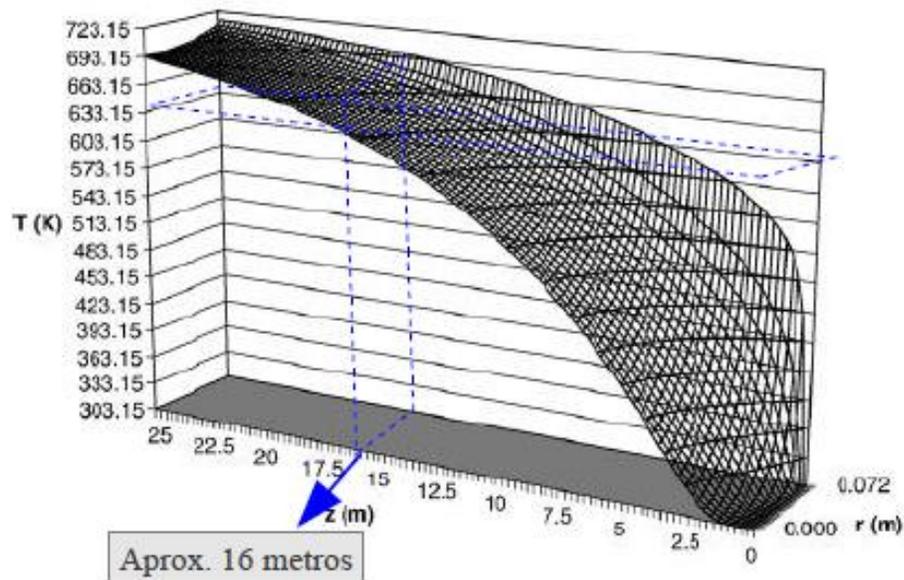


Figura 7.72: Gráfico com dados de temperatura do petróleo no interior do tubo adaptado do trabalho de SOUZA *et al.* (2005) para escoamento turbulento.

Após analisar a figura verifica-se que a temperatura do petróleo no centro do tubo correspondente a $642K$ foi prevista pelo modelo no ponto localizado a aproximadamente 16 metros do tubo.

Através da Figura 7.73, também retirada de SOUZA *et al.* (2005), marca-se o ponto correspondente a 16 metros para verificar o valor correspondente a fração mássica de coque prevista pelo modelo de SOUZA *et al.* (2005).

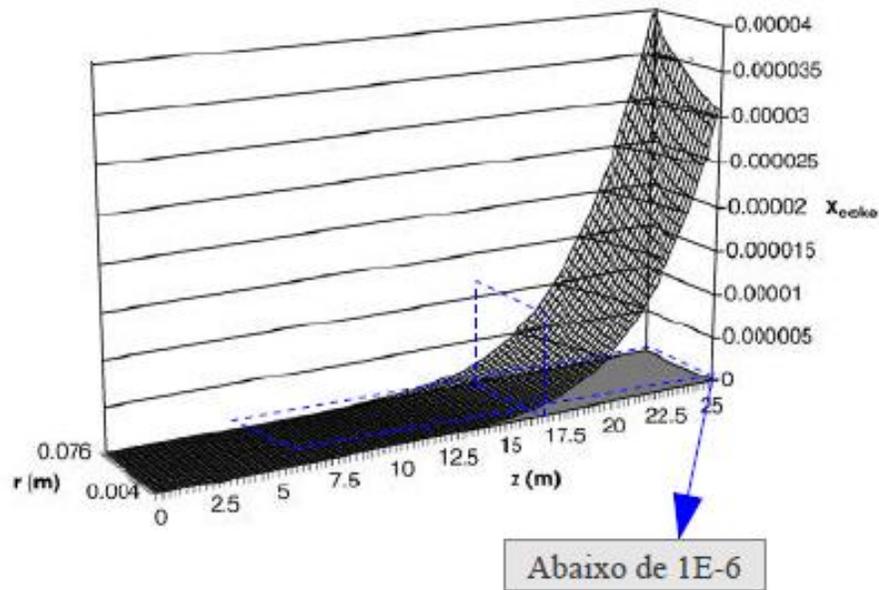


Figura 7.73: Gráfico com dados de fração mássica de coque no interior do tubo adaptado do trabalho de SOUZA *et al.* (2005) para escoamento turbulento.

Foi verificado um valor muito baixo da fração de coque, difícil até mesmo avaliar seu valor. Apesar de ser difícil uma comparação dos valores calculados pelos dois modelos, verifica-se uma coerência entre os dois. Observa-se que o perfil de concentração de coque tem um comportamento exponencial tanto para o modelo de SOUZA *et al.* (2005), quanto para o modelo bifásico estudado.

Vale ressaltar que por razões de limitação computacional, não foi possível simular o comprimento total da tubulação do forno. Então, a simulação foi realizada considerando apenas um segmento de tubo na parte inicial do forno. Portanto, maiores concentrações de coque são esperadas a medida que o fluido percorrer a tubulação, pois, a mistura continuará a receber energia e aumentará sua temperatura, o que irá favorecer a cinética de formação de coque.

Capítulo 8

Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

Neste capítulo são apresentadas as conclusões do trabalho e as sugestões para a continuidade no desenvolvimento de trabalhos futuros.

8.1 Conclusões

- Foi verificado uma grande necessidade de poder computacional na resolução do modelo e um sistema composto de um conjunto de computadores foi necessário para sua resolução.
- O software OpenFOAM apresentou-se como uma ferramenta eficiente nas simulações realizadas e versátil na implementação de novas rotinas computacionais ao modelo.
- O modelo de escoamento líquido-gás previu com boa precisão os valores de fração volumétrica do gás e velocidade do líquido ao ser comparado com dados experimentais.
- O modelo foi capaz de prever os perfis das propriedades mesmo para regiões que apresentaram frações volumétricas igual a zero. Isso foi possível através do uso das equações na forma intensiva da fase.
- O modelo é capaz de simular com boa estabilidade numérica sistemas inicialmente monofásicos e que ao decorrer do processo tornem-se multifásicos. Ele também pode

ser utilizado para simular sistemas monofásicos apenas, mas seria um processo inviável pelo tempo computacional exigido.

- Através dos resultados podemos ver claramente a vantagem em utilizar modelo Euleriano com formulação não conservativa. O modelo conseguiu captar regiões que praticamente são monofásicas com características de fluxo estratificado e também regiões em que os fluidos estão dispersos.
- Os resultados das simulações ao utilizar o modelo de vaporização simplificado mostraram que após 25 s a fração volumétrica média do gás dentro do tubo se encontra em torno de 2,9% para o petróleo Árabe e aproximadamente 1,86% para o betume Athabasca. O modelo comportou-se com robustez e estabilidade nas simulações realizadas e o software OpenFOAM se mostrou versátil na implementação das rotinas para esse cálculo.
- Em relação às concentrações pode-se observar a formação de coque com maior intensidade em regiões de maiores temperaturas. A adoção da difusividade mássica igual a viscosidade cinemática é uma simplificação utilizada para fluxos turbulentos, mas melhorias no cálculo deste parâmetro devem ser inseridos em trabalhos futuros.
- Foi possível verificar que fluxos com velocidades de entrada menores forneceram valores de fração volumétrica média de gás e concentração de coque maiores em relação aos previstos pela simulação com velocidades maiores.
- Ao utilizar modelo de vaporização ajustado a dados de termoanálises, foi possível observar a influência do tipo de petróleo nas taxas de vaporização e formação de coque. Foi previsto um valor maior de fração volumétrica média com o uso dos dados referentes à amostra 24 em relação à amostra 1, mas não foi observado uma diferença significativa entre os valores previstos da concentração de coque entre as duas amostras.
- Estudos empíricos através de termoanálises ou uma curva PEV, ligados a caracterização do petróleo em pseudocomponentes, os quais, compõe a rede cinética, devem ser realizados e inseridos no modelo de vaporização para maior representatividade do processo físico em escala industrial, levando em consideração a característica multicomponente do petróleo durante a vaporização.

8.2 Sugestões

- Encontrar mais dados experimentais para comparar com o modelo fluidodinâmico.
- Desenvolver um modelo de vaporização adequado ao petróleo levando em consideração as características de sua composição. O tratamento da evaporação pode se dar de duas formas: A primeira utilizando um gráfico PEV e ajustar uma equação prevendo a taxa de vaporização e as concentrações binárias em função da temperatura de corte. A segunda seria fazer um acoplamento de um software de processo que faça os cálculos do equilíbrio termodinâmico de fases fornecendo as concentração do líquido e gás.
- Acrescentar ao modelo de vaporização uma abordagem de ebulição nas paredes (*wall boiling*) considerando as energias de desprendimento e formação de bolhas.
- Adicionar modelos de coalescência e quebra de bolhas para a fase dispersa.
- Realizar simulações em várias condições operacionais com o objetivo de verificar a condição ótima de operação com menor geração de coque.
- Adicionar ao modelo, contribuições de outros grupos de pesquisas que desenvolvam modelos específicos de difusividade, turbulência, condutividade, coeficiente convectivo, etc., aproveitando o carácter *opensource* do código.
- Estas simulações exigem a resolução de vários sistemas de equações com cálculos de grandes matrizes. Uma abordagem para aceleração dos cálculos seria a utilização de placas de vídeos (GPUs) NVIDIA TESLA com tecnologia CUDA, as quais são específicas para cálculos e atualmente utilizadas em vários trabalhos em CFD.

A sugestão para a abordagem numérica-experimental para o modelo de vaporização é apresentado a seguir:

A abordagem a seguir é uma proposta para que a taxa de vaporização seja calculada considerando os pseudocomponentes da rede cinética, ou seja, que a previsão da taxa de vaporização seja feita através do cálculo da mudança de fase dos pseudocomponentes separadamente. Essa abordagem é muito importante, pois, a cinética de formação de coque é altamente influenciada pela concentração dos asfaltenos e durante a vaporização das cargas nos fornos ocorre uma variação em sua composição ao longo da tubulação. Assim, sugere-se adotar um gráfico do ponto de ebulição verdadeiro (PEV) integrado à classificação SARA

para obter os dados necessários ao cálculo das taxas de vaporização por pseudocomponentes. A ideia é definir as regiões na PEV para cada pseudocomponente do SARA através das temperaturas de corte e medir experimentalmente a quantidade de energia necessária que cada grupo utiliza durante a vaporização.

A Figura 8.1 apresenta os cortes das frações constituintes do petróleo agrupados em pseudocomponentes. Na Figura T_c e ΔH representam respectivamente a temperatura de corte e a energia total consumida durante a vaporização para cada grupo e w expressa a porcentagem vaporizada.

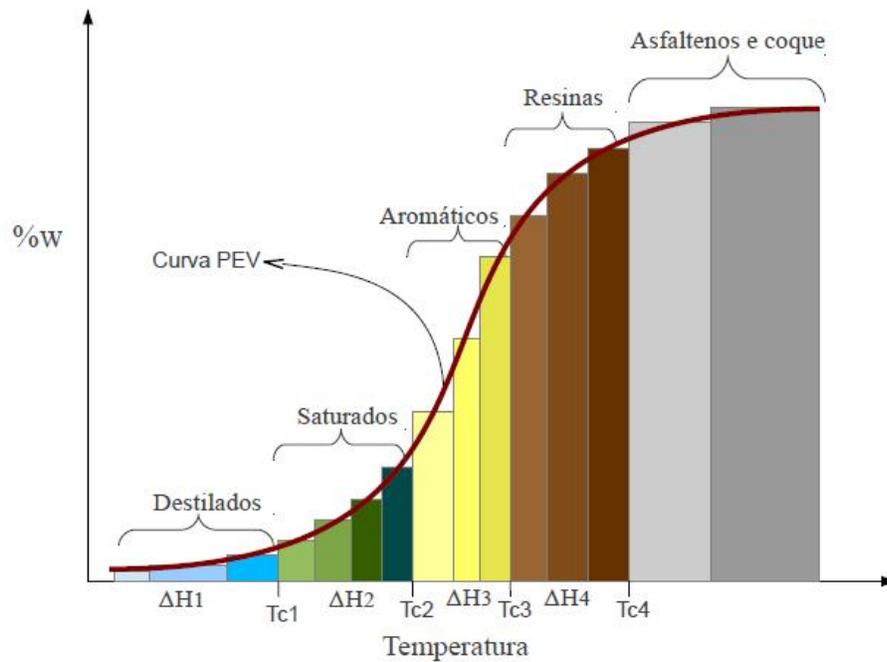


Figura 8.1: Exemplo de um gráfico de ponto de ebulição verdadeiro dividido em grupos de pseudocomponentes SARA.

É possível portanto, através da curva PEV gerada, ajustar uma função $\partial w_i / \partial T$ ou $\partial w_i / \partial H$ para cada grupo de pseudocomponente.

Utilizando as equações do balanço de energia implementadas no modelo CFD calcula-se $\partial T / \partial t$ ou $\partial H / \partial t$. Com os valores obtidos pelo cálculo numérico juntamente com o ajuste retirado da PEV calcula-se a taxa de vaporização para cada pseudocomponente como a seguir.

$$\frac{\partial w_j}{\partial t} = \frac{\partial w_j}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial w_j}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial t} \quad (8.1)$$

Referências Bibliográficas

- ANSYS INC. (US). ANSYS CFX-Solver theory guide. Release 12.0. Canonsburg, PA (2009).
- AL-HAJ IBRAHIM, H.; AL-QUASSIMI, M. M. Matlab program computes thermal efficiency of fired heater. *Periodica Polytechnica, Chemical Engineering*. vol. 52, n.2, pp. 61-69, 2008.
- AL-HAJ IBRAHIM, H.; AL-QUASSIMI, M. M. Simulation of Heat Transfer in the Convection Section of Fired Process Heaters. *Periodica Polytechnica, Chemical Engineering*. vol. 54, n.1, pp. 33-40, 2010.
- BAKER, O. Simultaneous flow of oil and gas. *Oil Gas Journal*,v. 53, p. 185-195, 1954.
- BHRAMARA, P.; RAO, V. D.; SHARMA, K. V.; REDDY, T. K. K. Cfd analysis of two phase flow in a horizontal pipe-prediction of pressure drop. *International Journal of Aerospace and Mechanical Engineering*,v. 3, n. 2, 72-78, 2009.
- BERGMAN, T. L.; LAVINE, A. S.; INCROPERA. F. P., DEWITT, D. P. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. John Wiley & Sons, seven edition, New York, 2011.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. *Fenômenos de Transporte, 2ª Edição*. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2004.
- BOUSSINESQ, J. *Théorie de l'Écoulement Tourbillant* Mem. Présentés par Divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr., v. 23, pp. 46-50, 1877.
- BRENNEN, C. E. *Fundamentals of Multiphase Flows* Cambridge University Press, 2005.
- BROWN, M. E. *Handbook of Thermal Analysis and Calorimetry*. Elsevier Science B.V., 1 edição, 1998.
- CAO, E. *Heat Transfer in Process Engineering* New York: McGraw-Hill, 2010.

- CHAPRA, S.C., CANALE, R.P. *Numerical methods for engineers. 3. ed.* New York: McGraw-Hill, 1988. cap. 12. p. 387-397.
- CHAUDHURI, U.R. *Funcamentals of Petroleum and Petrochemical Engineering.* CRC Press, USA, 2010.
- CHO, H.K.; LEE, H.D.; PARK, I.K.; JEONG, J.J. Implementation of a second-order upwind method in a semi-implicit two-phase flow code on unstructured meshes *Annals of Nuclear Energy* V. 37, P. 606-614, 2010.
- COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. On the partial difference equations of mathematical physics *IBM Journal of Research and Development* V. 11 (2), p. 215-234, 1967.
- DHOTRE, M. T.; NICENO, B.; SMITH, B. L.; SIMIANO, M. Large-eddy simulation (LES) of the large scale bubble plume. *Chemical Engineering Science*, v. 64, p. 2962-2704, 2009.
- DÍAZ-MATEUS, F. A. e CASTRO-GUALDRÓN, J. A. CFD Technique to calculate tube skin peak temperatures *Refinery Furnaces. CT & F - Ciencia, Tecnología y Futuro*, v.4 (4), p. 73-88, 2011.
- DREW, D. A.; CHENG, L.; LAHEY, R. T. The analysis of virtual mass effects in two phase flow. *Int. J. Multiphase Flow* v.5, p. 233-242, 1979.
- DREW, D. A.; LAHEY, R. T. The virtual mass and lift force on a sphere in rotating an inviscid flow. *Int. J. Multiphase Flow* v.13(1), p. 113-121, 1987.
- DREW, D. A.; LAHEY, R. T. Some supplemental analysis and concerning the virtual mass and lift force on a sphere in a rotating and straining flow. *Int. J. Multiphase Flow* v.16(6), p. 1127-1130, 1990.
- EKAMBARA, K., SANDERS, R. S., NANDAKUMAR, K., MASLIYAH, J. H. CFD simulation of bubbly two-phase flow in horizontal pipe, *Chemical Engineering Journal*, v.144, 2008, p. 277-288.
- EKAMBARA, K., SANDERS, R. S., NANDAKUMAR, K., MASLIYAH, J. H. CFD modeling of gas-liquid bubbly flow in horizontal pipes: influence of bubble coalescence and breakup. *International Journal of Chemical Engineering*, V. 2012, Article ID 620463, 20 pages, 2012.

- FARAH, M. A. *Caracterização do Petróleo e Seus Produtos* Petrobras, Rio de Janeiro, 2007.
- FERZIGER, J. H. AND PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics* Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- GHOSH, S.; MANDAL, T. K.; DAS, D.; DAS, P. K. *Review of oil water core annular flow*. Renewable and Sustainable Energy Reviews 13 (2009) 1957-1965.
- GHOSH, S.; DAS, D.; DAS, P. K. *Simulation of core annular downflow through CFD: A comprehensive study*. Chemical Engineering and Processing 49 (2010) 1222-1228.
- GHOSH, S.; DAS, D.; DAS, P. K. *Simulation of core annular in return bends: A comprehensive CFD study*. Chemical Engineering Research and Design 89 (2011) 2244-2253.
- GHIAASIAAN, S. M. *Two-Phase Flow, Boiling and Condensation in conventional and miniature systems* Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 2008.
- GIDASPOW, D. *Multiphase Flow and Fluidization*. Academic Press: San Diego, 1994.
- GABBOTT, P. *Principles and Applications of Thermal Analysis*. Blackwell Publishing, 1 edição, 2008.
- GOSMAN, A. D., ISSA, R. I., LEKAKOU, C., *et al.*, Multidimensional modelling of turbulent two-phase flows in stirred vessels. *A.I.Ch.E. Journal*, v. 38, n. 12, pp. 1946-1956, 1992.
- GOVIER, G. W. E AZIZ, K. *The flow of complex mixtures in pipes*. Van Nostrand Reinhold Co, New York, 1972.
- HARLOW, F. H., SCANNAPIECO, E. *Introduction of Finite-Difference Methods of Numerical Fluid Dynamics*. Los Alamos National Laboratory, Report LA-12984, Los Alamos, 1995.
- HARMATHY, T. Z. Velocity of Large Drops and Bubbles in Media of Infinite and Restricted Extent, *AICHE Journal* 6: 281-288, 1960.
- HAZRA, A.; DOLLIMORE, D.; ALEXANDER, K. Thermal analysis of the evaporation of compounds used in aromatherapy using thermogravimetry. *Thermochimica Acta*, v. 392 - 393, 221-229, 2002.
- HEWITT, G. F. E ROBERTS, D. N. Studies of two-phase flow patterns by simultaneous x-ray and flash photography. *Atomic Energy Research Establishment, Harwell (England)* Technical Report, AERE-M-2159, 1969.

- HILL, D. P. *The Computer Simulation of Dispersed Two-Phase Flows*. Ph.D.Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, Reino Unido, 1998.
- HIRSCH, C. *Numerical Computation of Internal and External Flows, volume I & II* John Willey Sons, 1991.
- HUTTON, D. V. *Fundamentals of Finite Element Analysis*. McGraw-Hill, New York, 2004.
- INCROPERA. F. P., DEWITT, D. P. *Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa*. LTC, Rio de Janeiro, 1998.
- ISHII, M. Thermo-fluid Dynamic Theory of Two-phase Flow. *Collection de la Direction des Etudes et Recherches d'Électricite de France*. Eyrolles, Paris, France, 22, 1975.
- ISHII, M., MISHIMA, K. Two-fluid Model and Hydrodynamic Constitutive Relations, *Nucl. Eng. Des.* 1984 v.82 p. 107-126.
- ISHII, M., HIBIKI, T. Thermo-fluid dynamics of two-phase flow. second edition New York: Springer, 2011, cap.9 p. 155-216
- ISHII M., ZUBER N. Drag coefficient an relative velocity in bubble, droplet or particulate flows. *AIChE Journal*, v. 25, p. 843-855, 1979;
- ISKANDRANI, A., KOJASOY, G. Local void fraction and velocity field description in horizontal bubbly flow, *Nucl. Eng. Des.* 204, 2001. p. 117-128.
- ISSA, R. I., Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, v. 62, n. 1, pp. 40-65, 1986.
- JASAK, H. *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows*. Ph.D. Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, Reino Unido, 1996.
- JASAK, H., WELLER, H. G., GOSMAN, A. D. *High resolution NVD dierencing scheme for arbitrarily unstructured meshes* Int. J. Num. Meth. Fluids, 31:431-449, 1999.
- JEONG, J.J.; YOON, H.Y.; CHO, H.K.; PARK, I.K. A semi-implicit numerical scheme for a transient two-fluid three-field model on an unstructured grid. *International Communications in Heat and Mass Transfer* v. 35, p. 597-605, 2008.

- JEONG, J.J.; YOON, H.Y.; PARK, I.K.; CHO, H.K.; KIM, J. A semi-implicit numerical scheme for transient two-phase flows on unstructured grids. *Nuclear Engineering and Design* v. 238, p. 3403-3412, 2008.
- KAUSHIK, V. V. R.; GHOSH, S.; DAS, G.; DAS, P. K. *CFD simulation of core annular flow through sudden contraction and expansion*. *Journal of Petroleum Science and Engineering* 86-87 (2012) 153-164.
- KOCAMUSTAFAOGULLARI, G., WANG, Z. An experimental study on local interfacial parameters in a horizontal bubbly two-phase flow, *International Journal of Multiphase Flow* v.17, 1991, p. 553-572.
- KOCAMUSTAFAOGULLARI, G., HUANG, W. D. Internal structure and interfacial velocity development for bubbly two-phase flow, *Nucl. Eng. Des.* v. 151, p. 79-101, 1994.
- KOPSCH, H. *Thermal Methods in Petroleum Analysis*. VCH Publishers, 1 edição, 1995.
- KOMATSU, S., HORI, Y., SHIMIZU, S. VISABC process yields high conversion. *Hydrocarbon Process* v. 65,n. 5,p.42-44, 1986.
- KÖSEOĞLU, R. Ö., PHILLIPS, C. R. Hydrocracking of Athabasca betumen. Kinetics of formation of gases. *Fuel* v. 67,n. 4,p. 552-556, 1988.
- KÖSEOĞLU, R. Ö., PHILLIPS, C. R. Kinetic models for the non-catalytic hydrocracking of Athabasca betumen. *Fuel* v. 67,p. 906-915, 1988.
- KÖSEOĞLU, R. Ö., PHILLIPS, C. R. Kinetics and product yield distributions in the $CoO - MoO_2/Al_2O_3$ catalyzed hydrocracking of Athabasca betumen. *Fuel* v. 67,p. 1411-1416, 1988.
- KÖSEOĞLU, R. Ö., PHILLIPS, C. R. Effect of reaction variables on the catalytic hydrocracking of Athabasca betumen. *Fuel* v.67, n.9, p.1201-1204, 1988.
- KÖSEOĞLU, R. Ö., PHILLIPS, C. R. Kinetic of non-catalytic hydrocracking of Athabasca betumen. *Fuel* v. 66, n. 6, p. 741-748, 1988.
- KRISHNA, R.; SAXENA, A. K. Use of an Axialdispersion Model for Kinetic Description of Hydrocracking. *Chemical Engineering Science*. vol. 44, n.3, p. 703-712, 1989.
- KULKARNI, A.A. Lift force on bubbles in a bubble column reactor:Experimental analysis. *Chemical Engineering Science*, v. 63, p. 1710-1723, 2008.

- LAMB, H. *Hydrodynamics* Dover, Nova Iorque, 1945.
- LANCE, M.; de BERTODONO, M. L. Phase distribution phenomena and wall effects in bubbly two-phase flows. *Multiphase Science and Technology* vol. 8, p. 69-123, 1994.
- LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. v. 3, p. 269-289, 1974.
- LAUFER, J. *The structure of turbulence in fully developed pipe flow*. National Advisory Committee of Aeronautics 1174. National Aeronautics and Space Administration of The USA, Washington D.C., 1952.
- LEGENDRE, D.; MAGNAUDET, J. The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow *Journal of Fluid Mechanics*. v. 368, pp. 81-126, 1998.
- LEVY, A. *Two-fluid approach for plug flow simulations in horizontal pneumatic conveying*. Powder Technology 112 (2000) 263-272
- LI, D. Vaporization kinetics and vapor pressures for petroleum fractions using thermogravimetry analysis. *Advanced Materials Research*, v. 236 - 238, 534-537, 2011.
- LOPES, G. C. *Desenvolvimento de um Modelo Numérico Tridimensional e Elíptico para o Estudo de Escoamentos no Interior de Dutos Cilíndricos*. Dissertação de Mestrado - UNICAMP, 2008. 13
- LOPES, G. C.; ROSA, L. M.; MORI, M.; NUNHEZ, J. R.; MARTIGNONI, W. P. Three-dimensional modeling of fluid catalytic cracking industrial riser flow and reactions. *Computers and Chemical Engineering*, v.35 p.2156-2168 , 2011.
- LOPES, G. C.; ROSA, L. M.; MORI, M.; NUNHEZ, J. R.; MARTIGNONI, W. P. Simulation of a three-phase three-dimensional reacting flow in an FCC industrial riser. *Boletim Técnico da Petrobras*, v. 54 (1/2), p. 117-129, 2011.
- LOPES, G. C.; ROSA, L. M.; MORI, M.; NUNHEZ, J. R.; MARTIGNONI, W. P. The importance of using three-phase 3-D model in the simulation of industrial FCC risers. *Chemical Engineering Transactions*, v. 24, p. 1417-1422, 2011.
- LOPEZ de BERTODANO, M. A. *Turbulent bubbly two-phase flow in a triangular duct*. Tese de Doutorado, Rensselaer Polytechnic Institute, 1992.

- MACHADO, M.B. *Modelagem tridimensional da dispersão de efluentes industriais em rios*. Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2006.
- MALISKA, C.R. *Transferência de calor e mecânica de fluidos computacional*. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.
- MANSOORI, G. A., LEONTARITIS, K. J. A Colloidal Model For Asphaltene Flocculation From Petroleum Fluids. *Iranian Journal of Science and Technology*. v. 16, n. 2, 3, 1992.
- MATOS, E. M.; GUIRARDELLO, R. Modeling and Simulation of a Pseudo-Two-Phase Gas-Liquid Column Reactor for Thermal Hydrocracking of Petroleum Heavy Fractions. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*. vol. 19, n°3, pp. 319-334, 2002.
- MENDONÇA FILHO, L. G., GUIRARDELLO, R. *Modelagem e Simulação de Reator Trifásico Aplicado à Óleos Pesados com Reações de Hidrocraqueamento Térmico e Catalítico, Desmetalização de Coque na Mistura e no Catalisador*. Dissertação de Mestrado - UNICAMP, 1998.
- MERCADO, E. R. V.; SOUZA, V. C.; GUIRARDELLO, R.; NUNHEZ, J. R. Modeling flow and heat transfer in tubes using a fast CFD formulation. *Computers and Chemical Engineering*. v.25, 713-722, 2001.
- MICHITA E. *Modeling of subcooled nucleate boiling with OpenFOAM*. Dissertação de Mestrado, Division of nuclear reactor technology, Royal Inst of technology, Stockholm, 2011.
- MILNE-THOMSON L. M. *Theoretical Hydrodynamics*, MacMillan & Co. Ltd., Londres, 1968.
- MOUZA, A. A.; PARAS, S. V.; KARABELAS, A. J. *CFD code application to wavy stratified gas-liquid flow*. Trans IChemE, Vol 79, Part A, July 2001, 561-568.
- MULLINGER, P.; JENKINS, B. *Industrial and Process Furnaces* BH Elsevier, Oxford, Reino Unido, 2008.
- NAVIER, C. L. M. H. Memoire sur les lois du mouvement des fluides *Mem. Acad. Sci. Inst.*, Vol 6, França, 1822, 389-440.
- NEWTON, I., *Philosophiae Naturalis: Principia Mathematica*. Societatis Regalis Sodali, 1686.

- OPENCFD Ltd. OpenFOAM The Open Source CFD Toolbox Programmer's Guide, v. 1-7-1
OpenCFD Ltd., 2010. Disponível em <http://www.openfoam.com/>.
- OPENCFD Ltd. OpenFOAM The Open Source CFD Toolbox User's Guide, v. 1-7-1
OpenCFD Ltd., 2010. Disponível em <http://www.openfoam.com/>.
- PALADINO, E. E. *Estudo do escoamento multifásico em medidores de vazão do tipo pressão diferencial* Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, 2005.
- PARK, I.K.; CHO, H.K.; YOON, H.Y.; JEONG, J.J. *Numerical effects of the semi-conservative form of momentum equations for multi-dimensional two-phase flows*. Nuclear Engineering and Design 239 (2009) 2365-2371
- PATANKAR, S. V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York: Hemisphere, 1980. p. 67-68.
- PEEBLES, F. N.; GRABER, H. J. Studies on the Motion of Gas Bubbles in Liquid, *Chem. Eng. Prog.* 49: 88-97, 1953.
- PINTO, M.L.M. *Simulação de trem de pré-aquecimento de petróleo visando estudo de incrustação*. Dissertação de Mestrado - UNICAMP, 2004.
- POISEUILLE, J. L. M. Recherches experimentales sur le mouvement des liquides dans les tubes de très petits diametres. *Comptes Rendus*, v. 12, p. 112-115, Academie des Sciences, 1841.
- POLLEY, G.T.; WILSON,D.I.; YEAP,B.L.; PUGH,S.J. Use of crude oil fouling threshold data in heat exchanger design. *Applied Thermal Engineering.*, vol.22, p.777-778, 2002.
- PRANDTL, L. *Essentials of Fluid Dynamics*, Blackie & Son, Glasgow pp. 342, 1952.
- PROSPERETTI, A.; TRYGGVASON, G. *Computational Methods for Multiphase Flow* Cambridge University Press: New York, 2007.
- RAHIMI, P. M. E GENTZIS, T.. The chemistry of bitumen and heavy oil processing. *Practical Advances in Petroleum Processing*, p. 597-634. Springer New York, 2006.
- RIAZI, M. R. *Characterization and Properties of Petroleum Fractions* West Conshocken, Pennsylvania: ASTM, 2005.

- RODI, W. Turbulence modelling. *In Turbulence models and their application in hydraulics*. Germany, 1984.
- ROSA, L. M. *Simulação de reações químicas e consumo de calor em risers*. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2002.
- ROSA, L. M. *Aplicação de técnicas CFD para o cálculo de escoamento em meio reativo em riser*. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2008.
- RUDINGER, A.C.A.; SPOGIS, N. E NUNHEZ, J.R. Optimizing mixing and power consumption through the use of computational fluid dynamics (CFD). *Computer Aided Chemical Engineering*, Vol. 15, p. 1008-1013, 2003.
- RUSCHE, H. *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*. Ph.D. Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, Reino Unido, 2002.
- SALARI, D.; NIAEI, A.; SHOJA, M.R. E NABAVI, R. Coke formation reduction in the steam cracking of naphtha on industrial alloy steels using sulfur-based inhibitors. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, Vol. 8, Article A130, 2010.
- SCHILLER, L. NAUMANN, A. Uber die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerekräftaufbereitung. *Z. Vereins deutscher Ing.*, 77(12):318-320, 1933.
- SCHLICHTING, H. *Boundary Layer Theory*, Springer, Nova Iorque, 2000.
- SEGRÉ, G.; SILBERBERG, A. Radial particle displacement in Poiseuille flow of suspensions. *Nature* v.189, p.209-210, 1961.
- SEGRÉ, G.; SILBERBERG, A. Behavior of macroscopic rigid spheres in Poiseuille flow. *J. Fluid Mech.* v.14 p.115-157, 1962.
- SILVA, L. F. L. R. *Desenvolvimento de Metodologias para Simulação de Escoamentos Polidispersos Usando Código Livre*. Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas/Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro, 2008.
- SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. *Introdução à termodinâmica da engenharia química*. LTC, 7. ed. Rio de Janeiro, 2007.

- SOUZA, B. A.; MATOS, E. M.; GUIRARDELLO, R.; NUNHEZ, J. R. Predicting coke formation due to thermal cracking inside tubes of petrochemical fired heaters using a fast CFD formulation. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 51, p. 138-148, 2005.
- SPALDING, D.B.A. Single formula for the law of the wall. *Journal of Applied Mechanics*, v. 28, p. 455-458, 1961.
- SPIEGEL, M. *Vector Analysis. 1. ed.* New York: McGraw-Hill, 1968.
- SPOGIS, N. *Metodologia para determinação de curvas de potencia e fluxos característicos para impelidores axiais, radiais e tangenciais utilizando a fluidodinamica computacional.* Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2002.
- SPOGIS, N. *Desenvolvimento de um impelidor de alta eficiência através da dinâmica dos fluídos computacional e otimização multi-objetivo.* Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2007.
- WALLIS, G. B. The Terminal Speed of Single Drops or Bubbles in an Infinite Medium. *Int. J. Multiphase Flow* 1: 491-511, 1974.
- WANG, S. K.; LEE, S.-J.; JONES Jr, O. C.; LAHEY Jr., R. T. 3-d turbulence structure and phase distribution measurements in bubbly two-phase flows. *Int. J. Multiphase Flow*, 13(3):327-343, 1987.
- WAUQUIER, J. P. *Petroelum Refining of Crude Oil Petroleum Products Process Flowsheets.* Éditions Technip: Paris, 1995.
- WELTY, J.R.; WICKS, C.E.; WILSON, R.E. *Fundamentals of momentum, heat and mass transfer. 3. ed.* New York: John Wiley & Sons, 1984. cap. 5. p. 48; cap. 9. p. 120-134; cap. 19. p. 591.
- WELLER, H. G., TABOR, G., JASAK, H., FUREBY, C. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object orientated techniques. *Comp. in Phys* 12(6):620-630, 1998.
- WELLER, H. G. *Derivation, modelling and solution of the conditionally averaged two-phase flow equations.* Technical Report TR/HGW/02, Nabla Ltd., 2002.
- WESSELING, P. *An Introduction to Multigrid Methods.* John Wiley & Sons, 1992.
- WILCOX, D.C. *Turbulence modeling for CFD.* DCW Industries, incorporated, 1993.

- WINSLOW, A.J. Numerical solution of the quasi-linear Poisson equation in a nonuniform triangular mesh. *Journal of Computational Physics*, v. 2, p. 149-172, 1966.
- WOLFERT, K. Non-Equilibrium Mass Transfer Between Liquid and Vapor Phases During Depressurization Processes in Transient Two-Phase Flow. *2nd CSNI Specialists Meeting*, v.2, p. 1377-1387, Paris. CSNI, 1978.
- YOON, M.H.Y.; PARK, I.K.; LEE, Y.J.; JEONG, J.J. An unstructured SMAC algorithm for thermal non-equilibrium two-phase flows. *International Communications in Heat and Mass Transfer* v. 36, p. 16-24, 2009.
- VALLÉE, C.; HÖHNE, T.; PRASSER, H-M.; SÜHNEL, T. Experimental investigation and CFD simulation of horizontal stratified two-phase flow phenomena. *Nuclear Engineering and Design* 238 (2008) 637-646.
- VASILIEV, V.I.; VOLKOV, D.V; ZAITSEV, S.A. and LYUBIMOV, D.A.; Numerical simulation of channel flows by a one-equation turbulence model. *ASME Journal of Fluid Engineering*, 119:885-892, 1997.
- VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics - The finite volume method*. Longman Scientific and Technical: Reino Unido, 2ª edição, 2007.
- TAHA, T., CUI, Z. F. CFD modelling of slug flow in vertical tubes *Chemical Engineering Science*. 61, p.676-687, 2006.
- TAKATSUKA, T., WATA, Y.,HIROHAMA, S., FUKUI, Y. A prediction model for dry sludge formation in residue hydroconversion. *Journal of Chemical Engineering*. Japão, 22(3), p.289-303, 1989.
- THOMAS, C. E. *Process Technology Equipment and Systems, third edition*. Delmar, Nova York, 2011.
- THOMAS, J. E. *Fundamentos de engenharia de petróleo*. Interciência: Petrobrás, 2ª edição, Rio de Janeiro, 2004.
- TONG, L. S.; TANG, Y. S. *Boiling Heat Transfer and Two-Phase Flow*. Taylor & Francis, 2ª edição, USA, 1997.

TOMIYAMA, A.; SOU, I.; ZUN, I.; KANAMI, N.; SAKAGUCHI, T. Effects of Eötvös number and dimensionless liquid volumetric flux on lateral motion of a bubble in a laminar duct flow. *Adv. Multiphase Flow*,p. 3-15, 1995.