

Aplicação de Técnicas CFD para o Cálculo de Escoamento em Meio Reativo em *Riser*

Autor: Leonardo Machado da Rosa

Orientador: prof. Dr. Milton Mori

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Campinas – São Paulo

Abril de 2008

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

R71a Rosa, Leonardo Machado da
Aplicação de técnicas CFD para o cálculo de
escoamento em meio reativo em *riser* / Leonardo
Machado da Rosa.–Campinas, SP: [s.n.], 2008.

Orientador: Milton Mori
Tese (Doutorado) – Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Craqueamento catalítico. 2. Reatores fluidizados.
3. Escoamento multifásico. 4. Modelos matemáticos. 5.
Métodos de simulação. 6. Método dos volumes finitos.
I. Mori, Milton. II. Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Título em Inglês: Application of CFD techniques for the calculation of reacting flow in
riser

Palavras-chave em inglês: Catalytic cracking, Fluidized reactors, Multiphase flow,
Mathematical models, Simulation Methods, Finite volume
method

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora: Henry França Meier, José Roberto Nunhez, Maria das Graças
Enrique da Silva, Waldir Pedro Martignoni

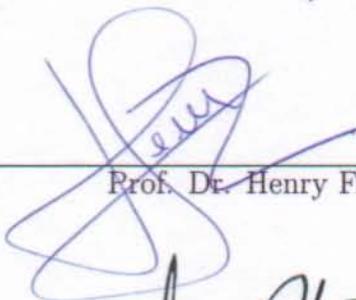
Data da defesa: 04/04/2008

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

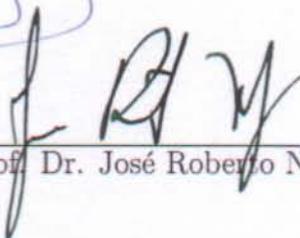
Tese de Doutorado defendida por Leonardo Machado da Rosa e aprovada em 04 de abril de 2008 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Milton Mori – Orientador



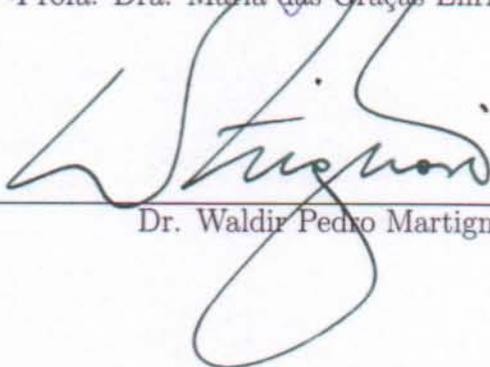
Prof. Dr. Henry França Meier



Prof. Dr. José Roberto Nunhez



Profa. Dra. Maria das Graças Enrique da Silva



Dr. Waldir Pedro Martignoni

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia Química.

[Handwritten signature]

Orientador

Agradecimentos

Agradeço a FAPESP e a PETROBRAS pelo aporte financeiro, que tornaram possível a manutenção da minha pesquisa.

Resumo

A aplicação de Fluidodinâmica Computacional (CFD) em operações industriais vem aumentando sensivelmente, em razão desta auxiliar no projeto de novos equipamentos, bem como a otimização dos já existentes. O presente trabalho apresenta uma série de simulações tridimensionais, bifásicas e adiabáticas, utilizando-se o modelo de dois-fluidos para o cálculo do escoamento gás-sólido em *risers* de diferentes tamanhos – um com as dimensões de 10m de altura e 76mm de diâmetro interno, e outro com 18m de altura e 50mm de diâmetro interno. Utilizou-se o modelo *k-epsilon* para tratar a fase gasosa como turbulenta. Foram considerados os modelos cinéticos de 4 *lumps* e 10 *lumps* para o cálculo das taxas de craqueamento catalítico presentes no reator. Dados experimentais para comparação do escoamento foram obtidos em literatura, e os resultados obtidos mostram que, para a correta predição dos fenômenos presentes no interior de um *riser*, deve-se levar em consideração também as reações de craqueamento, visto que a alteração da composição química da fase gasosa interfere diretamente no comportamento dinâmico do escoamento.

Abstract

The application of Computational Fluid Dynamics (CFD) in industrial operations has been increased not only in the project of new equipments but also in the optimization of the existing ones. The present work shows a set of tridimensional two-phase and adiabatic conditions, using the two-fluids model for the calculation of gas-solids flow in a high-flux risers of two different geometries, one with 10m of height and 76mm of internal diameter, and the second with 18m of height and 50mm of internal diameter. The k-epsilon model was applied to consider the influence of turbulence over the gas phase. The four-lump and ten-lump schemes kinetic models were used to predict the catalytic cracking reactions in the two different reactors. The riser with 10m of height and 76 mm of internal diameter had two entrances, one for particles inlet and one for the organic materials. The size of mesh for this case was 584.000 control volumes. The second riser studied with geometry of 18m of height and 50mm of internal diameter had one entrance for vapor, one for organic materials, and a third for particles inlet. The mesh generated over this geometry was considered 650.000 control volumes. The numerical results of gas-solids dispersion flow in a high-flux were compared with the experimental data from the work of Pärssinen and Zhu (2001), the four lump scheme for the mass concentration of chemical species was compared with the work of (ALI et al., 1997), and the ten lump scheme was compares with the work of NAYAK et al. (2005). The catalytic cracking reactions models show an important role in the prediction of all phenomena present in the reactor. The simulated results show that the kinetics models are important not only because of the variation of the gas phase and the temperature profiles inside the reactor but also because these parameters interfere directly in the dynamic behavior of the gas-solid flows.

Sumário

Resumo	i
Abstract	i
1 Apresentação	6
2 Descrição do Processo	8
2.1 Caracterização do Material Particulado	8
2.2 Estados de Fluidização	12
2.3 Leitos Fluidizados	15
2.4 Descrição do Processo FCC	20
3 Revisão Bibliográfica	23
4 Modelagem Matemática	32
4.1 Equações de Transporte	34
4.2 Equações de Fechamento	36
4.3 Turbulência	37
4.4 Reações Químicas	39
4.4.1 Modelo de 4 <i>lumps</i>	39
4.4.2 Modelo de 10 <i>lumps</i>	40
5 Métodos Numéricos	43

5.1	Método dos Volumes Finitos	44
5.1.1	Esquemas de Interpolação	46
5.1.2	Algoritmos de Resolução de Sistemas Lineares	48
5.2	Geração de Malhas	50
5.3	Simulador	50
6	Resultados	52
6.1	Malhas	52
6.2	Condições de Simulação	63
6.3	Escoamento a Frio	64
6.4	Escoamento com Reações	73
7	Conclusões e Sugestões	83
	Bibliografia	85
A	Notação	90
A.1	Variáveis	90
A.2	Superescritos e Subscritos	92
A.3	Siglas	93

Lista de Figuras

2.1	Caracterização de sólidos particulados segundo Geldart.	11
2.2	Seqüência de regimes de escoamento gás-sólido em um duto vertical. . .	13
2.3	Diagrama de regimes de escoamento.	16
2.4	Regimes de escoamento para partículas grosseiras.	18
2.5	Regimes de escoamento para partículas finas.	19
2.6	Unidade de craqueamento catalítico.	22
4.1	Modelo de 4 <i>lumps</i> para o craqueamento de gasóleo.	39
4.2	Modelo de 10 <i>lumps</i> para o craqueamento de gasóleo.	41
5.1	Representação de volumes de controle.	45
6.1	Perfil de velocidade para camada limite turbulenta.	54
6.2	Configuração do <i>riser</i> da Geometria A.	57
6.3	Divisão de blocos do tipo O-grid.	58
6.4	Detalhes da malha da Geometria A.	59
6.5	Configuração do <i>riser</i> da Geometria B.	60
6.6	Aplicação de uma construção do tipo L-grid.	61
6.7	Detalhes da malha da Geometria B.	62
6.8	Perfil de velocidade da fase particulada a 1,53m de altura.	65
6.9	Perfil de velocidade da fase particulada a 2,73m de altura.	66
6.10	Perfil de velocidade da fase particulada a 3,96m de altura.	67

6.11	Perfil de velocidade da fase particulada a 5,13m de altura.	67
6.12	Perfil de velocidade da fase particulada a 6,34m de altura.	68
6.13	Perfil de velocidade da fase particulada a 8,74m de altura.	69
6.14	Perfil de velocidade da fase particulada a 9,42m de altura.	69
6.15	Campo de velocidade da fase particulada – caso 02.	70
6.16	Campo de fração volumétrica da fase particulada – caso 02.	71
6.17	Campo de velocidade da fase gasosa, Geometria B – caso 03.	72
6.18	Variação de frações mássicas conforme o modelo de 4 <i>lumps</i> – caso 04. .	73
6.19	Efeito do calor de reação sobre a temperatura da fase gasosa – caso 04.	74
6.20	Fração mássica de gasóleo segundo o modelo de 10 <i>lumps</i> – caso 05. . .	75
6.21	comparação entre perfis de fluxo de partículas.	76
6.22	comparação entre perfis de fluxo de partículas.	77
6.23	Campo de temperatura – caso 06.	78
6.24	Variação da temperatura no reator – caso 06.	79
6.25	Campo de concentração de gasóleo – caso 06.	80
6.26	Concentração de gasóleo ao longo da altura – caso 06.	81

Lista de Tabelas

4.1	Constantes de reação para o modelo de 4 <i>lumps</i>	40
4.2	Constantes de reação para o modelo de 10 <i>lumps</i>	42
6.1	Simulações realizadas.	63

Capítulo 1

Apresentação

Uma unidade de craqueamento catalítico fluidizado (FCC) consiste, basicamente, de um reator (chamado *riser*), onde ocorrem as reações de craqueamento, e de um regenerador, no qual o catalisador é regenerado.

O *riser* é um equipamento importante presente em unidades de craqueamento catalítico fluidizado. Sua principal função é prover um meio para colocar em contato frações pesadas de hidrocarbonetos (o gasóleo) com partículas aquecidas de catalisador, dando início às reações de craqueamento catalítico. O processo de craqueamento transforma moléculas de hidrocarbonetos alimentados em produtos de maior valor comercial. Mesmo sendo equipamentos amplamente utilizados, fundamentais ao processo de craqueamento catalítico, os *risers* são unidades que apresentam fenômenos não plenamente explicados pela literatura. O objetivo deste trabalho é verificar a influência de modelos de craqueamento sobre os demais fenômenos presentes no escoamento de *risers*, através de simulações sem e com reações químicas, e com diferentes modelos de craqueamento.

Na simulação do escoamento no interior do *riser*, considerou-se o escoamento de duas fases: a fase gasosa, composta por vapor contendo uma mistura de compostos orgânicos, e a fase particulada, composta por partículas de catalisador. Ambas as fases são alimentadas no reator com temperaturas diferentes; assim, na base do *riser* existem altos gradientes de temperatura. A variação da temperatura influencia tanto as taxas de reação quanto a própria dinâmica do escoamento. Recursivamente, as reações de craqueamento catalítico consomem energia devido ao seu caráter endotérmico, e assim também alteram a temperatura no interior do reator. A formação de novos produtos,

e consumo dos existentes, altera as propriedades físico-químicas do meio em que se encontram.

Neste trabalho são apresentados a metodologia utilizada para resolver o problema acima exposto, bem como resultados obtidos com as simulações realizadas.

O Capítulo 2 apresenta uma descrição do objeto de estudo desse trabalho, que envolve a caracterização do material particulado, dos regimes de escoamento gás-sólido e do processo de craqueamento catalítico. Os artigos e estudos referentes aos fenômenos encontrados em *risers* (tais como modelos para o cálculo de escoamentos gás-sólido, e para reações de craqueamento) são apresentados no Capítulo 3.

No Capítulo 4, são definidas as equações de transporte, de turbulência, das reações de craqueamento, e as equações de fechamento utilizadas nas simulações seguintes. Já no Capítulo 5 é apresentado o Método dos Volumes Finitos, utilizado neste trabalho, bem como os programas utilizados para a definição, cálculo e análise das simulações: os pacotes ICEM (utilizado no desenho e geração de malhas) e CFX (utilizado nas simulações). No Capítulo 6 são apresentados os resultados obtidos com as diversas simulações realizadas. Comparações são feitas, considerando os dados experimentais disponíveis, e gráficos com campos de velocidade, concentração e temperatura são apresentados e discutidos. Finalmente, no Capítulo 7 são apresentadas as conclusões deste trabalho, e algumas sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Descrição do Processo

Fluidização é a operação na qual partículas sólidas adquirem um estado fluido através da suspensão em gás ou líquido. Leitos de partículas fluidizadas são utilizados em diversas aplicações industriais, por proporcionarem excelentes taxas de troca térmica e mássica. No craqueamento catalítico, sólidos particulados (catalisador) entram em estado de fluidização para que longas cadeias de carbono sejam quebradas em cadeias menores, formando produtos com maior valor agregado.

2.1 Caracterização do Material Particulado

GELDART (1973) foi o primeiro a classificar partículas de acordo com as características que permitiam-nas fluidizar. Após observar a fluidização de todos os tipos e tamanhos de sólidos, Geldart apresentou quatro comportamentos claramente distintos de partículas (Grupos A, B, C e D), caracterizados pela diferença entre as massas específicas das partículas e do fluidizante, e pelo tamanho da partícula. A Classificação de Partículas de Geldart, obtida de dados experimentais em temperatura e pressão ambiente, fluidizadas com ar, tornou-se de utilidade para descrever o comportamento fluidodinâmico de sólidos. Na sua classificação, Geldart apresentou os seguintes grupos:

Partículas do Grupo A são aquelas que, quando fluidizadas em condições ambientes, formam uma região de regime não-borbulhante, com expansão do leito (fluidização homogênea), até atingirem a velocidade mínima de formação de bolhas (u_{mb}). Acima desta, entra no regime borbulhante, caracterizado por:

- bolhas de gás movem-se mais rápido que o restante do gás, que mantém-se junto à emulsão;
- estas bolhas de gás quebram e se coalescem enquanto ascendem no leito; há um tamanho máximo para as bolhas, normalmente menor que 10cm;
- internos não melhoram a significativamente fluidização;
- uma grande circulação de sólidos acontece, mesmo quando existe apenas poucas bolhas; esta característica pode ser melhor observada em leitos grandes;
- quando bolhas crescem até atingir o diâmetro do duto, levam ao regime intermitente (ou *slug*).

Finos agem como lubrificantes, facilitando a fluidização do leito. Assim, a razão entre a velocidade mínima para formação de bolhas e de fluidização ($\mathbf{u}_{mb}/\mathbf{u}_{mf}$) aumenta com a adição de finos.

Partículas do Grupo B formam leitos que, ao serem fluidizados, formam bolhas (fluidização heterogênea) imediatamente ao atingirem a velocidade mínima de fluidização (\mathbf{u}_{mf}). Neste caso, a razão $\mathbf{u}_{mb}/\mathbf{u}_{mf} \approx 1$, diferente dos sólidos do Grupo A. Com velocidades maiores, o leito comporta-se como segue:

- bolhas pequenas formam-se no distribuidor, crescem e coalescem com a ascensão no riser;
- o tamanho das bolhas aumenta aproximadamente de forma linear com a distância acima do distribuidor, excedendo a velocidade do gás.
- o tamanho das bolhas torna-se (geralmente) independente do tamanho médio das partículas;
- o borbulhamento vigoroso incentiva a circulação dos sólidos;

A maioria dos sistemas gás-sólido com reações, metalúrgicos e outros, operam nesta faixa porque o tamanho médio e distribuição das partículas alimentadas são normalmente determinadas pela corrente precedente no processo dos materiais brutos.

Partículas do Grupo C são partículas muito finas, com forte coesão, que são incapazes de sofrer fluidização. Existe uma classificação AC para partículas em uma região de transição incerta entre as partículas do Grupo A e do Grupo C; estes

sólidos escoam bem quando fluidizados, mas “defluidizam” permanentemente quando deslizando sobre uma superfície horizontal, bloqueando dutos.

Partículas do Grupo D são partículas muito grandes, cujo movimento preferencial é o de jorro. A fluidização se dá por caminhos preferenciais, com as características:

- bolhas coalescem rapidamente e crescem em grandes tamanhos;
- bolhas ascendem mais lentamente que o restante do gás percolando a emulsão;
- a fase densa tem uma porosidade baixa;
- quando o tamanho das bolhas atinge o diâmetro do leito, “golfadas planas” são observadas (vide Figura 2.2f, página 13);
- os sólidos “jorram” facilmente, enquanto os sólidos do Grupo B não;

Leitos de partículas grandes são normalmente indesejáveis para operações físicas ou químicas. Entretanto, em algumas indústrias isto não pode ser evitado (como, por exemplo, no processamento de produtos agrícolas, em aglomerados químicos, e reações de *pellets* compósitos).

A Figura 2.1 mostra como os grupos estão classificados, de acordo com as propriedades do gás e das partículas.

As propriedades de fluidização de um pó em ar podem ser preditas, estabelecendo em qual grupo ele está situado (KUNII e LEVENSPIEL, 1991). É importante notar que à temperatura operacional e pressões acima da ambiente, um pó pode aparecer em um grupo diferente do que ocupa em condições ambientes. Isto é devido ao efeito das propriedades do gás no agrupamento e pode ter implicações sérias na operação do leito fluidizado que se tem interesse.

Como a faixa de velocidades de gás acima das quais a fluidização não borbulhante acontece no Grupo A de pós é pequena, a fluidização borbulhante é o tipo mais comumente encontrado em sistemas comerciais fluidizados por gás. A velocidade superficial de gás na qual as primeiras bolhas aparecem é conhecido como a velocidade borbulhante mínima \mathbf{u}_{mb} . Um borbulhamento prematuro pode ser causado por um projeto de distribuidor deficiente ou protuberâncias dentro do leito.

Nas partículas do Grupo A quando $\mathbf{u}_{mb} > \mathbf{u}_{mf}$ as bolhas estão constantemente se dividindo e coalescendo, e um tamanho de bolha estável máximo é alcançado. Por

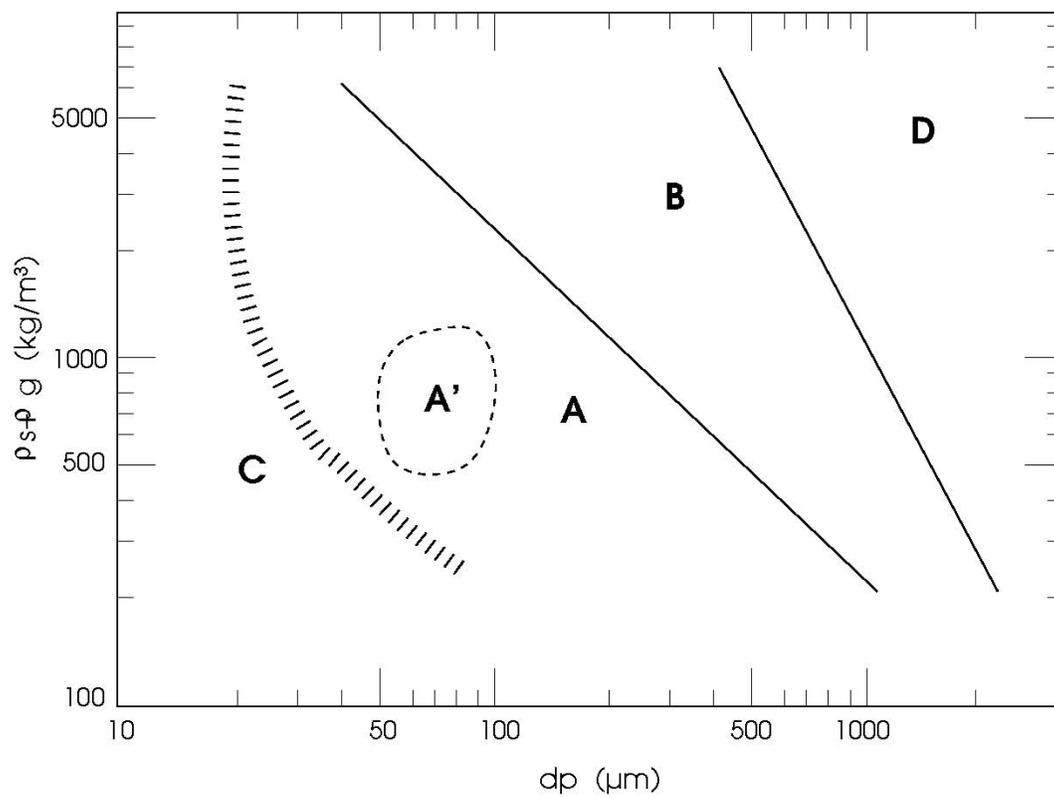


Figura 2.1: Caracterização de sólidos particulados segundo Geldart; a região A' demarca propriedades de catalisadores FCC (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

divisão e coalescência, as bolhas alcançam um máximo tamanho estável, efetivamente independente da velocidade do gás ou tamanho de vaso.

Nas partículas dos Grupos B e D, $\mathbf{u}_{mb} = \mathbf{u}_{mf}$, as bolhas continuam crescendo em tamanho e nunca alcançam um tamanho máximo. Isto produz uma fluidização de qualidade bastante pobre pois há grandes flutuações de pressão.

Nas partículas do Grupo C, as forças interparticulares são grandes quando comparadas com as forças inerciais nas mesmas. Como resultado, as partículas estão impossibilitadas de alcançar a separação, e exigem serem totalmente suportadas pelas forças de arraste e de empuxo, e a verdadeira fluidização não acontece. Nestes casos não surgem bolhas e, ao invés disso, o fluxo de gás forma canais através do pó.

Considerando que as partículas não são suportadas completamente pelo gás, a perda de pressão através do leito sempre é menor que o peso aparente do leito por unidade de área da seção reta. Por conseguinte, a medida da queda de pressão do leito é um modo de detectar o comportamento deste Grupo C, se a observação visual é inconclusiva. A fluidização neste grupo pode ser alcançada com a ajuda de um agitador mecânico ou vibração. Quando o tamanho das bolhas é maior que um terço do diâmetro do equipamento, a velocidade de ascensão destas é controlada pelo equipamento e elas se tornam bolsas de gás.

2.2 Estados de Fluidização

Parte da definição do regime de escoamento é a descrição do arranjo morfológico dos componentes, ou *padrão de escoamento*. O padrão de escoamento é geralmente óbvio em observações visuais ou fotográficas, mas não é trivial defini-lo devido a critérios adicionais de distinção (como a diferença entre escoamento laminar ou turbulento), ou à importância relativa de diversas forças. Como exemplo da complexidade de escoamentos bifásicos, a Figura 2.2 mostra uma seqüência de padrões de escoamento ocorrendo quando um fluido passa através de um leito de partículas finas, com vazão progressivamente mais alta.

Na primeira situação, Figura 2.2a a uma taxa de escoamento baixa, o fluido apenas percola os espaços vazios entre partículas estacionárias. Este é um **leito fixo**. Com o aumento na taxa de escoamento, partículas movem-se à parte, e poucas vibram e movem-se em regiões restritas, formando um **leito expandido**.

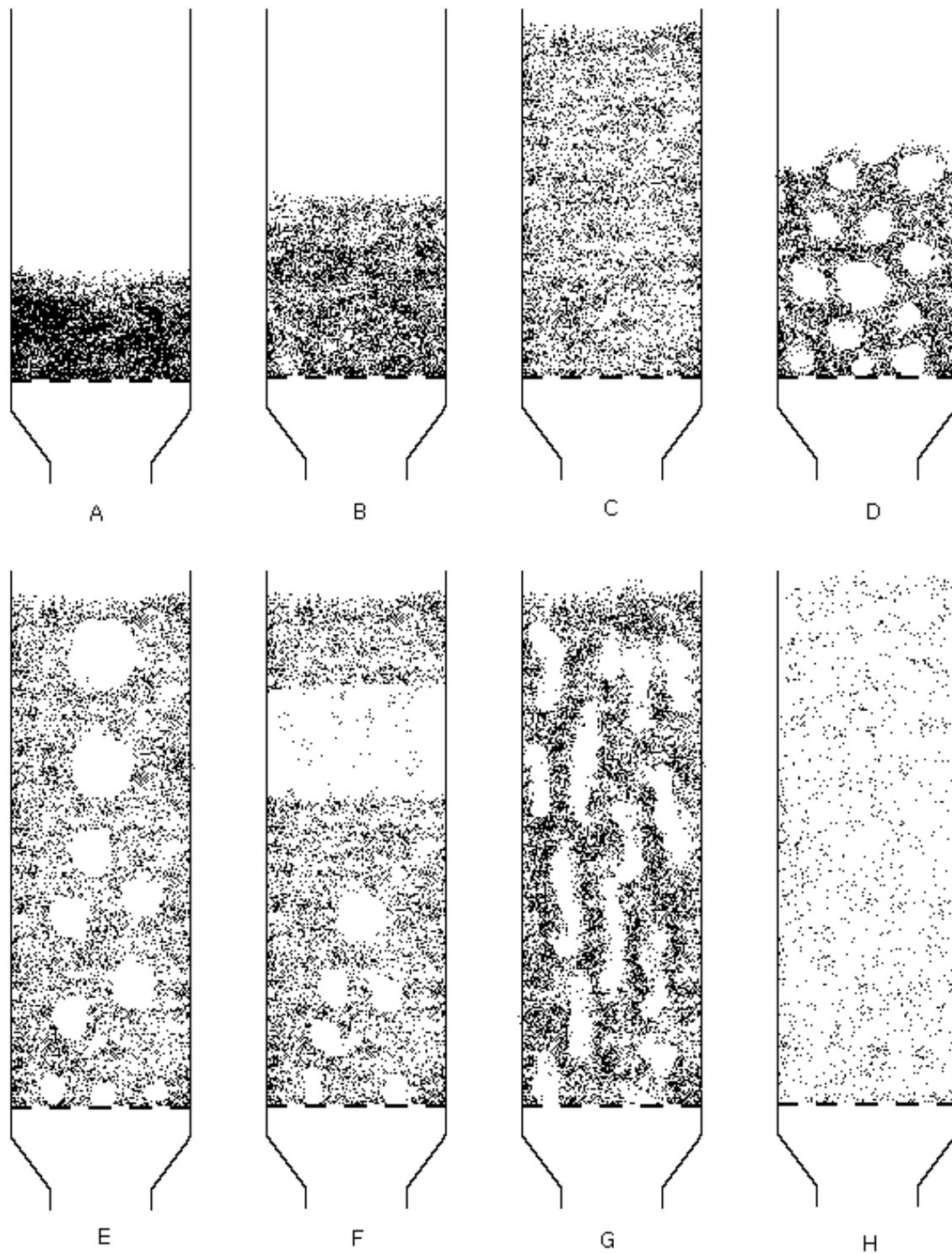


Figura 2.2: Seqüência de regimes de escoamento gás-sólido em um duto vertical (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

Com velocidades ainda maiores, atinge-se um ponto no qual todas as partículas estão suspensas pelo escoamento ascendente do gás. Neste ponto o atrito entre partícula e fluido (arraste) equilibra-se com a força peso das partículas, e a queda de pressão (na direção axial do leito) iguala-se ao peso do fluido e das partículas no leito. Considera-se que o leito esteja fluidizado, sendo chamado de **leito na mínima fluidização** (Figura 2.2b).

Em sistemas sólido-líquido, um aumento na taxa de escoamento acima da fluidização mínima provoca uma expansão suave, progressiva do leito. Fortes instabilidades são amortecidas, e heterogeneidades, ou grandes vazios de líquidos, não são observados em condições normais. Leitos como este são referenciados como **leito na fluidização suave** (Figura 2.2c). Estes leitos também podem ser encontrados em sistemas gás-sólido, desde que contenham partículas finas leves com gases densos em alta pressão.

Geralmente, sistemas gás-sólido atuam de maneira diferente. Diferente de sistemas sólido-líquido, instabilidades não são amortecidas, e o aumento da taxa de escoamento além da mínima fluidização causa o aparecimento de grandes instabilidades, com o borbulhamento e escoamento de gás através de caminhos preferenciais. Em taxas de escoamento mais elevadas, a agitação torna-se mais violenta, e o movimento dos sólidos mais vigoroso. Chama-se este padrão de **leito borbulhante** (Figura 2.2d). Em casos raros, sistemas líquido-sólido também podem operar desta maneira, desde que sejam formados por sólidos muito densos fluidizados por líquidos de baixa massa específica.

Em sistemas gás-sólido, bolhas de gás coalescem e crescem enquanto ascendem, e em um leito de diâmetro pequeno, suficientemente profundo, as bolhas podem eventualmente tornar-se grandes o bastante para espalhar-se por toda a seção do tubo. No caso de partículas finas, elas escoam suavemente para baixo pela parede em torno do “vazio” ascendente de gás. Este padrão chama-se **intermitente**, com **golfadas axiais** como mostrado na Figura 2.2e. Para partículas grosseiras, a porção do leito acima das bolhas é impulsionada para cima, como em um pistão. Partículas caem da *golfada*, que por fim desintegra-se. Neste tempo, outra golfada é formada, e este movimento oscilatório repete-se. Isto é chamado de **golfada plana** (Figura 2.2f).

Quando partículas finas são fluidizadas com uma taxa de escoamento suficientemente alta, a velocidade terminal dos sólidos é excedida, a superfície superior do leito

desaparece, e, ao invés de bolhas, o que se observa é o movimento turbulento de grupos de partículas (*clusters*), e vazios de gás de várias formas e tamanhos. Este é o **leito fluidizado turbulento**, mostrado na Figura 2.2g. Com o aumento na velocidade do gás, sólidos são arrastados para fora do leito. Neste estado têm-se um **leito fluidizado disperso com transporte pneumático** de sólidos (Figura 2.2h).

As condições presentes no interior de equipamentos do tipo *riser* permitem o desenvolvimento de leitos fluidizados turbulentos (próximo às paredes, onde a velocidade das fases gasosa e particulada é menor), mas o regime é predominantemente um transporte pneumático, pois no centro do reator a velocidade de ambas as fases é suficientemente elevada.

Diferentes regimes de escoamento requerem diferentes métodos de análise, e o problema de como um regime desenvolve-se em outro também deve ser considerado. Para um dado equipamento e componentes específicos, mapas de padrões e de regimes de escoamento, nas quais várias áreas são indicadas em um gráfico com duas coordenadas independentes, podem ser elaborados em termos de regimes de escoamento, como mostrado na Figura 2.3.

2.3 Leitos Fluidizados

Embora a técnica de leito fluidizado tenha sido introduzida comercialmente em 1926 (para a gaseificação de lignita), a verdadeira adoção dos leitos fluidizados está associada com o craqueamento catalítico do gasóleo em gasolina, primeiramente exercida em 1942 na refinaria de Baton Rouge (Exxon). Antes, o craqueamento era realizado em reatores de leito fixo. O craqueamento catalítico deposita derivados de carbono na superfície do catalisador, causando uma rápida desativação dos poros. Para manter a capacidade de produção, o coque tinha que ser queimado. Essa regeneração requeria que o reator estivesse fora de operação. Para eliminar o ciclo, tentativas foram feitas para circular o catalisador e queimar o coque em um tanque separado, o regenerador. O primeiro método foi usar um leito dinâmico de catalisador: o catalisador movia-se para baixo no reator, em contracorrente com o fluxo de fluido, em uma massa compacta, até o regenerador. Deste, o catalisador retornava ao topo do reator por um transportador. Depois, o sistema de transporte foi substituído por um sistema de elevação a gás (*gas-lift*). Finalmente, optou-se por manter tanto o reator quanto o regenerador sob

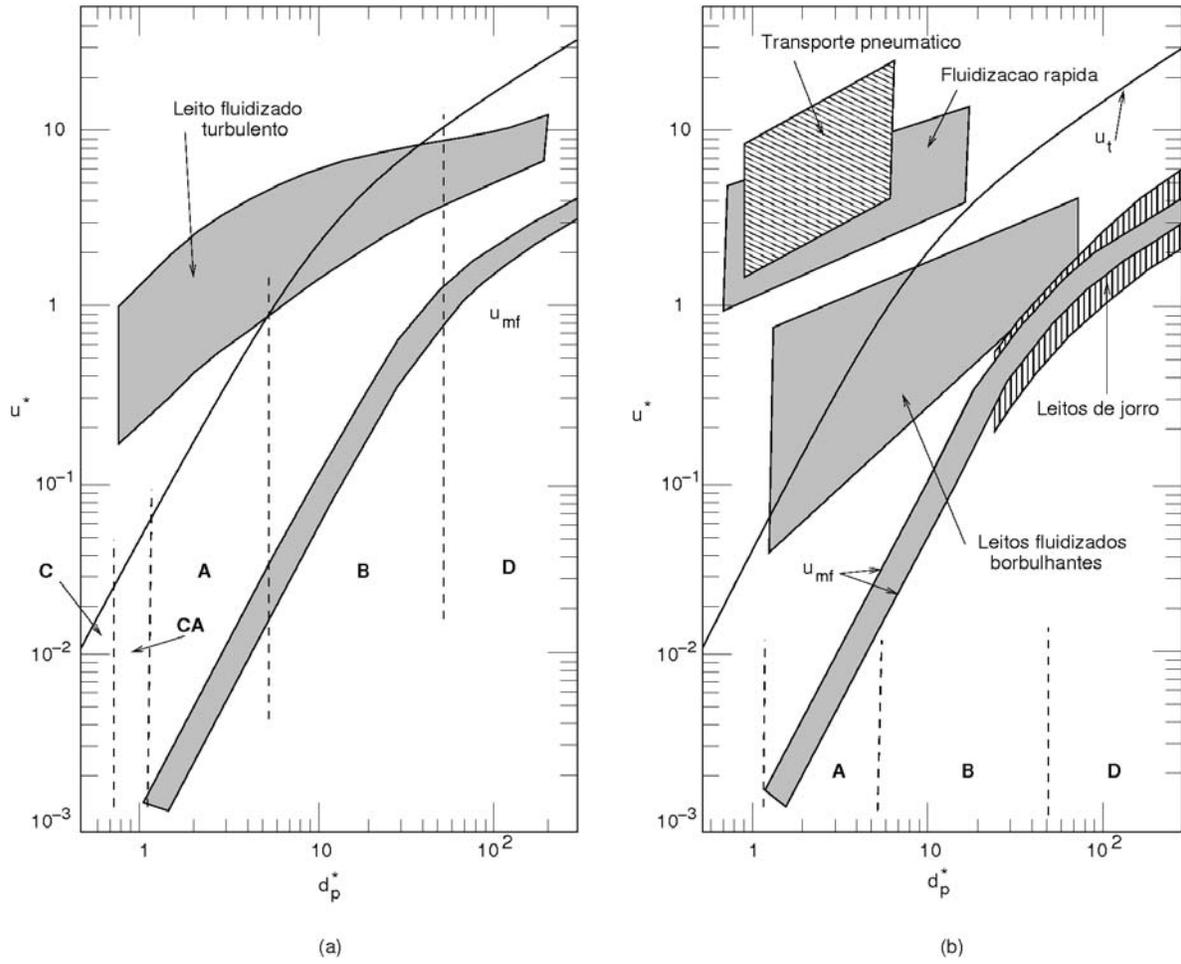


Figura 2.3: Diagrama de regimes de escoamento (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

condições de transporte. As altas velocidades necessárias para o transporte pneumático causaram atrito considerável no catalisador. Para diminuir a velocidade, sólidos muito finos tiveram que ser usados. Foi então descoberto que a mistura densa de sólidos e gás comportava-se em muitos aspectos como um fluido, e isto tornava o controle das correntes muito mais conveniente. Desde este momento, leitos fluidizados têm sido usados em outras áreas, onde sólidos precisam ser manipulados.

O projeto e operação de reatores em leito fluidizado e de transporte não é uma tarefa trivial, particularmente quando envolve a circulação de sólidos. A tecnologia é muito mais complicada que àquela associada a reatores em leito fixo.

O craqueamento do gasóleo para produção de gasolina ocorre a temperaturas da ordem de 525°C . O coque impregnado no catalisador (1% a 2% em massa) é regenerado com ar a cerca de 580°C , reduzindo a quantidade de 0,4% a 0,8% em massa.

Há uma diferença considerável entre o comportamento de partículas grosseiras com um tamanho entre $650\mu\text{m}$ e $2600\mu\text{m}$, usadas em leitos de combustão, e partículas finas com um tamanho entre $60\mu\text{m}$ e $100\mu\text{m}$, tipicamente usadas em craqueamento catalítico.

Num leito fixo de partículas grosseiras, a queda de pressão na altura total do leito é uma função da taxa de escoamento de gás fluindo através dele (KUNII e LEVENSPIEL, 1991). A queda de pressão aumenta proporcionalmente com o aumento da velocidade superficial do ar, até uma velocidade crítica, a partir da qual a queda de pressão diminui um pouco, devido ao reposicionamento do catalisador num arranjo mais livre. A partir deste ponto, a queda de pressão mantém-se praticamente constante.

O ponto de mínima fluidização é facilmente observado. Com o aumento sucessivo da velocidade do fluido acima da velocidade de mínima fluidização, o leito expande-se, o leito torna-se menos denso e, finalmente, as partículas são carregadas. Uma análise do leito permite uma descrição mais detalhada, conforme representado na Figura 2.4, na qual a fração volumétrica é traçada contra a velocidade superficial relativa do gás. Uma vez que a velocidade de mínima fluidização é excedida, bolhas aparecem no leito (para partículas do grupo B, por exemplo). Além do regime de borbulhamento, o regime turbulento é obtido, no qual o tempo de duração das bolhas é curto, tal que, de modo geral, o leito parece mais ou menos uniforme. As velocidades terminal e a de deslocamento coincidem. Além dessa velocidade, o regime de fluidização rápida é atingido. Se a velocidade é aumentada mais ainda, o regime de transporte é

encontrado, com um declive bastante íngreme na fração volumétrica de sólidos.

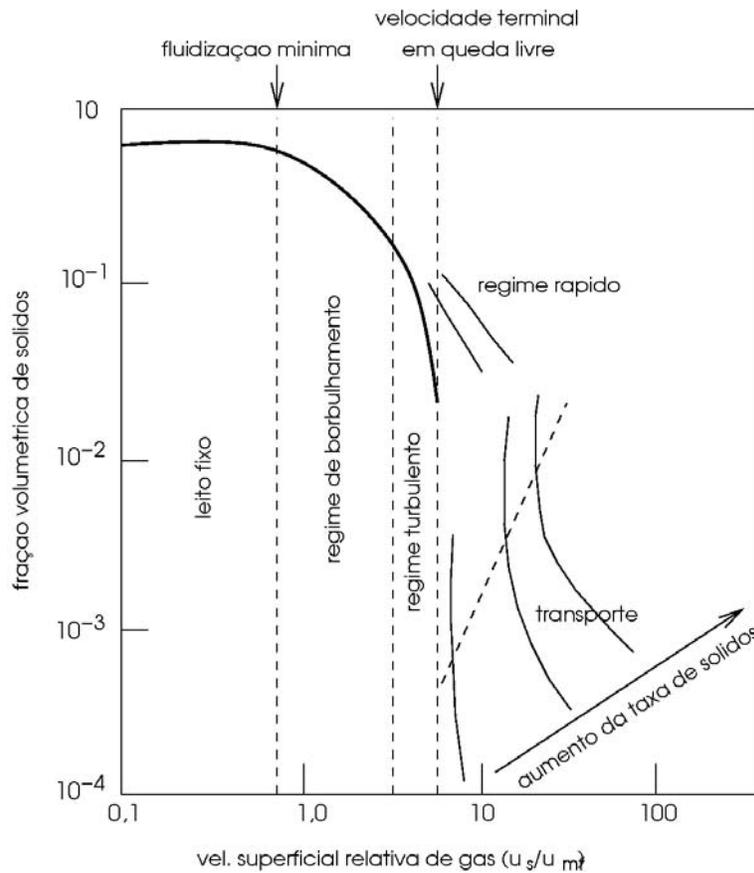


Figura 2.4: Regimes de escoamento para partículas grosseiras (FROMENT and BISCHOFF, 1979).

Com partículas finas, como aquelas utilizadas em unidades FCC, o diagrama da Figura 2.4 é modificado, assumindo o comportamento ilustrado na Figura 2.5. Bolhas não aparecem tão logo a fluidização mínima é atingida. Na realidade, há uma faixa de velocidades na qual uma expansão uniforme é observada. O leito é muito mais coerente que o caso anterior, e as partículas comportam-se menos *individualmente*. O regime turbulento encontra-se muito além da velocidade terminal de uma única partícula. Este é um regime interessante porque o efeito do “curto-circuito” das bolhas é bem menos pronunciado que no regime borbulhante. Como conseqüência, altas conversões podem ser mais rapidamente obtidas.

Para atingir uma fluidização suave em condições realmente turbulentas, 20 a 35 por cento de finos, com diâmetro de partícula abaixo de $40\mu\text{m}$, é necessário. A razão

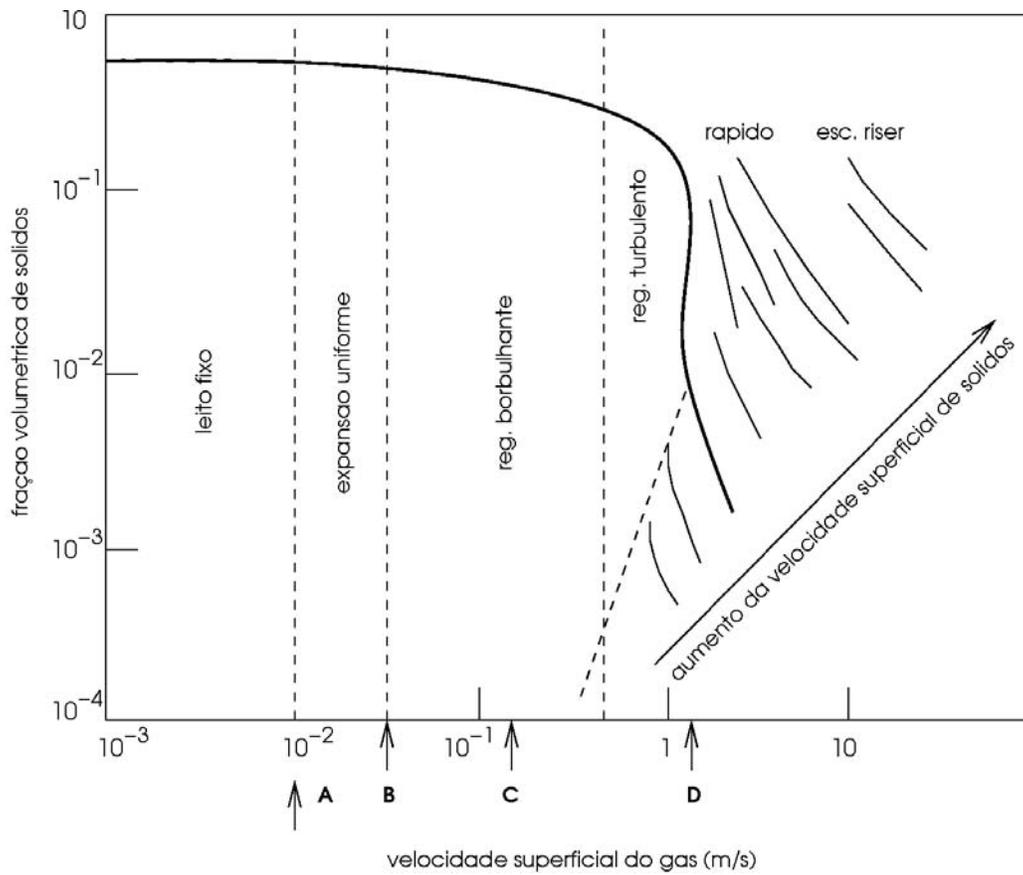


Figura 2.5: Regimes de escoamento para partículas finas (FROMENT and BISCHOFF, 1979).

entre a maior e a menor velocidade de gás em operação é muito maior do que com partículas grosseiras. O arraste não segrega as partículas de acordo com o seu tamanho, como observado em partículas grosseiras; assim, quando o fluxo de gás é interrompido, o leito não é imediatamente “defluidizado”. Os reatores Kellog-Fischer-Tropsch operam no regime rápido, bem como as unidades de craqueamento catalítico modernas no regime de elevação (*riser regime*), no qual a taxa de sólidos é muito alta.

2.4 Descrição do Processo FCC

Uma unidade de craqueamento catalítico fluidizado – FCC – é composta por um reator (chamado *riser*), onde ocorrem as reações de craqueamento, de um regenerador, no qual o catalisador é recuperado, e de ciclones e *strippers* que fazem a separação dos produtos e do catalisador (Figura 2.6).

A corrente de alimentação que entra na base do reator é composta por vapor d’água e gasóleo pré aquecido a cerca de 300°C. Também na parte inferior do reator é alimentado o catalisador quente, proveniente do regenerador, e ambas as correntes são misturadas. A vaporização e o craqueamento dos hidrocarbonetos causa uma expansão dos gases que, somada com a adição de vapor, gera um fluxo de gás transportando o catalisador em direção à saída do *riser*, numa mistura de fases gasosa (material orgânico com vapor) e particulada (catalisador incrustado com coque).

Na saída, que localiza-se na parte superior do *riser*, uma série de ciclones (aliados ao *stripper*) separa as partículas de catalisador do produto. Vapor puro é adicionado, a fim de completar a dessorção dos hidrocarbonetos que ainda permanecem impregnados no catalisador.

O catalisador que é separado dos produtos é transportado ao regenerador, onde o coque (que é formado junto aos produtos e permanece na superfície do catalisador) é queimado. Esta operação é necessária porque, ao ocupar os sítios presentes no catalisador, o coque acaba por desativá-los, diminuindo drasticamente a eficiência do catalisador. A combustão do coque é uma reação muito exotérmica, e o calor liberado eleva a temperatura do catalisador até cerca de 700°C. Esta é a principal fonte da energia consumida na vaporização da carga de gasóleo e nas reações de craqueamento no *riser*.

As de queima, no regenerador, ocorrem em leito fluidizado. No entanto, a

velocidade no interior do *riser* é suficientemente alta para que as reações de craqueamento ocorram em leito fluidizado disperso, com o transporte pneumático de sólidos (Figura 2.2h). O *riser* e o regenerador operam normalmente em balanço térmico, não precisando de uma fonte externa de calor. Se muito coque é formado no *riser*, sua combustão no regenerador pode elevar demais a temperatura do catalisador, e a alimentação de catalisador regenerado no *riser* deve ser reduzida. Isto restringe a capacidade produtiva da unidade; por isso, espera-se que um bom catalisador gere uma quantidade ótima de coque sem sacrificar a produção dos demais produtos.

A (elevada) temperatura presente no reator tem como efeito o aumento na frequência das bolhas, e torna a fluidização mais suave. Para partículas finas, a porosidade na mínima fluidização aumenta com a temperatura (até 8% para temperaturas de até 500°C).

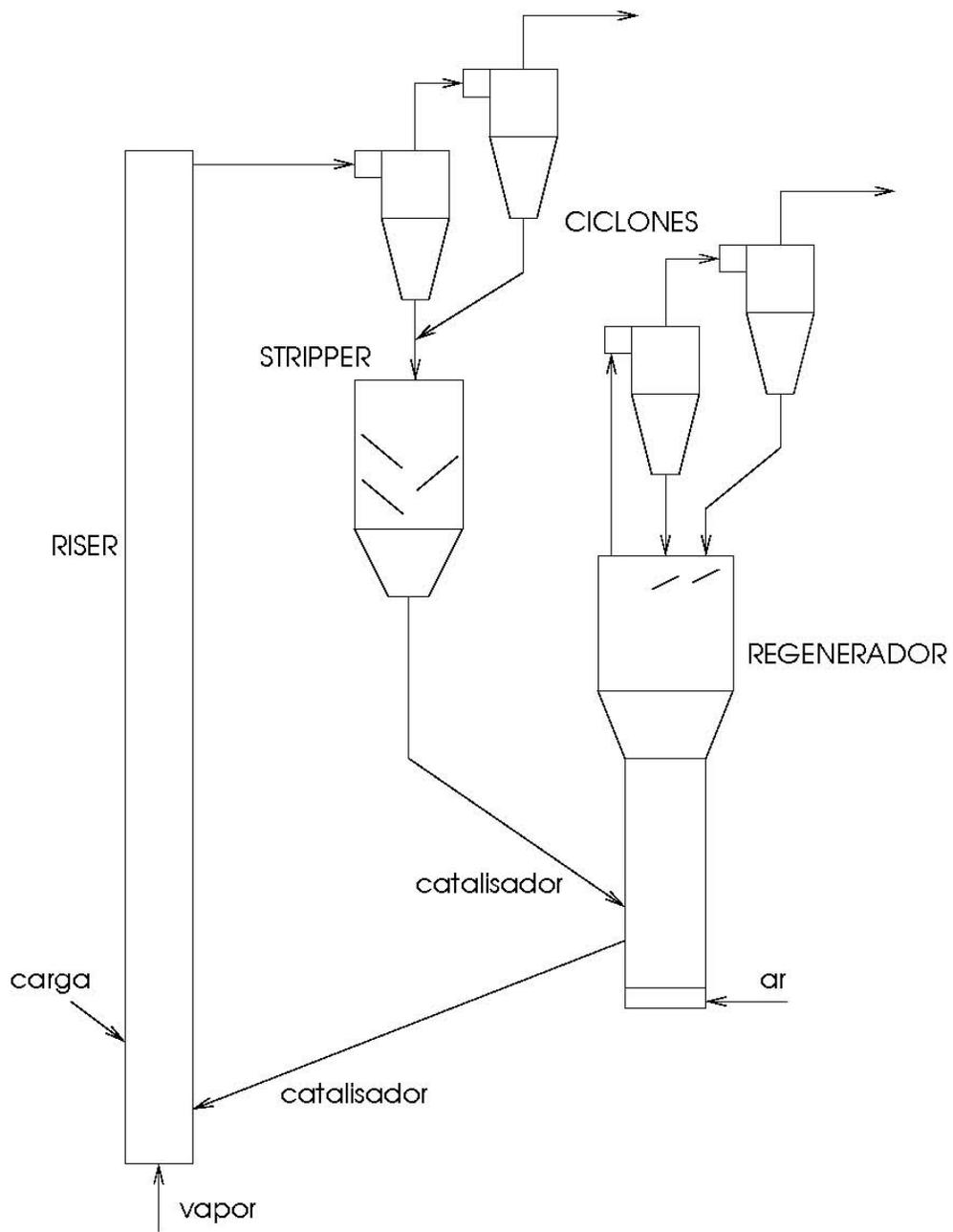


Figura 2.6: Unidade de craqueamento catalítico.

Capítulo 3

Revisão Bibliográfica

Escoamentos multifásicos, especialmente escoamentos particulados densos, são muito comuns em processos industriais. Processos que envolvem leitos fluidizados circulantes (CFB) proporcionam características como boa transferência de calor e massa, vantagens essas que justificam o considerável interesse acadêmico e industrial das últimas duas décadas. Aplicações industriais comuns incluem processos como Fischer-Tropsch, craqueamento catalítico (FCC) e queima de carvão, mas muitas novas aplicações têm sido desenvolvidas.

O sucesso da aplicação de sistemas multifásicos requer conhecimento acerca da natureza desses sistemas, o que pode ser obtido com o uso de estratégias analíticas e numéricas para prever precisamente as características do escoamento. Durante a última década, esforços significativos de pesquisa têm sido feitos no desenvolvimento de modelos numéricos para estudar a complexa fluidodinâmica de escoamentos densos multifásicos – como escoamentos gás-sólidos em leitos fluidizados, escoamentos gás-líquidos em colunas de bolhas e escoamentos com sedimentação de sólidos.

A simulação de problemas de fluidodinâmica está intimamente ligada ao desenvolvimento de métodos numéricos para a solução de Equações Diferenciais Parciais (PDEs). No entanto, embora métodos numéricos para a solução destas equações estivessem conceitualmente concebidos desde o Século 18, foi necessário o aparecimento dos microcomputadores para a aplicação destas técnicas em simulações computacionais do fenômeno de escoamento. A disponibilidade atual de computadores relativamente poderosos (se comparados com os disponíveis há poucas décadas), aliado à distribuição de algoritmos robustos para a solução destes problemas, têm permitido aos engenheiros

responder à demanda industrial por pesquisa e desenvolvimento. Com isso, o uso da Fluidodinâmica Computacional (CFD) para prever fluxos têm crescido muito nos últimos anos.

Desde a década de 40, soluções analíticas para a maioria dos problemas, especialmente os de aerodinâmica, estavam prontamente disponíveis para situações simplificadas ou idealizadas. Entretanto, logo percebeu-se que uma ampla faixa de problemas ainda precisavam ser resolvidos, especialmente para as demandas crescentes da indústria. Devido ao fato da Fluidodinâmica Computacional poder realizar simulações de situações complexas, esta tem tornado-se uma ferramenta viável para simulação de processos de sistemas de escoamento multifásico. O desenvolvimento de novos modelos de turbulência têm permitido a obtenção de resultados mais precisos para escoamentos complexos. Hoje, CFD é aplicada em áreas diversas, como a aeroespacial, estrutural, automotiva, filmes e computação gráfica, marinha, médica, indústria de semicondutores, indústria de processos, engenharia e metalúrgica.

Algumas das vantagens da CFD sobre métodos experimentais para o projeto de sistemas fluidos incluem a redução substancial do tempo e dos custos de novos projetos; a capacidade de estudar sistemas onde experimentos controlados são muito difíceis, senão impossíveis; e a obtenção de resultados com detalhamento quase ilimitado, de forma não-intrusiva. No entanto, deve-se salientar que embora os métodos computacionais ofereçam diversas vantagens, o uso de técnicas experimentais é de extrema importância na análise de problemas. Isto porque, mesmo que um caso simulado resulte em dados coerentes do ponto de vista numérico, pode-se facilmente tratar-se de um resultado inconsistente com a realidade; ou então, mesmo que fisicamente correto, pode apresentar alguma divergência percebidas apenas quando comparando com dados reais.

Atualmente, nos métodos mais utilizados para a modelagem de partículas em escoamentos gás-sólido (*euleriano-euleriano*, contendo duas fases contínuas interpenetrantes, e *euleriano-lagrangeano*, na qual as partículas são calculadas separadamente), a fase gasosa é descrita por uma equação média de Navier-Stokes, e as duas fases são acopladas por uma força de arraste (ENWALD et al., 1996).

A geometria de entrada e saída de um *riser* de leito fluidizado circulante (CFB) também possui um impacto significativo sobre a fluidodinâmica de toda a unidade (CHENG et al., 1998). Em particular, a distribuição do tempo de residência no *riser* pode influenciar no perfil de temperatura para um combustor ou na eficiência

de conversão do reator. A extensão desses efeitos parece ser uma função tanto das condições operacionais, configuração de saída, propriedades das partículas e dimensões do *riser*.

A formação de estruturas heterogêneas em escoamentos gás-partícula (tal como agregados – *clusters* – e bolhas) afeta seriamente o contato gás-sólido e processos de transporte em leitos fluidizados densos. Estas estruturas dependem de alguma forma do balanço local de forças atuando sobre as partículas, como a quantidade de partículas presente, sua forma, a velocidade de escorregamento e propriedades físicas, tanto do gás quanto das partículas.

Num sistema gás-sólido fluidizado, a média temporal do comportamento dinâmico apresenta simetria radial quando em regime turbulento (DU et al., 2003, através de tomografia de capacitância elétrica e de sonda de fibra ótica). Já para o regime “borbulhante”, a velocidades menores, este fato não é observado, e a assimetria na distribuição da concentração de sólidos pode ser atribuída ao movimento espiral das bolhas no leito.

Predições de escoamento, no caso de regimes densos, não são muito sensíveis ao uso de diferentes modelos de tensão (*stress*) sólida ou funções de distribuição radial (VAN WACHEM et al., 2001). A aplicação de diferentes correlações para o modelo de arraste, entretanto, causa um impacto significativo no escoamento da fase particulada. Assim, a quantificação precisa do arraste do gás agindo sobre uma partícula em um conjunto é fundamental para a compreensão da interação gás-sólido em escoamentos particulados densos.

ZHANG e REESE (2003) observam que a força de arraste da fase gasosa sobre a fase particulada desempenha um papel fundamental no acoplamento entre gás e partículas, e deveria considerar a influência não apenas da fração volumétrica da fase sólida, mas também as flutuações aleatórias no movimento das partículas. Enquanto revêem as formulações dos modelos de Wen e Yu e de Gidaspow (GIDASPOW, 1994), propõem uma nova expressão para a força de arraste média, que considera não apenas o efeito da fração volumétrica de sólidos, mas também as flutuações aleatórias do movimento das partículas.

O emprego de diferentes correlações encontradas na literatura para o arraste foi explorado (LI e KUIPERS, 2003). O aumento no valor do expoente da função de correção da porosidade (com valores entre 2,0 e 8,0) resultou o aumento na altura

do leito (devido a maior força de arraste atuando sobre as partículas). A força de arraste baseada nas equações combinadas de Ergun e de Wen e Yu deram uma estrutura de escoamento mais heterogênea, comparada às mais homogêneas produzidas pelas equações de Hill, Happel e Happel modificado. As equações de Ergun e de Happel sobrepredizem a força de arraste, enquanto a equação de Hill possui uma boa capacidade de predição para esta força, podendo substituir a equação de Wen e Yu em leitos fluidizados.

A dependência da função porosidade com o número de Reynolds foi verificada, em misturas de partículas pertencentes aos grupos B e B/D de Geldart (MAKKAWI e WRIGHT, 2003). O valor do expoente na função de correção varia com Re_p^* para a faixa de valores escolhida no estudo, assumindo valores numa faixa tão ampla quanto de 1 a 45 para uma das misturas no centro do leito.

GELBERBLOOM et al. (2006) desenvolveram um modelo utilizando a equação de Ergun modificada, para prever o experimento de leito fluidizado colapsante, para partículas de 3 grupos de Geldart (A, B e C). O modelo foi capaz de prever todos os quatro regimes (expansão do leito, borbulhamento, sedimentação e consolidação).

No escoamento presente no interior de *risers* FCC, bem como em virtualmente todos os escoamentos de interesse, a velocidade das fases é suficiente para que elas apresentem caráter turbulento (escoamentos turbulentos sempre ocorrem quando o número de Reynolds é alto). E, a despeito da intensa pesquisa em torno deste tema, a turbulência tem sido reconhecida como “o maior problema da física clássica ainda sem solução” (WILCOX, 1998). Ainda, a sua extensão para escoamentos bifásicos/multifásicos não é uma tarefa trivial.

Estudos sobre a distribuição de partículas em *risers* revelam que há segregação em regiões de baixa energia cinética. O escoamento não é estacionário, havendo grandes flutuações na densidade da suspensão. Uma origem física para a turbulência em escoamentos gás-sólido pode ser atribuída à instabilidade inercial da fase gasosa (DASGUPTA et al., 1994). Entretanto, quando a concentração de partículas é alta, elas interagem entre si por colisões e tanto os efeitos inerciais quanto viscosos são completamente dominados por contribuições da fase particulada. Assim, o gás responde a estas flutuações como um participante passivo na turbulência; enquanto o gradiente de pressão gasoso é o agente propelente do escoamento, e em última análise, a fonte de energia para as flutuações turbulentas, o papel do gás na geração destas flutuações

é de forma indireta. Com o estabelecimento da turbulência, há um “espalhamento” das partículas próximas ao eixo e correspondente aumento na concentração junto às paredes para manter o balanço de forças no sentido axial.

O desenvolvimento da teoria cinética para o escoamento granular para a modelagem da turbulência na fase particulada é considerado um avanço na compreensão de sistemas gás-sólido (HUILIN e GIDASPOW, 2003), e têm auxiliado na obtenção de resultados que, em alguns casos, aproximam-se mais dos dados experimentais (ALVES e MORI, 1998). Com esta teoria, usa-se um modelo de *uma equação* para determinar a energia cinética turbulenta (ou temperatura granular) das partículas, e a pressão e viscosidade dos sólidos são obtidas através de relações empíricas (GIDASPOW, 1994).

HUILIN e GIDASPOW (2003) propõe um novo modelo fluidodinâmico, no qual é calculada uma equação para a temperatura granular separada para cada fase, gasosa e particulada, ou tamanho de partícula. O regime de escoamento centro-anelar (*core-annulus*) foi obtido, bem como tendências das distribuições radiais e axiais das partículas. Os cálculos também mostram uma forte anisotropia na estrutura do fluxo, com variações na distribuição da velocidade muito maiores na direção do escoamento que na direção radial. Gradientes na velocidade das partículas produzem oscilações aleatórias.

Modelos baseados na teoria cinética, com a força de arraste corrigida para *clusters*, podem ser capazes de capturar as características básicas do regime de fluidização turbulenta (região inferior densa, e superior diluída) O estudo de JIRADILOK et al. (2006) faz uso dessa abordagem, propondo que, exceto para partículas do grupo B de Geldart, as oscilações para partículas FCC no centro do *riser* devem-se primeiramente às oscilações dos *clusters*, e não às oscilações das partículas individuais.

Nos últimos anos, com o advento de computadores com capacidade de processamento cada vez maior, têm-se tornado possível o cálculo das características do escoamento através do uso da técnica de simulação numérica direta (DNS). Este procedimento resolve as equações de Navier-Stokes completas, tridimensional, com condições de contorno apropriadas. Por estas razões, é uma técnica que necessita um grande poder computacional.

Outro procedimento que vem sendo utilizado, que necessita de bem menos processamento que o DNS, corresponde à simulação de grandes escalas (*Large Eddy Simulation*, LES). Este é baseada em um cálculo DNS de baixa resolução, com as

escalas finas sendo modeladas com o conhecimento do escoamento, como pode ser visto nos trabalhos de HUILIN e GIDASPOW (2003) ou HUILIN et al. (2003), que utiliza uma modelagem de submalha (*Sub Grid Scale*, SGS).

Para a modelagem das reações químicas, é comum o uso de grupos de espécies químicas (ou *lumps*). Um *lump* é a representação de um grupo de espécies químicas que possuem propriedades similares. Desta maneira, as reações de craqueamento catalítico que ocorrem concorrentemente entre numerosas espécies químicas podem ser modeladas por meio de reações entre um número muito menor de *lumps* (FARKAS, 1999).. A vantagem deste procedimento é o número reduzido de espécies químicas a serem calculadas separadamente, uma vez que o número destas é grande e necessitaria de um banco de dados completo para o seu cálculo, além de mais recursos computacionais.

Na literatura encontram-se simulações, predominantemente unidimensionais, que utilizam *lumps* para modelar o craqueamento de hidrocarbonetos, ora em sistemas gás-sólido reativos (ALI e ROHANI, 1997; ALI et al., 1997), ora em sistemas trifásicos (NAYAK et al., 2005), onde a vaporização das gotículas de gasóleo também é considerada. Desvios entre 2,31% e 14,46% foram observados, referente ao rendimento de gasolina formada, o que corrobora a validade dessa abordagem.

No entanto, simulações unidimensionais não geram soluções realistas para as distribuições radiais, e não são capazes de tratar adequadamente fenômenos como o refluxo de partículas ou vórtices no escoamento turbulento. Balanços unidimensionais também não podem ser aplicados na área de entrada, porque nesta parte do reator a não-homogeneidade e turbulência intensa do escoamento resultam em altos gradientes de temperatura e concentração. Ainda assim, soluções para simulações completamente tridimensionais raramente estão disponíveis, quando muito limitadas a setores tridimensionais (THEOLOGOS et al., 1997), que conseguem obter melhores resultados para as distribuições de concentração de espécies químicas.

Ao longo das reações de craqueamento catalítico, é observado que a atividade do catalisador decresce. Em modelos unidimensionais, esta variação pode ser ajustada em função do *tempo de residência* das partículas de catalisador no reator, mas este procedimento é considerado inadequado (VAN LANDEGHEM et al., 1996). O tempo não seria a causa física da desativação, e sim o acúmulo de coque sobre a superfície das partículas de catalisador, que diminuem a quantidade de superfícies ativas disponíveis para futuras reações. O conteúdo de coque no catalisador, de acordo com esta ex-

plicação, é usado como a variável para a desativação. Avaliando três funções distintas para descrever a desativação do catalisador, CERQUEIRA et al. (1997), utilizando um modelo cinético de 12 *lumps*, indicaram que uma função de desativação com um parâmetro exponencial é satisfatória.

WANG et al. (2005) desenvolveram um modelo cinético de 8 *lumps* que considera também as reações secundárias de gasolina craqueada de forma catalítica. As taxas de reação dadas foram expressas na forma adimensional, e as constantes no modelo proposto para a determinação dessas taxas ajustaram-se aos dados experimentais. Entretanto, para a aplicação do modelo proposto, deve-se ter em mente que estas taxas foram determinadas para um *riser* de apenas 2,8 metros de altura.

Um reator *riser*, quando em operação, não pode ser tratado como um equipamento isotérmico, dado o caráter endotérmico das reações de craqueamento, e a grande diferença de temperatura nas correntes de entrada. Além disso, com a formação dos produtos, o número total de moléculas presentes na fase gasosa aumenta consideravelmente, levando à expansão desta corrente. PAREEK et al. (2003) desenvolveram um modelo não isotérmico que contempla estas características, e, através das simulações, sugeriram que o equilíbrio é atingido próximo à entrada, a cerca de 40 centímetros de altura – reforçando a noção de que a região de entrada é crítica para a correta previsão das propriedades termodinâmicas das fases no resto do reator.

Outras questões relevantes quanto às dificuldades atuais em se obter um modelo geral para prever com exatidão o escoamento gás-sólido em *risers* podem ser levantadas (HANRATTY et al., 2003). Primeiramente, escoamentos multifásicos são muito mais difíceis de analisar que escoamentos monofásicos, porque as fases assumem um número grande de configurações complicadas. As fases não se misturam uniformemente, e interações (em escalas pequenas) entre as fases podem ter efeitos profundos nas propriedades macroscópicas do escoamento. Há uma variedade de padrões, que dependem das propriedades das partículas, sua concentração, e o número de Reynolds caracterizando a velocidade relativa. Para grandes concentrações, instabilidades associadas com interações partícula-partícula comumente causam separação em sistemas que não são homogêneos.

Conforme SUNDARESAN et al. (2003), é necessária uma descrição mais realista das interações fluido-partícula e partícula-partícula, que afinal seriam adequadas para usar em simulações de grandes escalas (Large Eddy Simulations, LES). Desafios

na área de escoamentos dispersos incluem o desenvolvimento de equações médias de movimento e de fechamento associadas para situações onde a inércia da fase contínua é importante, e o entendimento das características estatísticas das flutuações resultantes de instabilidades associadas com a inércia do movimento relativo entre as fases.

Ainda segundo SUNDARESAN et al. (2003), dificuldades em simulações (de grandes escalas) em códigos CFD atuais surgem devido a:

- o acompanhamento das partículas é normalmente realizado usando equações fortemente simplificadas; geralmente, a velocidade calculada do fluido é interpolada para a posição da partícula e uma equação de arraste empírica ou analítica é aplicada assumindo que a partícula está movendo-se em um campo de velocidades localmente uniforme; isto rejeita o fato de que o escoamento é turbulento e pode ter movimentos com a mesma escala da partícula
- as leis de arraste utilizadas na maioria das simulações para o acoplamento entre duas fases são baseadas em velocidades relativas não perturbadas (não disponíveis quando o acoplamento é implementado no código);
- simulações de grandes escalas requerem malhas muito finas próximo aos contornos de sólidos, e em muitos casos o espaçamento é menor que o diâmetro das partículas.

No *Laboratório de Pesquisa em Processos Químicos e Gestão Empresarial* já foram elaborados outros trabalhos relacionados ao tema desta tese – escoamentos gás-sólido, simulações de *risers*. Uma das primeiras referências é a de ALVES (1998), que desenvolveu um programa para a simulações de um reator de leito fluidizado circulante, utilizando um modelo fluidodinâmico baseado no modelo de dois fluidos. Foi utilizado o modelo *k-epsilon* para a fase gasosa e a Teoria Cinética do Escoamento Granular para as partículas. Com os resultados obtidos, concluiu-se que modelos com a viscosidade nula para a fase particulada não representavam a fluidodinâmica de sistemas com alta concentração de partículas, nos quais as interações partícula-partícula e partícula-parede têm um papel importante. Nestes casos, a determinação da viscosidade efetiva da fase particulada é fundamental na obtenção da distribuição radial de partículas.

RIBEIRO (2001) estudou o escoamento gás-sólido em um *riser*, calculado com um pacote comercial para simulações, em uma malha bidimensional cilíndrica. Foi aplicada uma equação simplificada para o transporte da temperatura granular (um

dos termos mais importantes da Teoria Cinética do Escoamento Granular) para a determinação da viscosidade da fase particulada, sem turbulência na fase gasosa.

ROSA (2002) fez a simulação de um escoamento com reações químicas em um *riser*, também utilizando um simulador comercial, em uma malha bidimensional, representando dois setores do reator, sem axissimetria. O modelo *k-epsilon* foi utilizado para o cálculo da turbulência na fase gasosa. Nesta, também foi acoplado o modelo de 4 *lumps* para o cálculo das reações de craqueamento presentes. Também foram acoplados às equações o transporte de energia das fases e a transferência de calor entre estas. Os resultados obtidos mostraram qualitativamente o consumo dos reagentes. Características do escoamento (como o fluxo em forma sinuosa, não simétrico, e a aglomeração de partículas próximo às paredes) foram encontradas nos resultados obtidos.

DECKER (2003) realizou simulações de escoamentos gás-sólido em dutos de diferentes configurações de dutos com seções horizontais e verticais. Nos casos simulados, foram considerados os modelos de turbulência *k-epsilon* para a fase gasosa, e o modelo de Massarani e Coelho para o tratamento do coeficiente de arraste. A aplicação deste modelo para uma situação real forneceu uma explicação fenomenológica para o uso de curvas auto-limpantes, relacionadas a efeitos de redistribuição das frações volumétricas na seção transversal do tubo.

BASTOS (2005) apresentou simulações tridimensionais de um *riser*. Foi empregado o modelo de dois fluidos para o cálculo do escoamento gás-sólido, aplicando o modelo *k-epsilon* para a fase gasosa, e testando três diferentes modelos para o cálculo do coeficiente de arraste. Os resultados indicaram um melhor desempenho do modelo de Gidaspow e Ettehadieh sobre as demais correlações (Wen e Yu, e Massarani e Coelho). Foi obtida concordância entre os valores experimentais e os resultados calculados.

Desde 1998, houve uma progressão gradual nas simulações elaboradas. A contribuição do presente trabalho é a simulação tridimensional de escoamentos gás-sólido com reações químicas, baseando-se em grande parte nos trabalhos já concluídos de ROSA (2002) e BASTOS (2005). O ajuste de modelos para a avaliação da troca térmica também é fundamental neste tipo de escoamento, dada a importância da temperatura sobre as taxas de reação. Ao fazer o acoplamento das reações de craqueamento ao problema, utilizando-se o CFX[®], têm-se um conjunto de modelos pronto para futuras avaliações de novos modelos neste simulador. Com isso, obtém-se um modelo um pouco mais completo para prever o comportamento de *risers*.

Capítulo 4

Modelagem Matemática

Problemas de escoamento em duas fases podem ser modelados de diversas maneiras. Uma técnica consiste em modelar as fases separadamente com as equações estabelecidas para escoamentos monofásicos com uma interface móvel entre elas. Entretanto, este método não pode ser usado em aplicações com fases bem misturadas, fenômeno presente em muitos escoamentos. Nestes, procedimentos de média são necessários para tornar possível a resolução das equações.

Logo reconheceu-se que o modelo *plug-flow* simples e modelos de mistura completa não eram adequados para a predição da conversão em leitos fluidizados. Por volta de 1960, um modelo com difusão axial efetiva superpôs o modelo *plug-flow*, com um pouco mais de sucesso. Nenhum destes modelos podem explicar a obtenção de curvas de conversão experimentais com valor mais baixo daquelas para a mistura completa. Esta observação pode ser explicada, em parte, com a suposição de que uma fração do gás passa através de caminhos preferenciais pelo catalisador. Isto é um tanto lógico, desde que uma fração importante do gás escoar através do leito na forma de bolhas. A quantidade de catalisador nas bolhas é muito pequena, e sua contribuição para a conversão total é normalmente negligenciável. Ainda, em reatores industriais a fração de gás escoando através do leito na forma de bolhas é tão grande que, para ajustar dados experimentais, deve-se concluir que este gás não passa completamente pelo catalisador através de caminhos preferenciais. Devido ao fenômeno da coalescência (crescimento das bolhas), ocorre alguma troca entre o gás da bolha e o gás da fase densa circundante (também chamada de “emulsão”). Estas considerações levaram ao modelo de duas-fases, e ainda são a base de desenvolvimentos recentes, que têm, entretanto, fenômenos de

troca (de massa, calor e/ou quantidade de movimento) entre as fases substancialmente clarificados e refinados. Considera-se que uma fração da taxa total de gás escoa através do leito sob a forma de bolhas, e o resto como emulsão. Entre ambas as fases há uma certa troca de gás, ou fluxo cruzado. Na saída, ambas as fases, com suas respectivas conversões, estão hipoteticamente misturadas para formar a corrente de saída, com sua concentração ou conversão média. Como não há conversão nas bolhas, e devido ao seu elevado perfil de velocidade, o escoamento através da fase é normalmente tratado como do tipo *plug flow*. Na emulsão, vários graus de desvio do escoamento *plug flow* podem ser postulados. O movimento violento das partículas levam a uma mistura com a fase gasosa, a qual pode ser descrita com um modelo de difusividade efetiva. Alguns autores têm preferido tratar uma mistura completa nesta fase, baseado na observação de que há um padrão definido para o escoamento de sólidos: descendente próximo às paredes, ascendente no núcleo central.

ISHII (1975) divide os modelos para resolução de problemas de escoamento em duas fases em duas categorias: modelos de difusão e modelos de dois fluidos. Um modelo de difusão é formulado pela consideração da mistura como um todo, e pode ser representada por uma equação da continuidade, uma equação de quantidade de movimento para cada direção, uma equação de energia e uma equação de difusão. Um modelo de dois fluidos consiste em duas equações da continuidade, duas equações de quantidade de movimento para cada direção e duas equações de energia. Equações de fechamento adicionais são necessárias para solucionar o sistema de equações.

Para a formulação de um modelo de dois fluidos, primeiro formulam-se balanços integrais de massa, quantidade de movimento e energia para um volume de controle fixo contendo ambas as fases. Este balanço deve ser satisfeito a qualquer tempo, em qualquer ponto no espaço. Têm-se, assim, dois conjuntos de equações: as equações locais instantâneas para cada fase, e os termos de transferência locais. A princípio, este conjunto de equações poderia ser resolvido diretamente (usando uma malha mais fina que a menor escala de comprimento e um passo de tempo mais curto que a mais rápida flutuação). No entanto, isto requereria um tempo computacional um tanto não realista. Adicionalmente, os modelos ainda não possuem um grau de sofisticação para tal resolução.

No procedimento Euleriano (onde uma variável vetorial ou escalar é transportada através do volume de controle usando um sistema de coordenadas fixo), as equações locais instantâneas passam por médias adequadas. Isto permite que malhas

mais grosseiras ou passos de tempo mais longos possam ser usados em simulações numéricas.

Os balanços de conservação podem ser feitos tanto em nível molecular, originando uma equação para cada molécula, como sobre volumes de controle, que podem até – em determinadas direções – coincidir com o domínio de solução. Segundo WHITAKER (1969), as condições nas quais uma média volumétrica pode ser aplicada são:

$$\text{(dimensão característica das fases)} \ll \text{(dimensão característica do volume médio)} \ll \text{(dimensão característica do sistema físico)}$$

E, de acordo com DELHAYE e ACHARD (1977), o intervalo de tempo escolhido para a média temporal deve seguir as seguintes condições:

$$\text{(escala de tempo das flutuações turbulentas)} \ll \text{(escala de tempo para a média)} \ll \text{(escala de tempo das flutuações do fluxo)}$$

O procedimento de média leva a um modelo descrevendo dois meios contínuos, interpenetrantes.

As equações médias não podem ser resolvidas diretamente, pois possuem produtos de variáveis instantâneas. Empregando o procedimento de decomposição de Reynolds e ponderação antes de realizar a média, obtém-se então expressões contendo produtos de variáveis médias (a decomposição de Reynolds e a média temporal são normalmente utilizadas no campo da modelagem de turbulência monofásica, para separar os componentes flutuantes das variáveis médias). Estas expressões de transporte são apresentadas nos itens a seguir.

4.1 Equações de Transporte

As equações para a continuidade das fases gasosa e sólida, sem transferência de massa entre elas, são dadas respectivamente por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g) = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_p \rho_p) + \nabla \cdot (\varepsilon_p \rho_p \mathbf{u}_p) = 0 \quad (4.2)$$

onde ε representa a fração volumétrica, ρ a massa específica, e \mathbf{u} o vetor velocidade. Os índices g e p indicam a fase, gasosa ou particulada, respectivamente (CFX, 2004).

No modelo de dois-fluidos, que trata a fase gasosa e particulada como dois meios contínuos com interpenetrabilidade, as *equações médias de transporte de quantidade de movimento* da fase gasosa (Equação 4.3) e da fase particulada (Equação 4.4) são dadas por

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) &= \nabla \cdot (\varepsilon_g \mu_g (\nabla \mathbf{u}_g + (\nabla \mathbf{u}_g)^T)) \\ &+ \varepsilon_g \rho_g \mathbf{g} - \varepsilon_g \nabla p + \beta (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_g) \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_p \rho_p \mathbf{u}_p) + \nabla \cdot (\varepsilon_p \rho_p \mathbf{u}_p \mathbf{u}_p) &= \nabla \cdot (\varepsilon_p \mu_p (\nabla \mathbf{u}_p + (\nabla \mathbf{u}_p)^T)) \\ &+ \varepsilon_p \rho_p \mathbf{g} - \varepsilon_p \mathbf{G} \nabla \varepsilon_p + \beta (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p) \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde p e g são a pressão do fluido e a gravidade, respectivamente. β é o coeficiente de interface entre as fases; \mathbf{G} é o módulo de elasticidade.

As *equações de conservação das espécies químicas*, que são representadas por frações mássicas na fase gasosa onde se encontram, têm a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g c_{g,i}) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g c_{g,i} \mathbf{u}_g) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \Gamma_i \nabla c_{g,i}) + S_g^i \quad (4.5)$$

onde c é a concentração de cada espécie química i , e Γ a sua difusividade na fase. O termo S^i representa a formação ou consumo da espécie química ao longo das reações de craqueamento.

Já as *equações de conservação de energia* (térmica) para as fases gasosa e particulada são escritas, respectivamente, como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g H_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g H_g \mathbf{u}_g) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \lambda_g \nabla T_g) + \gamma (T_p - T_g) + \varepsilon_g \rho_g \sum_r \Delta H_r \frac{\partial c_r}{\partial t} \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_p \rho_p H_p) + \nabla \cdot (\varepsilon_p \rho_p H_p \mathbf{u}_p) = \nabla \cdot (\varepsilon_p \lambda_p \nabla T_p) + \gamma (T_g - T_p) \quad (4.7)$$

onde λ é a condutividade térmica de cada uma das fases. Para a fase gasosa, há a alteração da sua energia de acordo com cada reação de craqueamento r .

4.2 Equações de Fechamento

O termo de transferência de calor entre as partículas e a fase gasosa (γ) (presente nas Equações 4.6 e 4.7) é dado por

$$\gamma = \pi d_p \text{Nu} \lambda \quad (4.8)$$

onde Nu é o número de Nusselt. O número de Nusselt é definido como a razão entre a transferência de calor através de convecção e a transferência de calor através de condução, onde a condução de calor está sob as mesmas condições da convecção de calor, exceto para o caso (hipotético) de um fluido estagnado. Um número de Nusselt próximo a 1 indica um escoamento laminar com o aquecimento por convecção tendo uma magnitude similar ao aquecimento por condução. Um número de Nusselt alto, de 100 a 1000, corresponde a uma convecção muito ativa, característica de escoamentos turbulentos. Os calores de convecção e condução são paralelos entre si e à normal da superfície, e são perpendiculares ao escoamento médio em casos simples.

Para o caso de partículas sólidas, o coeficiente de transferência térmica pode ser determinado de acordo com o modelo de Ranz e Marshall. Assim, o número de Nusselt foi obtido com a Equação 4.9:

$$\text{Nu} = 2 + 0,6 \text{Re}_p^{1/2} \text{Pr}^{1/3} \quad (4.9)$$

Na Equação 4.4, G é o módulo de elasticidade, que pode ter um valor constante, ou ajustado através de expressões como a de GIDASPOW (1994):

$$G = \exp(600(\varepsilon - 0,62)) \quad (4.10)$$

O coeficiente β representa a energia aplicada pela fase gasosa para vencer a inércia das partículas, carregando-as. Para regimes diluídos, $\varepsilon_g \geq 0,8$, o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre a fase gasosa e as partículas (esféricas) fica

$$\beta = \frac{3}{4} \text{Cd} \frac{|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_g| \varepsilon_p \rho_g}{d_p} f(\varepsilon) \quad (4.11)$$

onde d_p é o diâmetro das partículas de catalisador, e o valor de Cd (o coeficiente de arraste), depende do número de Reynolds; para $\text{Re} \leq 1000$, têm-se

$$\text{Cd} = \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0,15 \text{Re}^{0,687}) \quad (4.12)$$

e, para $Re > 1000$,

$$Cd = 0,44 \quad (4.13)$$

onde o número de Reynolds é obtido conforme a expressão

$$Re = \frac{|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_g| \rho_g d_p}{\mu_g} \quad (4.14)$$

Para regimes densos, $\varepsilon_g < 0,8$, adota-se uma expressão baseada na lei de Ergun:

$$\beta = 150 \frac{\varepsilon_p^2 \mu_g}{\varepsilon_g d_p^2} + 1,75 \frac{|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_g| \varepsilon_p \rho_g}{d_p} \quad (4.15)$$

No modelo proposto por Wen e Yu para o cálculo do coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases, usa-se $f(\varepsilon) = 1$ na Equação 4.11. Além disso, os cálculos são feitos com os valores locais (instantâneos) de velocidade das fases sólida e particulada. Já no modelo proposto por GIDASPOW (1994), que considera velocidades médias locais, usa-se $f(\varepsilon) = \varepsilon^{-2,65}$.

4.3 Turbulência

Como o fluxo das fases no interior do *riser* possui caráter turbulento, é necessário usar modelos apropriados para descrever os seus efeitos sobre o escoamento. Na Hipótese de Boussinesq, a transferência da quantidade de movimento turbulenta é análoga ao transporte cinético molecular, ou seja, o fluxo é proporcional ao gradiente de velocidade. Desta forma, acopla-se o efeito da turbulência como um incremento na viscosidade molecular da fase gasosa na Equação ??:

$$\mu_g = \mu_g^l + \mu_g^t \quad (4.16)$$

onde μ_g é a viscosidade efetiva, μ_g^l a viscosidade molecular, e μ_g^t a “viscosidade turbulenta”.

No modelo de turbulência *k-epsilon*, a viscosidade turbulenta (μ_g^t) é definida como

$$\mu_g^t = C_\mu \rho_g \sqrt{2k\ell} \quad (4.17)$$

onde \sqrt{k} é uma escala de velocidade e ℓ é uma escala de comprimento; C_μ é uma constante do modelo. Para a obtenção destas variáveis, é calculada uma equação de transporte para a energia cinética turbulenta e outra para a sua dissipação. Para a energia cinética,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g k) + \nabla \cdot \left[\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g k - \left(\mu^l + \frac{\mu^t}{\sigma_k} \right) \nabla(\varepsilon_g \rho_g k) \right] = \rho P^k - \varepsilon_g \rho_g \varepsilon \quad (4.18)$$

onde σ_k é uma constante, e

$$P^k = \mu^t (\nabla \mathbf{u}_g + (\nabla \mathbf{u}_g)^\top) \nabla \cdot \mathbf{u}_g \quad (4.19)$$

Assume-se que a produção (P^k) e a dissipação (ε) de turbulência estão próximos do equilíbrio, e o resultado disto é que ε , k e ℓ ficam relacionados por

$$\varepsilon = \frac{k^{2/3}}{\ell} \quad (4.20)$$

A equação de transporte para a dissipação é escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \varepsilon) + \nabla \cdot \left(\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g \varepsilon - \frac{\mu^t}{\sigma_\varepsilon} \nabla(\varepsilon_g \rho_g \varepsilon) \right) = C_{\varepsilon 1} P^k \frac{\varepsilon}{k} - \varepsilon_g \rho_g C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4.21)$$

onde σ_ε , $C_{\varepsilon 1}$ e $C_{\varepsilon 2}$ são constantes¹. A viscosidade turbulenta é então obtida com a expressão:

$$\mu_g^t = C_\mu \rho_g \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4.22)$$

¹As constantes utilizadas no modelo *k-epsilon* foram $C_\mu = 0,09$; $C_{\varepsilon 1} = 1,44$; $C_{\varepsilon 2} = 1,92$; $\sigma_k = 1,0$; $\sigma_\varepsilon = 1,3$

4.4 Reações Químicas

No craqueamento catalítico de óleos pesados, diversas reações ocorrem simultaneamente para cada espécie química presente. Para o acoplamentos das reações de craqueamento catalítico, pode-se utilizar modelos que tratam “*lumps*” (ou grupos de espécies químicas) ao invés de cada espécie isoladamente. Diversos modelos têm sido propostos para a representação das reações de craqueamento catalítico. O progresso, tanto das técnicas de análise, quanto nas rotinas matemáticas para a determinação de parâmetros, levou ao desenvolvimento dos modelos mais simples, com 3 e 4 *lumps*, até modelos mais complexos de 10, 12 ou mais *lumps*, propostos para superar as deficiências dos primeiros.

4.4.1 Modelo de 4 *lumps*

O modelo cinético de 4 *lumps* classifica as frações de hidrocarbonetos em quatro grupo distintos, conforme ilustrado na Figura 4.1, com apenas dois destes grupos sofrendo craqueamento.

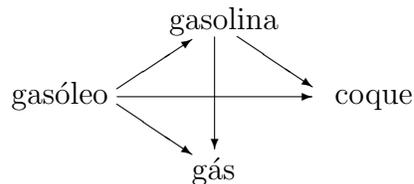


Figura 4.1: Modelo de 4 *lumps* para o craqueamento de gasóleo.

Na Figura 4.1, cada seta representa uma reação. Estas reações de craqueamento, segundo ALI et al. (1997), seguem uma cinética de segunda ordem para o craqueamento do gasóleo (Equação 4.23), devido a uma mudança considerável na reatividade quando a composição do óleo é alterada, resultando num aparente aumento da ordem das reações. As reações de craqueamento da gasolina são modeladas seguindo uma cinética de primeira ordem (Equação 4.24):

$$\frac{\partial c_r}{\partial t} = -k_r \varepsilon_s c_{\text{gasóleo}}^2 \varphi \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial c_r}{\partial t} = -k_r \varepsilon_s c_{\text{gasolina}} \varphi \quad (4.24)$$

onde φ representa o efeito da desativação do catalisador devido à deposição de coque em sua superfície. Este fator não foi considerado nas simulações feitas (isto é, $\varphi = 1$).

O parâmetro cinético k_r é fortemente dependente da temperatura, e é ajustado por uma expressão de Arrhenius:

$$k_r = k_0 \exp\left(\frac{-E_r}{RT}\right) \quad (4.25)$$

Associadas a estas reações, há a geração ou o consumo de energia, devido às reações serem exotérmicas ou endotérmicas. No balanço global de energia para o *riser*, têm-se que o craqueamento é predominantemente endotérmico, com a diminuição da entalpia dos fluidos em parte devido ao avanço das reações. Os calores de reação e as constantes cinéticas utilizadas nas simulações subseqüentes são apresentados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Constantes de reação para o modelo de 4 *lumps* (ALI et al., 1997).

reação	k_0		E(kJ/mol)	ΔH_r (kJ/kg)
gasoleo \rightarrow gasolina	554,00	m ³ /kg.s	68,2495	-2972,628
gasoleo \rightarrow gás	1895,40	m ³ /kg.s	89,2164	-9746,870
gasoleo \rightarrow coque	10,45	m ³ /kg.s	64,5750	23835,452
gasolina \rightarrow gás	0,904	s ⁻¹	52,7184	-6774,242
gasolina \rightarrow coque	2210,28	s ⁻¹	115,4580	22621,280

4.4.2 Modelo de 10 *lumps*

De modo análogo, um modelo de 10 *lumps* pode ser considerado para a modelagem das espécies químicas. No modelo de 10 *lumps*, existem quatro grupos de hidrocarbonetos pesados (com maior peso atômico) que, ao reagirem, formam outros quatro grupos leves, além de gasolina, gás e coque. Gás e coque são representados por um grupo apenas neste modelo. A alimentação de material orgânico, desta forma, é uma mistura dos quatro grupos de hidrocarbonetos pesados. Na Figura 4.2, pode-se observar os diversos grupos de espécies químicas, e as suas reações de formação/consumo – “P” = parafínicos, “N” = naftalenos, “Ar” = aromáticos, “As” = substituintes aromáticos, “G” = gasolina, e “C” = coque; as frações recebem índices “l” ou “h” conforme sejam espécies químicas

de cadeias curtas ou longas de carbono. As taxas de reação deste modelo seguem uma cinética de primeira ordem, (análogas à Equação 4.24), e as constantes para a determinação destas taxas são dadas na Tabela 4.2. Os valores apresentados foram obtidos do trabalho de NAYAK et al. (2005).

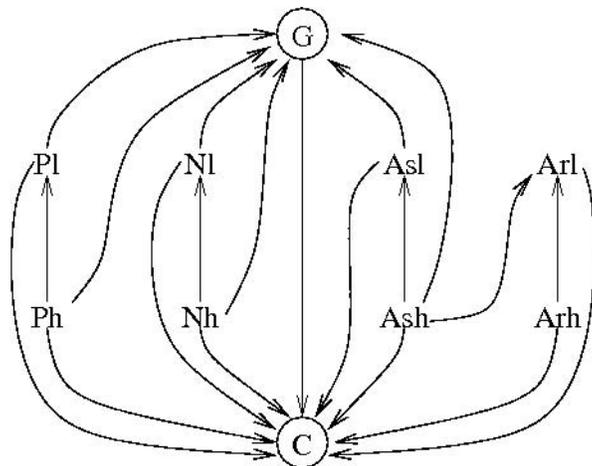


Figura 4.2: Modelo de 10 *lumps* para o craqueamento de gásóleo.

Tabela 4.2: Constantes de reação para o modelo de 10 *lumps* (NAYAK et al., 2005).

reação	k_0 ($\text{m}^3/\text{kg}\cdot\text{s}$)	E (KJ/mol)	ΔH_r (kJ/mol)
Ph \rightarrow Pl	11,01	84,96	23300
Nh \rightarrow Nl	65,05	54,67	23300
Ash \rightarrow Asl	34,81	66,20	23300
Arh \rightarrow Arl	175,3	57,18	23300
Ph \rightarrow G	0,8939	22,42	60500
Nh \rightarrow G	1,397	24,87	60500
Arh \rightarrow G	9803	79,04	60500
Ph \rightarrow C	16,97	50,78	209300
Nh \rightarrow C	119,8	55,35	209300
Ash \rightarrow C	1082	72,61	209300
Arh \rightarrow C	639,8	67,12	209300
Arh \rightarrow Asl	2,278	42,49	23300
Pl \rightarrow G	1,181	32,55	18600
Nl \rightarrow G	2,733	33,55	18600
Arl \rightarrow G	34140	89,50	18600
Pl \rightarrow C	212,7	81,74	186000
Nl \rightarrow C	864,4	75,33	186000
Arl \rightarrow C	11460	93,38	186000
Asl \rightarrow C	2205	89,70	186000
G \rightarrow C	1333	102,59	149000

Capítulo 5

Métodos Numéricos

Por vezes, o desenvolvimento experimental para predições de escoamentos onde não existem banco de dados suficientes mostra-se um procedimento custoso; uma alternativa razoável veio com o desenvolvimento dos computadores eletrônicos. Enquanto que muitas das idéias para métodos de solução numérica para equações diferenciais parciais foram estabelecidas há mais de um século atrás, estas tiveram pouco uso antes dos computadores aparecerem. A razão capacidade/custo dos computadores tem aumentado em uma razão espetacular desde a década de 1950 e não mostra sinais de diminuir.

A solução das equações da mecânica dos fluidos em computadores tem tornado-se tão importante que, hoje, ocupa a atenção de talvez um terço de todos os pesquisadores em mecânica dos fluidos, e essa proporção continua a aumentar (FERZIGER e PERIC, 1996). Este campo é conhecido como *Fluidodinâmica Computacional* (CFD), e abrange muitas sub-especialidades.

Escoamentos e fenômenos relacionados podem ser descritos por equações diferenciais parciais, que podem ser resolvidas analiticamente apenas para um número limitado de tipos de escoamentos. As soluções conhecidas são extremamente úteis na compreensão do escoamento fluido, mas raramente podem ser utilizadas diretamente em aplicações práticas. O método normalmente empregado é a utilização de simplificações das equações. Para obter uma solução aproximada numericamente, deve-se utilizar um *método de discretização*, que aproxima as equações diferenciais por um sistema de *equações algébricas*, que pode então ser resolvidas em um computador. As equações são aplicadas em domínios espaciais e/ou temporais diminutos, tal que a solução numérica

dê resultados em *posições discretas* no espaço e no tempo.

Para a simulação de um equipamento através da CFD, é necessária a elaboração de uma geometria que corresponda àquela que se deseja simular, para somente então determinar as condições operacionais presentes no equipamento e calcular o problema. Para a primeira etapa neste trabalho, foi utilizado o programa ICEM; para as outras, utilizou-se o programa CFX.

Dentre os métodos numéricos disponíveis para a resolução de problemas de engenharia, existem métodos estabelecidos como o Método dos Elementos Finitos (FEM), e o Método dos Volumes Finitos (FVM). O Método dos Elementos Finitos é uma forma de resolução numérica de um sistema de equações diferenciais parciais. Foi originalmente desenvolvido para a solução de problemas de elasticidade e de análise estrutural na engenharia civil e aeronáutica. O Método dos Volumes Finitos também resolve numericamente sistemas de equações diferenciais parciais, baseado na resolução de balanços de massa, energia e quantidade de movimento em um determinado volume de controle. É derivado do Método das Diferenças Finitas e, adicionalmente a este método, fornece uma melhor interpretação física, através das equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento. Nas simulações apresentadas neste trabalho, foi utilizado o Método dos Volumes Finitos, implementado no pacote computacional CFX.

5.1 Método dos Volumes Finitos

O *Método dos Volumes Finitos* é uma forma de discretização que usa como princípio a forma integral das equações de conservação. O domínio de solução é subdividido em um número finito de volumes de controle, e as equações de conservação são aplicadas a cada volume. No Método dos Volumes Finitos *co-localizado*, um *nó computacional* fica no centróide de cada volume de controle em que o valor de uma variável deve ser calculado. Interpolação é usada para expressar valores da variável na superfície do volume de controle em termos dos valores nodais. Integrais de superfície e de volume são aproximadas usando formulações apropriadas. Como resultado, obtém-se um sistema de equações algébricas para cada obtenção dos valores de uma variável em todos os volumes de controle.

O Método dos Volumes Finitos é conservativo por natureza, uma vez que integrais de superfície (que representam fluxos convectivos e difusivos) são as mesmas para

volumes de controle que compartilham a mesma face. Todos os termos que precisam ser aproximados possuem significado físico. A Figura 5.1 mostra a representação de um volume de controle (nomeado “P”), e a nomenclatura dos pontos nodais vizinhos – W, E, S e N para malhas bidimensionais, acrescentando B e T para malhas tridimensionais.

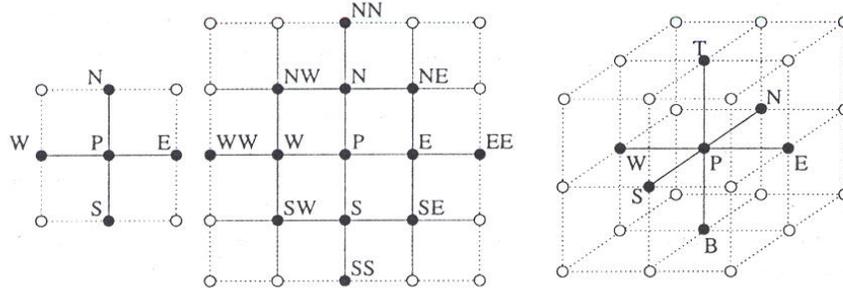


Figura 5.1: Representação de volumes de controle (FERZIGER e PERIĆ, 1996).

Considerando apenas a equação de conservação genérica para a variável ϕ e assumindo que o campo de velocidades e todas as propriedades do fluido são conhecidas, o método dos volumes finitos parte da forma integral da equação de conservação. O domínio de solução é subdividido em uma malha de pequenos volumes de controle.

Na equação genérica para as equações de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u} - \Gamma^\phi\nabla\phi) = S^\phi \quad (5.1)$$

onde Γ^ϕ é a difusividade de ϕ , a variável genérica transportada; ϕ deve ser conservada em cada um dos volumes de controle da geometria discretizada. Discretizando essa equação para um volume de controle, obtendo-se

$$\frac{\delta}{\delta t}(\rho\phi) + \frac{\delta}{\delta x_L} \left(\rho\phi\mathbf{u}_L - \Gamma^\phi \frac{\delta\phi}{\delta x_L} \right) = S^\phi \quad (5.2)$$

onde δx_L são as dimensões do volume de controle, e δt é o passo no tempo da iteração (para o caso de um problema transiente).

O conjunto de equações diferenciais parciais que expressam a conservação de quantidade de movimento, calor e espécies químicas no estado estacionário para ambas as fases foi convertido em um conjunto de equações discretas, que podem ser resolvidas sobre uma malha de volumes de controle que preenche o domínio do reator.

A formulação de discretização utilizada foi a técnica de *Volumes Finitos*, conforme descrito por FERZIGER e PERIĆ (1996), e PATANKAR (1980).

No método dos Volumes Finitos, a forma integral das equações de conservação é o ponto de partida:

$$\int_S \rho \phi \mathbf{n} dS = \int_S \Gamma \nabla \phi \mathbf{n} dS + \int_V S^\phi dV \quad (5.3)$$

O domínio de solução é dividido em um número finito de pequenos volumes de controle. A equação de conservação aplica-se a cada volume de controle, tanto quanto para o domínio inteiro da solução. Se as equações de todos os volumes forem somadas, obtém-se a equação de conservação global, uma vez que as integrais sobre as superfícies internas cancelam-se.

O fluxo líquido através do volume de controle é a soma das integrais sobre as superfícies (4 faces para um problema bidimensional, 6 para o caso tridimensional):

$$\int_S \rho \phi \mathbf{n} dS = \sum_l \int_{S_l} \rho \phi \mathbf{n} dS \quad (5.4)$$

$$\int_S \Gamma \nabla \phi \mathbf{n} dS = \sum_l \int_{S_l} \Gamma \nabla \phi \mathbf{n} dS \quad (5.5)$$

Para solucionar estas integrais de superfície nas Equações 5.4 e 5.5 exatamente, deve-se conhecer o valor do integrando ao longo de toda a superfície S ; como esta informação não é disponível, já que apenas o valor no centro do volume de controle é calculado, uma aproximação deve ser feita.

5.1.1 Esquemas de Interpolação

Para calcular os fluxos difusivo e convectivo, o valor de ϕ e de seus gradientes normais às faces da célula são necessários. Eles devem ser expressos em termos dos valores nodais existentes (ϕ_L), e para isso existem diversos métodos de interpolação.

Interpolação por Diferenças Centrais (CDS) Um possível esquema utilizado para determinar os valores de ϕ no centro das faces do volume de controle é a inter-

poluição linear entre dois nós adjacentes (chamado de *central differencing scheme*). No ponto e da malha Cartesiana têm-se:

$$\phi_e = \phi_E \xi_e + \phi_P (1 - \xi_e) \quad (5.6)$$

onde os índices e e E referem-se aos pontos localizados sobre a interface e o centro do volume de controle posicionado à esquerda do volume de controle que está sendo calculado (P); o fator de interpolação linear ξ_e é definido como

$$\xi_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} \quad (5.7)$$

(para o caso especial onde as faces do volume de controle encontram-se no meio da distância entre os pontos nodais, têm-se $\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2}$)

A suposição de um perfil linear entre os nós P e E também oferece a aproximação mais simples do gradiente, que é necessário para a avaliação dos fluxos difusivos:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \quad (5.8)$$

Este é o método de segunda ordem mais simples, e também o mais utilizado.

Interpolação Upwind (UDS) Outro método bastante utilizado consiste em aproximar ϕ_l por seu valor no nó à montante da face l (o volume depende da direção do escoamento); esta aproximação é chamada de *upwind differencing scheme* (UDS). Nesse esquema, então, ϕ_l é aproximado como

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{se } (\mathbf{un})_l > 0 \\ \phi_E & \text{se } (\mathbf{un})_l < 0 \end{cases} \quad (5.9)$$

O termo difusivo continua sendo aproximado por diferenças centrais; assim, as derivadas são obtidas por:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \quad (5.10)$$

Esta é a única aproximação que não gera resultados oscilatórios incondicionalmente. Entretanto, é numericamente difusivo; picos ou variações rápidas são amortecidas e, desde que este é um esquema de primeira ordem, são necessárias malhas refinadas para a obtenção de soluções precisas rapidamente.

Higher-Order Upwind Este é um esquema do tipo upwind, com precisão de segunda ordem devido à extrapolação de uma face em dois pontos; assim, ϕ_w é dado por:

$$\phi_w = \frac{3}{2}\phi_W - \frac{1}{2}\phi_{WW} \quad (5.11)$$

onde W refere-se ao centro do volume de controle posicionado à direita do volume de controle que está sendo calculado, WW posicionado dois volumes de controle à direita;

Este esquema é menos compacto que o anterior pela presença do termo ϕ_{WW} , que dá a maior precisão ao método.

5.1.2 Algoritmos de Resolução de Sistemas Lineares

Independente da dimensão do problema (seja ele uni, bi ou tridimensional), a discretização das equações resulta em um sistema linear que pode ser escrito na forma matricial. As matrizes obtidas caracterizam-se por possuírem um alto índice de esparsidade (ou seja, um pequena razão de elementos não-nulos).

O sistema de equações pode, depois de estar determinado, ser resolvido através de dois procedimentos: de forma **direta** ou de forma **iterativa**.

Nos métodos diretos, necessita-se fazer a inversão da matriz completa; por isso, requerem o manuseio dos elementos de todos os elementos da matriz de coeficientes (inclusive os elementos nulos), influenciando bastante na taxa de convergência do método.

Nos métodos iterativos, o sistema de equações é resolvido parcialmente a cada iteração, partindo de uma estimativa inicial e obtendo uma resposta mais próxima da solução. Assim, várias iterações são necessárias para que a diferença entre a solução obtida e a solução real seja satisfatória.

Após i iterações, têm-se uma solução aproximada ϕ^i que satisfaz o sistema de equações aproximadamente (com um resíduo não nulo \mathcal{R}):

$$\mathcal{A}\phi^i = \mathcal{Q} - \mathcal{R}^i \quad (5.12)$$

Assim, a cada iteração, têm-se um erro de convergência

$$\mathcal{E}^i = \phi - \phi^i \quad (5.13)$$

onde ϕ é a solução exata. O resíduo é, então,

$$\mathcal{A}\mathcal{E}^i = \mathcal{R}^i \quad (5.14)$$

Ao longo de um processo iterativo, \mathcal{R} e \mathcal{E} tendem a zero. Considere um esquema iterativo, escrito na seguinte forma:

$$\mathcal{M}\phi^{i+1} = \mathcal{N}\phi_i + \mathcal{B} \quad (5.15)$$

Na convergência, $\phi^{i+1} = \phi^i = \phi$, obtendo-se

$$\mathcal{A} = \mathcal{M} - \mathcal{N} \quad (5.16)$$

$$\mathcal{B} = \mathcal{Q} \quad (5.17)$$

O método de *Jacobi* é o mais simples, onde \mathcal{M} é a matriz diagonal cujos elementos são os elementos da diagonal de \mathcal{A} . Cada variável é determinada, assim, a partir dos valores já calculados para os seus vizinhos:

$$\phi_p^{i+1} = \frac{S_p - \sum_L a_L \phi_L^i}{a_p} \quad (5.18)$$

Para atingir a convergência, este método requer um número de iterações proporcional ao quadrado do número de nós em uma direção da malha. Isto significa que é mais dispendioso que algum método direto, então existem poucos motivos para utilizá-lo.

No método de *Gauss-Seidel* a convergência é acelerada fazendo-se com que, no somatório $\sum_L a_L \phi_L$ presente na Equação 5.18, os valores de ϕ_L sejam tomados como ϕ_L^{n+1} , se estes forem disponíveis.

O método empregado pelo CFX utiliza um algoritmo do tipo Gauss-Seidel, porém otimizado para matrizes esparsas. Desta maneira, toda a matriz de coeficientes é resolvida de uma só vez, com a determinação do campo de pressão de acordo com os campos de velocidade, conforme o princípio apresentado por Rhie-Chow (CFX, 2004).

5.2 Geração de Malhas

O pacote de programas gráficos ICEM[®] corresponde àqueles necessários para a geração de geometrias e malhas. Destes, há o programa DDN que é utilizado para o desenho da geometria do *riser*, especificando as entradas, saída e o corpo do reator em termos de retas, curvas e superfícies tridimensionais. Ainda faz parte do ICEM os programas TETRA e HEXA, responsáveis pela divisão da geometria já pronta em diversos volumes de controle. As malhas geradas com estes programas podem ser do tipo tetraédricas ou hexaédricas, respectivamente.

Os volumes de controle gerados compõe a malha computacional, que pode ser de dois tipos: malha estruturada e malha não-estruturada. Malhas estruturadas são definidas como sendo aquelas que podem ser ordenadas, indexadas de uma maneira simples. Malhas não estruturadas não possuem essa característica, e por isso podem ser aplicadas a quaisquer geometrias, mesmo as mais complexas – as quais, de outra maneira, só poderiam ser elaboradas com o uso de várias malhas estruturadas entre si interligadas. Depois de prontas, as malhas são exportadas para o formato do CFX (volumes de controle não estruturados), para serem utilizadas nos cálculos.

5.3 Simulador

O pacote CFX[®] é um conjunto de programas voltados para a área de Fluidodinâmica Computacional de uso geral. O pacote combina um *solver* avançado com pré e pós processadores – CFX-Solver, CFX-Pre e CFX-Post, respectivamente. No programa CFX-Pre, determina-se o problema a resolver, ajustando as propriedades dos materiais presentes e escolhendo os modelos e expressões extras, os quais o CFX deverá calcular. O CFX usa a técnica dos volumes finitos, utilizando malhas co-localizadas para o cálculo das variáveis; as equações de transporte são resolvidas de uma vez só, caracterizando o método de solução “segregado”. Os resultados obtidos são visualizados através de gráficos no programa CFX-Post para a visualização gráfica. Utilizando-se os recursos disponibilizados pelo CFX, pode-se fazer previsões para:

- escoamentos estacionários e transientes;
- escoamentos laminares e turbulentos;

- escoamentos subsônicos, trans-sônicos e supersônicos;
- transferência de calor e radiação térmica;
- forças de empuxo;
- escoamentos newtonianos e não-newtonianos;
- transporte de componentes escalares;
- escoamentos multifásicos;
- combustão e reações químicas;

No método de solução do *solver*, segundo o Método dos Volumes Finitos, primeiro as equações diferenciais parciais são integradas por todos os volumes de controle da região de interesse; então, as equações integrais são convertidas a um sistema de expressões algébricas, que são resolvidas de maneira iterativa. O método iterativo é necessário devido à natureza não-linear das equações.

O CFX possui uma estrutura pronta para a definição de reações simples (e combinações destas, permitindo reações concorrentes). Entretanto, desta maneira não é possível a definição de reações heterogêneas. Para a entrada dos modelos de craqueamento catalítico, pode-se utilizar dois métodos no CFX. O primeiro, mais simples, é a criação de expressões, que utilizam as propriedades das fases em cada volume de controle. O segundo método é a criação de sub-rotinas (que são compiladas e executadas junto com o simulador) que, além de ter acesso a todas as variáveis calculadas pelo simulador, permite utilizar todos os recursos disponíveis pela linguagem **FORTRAN**. Nas simulações deste trabalho, as reações de craqueamento (5 reações para o modelo de 4 *lumps*, 20 reações para o modelo de 10 *lumps*) foram definidas com o auxílio de expressões, que são mais facilmente incorporadas aos demais modelos que compõe as simulações.

Desta forma, primeiro foram definidas (na linguagem do simulador) cada uma das espécies químicas que existem no reator, seja como reagente ou produto; em seguida, cada uma das reações paralelas que faz parte da reação (geral) de craqueamento também teve de ser definida. Assim, com a definição de várias expressões, foram definidas as constantes de reação (dependentes, dentre outros fatores, da quantidade presente de catalisador), seguidas das taxas de reação para cada uma das reações.

Capítulo 6

Resultados

6.1 Malhas

Estabeleceu-se o uso de duas geometrias diferentes: uma baseada no trabalho de ALI et al. (1997), referenciada aqui como Geometria A, e outra com dimensões fornecidas pela Petrobras, chamada Geometria B.

Para ambas as malhas elaboradas, tomou-se o cuidado de mantê-las com uma boa qualidade. Um dos métodos para avaliar a qualidade de uma malha hexaédrica é determinar o quanto cada um dos volumes de controle que a compõe aproxima-se de um cubo. As formas de se avaliar isto variam desde medir suas arestas, e verificar se todas são iguais, até verificar o quanto os ângulos internos do volume de controle distanciam-se de 90 graus. Outro parâmetro avaliado é a *razão de crescimento*, que relaciona o tamanho de volumes de controle adjacentes.

Junto às paredes, teve-se uma preocupação com relação à espessura da primeira camada de volumes de controle. Na simulação de escoamentos turbulentos, deve-se ter um grande cuidado quanto ao tamanho da malha com a qual o problema é calculado. Quando modelos de turbulência RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*, como por exemplo o modelo *k-epsilon*) são empregados, as propriedades médias do escoamento são determinadas, ao invés das quantidades instantâneas. Para tanto, o tamanho dos volumes de controle deve ser apropriado para este tipo de abordagem.

Deve-se considerar também que os valores calculados junto às paredes são

cruciais para a determinação do problema completo, nas demais regiões. Para isso, há uma expressão usada para determinar as propriedades do escoamento nessa região: a Lei de Parede.

A Lei de Parede é uma das mais famosas relações determinadas empiricamente em escoamentos turbulentos próximo a superfícies sólidas. Medidas mostram que, para ambos os escoamentos, interno e externo, a velocidade na linha da corrente no fluxo próximo à parede varia com o logaritmo da distância da superfície. Este comportamento é conhecido como Lei de Parede.

A observação dos limites das camadas turbulentas com altos números de Reynolds revela uma descrição útil, aproximada da estatística turbulenta próxima à parede. Encontra-se que os efeitos da inércia do fluido e do gradiente de pressão são pequenos próximos à parede. Conseqüentemente, as estatísticas do escoamento próximo à superfície no limite de uma camada turbulenta são estabelecidas por dois mecanismos primários. O primeiro é a taxa na qual a quantidade de movimento é transferido à superfície, por unidade de área por unidade de tempo, que é igual ao tensor (*stress*) viscoso. O segundo mecanismo é a difusão molecular de quantidade de movimento, que desempenha um papel importante muito próximo à parede. Observações também indicam que os detalhes dos turbilhões distantes da superfície são de pequena importância às estatísticas do escoamento junto à parede.

A região próxima a superfícies sólidas pode ser dividida em três camadas distintas: a Subcamada Viscosa, Camada Logarítmica e na camada onde ocorre o escoamento turbulento (do original, *viscous sublayer*, *log layer* e *defect layer*), cada uma com um perfil de velocidade característico, conforme apresentado na Figura 6.1 (WILCOX, 1998).

Como o perfil apresentado na Figura 6.1 foi extensamente verificado através de experimentos, adota-se este para o cálculo das propriedades turbulentas nesta região, quando utiliza-se algum modelo de turbulência RANS. Por isto, deve-se ter atenção quando elabora-se a malha computacional, pois a espessura do primeiro volume de controle junto às paredes de um equipamento influencia diretamente no cálculo das propriedades turbulentas, que fazem uso da Lei da Parede.

O procedimento de cálculo presente no CFX é uma extensão do método de Launder e Spalding. Na Camada Logarítmica, a velocidade tangencial próxima à parede está relacionada com a tensão de cisalhamento, τ_w , por uma relação logarítmica.

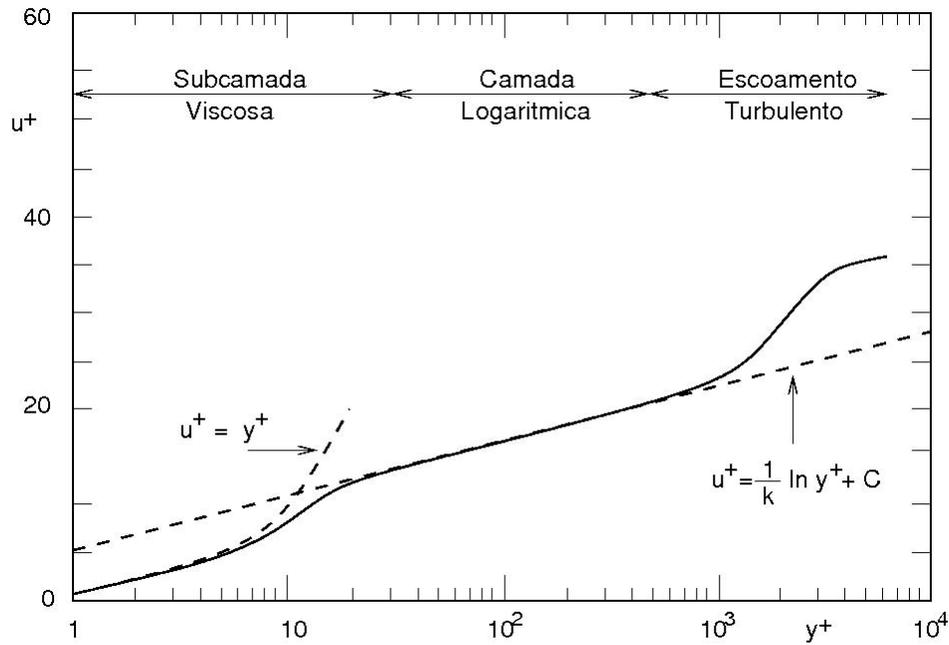


Figura 6.1: Perfil de velocidade típico para uma camada limite turbulenta (WILCOX, 1998).

No procedimento para a função de parede, a região afetada pela viscosidade é acoplada às demais regiões empregando-se fórmulas empíricas para dar as condições de contorno próximas à parede para as equações do escoamento médio e de transporte de turbulência. Estas fórmulas conectam as condições da parede (ex. a tensão de cisalhamento) com as variáveis dependentes nos nós da malha próximo à parede que supostamente estão na região completamente turbulenta.

A relação logarítmica é dada por:

$$u^+ = \frac{u_t}{u_\tau} = \frac{1}{K} \ln(y^+) + C \quad (6.1)$$

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau \Delta y}{\mu} \quad (6.2)$$

$$u_\tau = (\tau_w / \rho)^{1/2} \quad (6.3)$$

onde u^+ é a velocidade próxima à parede, u_τ é a velocidade de fricção, u_t é a velocidade tangencial conhecida na parede a uma distância Δy da parede, y^+ é a distância adimensional da parede, τ_w é a tensão de cisalhamento na parede, K é a constante de

von Kármán e C é a constante da camada logarítmica dependente da rugosidade na parede.

No entanto, como a Equação 6.1 tem o problema de tornar-se singular em pontos de separação (onde a velocidade próximo à parede, u_t , aproxima-se de zero), usa-se uma escala alternativa de velocidade – u^* – ao invés de u^+ na região logarítmica:

$$u^* = C_\mu^{1/4} k^{1/2} \quad (6.4)$$

Esta escala tem a propriedade de não tornar-se nula se u_t tende a zero (em fluxos turbulentos, a energia cinética turbulenta nunca é completamente zero). Baseado nesta definição, a seguinte equação explícita para u_τ pode ser obtida:

$$u_\tau = \frac{u_t}{\frac{1}{K} \ln(y^*) + C} \quad (6.5)$$

O valor absoluto da tensão de cisalhamento da parede, τ_w , é então obtido de

$$\tau_w = \rho u^* u_\tau \quad (6.6)$$

onde

$$y^* = \frac{\rho u^* \Delta y}{\mu} \quad (6.7)$$

e u^* é como definido anteriormente (Equação 6.4).

Uma das maiores desvantagens deste procedimento é que as predições dependem da localização do ponto mais próximo da parede, e é sensível à malha junto à parede; refinar a malha não necessariamente dá uma solução única de maior precisão. O problema de inconsistências na função de parede no caso de malhas finas pode ser solucionado com o uso de uma função de parede *Escalável* (que pode ser aplicável em malhas arbitrariamente finas e permite realizar consistentemente o refino da malha independente do número de Reynolds da aplicação).

Finalizando, é importante notar que a espessura do primeiro volume de controle foi mantida próxima a 1mm , o que garantiu que o valor de y^+ ficasse pouco maior que 11; neste ponto há a intersecção entre o perfil logarítmico e o linear próximo à parede. Assim, todos os pontos na malha estarão fora da subcamada viscosa e todas as inconsistências de malha fina são evitadas. O limite superior para y^+ é uma função do número de Reynolds do escoamento.

Testes de malha foram feitos para cada uma das geometrias. Este procedimento foi adotado para determinar o tamanho ótimo da respectiva malha a ser utilizada nas simulações. Primeiramente, tendo-se elaborada a geometria, foi determinada a melhor disposição dos *blocos*. Blocos são elementos geométricos (hexaedros, prismas, etc.) que são agrupados uns aos outros e deformados para ajustarem-se às superfícies da geometria. Nos quais é feita a divisão de vários Volumes de Controle, que compõe o que chamamos de *malha*.

A partir dos blocos, elaborou-se uma geometria “grosseira”, criada com o menor número possível de volumes de controle, capaz de atender aos critérios de qualidade (espessura da camada de volumes junto às paredes, e razão de crescimento máximo igual a 2). Diminuindo-se a razão de crescimento, principalmente na direção axial, obteve-se malhas mais refinadas. Tendo-se prontas malhas de vários tamanhos diferentes para a mesma geometria, fez-se um teste para verificar a dependência dos resultados calculados com o tamanho da malha, e com isso determinar a malha de tamanho ótimo (com o menor refino, ainda capaz de gerar resultados com valores independentes da malha).

O teste consistiu na simulação de um escoamento monofásico utilizando cada uma das malhas. Foi comparada a diferença entre a pressão na base do reator e a pressão na saída. Espera-se uma variação gradual da pressão ao longo do reator, mas o seu valor nas superfícies medidas é praticamente constante.

A Geometria A foi elaborada com dados apresentados por PÄRSSINEN e ZHU (2001), e possui 76mm de diâmetro interno e 10m de altura. O objetivo de se realizarem cálculos sobre a mesma é a comparação de escoamentos reativos e não reativos, estes últimos apresentados por BASTOS et al. (2008). É sabido que, com a formação de produtos de menor peso atômico, há uma ‘expansão’ da fase gasosa, levando a uma aceleração do escoamento na região superior do *riser*.

Conforme observado na Figura 6.2, a Geometria A compõe-se de um duto com terminação em curva, com uma junção que tem como função a entrada de catalisador. Para a elaboração de uma malha sobre esta geometria, bastaria considerar um bloco que seria “moldado” sobre o corpo do *riser*, e outro bloco que se adaptaria ao duto de entrada, conectado ao corpo do equipamento. Entretanto, estes dutos possuem a seção transversal circular; neste caso, para garantir a qualidade da malha gerada, é possível fazer a divisão do bloco que compõe um cilindro em cinco outros blocos, unidos de tal

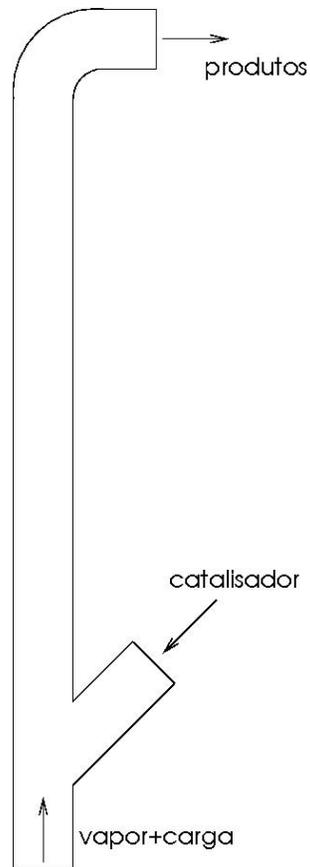


Figura 6.2: Configuração do *riser* da Geometria A.

maneira que formem uma construção conhecida como “O-grid”.

Como é possível observar na Figura 6.3a, quando um bloco único é distorcido para ajustar-se a uma seção circular, os volumes de controle que estão posicionados junto aos “cantos” do bloco (fazendo fronteira com o cilindro, nas extremidades das diagonais noroeste, nordeste, sudoeste e sudeste) possuem uma qualidade muito baixa, com ângulos internos próximos a 180 graus, e não podem ser melhorados, pois são inerentes a essa abordagem; já com a divisão deste bloco segundo uma construção do tipo O-grid (Figuras 6.3b e 6.3c), formam-se volumes de controle com todos os ângulos internos mais próximos de 90 graus. Um corte da malha final é mostrado na Figura 6.3d.

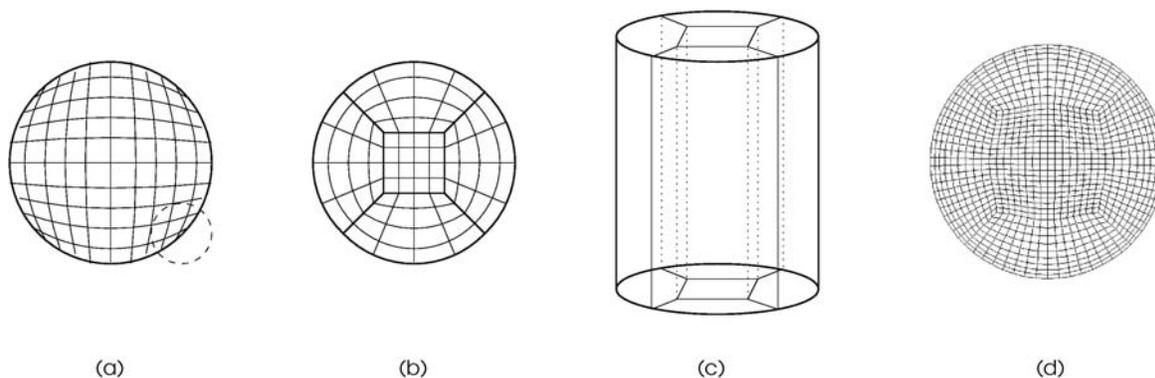
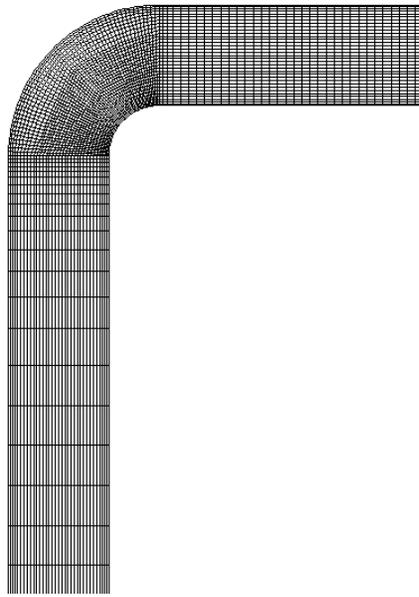


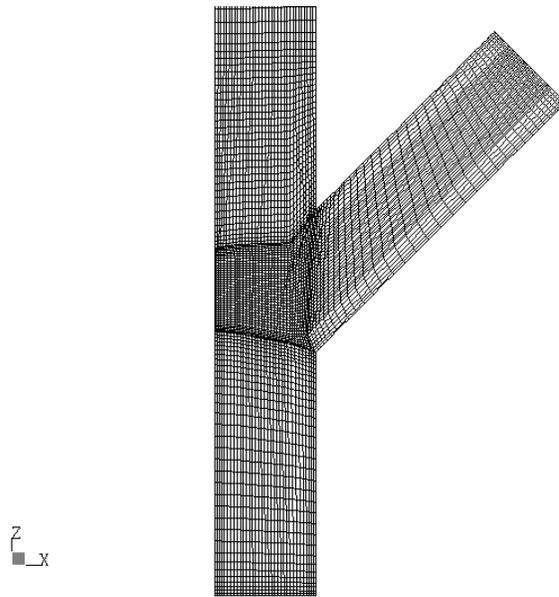
Figura 6.3: Divisão de blocos do tipo O-grid.

Na Figura 6.4b, mostra-se a região de entrada de gases na base do reator, e de sólidos pelo tubo lateral. A saída de ambas as fases ocorre após uma curvatura, vista na Figura 6.4a. Ambas as entradas e saída possuem 76mm de diâmetro, igual ao corpo do *riser*. A Figura 6.4c mostra um corte transversal desta malha, para demonstrar o refino junto às paredes do reator (onde, para garantir o cálculo correto da turbulência, a espessura do primeiro volume de controle manteve-se próximo de 1mm, o que também forneceu um bom número de células calculadas dentro da camada limite).

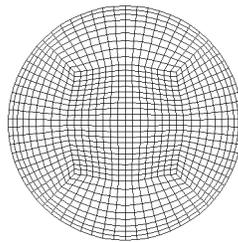
Confeccionaram-se malhas com os tamanhos de 234000, 337000, 417000, 470000, 527000, 584880, 635000 e 828000 volumes de controle. Optou-se pela malha que continha 584880 volumes de controle, já que esta apresentou resultados satisfatórios (muito próximos àqueles obtidos com cálculos sobre a malha mais refinada), necessitando de um tempo computacional menor para a realização dos cálculos.



(a)



(b)



(c)

Figura 6.4: Detalhes da (a) saída, (b) entrada, e (c) corte transversal da malha A.

A Geometria B foi elaborada com dimensões fornecidas pela Petrobras (50mm de diâmetro interno e 18m de altura), e teve como motivação principal a comparação entre diferentes modelos de cinética química, segundo a formação e/ou consumo das diferentes espécies químicas. A elaboração de uma malha para a Geometria B é mais complicada, como pode ser visto na sua representação na Figura 6.5. Além de uma junção para a entrada de catalisador, há também uma junção para a saída de produtos, mas a principal dificuldade encontra-se nas entradas internas ao reator.

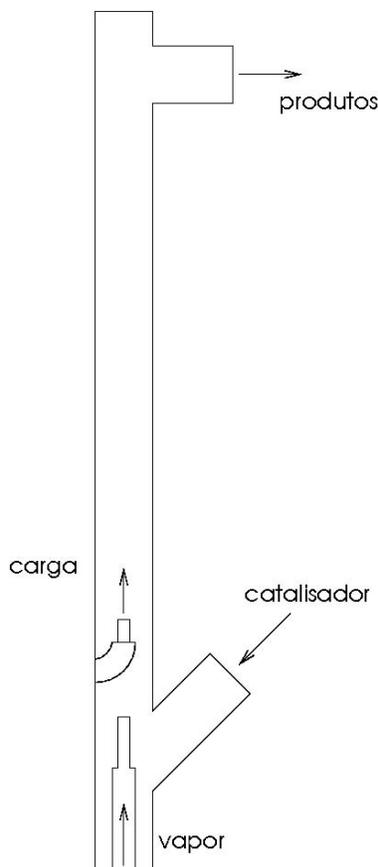


Figura 6.5: Configuração do *riser* da Geometria B.

Como tanto o corpo do reator quanto os tubos que compõe esta alimentação são cilíndricos, construções do tipo O-grid também foram empregadas conforme necessário, em torno de todas as superfícies cilíndricas. Para a entrada de vapor, a técnica utilizada foi a aplicação de diversos O-grids concêntricos, até que todos os volumes de controle junto a superfícies curvas ficassem com uma qualidade aceitável. Para a entrada de hidrocarbonetos, imaginou-se uma construção semelhante para ajustar todo o duto de alimentação que entra em curva no reator, uma vez que esta região também apresenta

problemas no ajuste de malha à superfície curva (Figura 6.6a). Esta construção é conhecida como “L-grid”, e é um caso especial do O-grid no qual apenas alguns dos contornos que delimitam o bloco são curvas, e as demais planas. O esquema de divisão dos blocos é mostrado nas Figuras 6.6b e 6.6c. Com isto, a malha nesta região ficou conforme mostrado na Figura 6.6d.

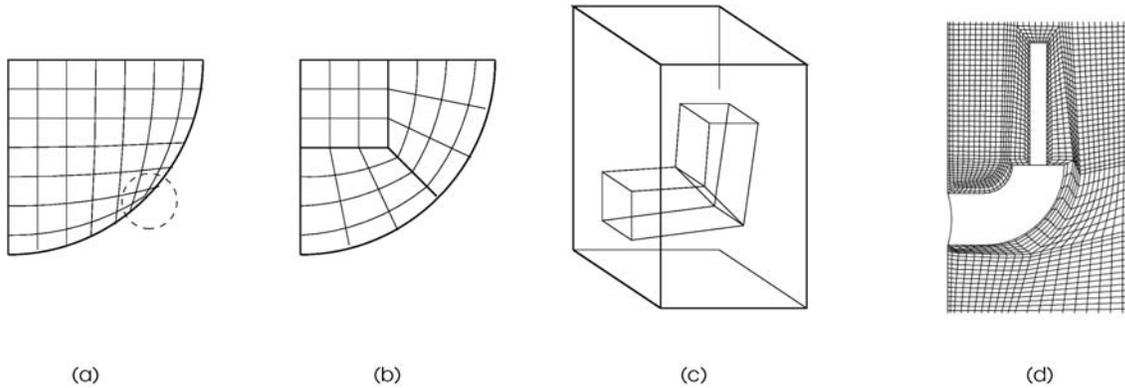
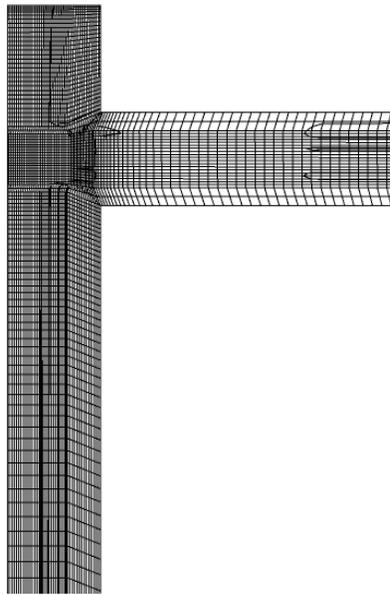


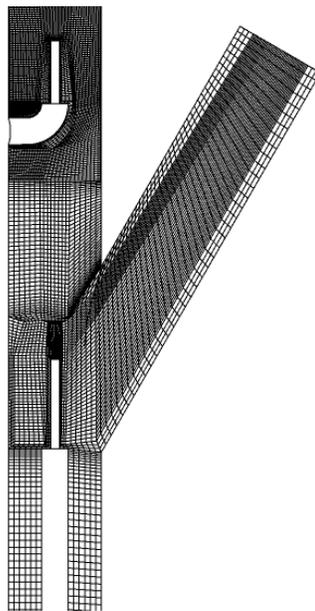
Figura 6.6: Aplicação de uma construção do tipo L-grid.

Na Figura 6.7, mostra-se os detalhes da malha gerada sobre a Geometria B. A região de entrada é mostrada na Figura 6.7b, na qual pode-se observar a entrada de catalisador (entrada lateral), a entrada de vapor (na base do reator), e o duto de injeção de hidrocarbonetos (no interior do reator, acima da entrada de sólidos). Os diâmetros dessas entradas são de 52mm para a entrada de sólidos, e 4,9mm para as demais entradas. A região de saída é mostrada na Figura 6.7a, onde é mostrado o tipo de junção que une o duto de saída ao corpo do reator. A Figura 6.7c mostra o corte transversal desta malha, com o refino desta ao longo do raio.

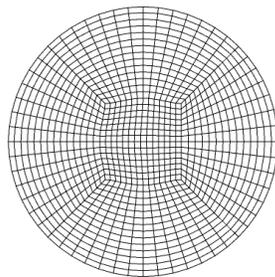
Para a Geometria B, foi determinado que a malha com tamanho ótimo para as simulações possui 650 mil volumes de controle. O tamanho desta malha é maior que o da malha da Geometria A porque, nesta, a altura é maior, e há mais complexidade no tipo de entrada adotada, o que requer um número maior de volumes de controle.



(a)



(b)



(c)

Figura 6.7: Detalhes da (a) saída, (b) entrada, e (c) corte transversal da malha B.

6.2 Condições de Simulação

De posse das malhas otimizadas para simulações sobre as Geometrias A e B, a Tabela 6.1 resume as simulações calculadas no estágio atual desta pesquisa de doutorado.

Tabela 6.1: Simulações realizadas.

caso	geometria	μ_s	cinética	tempo real simulado
01	A	nulo	sem reações	15s
02	A	μ_g	sem reações	15s
03	B	μ_g	sem reações	15s
04	A	μ_g	4 <i>lumps</i>	10s
05	A	μ_g	10 <i>lumps</i>	10s
06	B	μ_g	4 <i>lumps</i>	4s

Todos os casos consideraram o escoamento da fase gasosa com partículas sólidas de $67\mu\text{m}$, de $1500\text{kg}/\text{m}^3$ de massa específica. As propriedades da fase gasosa foram calculadas de acordo com a composição da fase – isto é, conforme a variação na concentração de hidrocarbonetos ou vapor d'água, decorrente do consumo ou formação de espécies químicas segundo as reações de craqueamento, ocorre também a variação na massa específica e na viscosidade da fase gasosa, que é uma mistura de todos os gases presentes.

Para os casos 01, 02, 04 e 05, utilizou-se um fluxo de $300\text{kgm}^{-2}\text{s}^{-1}$ para a fase particulada, e uma velocidade média de $8\text{m}/\text{s}$ para a fase gasosa; nos casos 03 e 06, utilizou-se uma vazão de $170\text{kg}/\text{h}$, e uma velocidade média de $5\text{m}/\text{s}$ para a fase gasosa.

Para os casos 03 e 06, as entradas de gás foram mantidas a 100°C , e o catalisador foi alimentado a 700°C . Nos demais casos, as temperaturas utilizadas foram as do ar atmosférico.

Ao longo do início de cada simulação, adotou-se o procedimento de partir com um passo de tempo inicial de $1,0 \times 10^{-4}\text{s}$, e, com o desenvolvimento dos cálculos, passar para $2,5 \times 10^{-4}\text{s}$, $5,0 \times 10^{-4}$ e $1,0 \times 10^{-3}$. Como um exemplo do tempo necessário para a solução do caso 05, o qual gerou 10s de escoamento, foram necessários cerca de 90 dias de cálculos. As simulações foram feitas em um cluster computacional, com cada uma rodando de modo paralelo paralelo em 3 nós com processadores de 2,4GHz.

6.3 Escoamento a Frio

Com a determinação do tamanho da malha a ser utilizada nos cálculos, as simulações seguintes trataram a modelagem do escoamento a frio (ocorrendo a temperatura ambiente, sem reações químicas) no reator. Os campos de velocidade e pressão obtidos foram utilizados no cálculo das reações químicas. As condições operacionais foram obtidas do trabalho de PÄRSSINEN e ZHU (2001). Neste artigo foram apresentaram perfis radiais de velocidades de partículas para um *riser* de 10 metros de altura e 76 milímetros de diâmetro interno, para diferentes valores de fluxo de sólidos e de velocidade superficial de gás. Estes perfis foram coletados para várias alturas diferentes no interior do *riser*, e com diferentes condições operacionais. Estes valores experimentais foram utilizados na comparação dos resultados de escoamentos simulados.

Assim, foram consideradas para velocidade de entrada do gás igual a 8,0m/s, e o fluxo de sólidos igual a 300kg/m²s. Foram calculados 15 segundos de escoamento real para cada um destes casos. Conforme verificado em trabalhos anteriores (BASTOS, 2005), o *riser* apresenta um estado pseudo-estacionário (pseudo-periódico) com ciclos de aproximadamente 7,5 segundos, a despeito de seu caráter fortemente transiente.

Simulações foram feitas sobre a Geometria A para verificar o modelo fluido-dinâmico empregado. Os resultados mostraram que, em cada uma das seções transversais, haviam três zonas distintas: uma zona central diluída (i.e., uma zona onde a concentração de partículas é muito baixa e, conseqüentemente, sua velocidade é alta, que estende-se do centro ($r=0m$) até aproximadamente $r=0,02m$); uma zona intermediária com velocidade de partículas moderada (aproximadamente entre $r=0,02m$ e $r=0,032m$); e uma zona junto à parede com velocidade de partículas baixa, que estende-se de aproximadamente $r=0,032m$ a $r=0,04m$.

Na direção axial, regiões diferentes também foram observadas: uma região de contato entre as fases, onde a maior concentração de sólidos ao longo do equipamento é observada, da seção inferior do *riser* e estendendo-se a altura de aproximadamente 4m; uma região média com cargas intermediárias de sólidos normalmente observada em condições de baixo fluxo, de 4m a 8m de altura; e uma região diluída no topo, onde uma concentração baixa de sólidos é observada, de aproximadamente 8m até o topo do reator (10m). O comportamento fluidodinâmico do reator é similar ao observado sob condições de baixo fluxo de sólidos. Entretanto, a concentração junto às paredes é muito maior no *riser* do que o encontrado em condições de baixo fluxo.

Dois casos distintos foram simulados para se avaliar a dinâmica do escoamento em termos do modelo de dispersão usado para a fase sólida. O primeiro (caso 01) considerou a fase particulada com viscosidade nula, e o segundo (caso 02) considerou um valor constante para a viscosidade de sólidos, sendo 1% maior que a viscosidade da fase gasosa. Estas simulações foram calculadas até que fosse atingido 15s de escoamento. Ambas as simulações mostraram que o modelo de dispersão invíscido, o qual considera a fase particulada com viscosidade nula, têm um comportamento qualitativo satisfatório desde a região média até a região diluída no topo. Entretanto, esta não ajusta corretamente a região de alta concentração de sólidos (0m a 4m).

As Figuras 6.8 e 6.9 mostram os perfis de velocidade de sólidos na região densa ($h=1,53m$ e $h=2,73m$) de alta concentração de partículas. Pode ser observado que o modelo invíscido (caso 01) possui um comportamento quantitativo melhor e melhores resultados na zona central do que o modelo com o coeficiente constante do modelo Newtoniano (caso 02), mas esta característica inverte-se junto à parede.

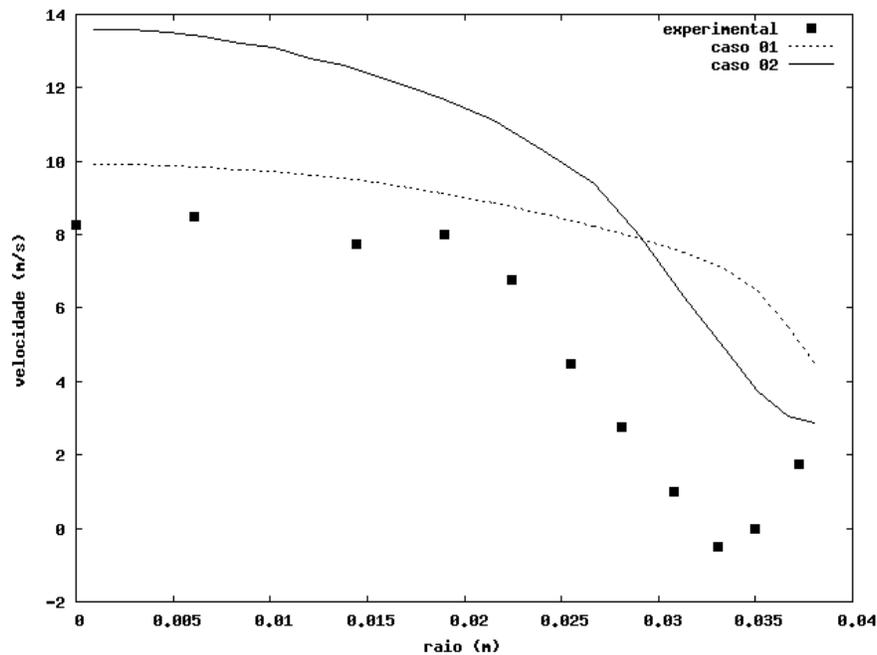


Figura 6.8: Perfil de velocidade da fase particulada a 1,53m de altura.

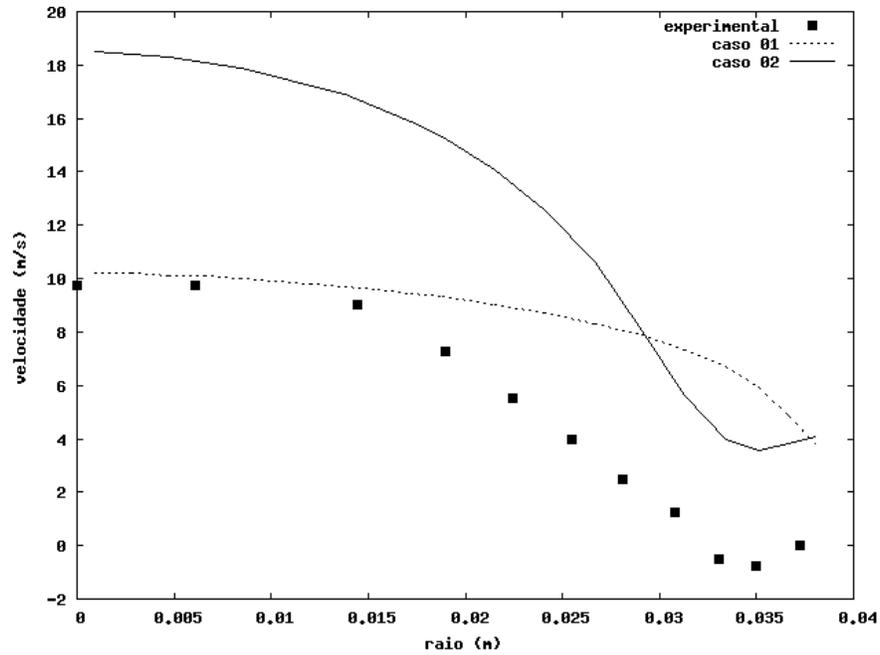


Figura 6.9: Perfil de velocidade da fase particulada a 2,73m de altura.

As Figuras 6.10, 6.11 e 6.12 mostram os perfis de velocidade na região de fluxo médio nas alturas de 3,96m, 5,13m e 6,34m respectivamente. Os perfis calculados predizem melhor os pontos experimentais nas zonas inteiras com o uso do coeficiente Newtoniano constante (caso 02) do que o modelo invíscido (caso 01). Isto torna-se relevante na região próximo à parede. Os resultados obtidos com coeficiente Newtoniano constante seguem a tendência da curva satisfatoriamente.

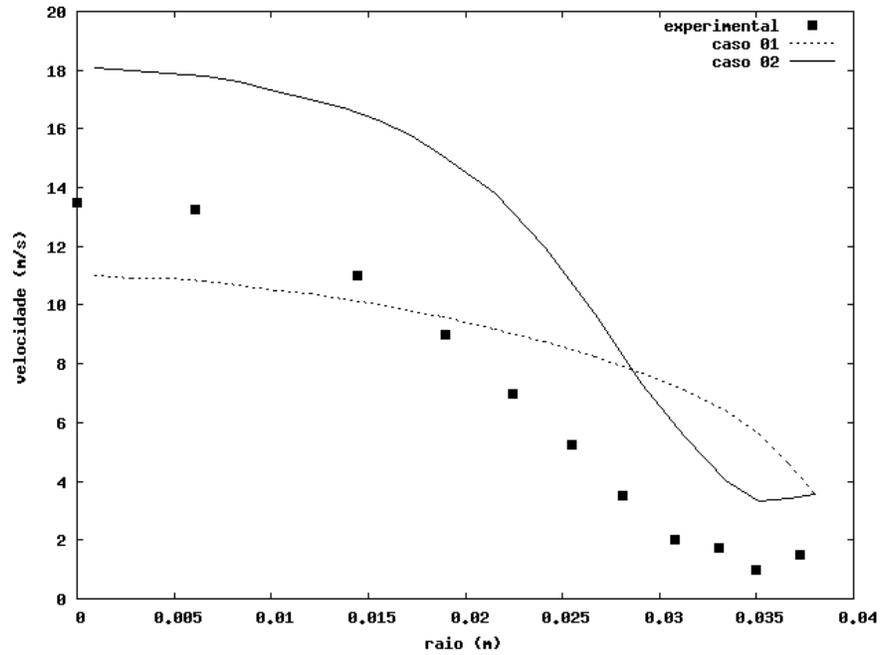


Figura 6.10: Perfil de velocidade da fase particulada a 3,96m de altura.

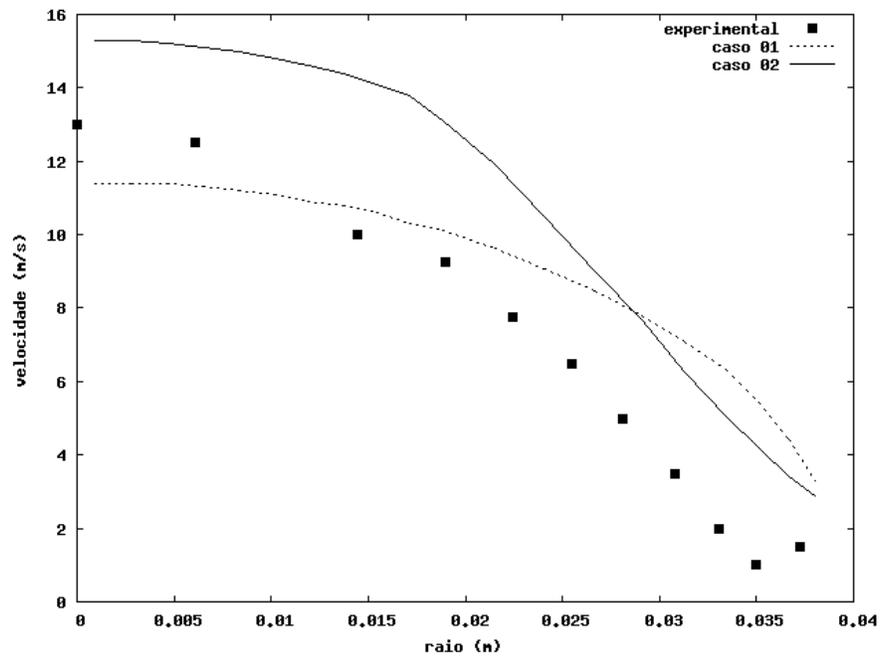


Figura 6.11: Perfil de velocidade da fase particulada a 5,13m de altura.

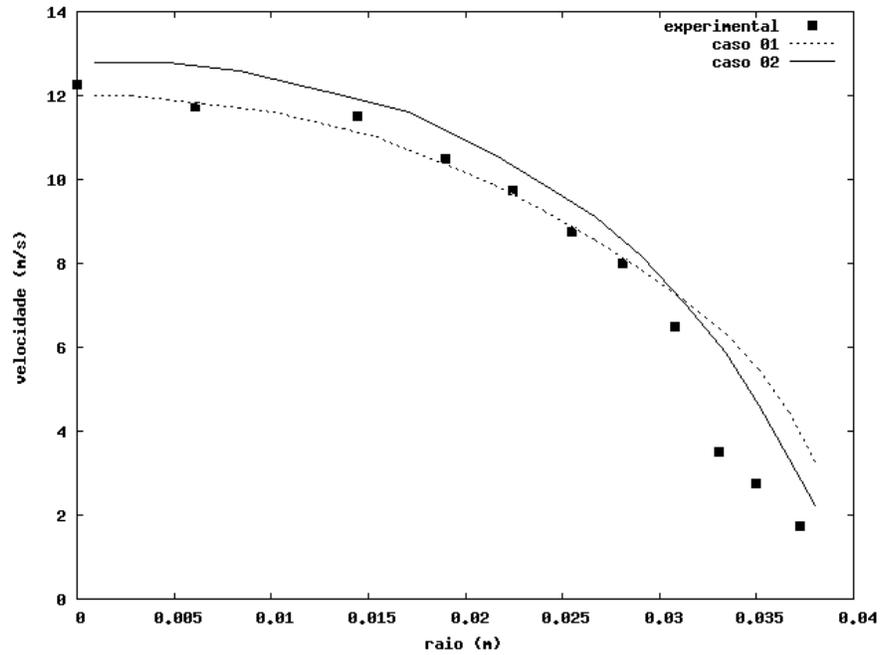


Figura 6.12: Perfil de velocidade da fase particulada a 6,34m de altura.

As Figuras 6.13 e 6.14 mostram perfis de velocidade da fase gasosa nas alturas de 8,74m e 9,42m, respectivamente, na região diluída (essa região possui uma concentração de sólidos muito menor do que a região de entrada).

Ambos os perfis mostram-se muito parecidos, tanto qualitativamente quanto quantitativamente, apresentando uma boa concordância com os dados experimentais. Isto mostra que o modelo de dispersão não possui uma influência pronunciável quando a concentração de sólidos é baixa.

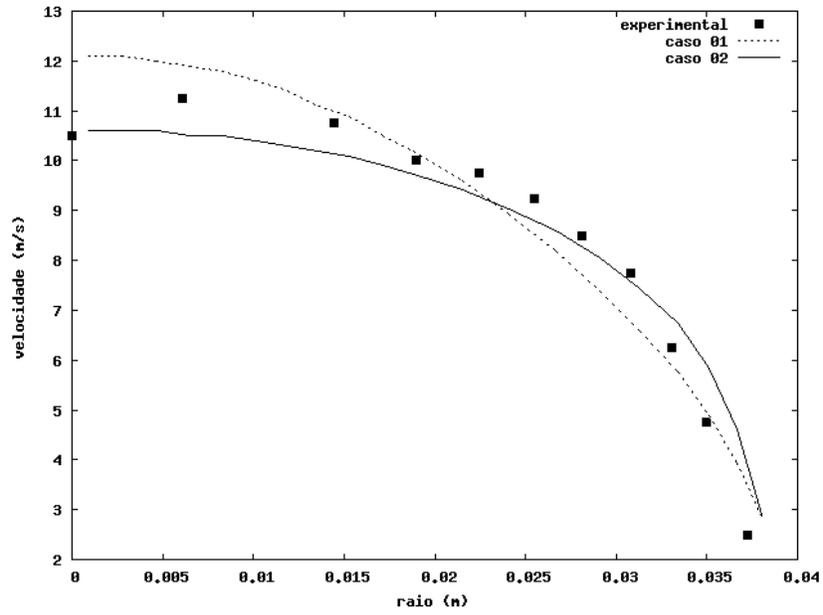


Figura 6.13: Perfil de velocidade da fase particulada a 8,74m de altura.

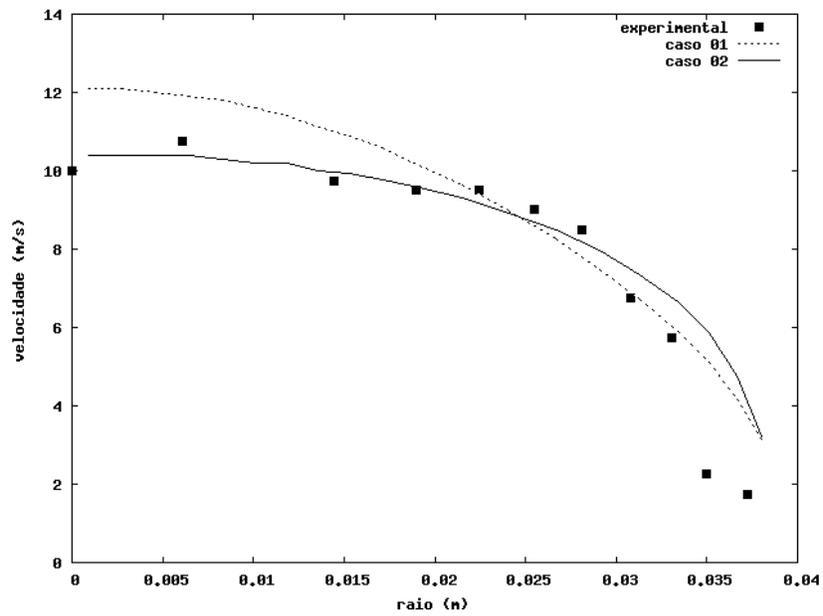


Figura 6.14: Perfil de velocidade da fase particulada a 9,42m de altura.

A Figura 6.15 mostra o campo de velocidade da fase particulada (caso 02), detalhando as regiões de entrada e saída do reator. Na região de entrada, o contato entre as fases gasosa e particulada causa a aceleração das partículas (nota-se na figura uma região de velocidade alta logo após o contato entre as fases). Na região de saída, o campo de velocidade da fase particulada aproxima-se do campo de velocidade da fase gasosa.

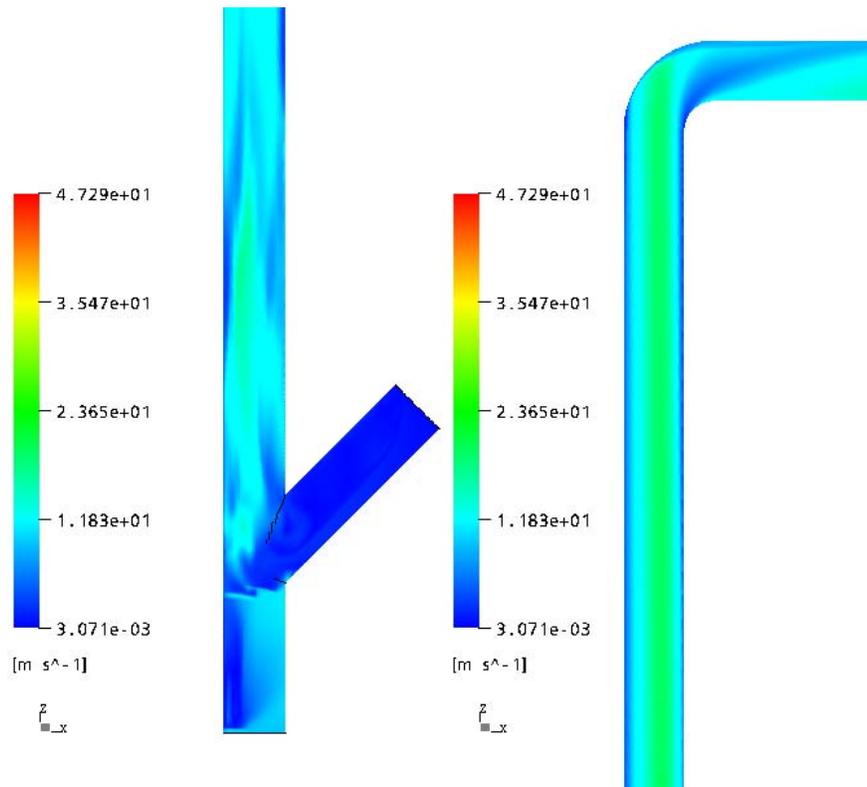


Figura 6.15: Campo de velocidade da fase particulada – caso 02.

Já a Figura 6.16 mostra o campo de concentração (fração volumétrica) da fase particulada, nas mesmas regiões. Logo após o contato entre as fases gasosa e particulada, há o espalhamento das partículas. A fase particulada volta a concentrar-se apenas no topo do reator, onde o fluxo as impelem à parede superior do *riser*. Entre as regiões de entrada e saída, ambas as fases estão bem misturadas entre si.

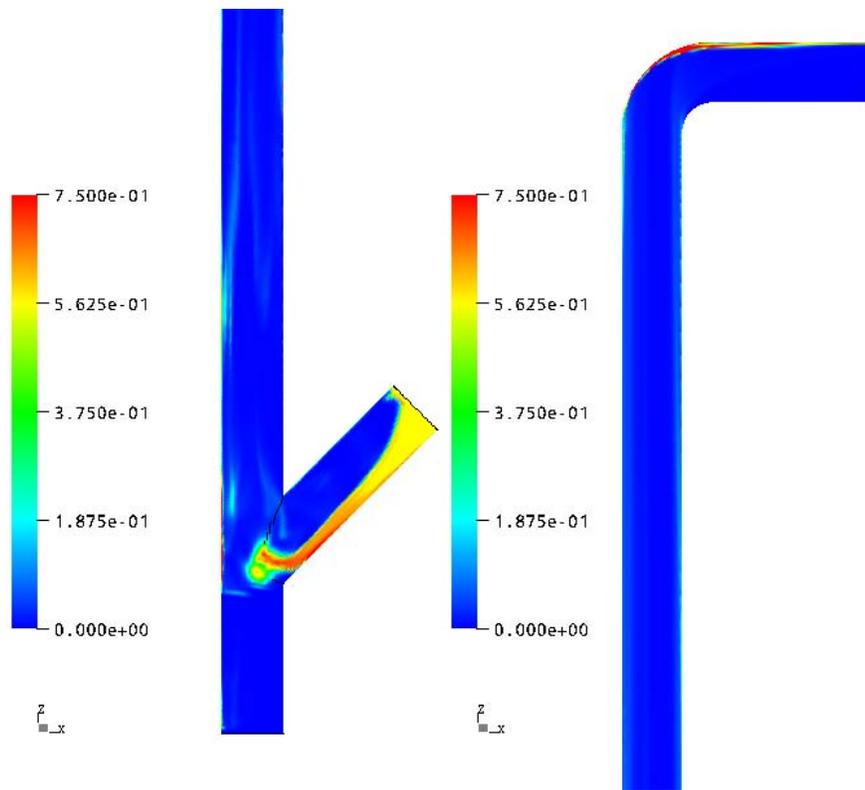


Figura 6.16: Campo de fração volumétrica da fase particulada – caso 02.

Na Figura 6.17 é apresentado o campo de velocidade da fase particulada, estimado sobre a Geometria B. Esta configuração de equipamento apresenta a entrada de material orgânico como obstáculo para o escoamento, o que causa uma pequena aceleração ao seu redor. Após isso, ocorre ainda uma aceleração após essa entrada (devido ao fluxo de material injetado), e próximo à saída do reator, no qual ambas as fases sofrem uma alteração brusca na direção de escoamento.

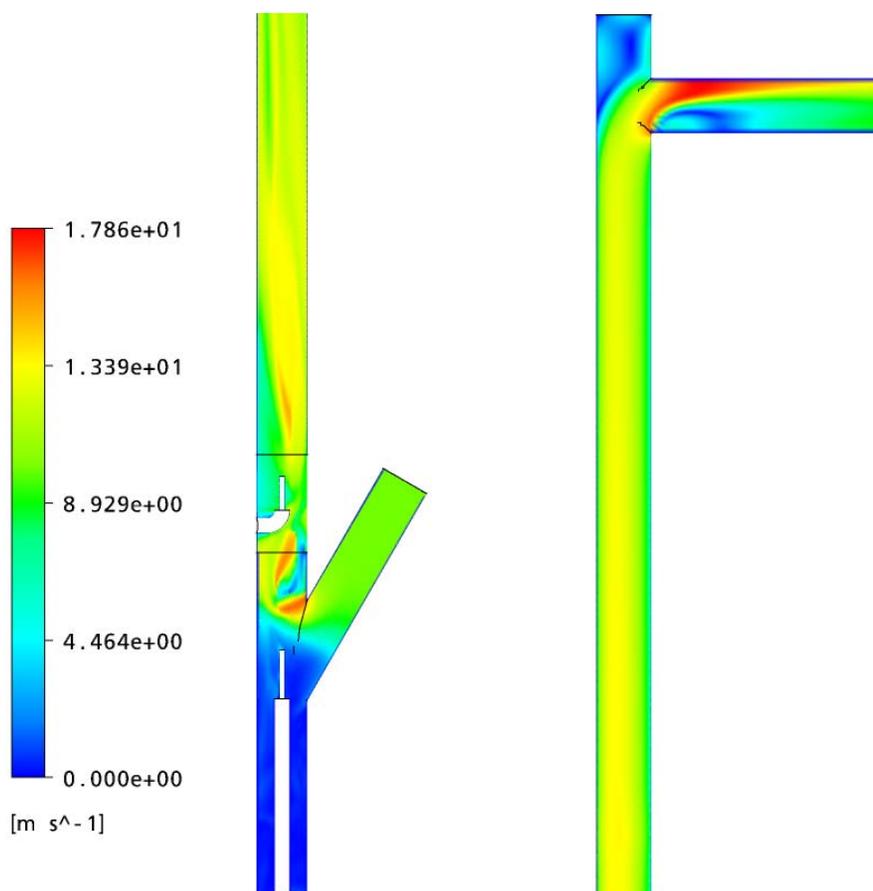


Figura 6.17: Campo de velocidade da fase gasosa, Geometria B – caso 03.

Deve-se ressaltar que, para as malhas da Geometria B, houve uma dificuldade maior em se obter a convergência dos cálculos, principalmente devido à maior complexidade da malha: o desenho de dutos de alimentação no interior da configuração deste *riser* (conforme mostrado na Figura 6.7) resulta em um número maior de volumes de controle “distorcidos” na malha, quando comparados aos volumes de controle malha da Geometria A (sem obstáculos internos).

6.4 Escoamento com Reações

As simulações apresentadas a seguir correspondem ao cálculo de um escoamento reativo segundo os modelos de 4 *lumps* e de 10 *lumps* de craqueamento catalítico. Ambos os modelos cinéticos foram implementados e calculados sobre a malha elaborada para a Geometria A, enquanto que, sobre a Geometria B, foi feito o cálculo do modelo de 4 *lumps* apenas.

Na Figura 6.18, têm-se os resultados para o escoamento em meio reativo, utilizando-se o modelo de 4 *lumps* para o cálculo das taxas de reações, com um tempo real de simulação de 10 segundos (caso 04). Os pontos denotam valores apresentados por ALI et al. (1997).

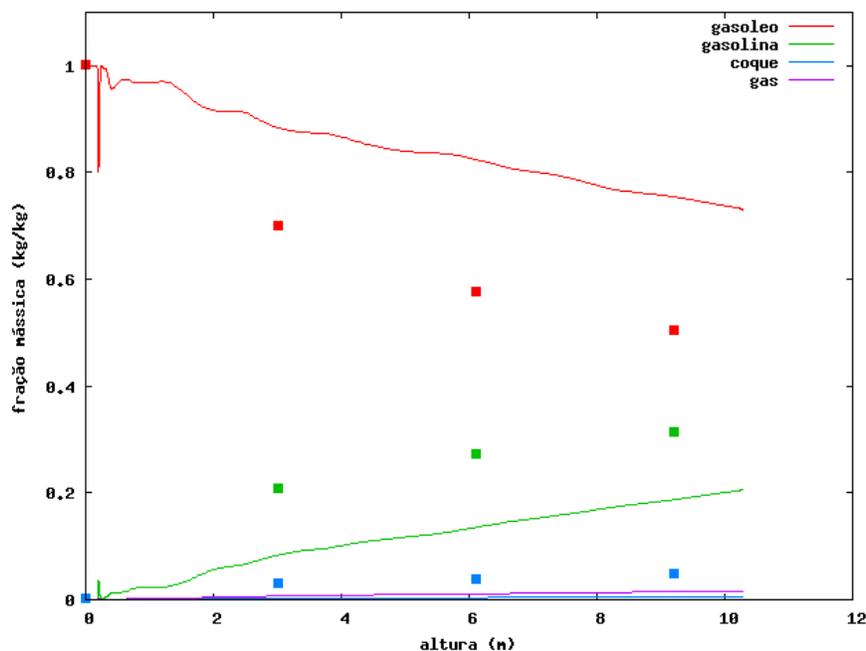


Figura 6.18: Variação de frações mássicas conforme o modelo de 4 *lumps* – caso 04.

Nota-se o decréscimo na fração mássica de gasóleo na fase contínua, que é craqueada, dando origem às demais espécies químicas (gasolina, gás e coque). A variação brusca observada na altura de 0,2m deve-se ao contato abrupto entre reagentes e partículas de catalisador (há um forte consumo de gasóleo, e um pico de formação de gasolina). Comparando-se os resultados calculados com os valores de (ALI et al., 1997), nota-se que a quantidade de gasóleo consumida e de produtos formada é menor que os encontrados em literatura.

O valor da temperatura no interior do reator é influenciada pela troca de calor entre as fases, e pela energia de cada uma das reações presentes. Sua variação ao longo da altura do reator é apresentada na Figura 6.19. A troca de calor entre as fases é mais intensa na região inferior do *riser*, onde ocorre o contato entre as fases gasosa e particulada, que entram no reator com temperaturas diferentes. A partir desta região de mistura, o valor da temperatura é alterado devido apenas ao consumo de calor promovido pelas reações de craqueamento.

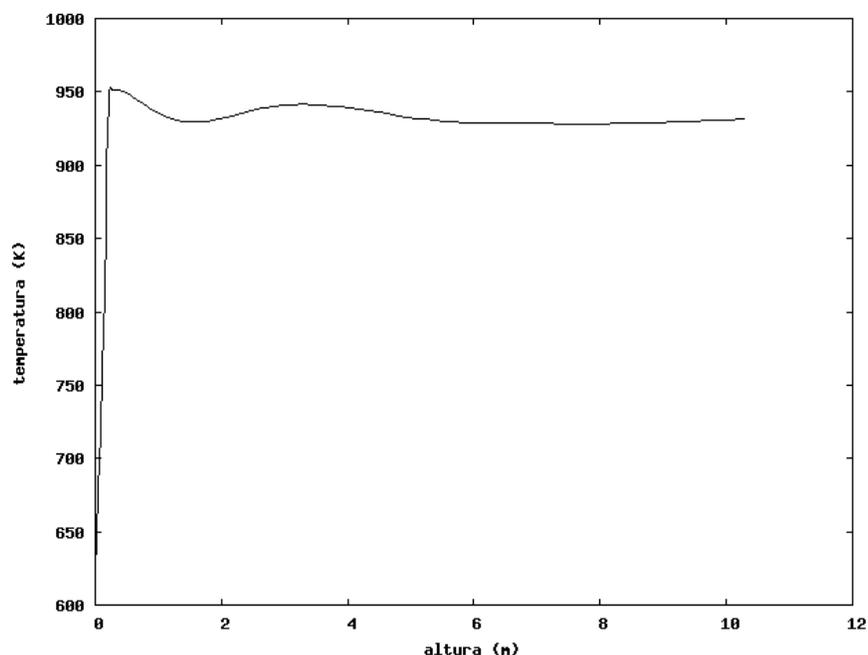


Figura 6.19: Efeito do calor de reação sobre a temperatura da fase gasosa – caso 04.

Na Figura 6.20 observa-se a variação da concentração de gásóleo, calculada com a utilização do modelo de craqueamento de 10 *lumps*, ao longo da altura do reator (caso 05). Para fins de clareza, é mostrada apenas a concentração mássica de gásóleo, e não a concentração de todas as espécies químicas presentes no reator. Mesmo que seja notado um decréscimo no seu valor, esta variação é muito pequena, e a quantidade de gasolina e demais produtos formados, é inexpressiva.

A Figura 6.21 mostra comparações entre os perfis de fluxo da fase particulada para as simulações sem reações químicas (caso 02), e com reações químicas (com o modelo de 4 *lumps*, caso 04), em duas alturas diferentes na região de entrada do reator. A Figura 6.22 faz essa mesma comparação, mostrando no entanto os perfis de fluxo da fase particulada próximo a região de saída. Exceto na seção mais próxima da entrada (a

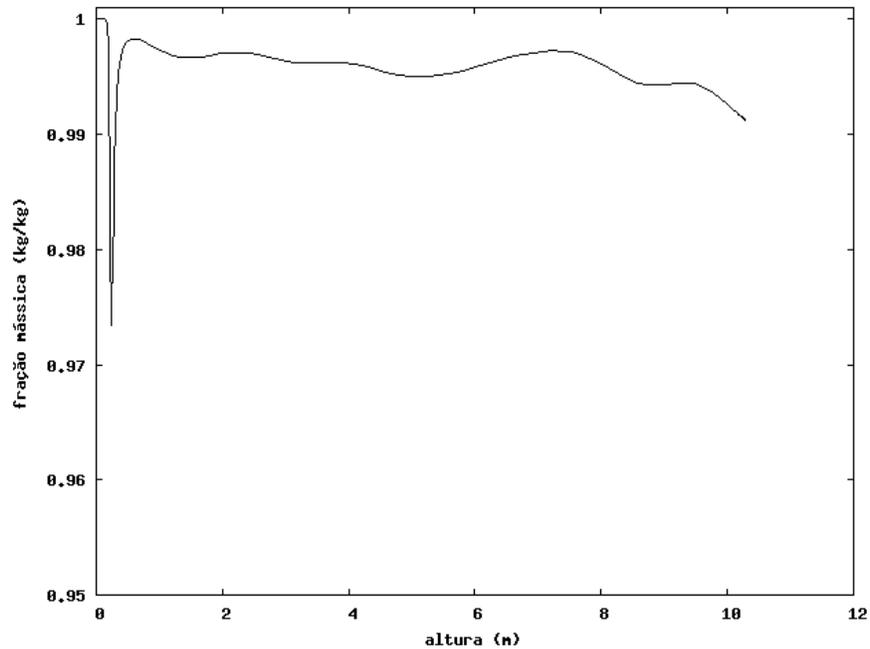


Figura 6.20: Fração mássica de gásóleo segundo o modelo de 10 *lumps* – caso 05.

1,53m de altura, Figura 6.21a), onde os fluxos dos casos 02 e 04 ficaram muito próximos entre si, em todas as demais alturas percebe-se que o fluxo de partículas é maior no centro do reator para o caso 02. Essa característica é ainda mais pronunciada próximo à saída do *riser* (a 9,42m, Figura 6.22b).

A estimativa sobre a Geometria B é apresentada a seguir. Para esta simulação, correspondente a 4s de escoamento real, foram necessários cerca de 3 meses de cálculo intenso em processamento paralelo. A Figura 6.23 mostra a variação da temperatura da fase gasosa na região de entrada do reator, onde as correntes de alimentação de hidrocarbonetos (a 500K) e de catalisador (a 900K) são postas em contato. A mistura entre as fases leva a temperatura a um valor comum para ambas as fases, e, ao longo da altura do reator, a variação no valor da temperatura deve-se ao craqueamento, endotérmico (Figura 6.24). Essa variação ocorre conforme descrito até aproximadamente 3m de altura. Como houve muito pouco tempo de simulação, acima desta altura não há reagentes, e por isso os valores mostrados para a temperatura da fase gasosa devem-se mais à condição inicial estipulada do que a qualquer outro fator.

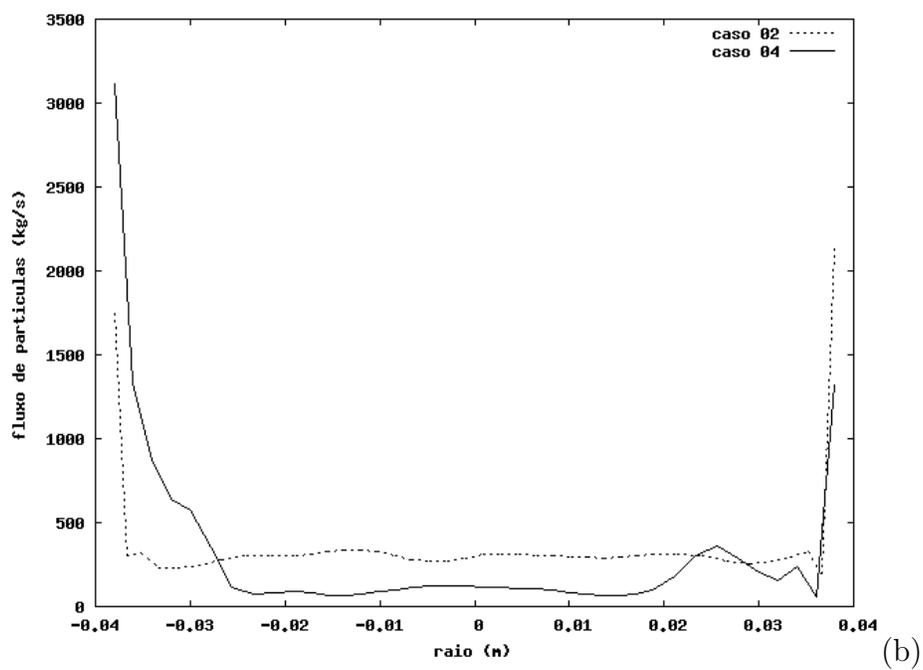
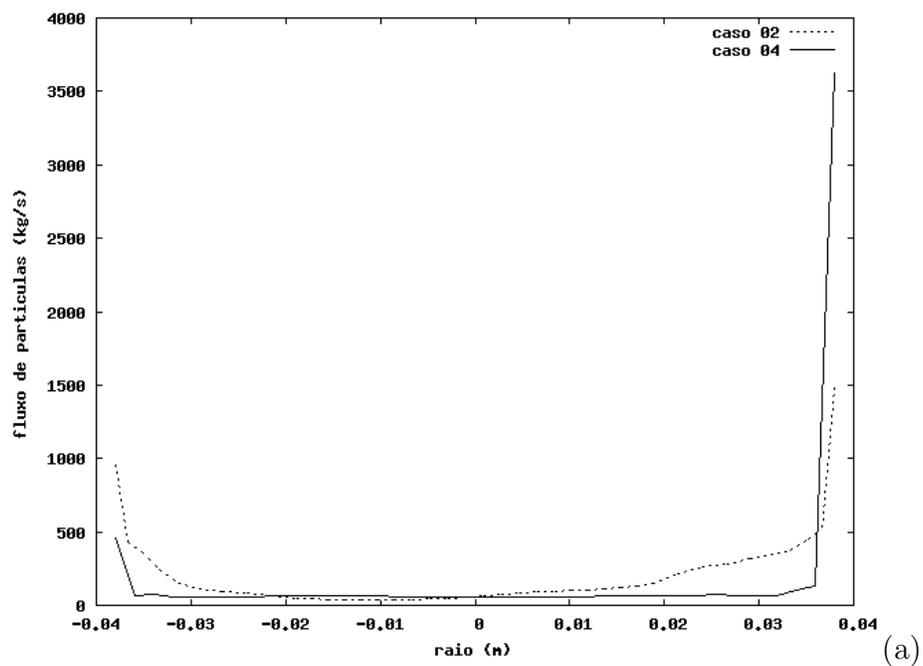


Figura 6.21: comparação entre perfis de fluxo de partículas a (a) 1,53m e (b) 2,73m de altura.

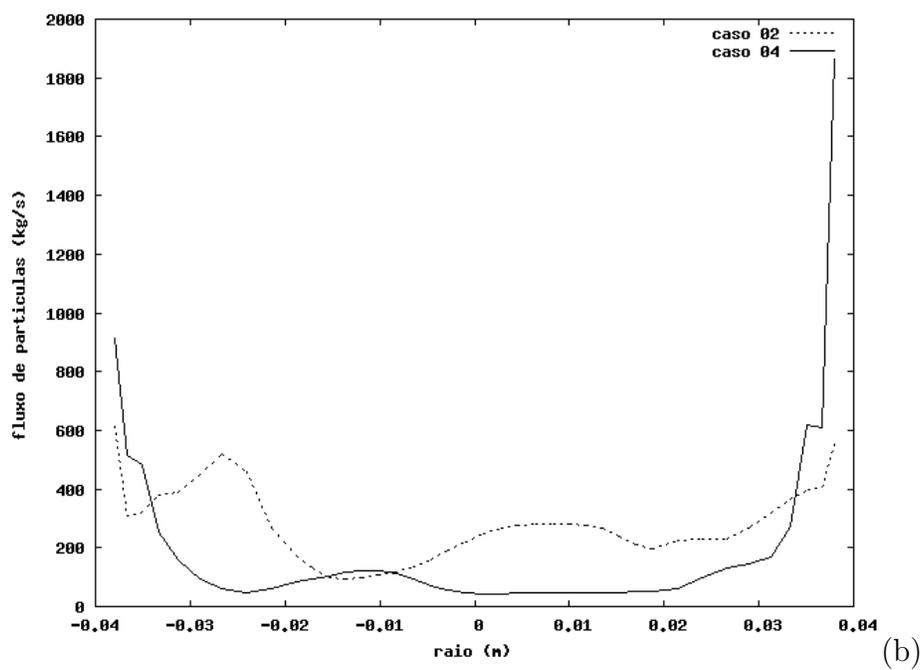
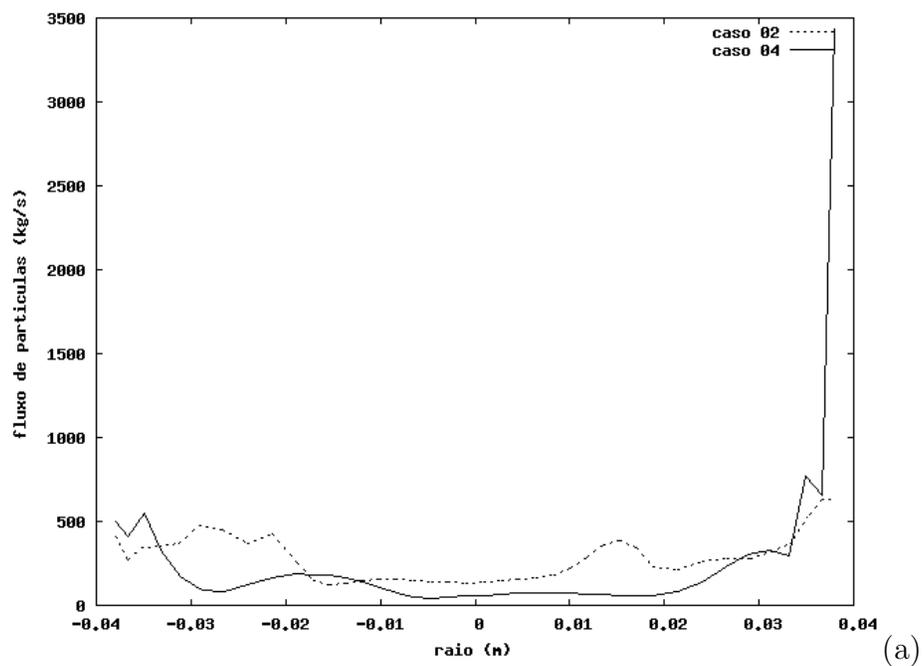


Figura 6.22: comparação entre perfis de fluxo de partículas a (a) 8,74m e (b) 9,42m de altura.

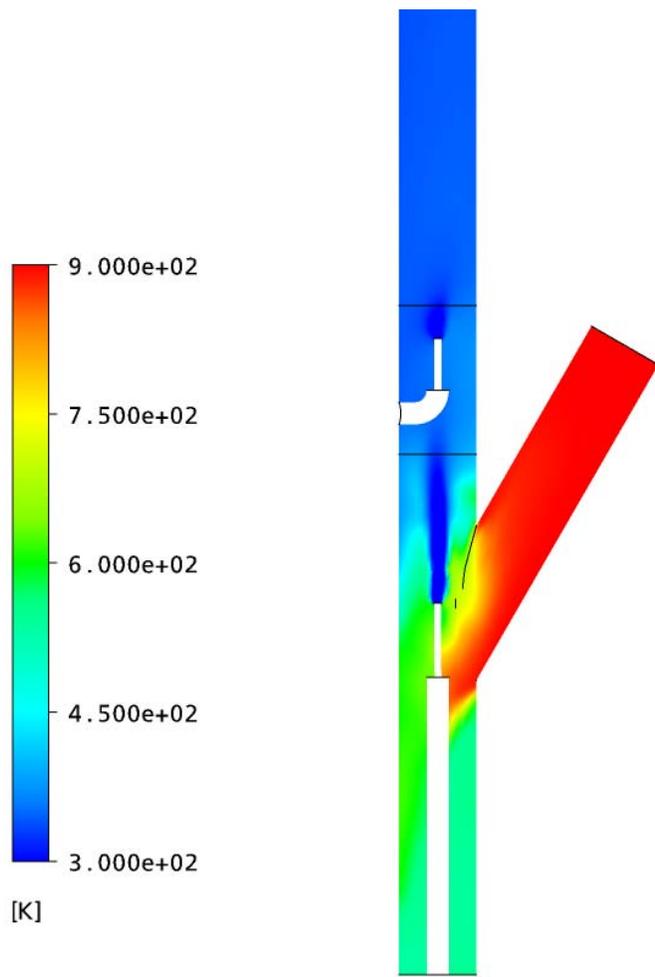


Figura 6.23: Campo de temperatura – caso 06.

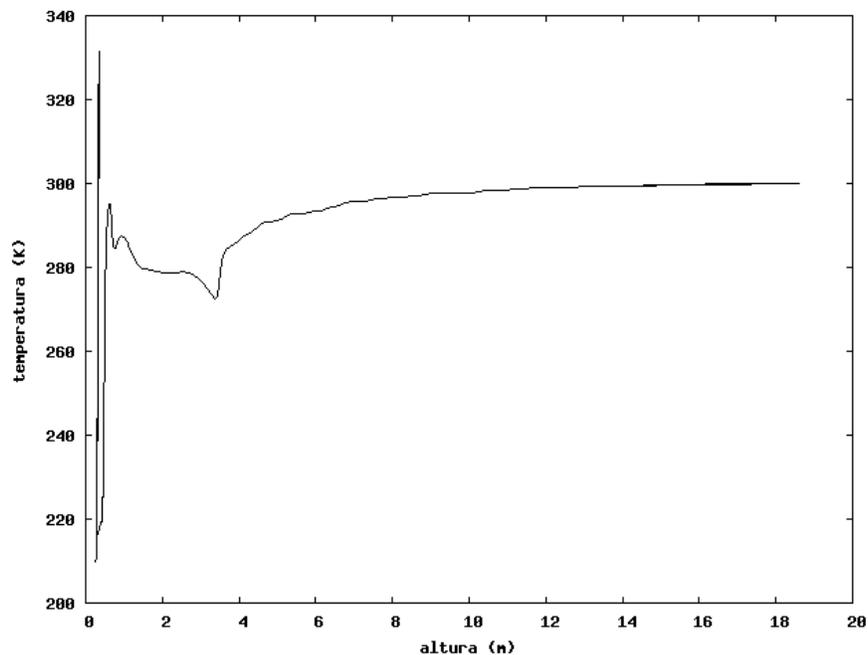


Figura 6.24: Variação da temperatura no reator – caso 06.

A Figura 6.25 mostra a concentração mássica de gasóleo, cujo valor máximo ocorre no bico onde é injetado. A partir do gasóleo, são formados os demais produtos. A Figura 6.26 mostra a variação de gasóleo, ao longo da altura do reator. Até aproximadamente 3 metros de altura, há um decréscimo no valor da concentração, em parte pelo consumo deste hidrocarboneto para a formação de gás, gasolina e coque. A partir dessa altura, a quantidade de gasóleo presente torna-se muito baixa, uma vez que, com 4s de escoamento, ainda não houve o transporte da carga de alimentação por toda a extensão do *riser*.

Devido ao pouco tempo de simulação (insuficiente para garantir que os hidrocarbonetos atingissem a saída do reator), os resultados para o caso 06 devem ser considerados até a altura de 3m, conforme pode ser observado na “descontinuidade” mostrada nas Figuras 6.26 e 6.24 próximo a essa altura. Somente com mais tempo de simulação pode-se avaliar corretamente a conversão que é obtida pelo modelo de craqueamento neste caso.

Os escoamentos “sem reação” e “com reação” apresentam diferenças, embora pequenas. Esperava-se uma diferença maior, visto que, com o craqueamento de moléculas grandes, há a formação de mais moléculas (isto é, aumenta a concentração molar, e

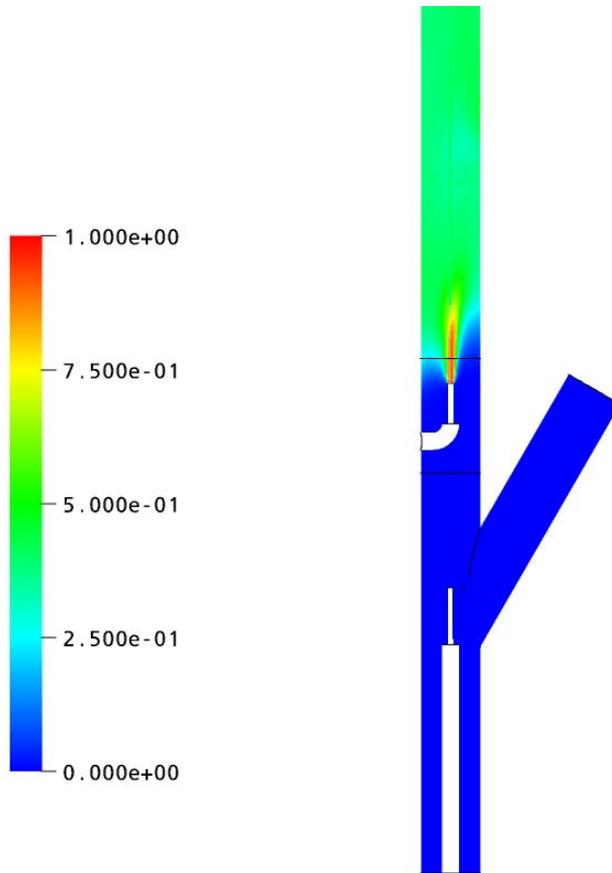


Figura 6.25: Campo de concentração de gasóleo – caso 06.

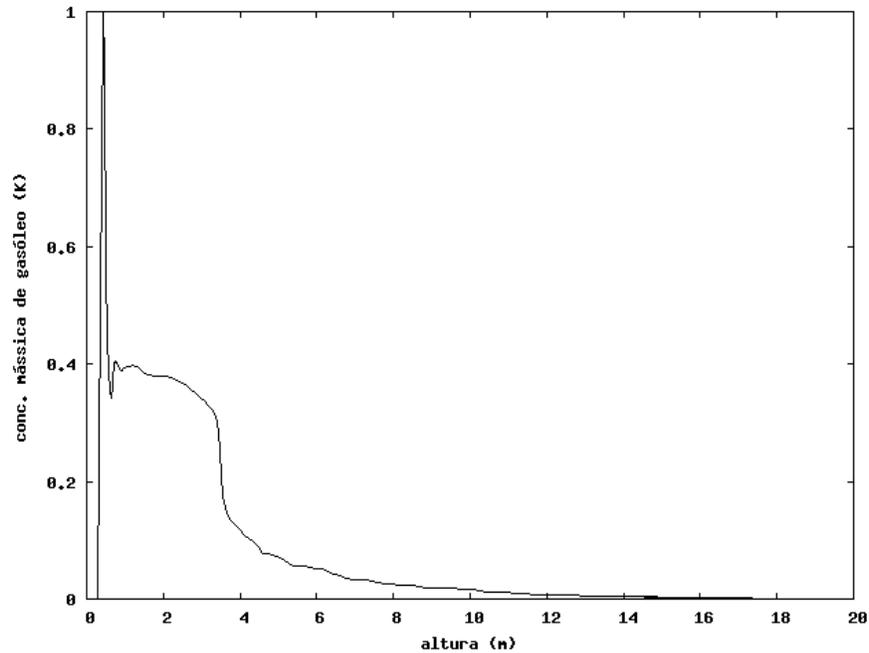


Figura 6.26: Concentração de gás óleo ao longo da altura – caso 06.

conseqüentemente o volume); no entanto, como a conversão obtida foi pequena.

Tomam-se como premissas que os modelos cinéticos foram corretamente determinados (NAYAK et al., 2005; ALI et al., 1997), e que estes são capazes de prever corretamente este tipo de fenômeno. Com estas suposições, resta trabalhar com algumas hipóteses para o déficit na quantidade calculada de produtos craqueados a partir do gás óleo alimentado.

A primeira hipótese abrange o perfil de temperatura calculado. Os resultados mostram que houve uma queda no valor da mesma, embora pequena, tal como observado para a variação da fração volumétrica da fase gasosa. Entretanto, temperaturas altas favorecem a conversão em reações de craqueamento, endotérmicas (ROSA, 2002; PAREEK et al., 2003). Por isso, outro fator deve ser tomado para a pequena conversão encontrada, em ambos os modelos cinéticos.

A segunda hipótese está relacionada com os campos de velocidade e de fração volumétrica determinados para as fases. Conforme apontado na introdução do Capítulo 4, no equipamento real, parte do gás escoa através de caminhos preferenciais, diminuindo a mistura entre as fases gasosa e particulada. Os valores encontrados para a concentração de produtos podem ser explicados por uma mistura demasiadamente pequena entre

as fases, menor ainda que na verificada experimentalmente. No entanto, resultados calculados a frio mostraram uma concordância satisfatória com valores experimentais. Talvez as diferenças observadas no escoamento reativo (com o *riser* operando a altas temperaturas) possam estar relacionadas com a alta temperatura na qual as fases escoam, visto que isto influencia na dinâmica de seu escoamento.

Uma última hipótese refere-se à quantidade de calor que é trocada de uma fase para outra. Na Figura 6.23, é mostrada a região de entrada de material orgânico no reator. Nota-se que a temperatura dos jatos permanece inalterada, mesmo após algum tempo em contato com a fase particulada (com temperatura mais elevada). Isto pode ser um indicativo de que o modelo utilizado para o cálculo do coeficiente de troca térmica (γ , Equações 4.8 e 4.9) seja inadequado para esta situação (jato de material orgânico a alta velocidade, em contato com partículas quentes).

Capítulo 7

Conclusões e Sugestões

A simulação de um escoamento reativo gás-sólido, para duas diferentes configurações de *risers*, pôde ser calculada no CFX. Fez-se o cálculo de 10s de escoamento, para garantir que as condições iniciais (isto é, com o *riser* isento de hidrocarbonetos) tivesse uma influência mínima nos resultados obtidos. Com o acoplamento de cinéticas de craqueamento ao escoamento, segundo modelos de 4 *lumps* e 10 *lumps*, foi calculada o escoamento com transporte de espécies químicas, cuja quantidade varia segundo o modelo de craqueamento utilizado.

A determinação do modelo fluidodinâmico mostrou que, para a condições de escoamento gás-sólido simuladas (a frio), o uso de um valor não-nulo para a viscosidade das partículas, próximo ao valor da viscosidade da fase gasosa, gerou perfis calculados de velocidade de partículas mais próximos do encontrado experimentalmente na região densa, onde a concentração de partículas é maior. Para regiões mais diluídas, o valor dessa propriedade não causou uma grande melhora nos resultados calculados, sendo que ambos os modelos aceitáveis.

Quanto aos resultados das simulações com cálculo de reações químicas, foi realizado o cálculo do escoamento considerando diferentes modelos para o craqueamento catalítico. No entanto, as conversões obtidas ficaram abaixo dos valores esperados. Modificações devem ser feitas na modelagem para ajustar melhor os valores obtidos aos disponíveis em literatura – por exemplo, nos valores das taxas de reação: uma vez que a modelagem necessária para a simulação de escoamento em *risers* com reações químicas foi elaborada, torna-se simples a realização de novas simulações com outros valores para as taxas de reação, para os mesmos modelos cinéticos (de 4 *lumps* e 10 *lumps*).

É necessário um aprofundamento maior quanto à influência de altas temperaturas sobre as estruturas de escoamento. Testes devem ser feitos para verificar a validade do modelo fluidodinâmico apenas, para os casos em que também há o transporte de calor e, enfim, avaliar novamente os modelos para a cinética de craqueamento.

Após isto, outros fenômenos também devem ser considerados para a obtenção de uma modelagem completa para o *riser*. É necessário um modelo que contemple a vaporização da carga (líquida) de material orgânico que é injetado no reator, para que, com isso, o balanço térmico possa ser corretamente estimado pelo simulador.

Outra característica importante, que talvez tenha uma influência notável sobre os resultados, é a consideração de um modelo de escoamento compressível. Tal como as simulações foram realizadas nesta tese, o volume específico da fase gasosa foi determinado a partir de sua composição (com a quantidade de cada espécie química presente), o que deve causar uma variação muito maior do que o tratamento da fase gasosa como sendo compressível. Mesmo assim, cabe citar essa consideração para algum trabalho futuro.

Por fim, pode-se também acoplar modelos para a consideração do fenômeno da adsorção de espécies químicas, e para o craqueamento térmico. Ambos influenciam a conversão obtida, e a fluidodinâmica das fases escoando no interior do reator.

Referências Bibliográficas

- Ali, H., Rohani, S. Dynamic modeling and simulation of a riser-type fluid catalytic cracking unit. *Chem. Eng. Technol.*, n. 20, p. 118-130, 1997
- Ali, H., Rohani, S., Corriou, J.P. Modelling and control of a riser type fluid catalytic cracking (FCC) unit. *Trans. IChemE.*, vol. 75, part A, p. 401-412, 1997.
- Alves, J.J.N. *Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante*. Campinas: UNICAMP/LMSPQ, 1998. Tese de Doutorado
- Alves, J.J.N. and Mori, M. Fluid dynamic modelling and simulation of circulating fluidized bed reactors: analyses of particle phase stress models. *Computers chem. Engng*, n. 22, p. S763-S766, 1998.
- Bastos, J.C.S.C. *Simulação do escoamento gás-sólido em um duto cilíndrico vertical em leito fluidizado rápido aplicando a técnica CFD*. Campinas: UNICAMP/LMSPQ, 2005. Tese de Mestrado
- Bastos, J.C.S.C., Rosa, L.M., Mori, M., Marini, F., Martignoni, W.P. Modelling and Simulation of a Gas-Solids Dispersion Flow in a High-Flux Circulating Fluidized Bed (HFCFB) Riser Catalysis Today, v. 130, i. 2-4, p. 462-470, 2008.
- Cerqueira, H.S., Biscaia, E.C., Falabella, E. Mathematical modeling of deactivation by coke formation in the cracking of gasoil. *catalyst deactivation*, 1997.
- CFX Ltd. (diversos autores). *manuals do CFX 5.7 e CFX 10*, arquivos online.
- Cheng, Y., Wei, F., Yang, G., Jin, Y. Inlet and outlet effects on flow patterns in gas-solid risers. *Powder Technology*, n. 98, p. 151-156, 1998.

- Dasgupta, S., Jackson, R., Sundaresan, S. Turbulent gas-particle flow in vertical risers. *AIChE Journal*, v. 40, n. 2, p. 215-228, 1994.
- Decker, R. K. *Modelagem e simulação tridimensional transiente do escoamento gás-sólido*. Campinas: UNICAMP/LMSPQ, 2003. Tese de Mestrado
- Delattre, C., Forissier, M., Schweich, D., Bernard, J.R. Improvement of the microactivity test for kinetic and deactivation studies involved in catalytic cracking. *Chemical Engineering Science*, n. 56, p. 1337-1345, 2001.
- Delhaye, J.M., Achard, J.L. On the use of averaging operators in two phase flow modeling. *Thermal and Hydraulic Aspects of Nuclear Reactor Safety*, ASME, 1977.
- Du, B., Warsito, W. and Fan, L.S. Bed nonhomogeneity in turbulent gas-solid fluidization. *AIChE Journal*, vol. 49, p. 1109-1126, 2003.
- Enwald, H., Peirano, E., Almstedt, A.E. Eulerian Two-Phase Flow Applied to Fluidization. *Int. J. Multiphase Flow*, v. 22, p. 21-66, 1996.
- Farkas, G. Kinetic lumping schemes. *Chemical Engineering Science*, 54, p. 3909-3915, 1999.
- Ferziger, Joel H., PeriĆ, Milovam *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Berlin, Germany: Springer, 1996, 364p
- Froment, Gilbert F. and Bischoff, Kenneth B. *Chemical Reactor Analysis and Design*. New York: John Wiley & Sons Inc, 1979.
- Gao, J., Xu, C., Lin, S., Yang, G., Guo, Y. Advanced model for turbulent gas-solid flow and reaction in fcc riser reactors. *AIChE Journal*, v. 45, n. 5, p. 1095-1112, 1999.
- Gelberbloom, S.J, Gidaspow, D., Lyczkowski, R.W. CFD simulations of bubbling/collapsing fluidized beds for three Geldart groups. *AIChE Journal*, v. 49, n. 4, p. 844-858, 2006.
- Geldart D. Types of Gas Fluidization *Powder Technology*, 7, p. 285-292, 1973.
- Gidaspow, D. *Multiphase flow and fluidization: Continuum and kinetic theory description*. San Diego: Academic Press, 1994

- Gupta, R.K., Kumar, V., Srivastava, V.K. A new generic approach for the modeling of fluid catalytic cracking (FCC) riser reactor. *Chemical Engineering Science*, n. 62, p. 4510-4528, 2007.
- Hanratty, T.J., Theofanous, T., Delhaye, J.M., Eaton, J., McLaughlin, Prosperetti, A., Sundaresan, S., Tryggvason, G. Workshop findings. *International Journal of Multiphase Flow*, n. 29, p. 1047-1059, 2003.
- Harris, A.T., Davidson, J.F., Thorpe, R.B. The influence of the riser exit on the particle residence time distribution in a circulating fluidised bed riser. *Chemical Engineering Science*, n. 58, p. 3669-3680, 2003.
- Huilin, L., Gidaspow, D., Bouillard, J., Wentie, L. Hydrodynamics simulation of gas-solid flow in a riser using kinetic theory of granular flow. *Chemical Engineering Journal*, n. 95, p. 1-13, 2003.
- Huilin, L., Gidaspow, D. Hydrodynamics of binary fluidization in a riser: CFD simulation using two granular temperatures. *Chemical Engineering Science*, n. 58, p. 3777-3792, 2003.
- Ishii, M. *Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow*. Eyrolles, 1975.
- Jiradilok, V., Gidaspow, D., Damronglerd, S., Koves, W.J., Mostofi, R. Kinetic theory based CFD simulation of turbulent fluidization of FCC particles in a riser. *Chemical Engineering Science*, n. 61, p. 5544-5559, 2006.
- Kunii, D., Levenspiel, O. *Fluidization Engineering*, Second Edition. Boston: Butterworth-Heinemann, 1991
- Jie Li, J.A.M. Kuipers Gas-particle interactions in dense gas-fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, n. 58, p. 711-718, 2003.
- Makkawi, Y.T., Wright, P.C. The voidage function and effective drag force for fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 2035-2051, 2003.
- Martignoni, W.P. *Modelling and simulation of FCC riser reactors: An heterogeneous approach*. Ontario: Faculty of Graduate Studies, The University if Western Ontario, 1998. 339p. PhD Thesis

- Massarani, G., *Fluidodinâmica em Sistemas Particulados*. E-Papers Serviços Editoriais, 2002.
- Meier, H.F., Alves, J.J.N., Mori, M. Comparison between staggered and collocated grids in the finite-volume method performance for single and multi-phase flows. *Computers and Chemical Engineering*, n. 23, p. 247-262, 1999.
- Nayak, S.V., Joshi, S.L., Ranade, V.V. Modeling of vaporisation and cracking of liquid oil injected in a gas-solid riser. *Chemical Engineering Science*, n. 69, p. 6049-6066, 2005.
- Pareek, V. K., Adesina, A. A., Srivastava, A., Sharma, R. Modeling of a non-isothermal FCC riser *Chemical Engineering Science*, n. 92, p. 101-109, 2003.
- Pärssinen, J. H. and Zhu, J. X. Particle velocity and flow development in a long and high-flux circulating fluidized bed riser *Chemical Engineering Science*, n. 56, p. 5295-5303, 2001
- Jin Y. Park The clustered dense phase model for group A fluidization: I. Dense phase hydrodynamics. *Chemical Engineering Science*, n. 58, p. 193-202, 2003.
- PATANKAR, Suhas V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York, USA: McGraw-Hill, 1980
- Pitault, I., Nevicato, D., Forissier, M., Bernard, J. R. Kinetic model based on a molecular description for catalytic cracking of vacuum gas oil. *Chemical Engineering Science*, n. 49, p. 4249-4262, 1994.
- Ribeiro, D.C. *Implementação de Modelo de Fechamento em Risers de FCC através de Código Comercial CFD*. Campinas: UNICAMP/LMSPQ, 2001. Dissertação de Mestrado
- Rosa, L.M. *Simulação de Reações Químicas e Consumo de Calor em Reatores Riser*. Campinas: UNICAMP/LMSPQ, 2002, 75p. Dissertação de Mestrado
- Sun, B. and Gidaspow, D. Computation of circulating fluidized-bed riser flow for the fluidization VIII benchmark test *Industrial & Engineering Chemistry Research*, n. 38, p. 787-792, 1999.

- Sundaresan, S., Eaton, J., Koch, D.L., Ottino, J.M. Appendix 2: Report of study group on disperse flow. *International Journal of Multiphase Flow*, n. 29, p. 1069-1087, 2003.
- Theologos, K.N., Nikou, I. D., Lygeros, A. I., MARKATOS, N. C. Simulation and design of fluid catalytic-cracking riser-type reactors. *AIChE Journal*, vol. 43, n. 2, 1997.
- van Landeghem, F., Nevicato, D., Pitault, L., Forissier, M., Turlier, P., Derouin, C., Bernard, J.R. Fluid catalytic cracking: modelling of an industrial riser. *applied catalysis a: general*, 138, p. 381-405, 1996.
- van Wachem, B.M.G., Schouten, J.C., van den Bleek, C.M., Krishna, R., Sinclair, J.L. Comparative analysis of CFD models of dense gas-solid systems. *AIChE Journal*, v. 47, p. 1035-1051, 2001.
- Wallis, Graham B. *One-dimensional Two-phase Flow*. New York, USA: McGraw-Hill, 1969
- Wang, L., Yang, B., Wang, Z., Lumps and kinetics for the secondary reactions in catalytically cracked gasoline *Chemical Engineering Journal*, n. 109, p. 1-9, 2005
- Whitaker, S. Advances in theory of fluid motion in porous media. *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 61, p. 14-28, 1969.
- Wincox, David C. *Turbulence Modeling for CFD* – 2nd. Edition California: DCW Industries, Inc., 1998, 537p.
- Zhang, Y. and Reese, J.M. The drag force in two-fluid models of gas-solid flows. *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 1641-1644, 2003.

Apêndice A

Notação

A.1 Variáveis

c	concentração de espécie química, kgmol/m^3
cp	calor específico, $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
C	termo de transferência interfase
Cd	coeficiente de arraste, $\text{kg}\cdot\text{m}^3/\text{s}$
C_μ, $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$	constantes do modelo <i>k-epsilon</i>
d_p	diâmetro da partícula, m
e	coeficiente de restituição
E	energia de ativação, J/mol
g	aceleração gravitacional, m/s^2
G	módulo de elasticidade, adimensional
H	entalpia, J/kg
I	tensor unitário
J	fluxo molecular
k	energia cinética turbulenta, m^2/s^2

K	constante de von Karman
ℓ	escala de comprimento turbulento, m
\dot{m}	vazão mássica, kg/s
n	vetor normal
p	pressão, Pa
q	calor, J
S	termo fonte das equações de transporte $[\phi]m^{-3}s^{-1}$
S_i	termo fonte interfacial
R	constante universal dos gases
Re	número de Reynolds
t	tempo, s
T	temperatura, K
u	velocidade, m/s
u_{mb}	velocidade mínima para formação de bolhas, m/s
u_{mf}	velocidade mínima de fluidização, m/s
u^+	velocidade próxima à parede
u_t	velocidade tangencial na parede
u_τ	velocidade de fricção
y^+	distância adimensional da parede
β	força de arraste
$\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z$	dimensões de um volume de controle
ϵ	taxa de dissipação de k, m^2/s^3
ε	fração volumétrica

Γ	difusividade
γ	coeficiente de transferência de calor entre as fases
λ	condutividade térmica, $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
μ	viscosidade, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
ϕ	variável conservativa
φ	função de desativação do catalisador
ρ	massa específica, kg/m^3
$\sigma_k, \sigma_\epsilon$	números de Prandtl turbulento
τ_w	tensão de cisalhamento na parede
ξ	fator de interpolação linear

A.2 Superescritos e Subscritos

0	tempo inicial
corr	valor de correção para a variável
h	entalpia
k	energia cinética turbulenta
l	laminar
L	posição (x, y, z)
m	quantidade de movimento
ρ	massa
t	turbulento
u	velocidade
ϕ	variável conservativa

$\alpha\beta$ transferência da fase α para a fase β

g, s fase gasosa ou particulada

i espécie química

r reação

W, E, S, N, B, T direções relativas ao centro de um volume de controle

wall parede

A.3 Siglas

CFB circulating fluid bed

CFD computational fluid dynamics

FCC fluid catalytic craking

FVM finite volume method