UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
CENTRO DE TECNOLOGIA
ESCOLA DE QUÍMICA
PROGRAMA EM TECNOLOGIA DE PROCESSOS
QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS

ALINE TROYACK FAISCA

A INFLUÊNCIA DA GEOMETRIA DE SAÍDA NA EROSÃO EM *RISERS* DE FCC: UM ESTUDO COM CFD

RIO DE JANEIRO
Março de 2013

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

Aline Troyack Faisca

A INFLUÊNCIA DA GEOMETRIA DE SAÍDA NA EROSÃO EM *RISERS* DE FCC: UM ESTUDO COM CFD

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciências em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos.

Orientador: Ricardo de Andrade Medronho

Rio de Janeiro
Março de 2013

FICHA CATALOGRÁFICA

F173i Faisca, Aline Troyack.

A Influência da Geometria de Saída na Erosão em *Risers* de FCC: um Estudo com CFD/ Aline Troyack Faisca. – Rio de Janeiro: UFRJ/ EQ, 2013.

xxii, 67f.: il.

Orientador: Ricardo de Andrade Medronho.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Programa em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, 2013.

1. *Riser*. 2. Erosão. 3. Craqueamento Catalítico. 4. Fluidodinâmica Computacional – Teses. I. Medronho, Ricardo de Andrade (Orientador). II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Escola de Química. III. Título

CDD: 532.05

A INFLUÊNCIA DA GEOMETRIA DE SAÍDA NA EROSÃO EM *RISERS* DE FCC: UM ESTUDO COM CFD

Aline Troyack Faisca

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciências.

Aprovado por:

Cesar Costapinto Santana, D.Sc.

Carlos André Vaz Junior, D.Sc.

Verônica Maria de Araújo Calado, D.Sc.

Orientado por:

Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Escola de Química
Universidade Federal do Rio de Janeiro
Março de 2013

Dedico este trabalho aos meus pais,
Angela e Alexandre,
por terem me proporcionado uma vida maravilhosa.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais por tudo que fizeram para que eu chegasse até aqui. Obrigada pelo amor, dedicação, confiança e por torcer sempre pelo meu sucesso. É difícil expressar em tão poucas palavras a enorme gratidão que sinto por vocês.

Agradeço ao meu irmão, Alan, por estar presente em todos os momentos da minha vida e por ter sido um amigo incomparável.

Agradeço ao meu namorado e grande companheiro, Anderson Valente, por ter me dado forças para completar esta etapa. Obrigada pelo seu inesgotável incentivo, carinho, paciência e principalmente amor.

Agradeço à minha família por todo o apoio. Em especial, gostaria de agradecer à minha prima Fernanda Troyack pelos anos de amizade; aos meus tios Gilmar, Sandra Leila, Solange Vânia e à Márcia Leitão pelo enorme incentivo; e aos meus avós Yolanda e Laurindo os quais possuo grande admiração. Agradeço aos meus avós Thereza (*in memoriam*) e Orlando (*in memoriam*) que mesmo distante sei que estarão sempre guiando meus passos.

Agradeço aos meus amigos Alice Vanzan, Carolina Portugal, Lívia Mattos e Diogo Cetto por todos os momentos de alegria quase que diários. Gostaria de agradecer ao Marcelo Fleming pela compreensão e material fornecido, e à Marianna Pereira por toda sua ajuda na elaboração deste trabalho.

Agradeço aos colegas do Laboratório de CFD. Em especial ao Rodrigo Petrone e Joao Phelipe pela colaboração durante a execução do trabalho, e ao Cristiano Agenor e Andrea Freitas por suas conversas de incentivo.

Por fim, agradeço ao meu orientador Ricardo Medronho pela orientação, confiança e oportunidade de aprendizado.

Resumo da Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências.

A INFLUÊNCIA DA GEOMETRIA DE SAÍDA NA EROSÃO EM *RISERS* DE FCC: UM ESTUDO COM CFD

Aline Troyack Faisca

Março de 2013

Orientador: Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

A erosão causada por partículas sólidas é um dos principais problemas em uma unidade de craqueamento catalítico. O topo do *riser* é a região mais vulnerável nesse processo, pois ocorre a mudança de direção do escoamento multifásico de gás e partículas de catalisador. No presente trabalho, diferentes configurações para a saída do topo de um *riser* foram estudadas a fim de minimizar o efeito da erosão. Fluidodinâmica computacional (CFD) foi empregada para simular o escoamento bifásico gás-sólido dentro de um *riser*. Nas simulações, foram utilizadas duas diferentes abordagens: Euler-Euler e o Modelo de Fase Densa Discreta (DDPM). O modelo de turbulência utilizado foi o modelo de duas equações k-ε. Foi observado que a saída do tipo L apresentou o mesmo fluxo de erosão médio que a saída curva, enquanto que a saída abrupta do tipo T gerou um fluxo de erosão médio duas vezes maior que a saída do tipo L. Adicionalmente, foi proposta uma nova geometria a fim de minimizar a erosão causada em topo de *risers*, porém foi verificado que ela apresentou desvantagens em seu uso quando comparada às anteriores.

Palavras-chave: *Riser*, erosão, FCC, craqueamento catalítico.

Abstract of the Master Dissertation presented to the Program on Technology of Chemical and Biochemical Process of the Chemical High School of Federal University of Rio de Janeiro as partial fulfillment of the requirements for the degree of Master on Science.

THE INFLUENCE OF THE RISER OUTLET GEOMETRY ON EROSION OF A FCC RISER: A STUDY WITH CFD

Aline Troyack Faisca

March 2013

Supervisor: Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

The erosion caused by solid particles is a major problem in catalytic cracking units. The riser outlet is the most vulnerable region to this process because a change in direction of the biphasic flow of gas and catalyst particles occurs. In this work, different configurations for a riser outlet were studied aiming at minimizing erosion. Computational Fluid Dynamics (CFD) was used to simulate the gas-solid flow in a riser. In simulations, two different approaches were used: Euler-Euler and Dense Discrete Phase Model (DDPM). The k-ε turbulence model was used to model the turbulence. It was observed that an abrupt L outlet produced the same average erosion rate as a soft outlet, while an abrupt T outlet provided an average erosion rate two times larger than the abrupt L outlet. Additionally, new riser outlet geometry was proposed in order to minimize erosion on top of risers. However it was found that this geometry presented disadvantages when compared to the other outlet geometries studied.

Keywords: Riser, erosion, FCC, catalytic cracking.

SUMÁRIO

1. Introdução 1
2. Revisão Bibliográfica 2
2.1 Descrição do Processo FCC 2
2.2 Configuração de saída do *riser* 4
2.3 Erosão 8
3. CFD 11
4. Modelagem Matemática 13
4.1 Escoamento Multifásico 13
4.1.1 Equações de Transporte 14
4.1.1.1 Abordagem euleriana 14
4.1.1.2 Abordagem DDPM 17
4.1.2 Turbulência 18
4.1.3 Teoria cinética granular 23
4.2 Lei de parede 27
4.3 Erosão 29
5. Métodos Numéricos 30
6. Metodologia 36
6.1 Geometria 36
6.2 Malha 38
6.3 Tempo total de escoamento 43
6.4 Condições das simulações 45
6.4.1 Modelagem 45
6.4.2 Condições de contorno 45
6.4.3 Propriedades das fases 47
6.4.4 Métodos de solução 48
6.5 Validação dos resultados 49
7. Resultados e Discussão 51
7.1 Resultados pela abordagem euleriana 51
7.2 Resultados pela abordagem DDPM 60
8. Conclusões 66

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Esquema de refino de petróleo. 2
Figura 2.2: Desenho esquemático típico da seção de conversão. 3
Figura 2.3: Configurações de topo de *risers*. (A) Saída simples (B) Primeira saída com cotovelo com função de separação (C) Saída com caixa e defletores da Chevron (D) Saída onde o *riser* era a própria caixa da UOP (E) Saída com sistema fechado *riser* e ciclone da Texaco. 5
Figura 2.4: (a) Saída abrupta do tipo L; (b) Saída abrupta do tipo T; (c) Curva com curto raio de curvatura; (d) Curva com longo raio de curvatura (e) Saída Mista. 5
Figura 2.5: Perfil axial da concentração de sólidos segundo Bai et al. (1992) e Martin et al. (1992). 7
Figura 2.6: Regiões que sofrem erosão severa. 9
Figura 4.1: Sub-regiões próximas à parede. 27
Figura 5.1: Representação em 2D de um volume de controle triangular e um quadrático. 30
Figura 5.2: Centroide do volume de controle. 32
Figura 5.3: Métodos de solução segregado e acoplado. 34
Figura 6.1: Configuração geométrica 3D do *riser* (saída curva). 36
Figura 6.2: Domínio dividido em 6 subdomínios. 37
Figura 6.3: Saída do tipo L. 37
Figura 6.4: Saída do tipo T. 38
Figura 6.5: Nova configuração para saída do *riser*. 38
Figura 6.6: Análise da média temporal da fração volumétrica de sólidos no teste de malha. 40
Figura 6.7: Primeira análise da queda de pressão no teste de malha. 40
Figura 6.8: Segunda análise da queda de pressão no teste de malha. 41
Figura 6.9: Malha 3 no topo e fundo do *riser* para a saída curva. 41
Figura 6.10: Contornos de Y^+ para a fase contínua. 42
Figura 6.11: Malha no topo do *riser* para a saída do tipo L. 42
Figura 6.12: Malha no topo do riser para a saída do tipo T. 43
Figura 6.13: Malha no topo do riser para nova geometria. 43
Figura 6.14: Análise do tempo de escoamento pela média temporal da fração volumétrica de sólidos. 44
Figura 6.15: Análise do tempo de escoamento pela média temporal da queda de pressão. 44
Figura 6.16: Análise do número representativo de partículas pelo fluxo de erosão máxima. 46
Figura 6.17: Distribuição radial da concentração de sólidos na elevação de 3,96 metros do *riser*. 50
Figura 6.18: Distribuição radial da concentração de sólidos na elevação de 6,34 metros do *riser*. 50
Figura 6.19: Distribuição radial da concentração de sólidos na elevação de 9,42 metros do *riser*. 50
Figura 7.1: Distribuição axial da fração volumétrica de sólidos ao longo do *riser*. 52
Figura 7.2: Distribuição axial da fração volumétrica de sólidos no topo do *riser*. 53
Figura 7.3: Distribuição radial da fração volumétrica de sólidos em 5 e 10 metros de altura do *riser* para: (a) saída curva, (b) saída do tipo L, (c) saída do tipo T e (d) nova geometria. 54
Figura 7.4: Vetores velocidade da fase particulada no topo do riser (m/s). 57
Figura 7.5: Tensão cisalhante da fase particulada no topo do *riser* (Pa). 58
Figura 7.6: Tensão cisalhante da fase particulada no topo do *riser* (escala de 0 a 100 Pa). 59
Figura 7.7: Trajetória das partículas no topo do *riser* (colorida pelo tempo de residência em segundos). 62
Figura 7.8: Fluxo de erosão causada pelas partículas no topo do *riser* (kg m^{-2} s^{-1}). 63

Figura 7.9: Fluxo de erosão causada pelas partículas no topo do *riser* (escala de 0 a 1,6e-06 kg m^{-2} s^{-1}). 64

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1: Constantes do modelo de turbulência κ-ε. 23
Tabela 4.2: Coeficientes da função do ângulo de impacto na equação 6.64. 29
Tabela 6.1 :Características das malhas empregadas no teste de malha para a saída curva. 39
Tabela 6.2: Característica da região 5 para as demais geometrias. 42
Tabela 6.3: Resumo das condições de contorno utilizadas. 47
Tabela 6.4: Propriedades das fases. 47
Tabela 6.5: Interação entre as fases. 48
Tabela 6.6: Modelagem da Teoria Cinética Granular. 48
Tabela 6.7: Resumo dos métodos de solução. 49
Tabela 7.1: Fluxo da erosão máxima no topo do *riser*. 65
Tabela 7.2: Fluxo da erosão média no topo do *riser*. 65

1. Introdução

O craqueamento catalítico fluidizado (*Fluid Catalytic Cracking*, FCC) é um processo de refino que visa transformar frações pesadas de petróleo em produtos com maior valor comercial. Uma unidade de FCC consiste basicamente de um *riser* onde ocorrem as reações de craqueamento e de um regenerador onde o catalisador é reativado. O *riser* é uma tubulação vertical com altura elevada em que a carga (normalmente gasóleo ou resíduo de vácuo) e o catalisador são introduzidos em sua base e essa mistura gás-sólido sobe em direção ao topo. Durante este percurso, a carga vaporizada penetra nos poros do catalisador ocorrendo as principais reações de craqueamento. Os gases contendo hidrocarbonetos e o catalisador que escoam na direção vertical dentro do *riser* mudam para direção horizontal seguindo para o vaso separador. Esta mudança de direção da mistura bifásica provoca erosão na superfície interna da tubulação pelo impacto das partículas do catalisador.

A erosão é um dos maiores problemas na indústria, uma vez que aumenta o custo de manutenção do equipamento e, como consequência, diminui a produtividade da unidade. Em condições de operação, a erosão em curvas é muito maior que em trechos retos devido à inércia das partículas e à turbulência local. Desta forma, é necessário o entendimento físico do fluxo das partículas do catalisador na saída do *riser* com o objetivo de identificar as regiões que sofrem maior impacto das partículas e, com isso prever as áreas que possuem maior tendência à erosão.

O objetivo deste trabalho é analisar o comportamento das partículas com características dos catalisadores das unidades de FCC em topo de *riser*, e com isso estudar a erosão provocada na tubulação nesta região. Também será avaliada a influência de diferentes configurações de saída de *risers* normalmente utilizadas na indústria na erosão de topo de *risers*. E por fim, será proposta uma nova configuração de saída a fim de reduzir esta erosão. Para o desenvolvimento deste trabalho, será utilizada a Fluidodinâmica Computacional (CFD), empregando o pacote de CFD da ANSYS.

Nos próximos capítulos serão apresentados a metodologia utilizada neste trabalho e os resultados obtidos com as simulações realizadas. No capítulo 2, será apresentada a revisão bibliográfica incluindo a descrição do processo FCC, a apresentação de alguns estudos referente às configurações de saída utilizadas em *risers* e fundamentos teóricos relacionados à erosão. No capítulo 3, serão apresentadas as etapas de simulação em CFD bem como os programas utilizados em cada etapa. No capítulo 4, será definida a modelagem matemática utilizada nas equações de transporte, nas equações de turbulência, nas equações de fechamento e na equação da erosão. No capítulo 5, serão apresentados os métodos numéricos aplicados na resolução deste trabalho, incluindo o método dos volumes finitos. A metodologia utilizada no desenvolvimento das simulações deste trabalho será apresentada no capítulo 6 onde se incluem a geração da geometria e da malha, e as definições das condições de simulação. No capítulo 7, serão apresentados os resultados obtidos com as diversas simulações realizadas onde serão demonstrados os perfis da fração volumétrica e da velocidade das partículas, os contornos da tensão cisalhante, a trajetória das partículas e o fluxo de erosão para cada geometria estudada. Também será feita uma comparação com dados experimentais para validação do modelo utilizado. Finalmente, no capítulo 8, serão apresentadas as conclusões deste trabalho e algumas sugestões para trabalhos futuros.

2. Revisão Bibliográfica

2.1 Descrição do Processo FCC

O processo de craqueamento catalítico surgiu da necessidade de produção de gasolina em qualidade e quantidade suficiente de modo a atender à crescente demanda deste combustível, em face ao crescimento da indústria automobilística. Atualmente, o craqueamento catalítico é o processo de refino largamente difundido em todo o mundo devido a sua capacidade de transformar frações pesadas do petróleo (gasóleos e resíduos) em derivados mais nobres (gasolina, GLP) aumentando em muito os lucros da refinaria (Figura 2.1). Além disso, possui uma grande flexibilidade operacional, ou seja, contribui eficazmente para o ajuste da produção de uma refinaria com as necessidades do mercado consumidor.

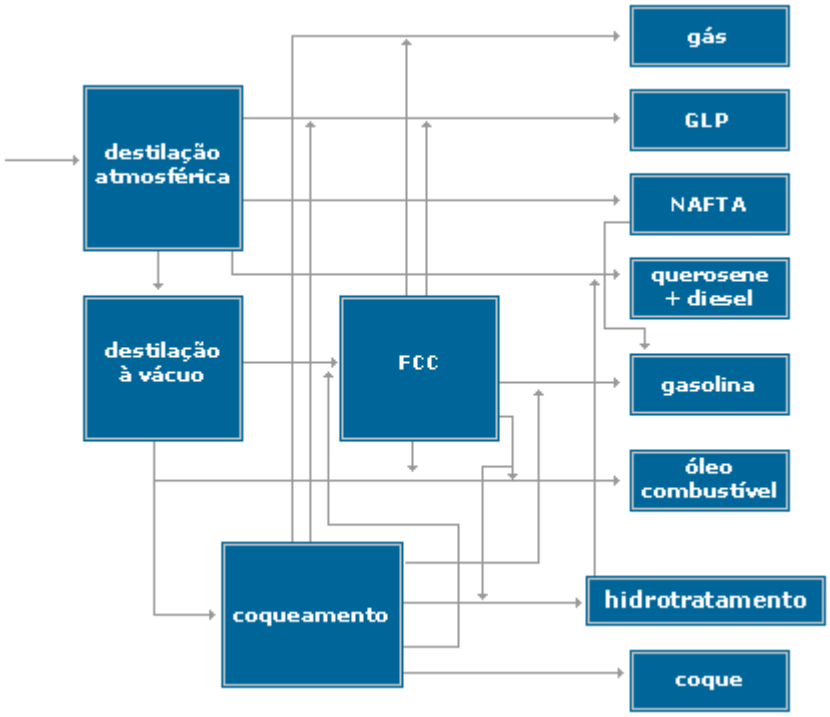

Figura 2.1: Esquema de refino de petróleo.

As unidades de craqueamento catalítico utilizam um sistema de circulação de sólidos empregando um ou mais leitos fluidizados chamado de leito fluidizado circulante (*Circulating Fluidized Bed*, CBF). Este sistema é bastante empregado quando o processo possui algumas características específicas como a rápida conversão dos hidrocarbonetos, deposição de coque na superfície do catalisador e uma grande quantidade de catalisador a ser regenerado. Uma unidade de FCC consiste em quatro seções principais:

a) seção de conversão: onde ocorrem as reações do processo (Figura 2.2);

b) seção de gases de combustão: local onde ocorre a adequação dos gases de combustão antes da liberação para a atmosfera;

c) seção de fracionamento: responsável pelo fracionamento dos produtos da reação;

d) seção de recuperação de gases: onde separa as frações leves do topo da fracionadora.

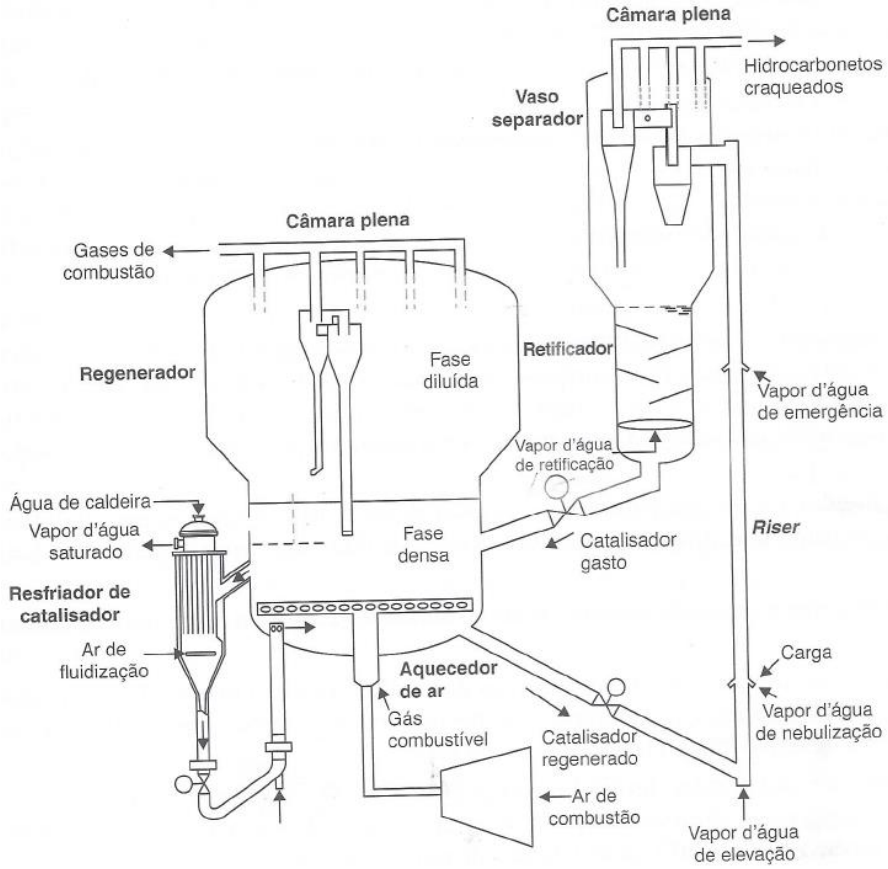

Figura 2.2: Desenho esquemático típico da seção de conversão.

A carga composta pelo gasóleo de vácuo antes de entrar na seção de conversão é aquecida para atingir a temperatura desejável em torno de 150 a 260ºC. Esse aquecimento é feito por uma bateria de trocadores de calor e, em alguns casos, também se utiliza um forno. Após o aquecimento, a carga é enviada para a seção de conversão sendo introduzida um pouco acima da base do *riser*.

O catalisador reativado aquecido, com temperaturas em torno de 650 a 710ºC, entra na lateral do *riser*. A carga em contato com catalisador em alta temperatura é vaporizada e carrega as partículas sólidas do catalisador em alta velocidade até o topo do *riser*. Dentro do *riser*, a carga vaporizada penetra nos poros do catalisador onde ocorrem as reações de craqueamento, no mesmo tempo em que o coque é depositado na superfície do catalisador, desativando-o. A velocidade de escoamento é consideravelmente alta, com isso, o tempo de residência é em torno de 2 a 3 segundos suficientes para que ocorra a maioria das reações desejadas.

O *riser* termina dentro de um vaso separador acoplado a um ou mais ciclones de separação rápida. A função dos ciclones é promover a rápida separação entre as partículas do catalisador desativado e os gases a fim de evitar as reações secundárias de formação do coque. Nos ciclones, as partículas do catalisador são lançadas para o fundo do vaso separador e os gases sobem em direção ao topo do vaso.

O efluente gasoso é enviado para a seção de fracionamento onde os produtos são separados em uma torre de destilação chamada de fracionadora. Os produtos da fracionadora são: gás úmido contendo hidrocarbonetos leves, nafta não estabilizada contendo nafta e GLP, nafta pesada, óleo leve de reciclo e óleo decantado. O gás úmido do topo da fracionadora é enviado para seção de recuperação de gases para separar o gás combustível, gás liquefeito e nafta de craqueamento por meio de operações de destilação, absorção e retificação.

O catalisador desativado, ainda contendo uma quantidade considerável de produtos gasosos, se acumula no fundo do vaso separador e é enviado para uma retificadora com vapor d'água a fim de recuperar hidrocarbonetos gasosos remanescentes. Na saída da retificadora, o catalisador é enviado ao regenerador através de um tubo chamado de *stand-pipe*. No regenerador, as partículas do catalisador entram em contato com ar de combustão, e o coque depositado na superfície do catalisador é queimado se transformando em gases de combustão ao mesmo tempo em que o catalisador é reativado. Como a reação é exotérmica, a temperatura de saída do catalisador do regenerador se situa entre 650 e 730ºC. O catalisador acumulado no fundo do regenerador retorna ao *riser* por outro *stand-pipe*.

2.2 Configuração de saída do *riser*

Em antigas unidades de FCC, a saída do *riser* não possuía nenhuma função de separar os produtos do catalisador, pois se acreditava que as reações ocorriam no vaso separador (chamado de reator) e o *riser* servia apenas como uma linha de transferência. Por isso, o *riser* possuía uma saída simples apenas para distribuir as partículas de catalisador no vaso separador.

As primeiras configurações de saída do *riser* com função de separação forçavam a mistura produtos e catalisador a sair do *riser* verticalmente para baixo por meio de um cotovelo ou uma caixa colocada acima da saída do *riser (*Figura 2.3). Assim, o gás ou qualquer particulado fino para entrar no ciclone deveria mudar o sentido do fluxo em 180º e, as partículas do catalisador continuavam escoando para baixo até se depositar no vaso separador. Porém, foi observado que o gás continuava o fluxo descendente no vaso separador aumentando seu tempo de residência. Modificações foram feitas na caixa da saída do *riser* para aumentar a eficiência de separação e diminuir o tempo de residência do gás. A Chevron adicionou defletores logo abaixo da saída da caixa forçando seu rápido contato com os produtos, assim os sólidos tenderiam a ficar em contato com a superfície do defletor separando do gás.

A UOP propôs uma configuração onde o próprio vaso separador era usado como caixa e a saída do *riser* era aberta acima da entrada dos ciclones. Após o contato com o topo do vaso separador, as partículas desciam pelas paredes do vaso separador e o gás entrava nos ciclones. Como o fluxo descendente das partículas do catalisador era feita pelas paredes do vaso separador, todos os equipamentos projetados em seu interior sofriam um processo erosivo e deviam ser protegidos.

Outras configurações foram desenvolvidas a partir dos anos 70 com a finalidade de diminuir o tempo de residência do gás no vaso separador. Empresas como a UOP, Kellogg, Móbil e Texaco desenvolveram diversas configurações de sistema fechado onde basicamente a terminação do *riser* é conectada na entrada de um ciclone e, com isso o gás era rapidamente separado das partículas do catalisador sendo enviado para fora do vaso separador enquanto que as partículas eram enviadas para o fundo do vaso separador.

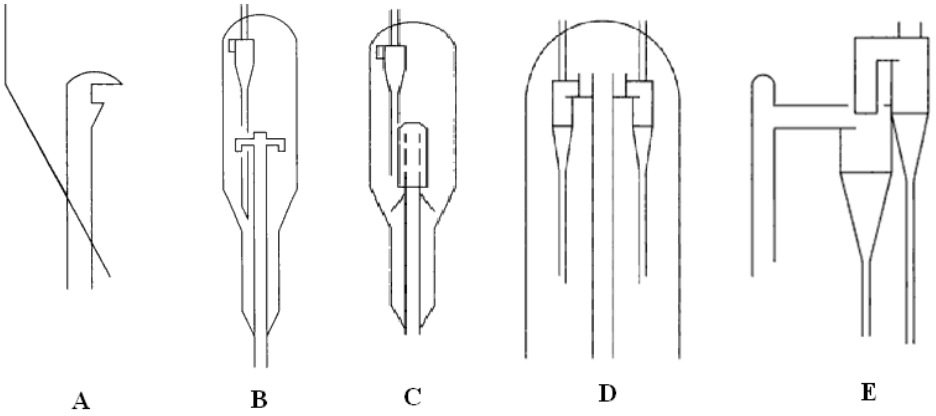

Figura 2.3: Configurações de topo de *risers*. (A) Saída simples (B) Primeira saída com cotovelo com função de separação (C) Saída com caixa e defletores da Chevron (D) Saída onde o *riser* era a própria caixa da UOP (E) Saída com sistema fechado *riser* e ciclone da Texaco.

Atualmente, um dos mais modernos tipos de *riser* é composto de uma tubulação vertical que pode ser projetada interna ou externa ao vaso separador. A configuração interna possui a vantagem de minimizar o fluxo horizontal dentro do *riser*, pois a saída do *riser* é dada dentro do próprio vaso separador. Já a configuração externa permite o uso de uma tubulação de parede fria (*cold wall design)* em todo o *riser*, minimizando o custo da tubulação.

Atualmente, a maioria das refinarias utiliza a configuração externa, e neste caso, os gases e as partículas do catalisador que ao longo do *riser* escoam na direção vertical mudam para a direção horizontal seguindo para o vaso separador. Esta mudança de direção no topo da saída do *riser* pode ser feita por diferentes tipos de configurações.

As configurações mais comuns são definidas como saídas abruptas, curvas ou mistas como mostradas na Figura 2.4. Nas saídas abruptas do tipo L, a mudança no sentido é feita por um cotovelo que possui um ângulo de 90º, e nas saídas abruptas do tipo T, existe uma extensão acima do cotovelo. Em saídas curvas, a mudança no sentido é feita por um cotovelo com uma curvatura. Já nas saídas mistas, o lado interno possui uma curvatura e o lado externo possui um ângulo de 90º (MEER et al, 2000).

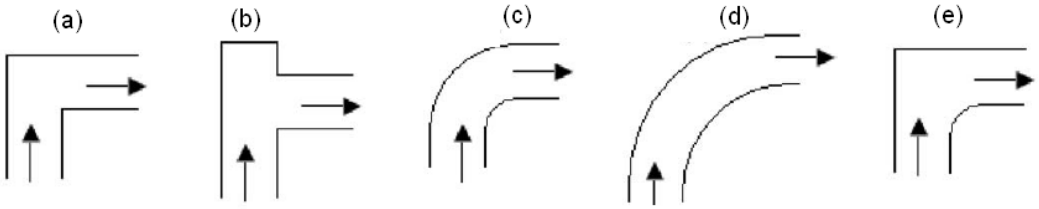

Figura 2.4: (a) Saída abrupta do tipo L; (b) Saída abrupta do tipo T; (c) Curva com curto raio de curvatura; (d) Curva com longo raio de curvatura
(e) Saída Mista.

Os diferentes tipos de acessórios utilizados na indústria para mudança de direção do fluxo dos fluidos causam efeitos diferentes no comportamento dos sólidos. Um parâmetro

bastante comum para investigar a propagação dos efeitos da configuração de saída do *riser* é o perfil radial e axial da fração volumétrica dos sólidos (GUPTA e BERRUTI, 2000).

O perfil radial da fração volumétrica de sólidos foi estudado por diferentes autores para um leito fluidizado circulante com seção circular (BAI et al, 1992; MARTIN et al, 1992; ISSANGYA et al, 1999; PÄRSSINEN e ZHU, 2001; LACKERMEIER e WERTHER, 2002). Os autores encontraram um perfil chamado de *core-annulus*, o qual possui por uma região central com baixa concentração de sólidos e uma região anular próxima à parede com uma maior concentração dos sólidos. Na região central as partículas de catalisador são arrastadas pelo fluxo de gás ascendente e na região anular tanto as partículas quanto o gás ficam praticamente estagnados devido à condição de não deslizamento da parede.

O perfil axial da concentração de sólidos ao longo do *riser*, de uma forma geral, possui uma região diluída com baixa concentração de sólidos no topo e uma região densa com uma concentração de sólidos relativamente maior próximo ao fundo do *riser*. Os parâmetros operacionais como a razão de circulação dos sólidos, as propriedades das partículas (densidade e tamanho) e a configuração de entrada e saída do *riser* afetam diretamente este perfil (LIM et al,1995).

A influência da configuração de saída do *riser* no perfil axial da concentração de sólidos foi estudada experimentalmente por diferentes autores e as conclusões foram conflitantes em relação a este assunto.

Alguns autores afirmam que o aumento da concentração de sólidos ocorre somente no topo do *riser*, enquanto que na região mais abaixo do topo a distribuição de sólidos não sofre nenhum efeito (BAI et al, 1992; HARRIS et al, 2003). Bai e outros (1992) concluíram que este efeito ocorre somente em *risers* com configuração de saída abrupta do tipo T. Verificaram que nesta configuração os sólidos se separam do gás por inércia se chocam no topo do *riser* enquanto o gás flui através da curvatura. Após o impacto, parte dos sólidos é misturada com o gás e segue para o vaso separador. A outra parte dos sólidos desce uma pequena distância perto da parede do *riser* provocando uma troca de momento intensa com o fluxo de gás subindo. Com isso, os autores concluíram que o perfil de concentração de sólidos para saídas abruptas é um perfil C com uma maior concentração de sólidos no topo e no fundo do *riser*. Adicionalmente, os autores não encontraram um aumento da concentração de sólidos no topo do *riser* com saída curva e concluíram que, para esta saída, o perfil é exponencial com uma maior concentração de sólidos apenas no fundo do *riser*.

Outros estudiosos consideram que o comprimento do *riser* que sofre efeito da geometria de saída no comportamento axial da concentração de sólidos é estendido até o fundo do *riser* (MARTIN et al, 1992, LIM et al, 1995). Martin e outros (1992) concluíram que em *riser*s com a saída abrupta do tipo T em escala laboratorial e industrial, após o impacto das partículas com a parede do topo, a maior parte dos sólidos desce por uma longa distância e, com isso, aumentam a concentração de sólidos em todo *riser*.

A comparação entre os perfis de concentração de sólidos ao longo do *riser* definidos por BAI et al (1992) e MARTIN et al (1992) está apresentada na Figura 2.5.

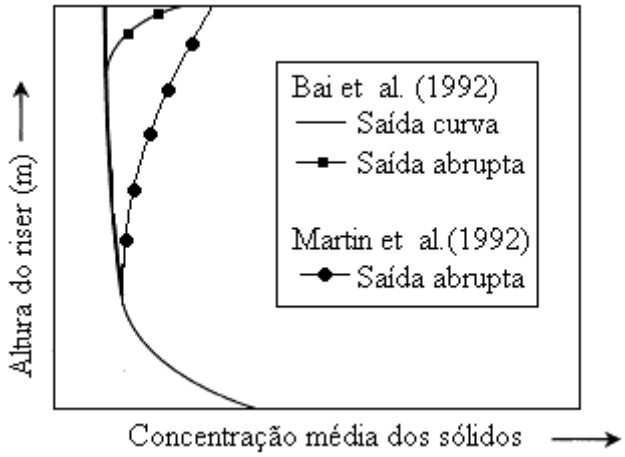

Figura 2.5: Perfil axial da concentração de sólidos segundo Bai et al. (1992) e Martin et al. (1992).

Pugsley e outros (1997) sugeriram que a distância de propagação do efeito de saída depende do fluxo mássico de sólidos. Em seu trabalho, os autores avaliaram o efeito de saída para um *riser* com configurações de saída do tipo T e concluíram que para o riser operando com baixo fluxo mássico de sólidos, o aumento da concentração de sólidos ocorre somente perto do topo. Porém, com o aumento do fluxo mássico de sólidos, o aumento da concentração de sólidos se propaga para o fundo do *riser*. Já para a saída curva, não verificaram um aumento considerável da concentração de sólidos no topo do *riser*.

Pärssinen e outros (2001) estudaram um *riser* com saída curva operando com alto fluxo mássico de sólidos (acima de 300 kg/m²s), diferentemente dos autores citados anteriormente que estudaram *risers* operando com baixo fluxo mássico de sólidos (geralmente abaixo de 100 kg/m²s). Em seu estudo, Pärssinen e colaboradores identificaram que o *riser* pode ser dividido em quatro regiões: o fundo com uma alta concentração de sólidos, uma região intermediária, uma região diluída com uma pequena concentração de sólidos, e o topo onde existe uma região com concentração de sólidos um pouco maior que a região diluída.

Wu e outros (2010) também concluíram que o perfil axial de fração volumétrica de sólidos para a saída curva é um perfil exponencial e para a saída abrupta do tipo T é um perfil C. Além disso, os autores notaram que a concentração de sólidos ao longo de todo *riser* para a saída do tipo T é quase o dobro quando comparada com a saída curva.

Em contrapartida, Lackermeier e Werther (2002) não verificaram nenhum aumento da concentração de sólidos na região de topo do *riser* usando saídas abruptas do tipo L e do tipo T. Os autores concluíram que o aumento da concentração perto da região de saída é devido à escala de bancada utilizada nos trabalhos de outros estudiosos, enquanto que em seu trabalho foi utilizado um *riser* de escala piloto.

Harris e outros (2003) descreveram um novo mecanismo físico para explicar o movimento dos sólidos na região de topo do *riser* com saída do tipo L. Em seu trabalho, sugeriram que quando os sólidos seguem uma curva na saída, a aceleração centrífuga é balanceada contra o componente de aceleração devido à gravidade atuando no centro da curvatura. Na região onde os sólidos tendem reduzir sua velocidade devido à geometria da saída, a gravidade se sobrepõe à aceleração centrífuga causando mudança na trajetória e criando zonas de recirculação na curva. Os autores sugeriram que as zonas de recirculação de sólidos também ocorrem quando os sólidos se separam das linhas de fluxo de gás devido à inércia e atingem a parede do topo do *riser*.

Além de dados experimentais, as ferramentas da Fluido Dinâmica Computacional (CFD) tem sido bastante empregadas nos últimos anos para predizer com maiores detalhes o escoamento dos sólidos dentro de *risers*.

De Wilde e outros (2003), utilizando as técnicas de CFD, avaliaram os efeitos de saída em um *riser* de escala industrial com saída abrupta do tipo T. Em seu estudo, foi verificado que parte dos sólidos não segue o fluxo para a saída do *riser*. Devido à inércia e a configuração da saída do *riser*, os sólidos atingem a parede do topo do *riser* e são refletidos formando um vórtice nesta região. Com a formação do vórtice, notou-se que no lado oposto ao da saída do *riser* ocorre um fluxo descendente tanto de sólido quanto de gás, o que aumenta a resistência da mistura gás-sólido que está subindo no *riser* e, com isso, gera um aumento da fração volumétrica de sólidos naquela região.

Van Engelandt e outros (2011) simularam um *riser* com saída abrupta do tipo L e do tipo T validando seus resultados com dados experimentais. Assim como De Wilde e outros (2003), foi observada a formação de um vórtice em macro escala induzido pela configuração de saída do tipo T e, consequentemente, um aumento da fração volumétrica de sólidos na extensão do *riser*. Para a saída do tipo L, também observaram a formação do vórtice, porém em menor escala.

2.3 Erosão

A necessidade de mudança de direção do escoamento gás-sólido no topo do *riser* promove a separação das partículas por inércia do fluxo do gás resultando no impacto das partículas com a parede do topo do *riser*. Como consequência, a energia das partículas é transferida para zona de impacto e a tubulação começa a se desgastar. Este processo, no qual a superfície sofre impacto das partículas sólidas, é geralmente chamado de erosão. Um dos mais importantes problemas na indústria relacionados à erosão ocorre em leitos fluidizados utilizados no processo de craqueamento catalítico (FINNIE, 1960).

A erosão nas paredes do *riser* diminui o tempo de vida na região danificada, necessitando de uma troca constante da tubulação na região de desgaste, aumentando o custo de manutenção e causando perda na produtividade. Com isso, é extremamente necessário detectar os locais na tubulação que apresentam erosão mais severa nas condições de operação do sistema (NJOBUENWU e FAIRWEATHER, 2012).

A erosão é um fenômeno altamente complexo, pois depende das condições operacionais (como a velocidade do fluido e o fluxo das partículas), das propriedades do fluido, das propriedades da partícula, do material da parede da tubulação e da geometria da tubulação e acessórios (CHEN et al, 2006). No caso dos *risers*, as condições de operação como a velocidade de entrada e o regime do escoamento operam em uma faixa restrita devido à grande influência na conversão dos produtos e, com isso se torna difícil alterar as condições operacionais para contornar os problemas causados pela erosão. As propriedades das partículas também são limitadas aos catalisadores para as reações de craqueamento. Logo, para tentar minimizar os efeitos da erosão causada em *risers*, alterações na superfície da tubulação são normalmente utilizadas como alternativa.

Uma alteração na superfície da tubulação bastante comum é promover modificações na geometria de saída do *riser* visando alterar a trajetória das partículas do catalisador e, consequentemente, alterar a dinâmica do impacto das partículas na superfície. Como a erosão é altamente dependemente da dinâmica do impacto das partículas, seus efeitos podem ser minizados dependendo da geometria utilizada.

Na literatura foram encontrados diversos estudos relacionados com a erosão em geometrias complexas (AMEZCUA et al, 2007; SONG et al, 2013). Amezcua e colaboradores (2007) estudaram a erosão causada por partículas sólidas em uma extremidade de uma turbina empregando CFD. Constataram que o fluxo de sólidos é mais sensível para previsão da erosão que o fluxo do gás. Adicionalmente, os autores verificaram que o aumento do tamanho da partícula diminui consideravelmente a erosão.

Song e outros (2013) investigaram a erosão causada pelo escoamento de água com partículas na entrada de uma bomba a jato. Diferentes configurações na entrada foram analisadas, entre elas uma nova geometria com uma curva de 90º. Concluíram que a utilização da geometria curva apresenta desvantagens para prevenção da erosão quando comparada com as configurações típicas.

Outros estudos relacionados com a erosão em curvas foram encontrados na literatura (ZHANG et al, 2012; TAN et al, 2012), porém com escoamento de uma mistura gás/fluido utilizada na indústria de concreto.

Njobuenwu e Fairweather (2012) estudaram a erosão causada em curvas pelo escoamento de gás carregado com partículas sólidas e compararam cinco diferentes modelos de erosão (modelo de Grant e Tabakoff, modelo de Menguturk e Sverdrup, modelo E/CR, modelo de Oka, Okamura e Yoshida e o modelo de Huang). Concluíram que todos os modelos estudados se ajustaram aos dados experimentais e que os resultados obtidos por CFD são capazes de prever os locais que sofrem maior efeito da erosão.

Entretanto, foram encontrados poucos trabalhos analisando a erosão causada em geometrias semelhante às saídas do *riser* (PARSLOW et. al, 1999; CHEN et. al, 2006). Parslow e outros (1999) investigaram a erosão causada por partículas de areia em uma tubulação com saída abrupta do tipo T. Os autores analisaram a erosão experimentalmente através do mapa visual em que a superfície é coberta por camadas de diferentes cores e compararam com os resultados obtidos em CFD. Avaliando diferentes fluxos de areia e velocidade de gás, os autores identificaram quatro regiões que possuíam a erosão mais severa, como mostra a Figura 2.6.

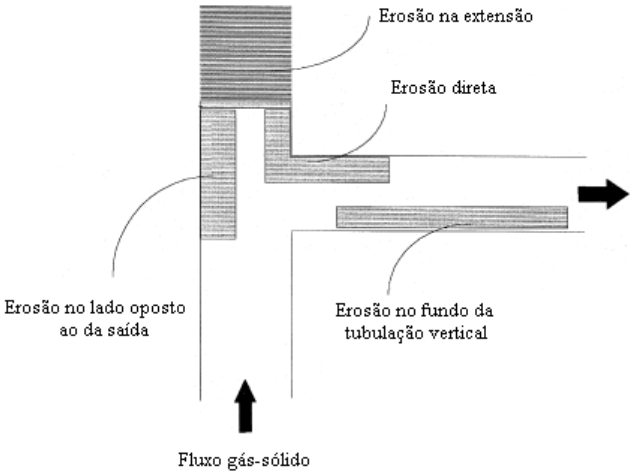

Figura 2.6: Regiões que sofrem erosão severa.

A região de erosão direta localizada entre a extensão do topo e a tubulação horizontal foi a que apresentou a maior erosão em todos os experimentos. No lado oposto ao da saída do *riser*, a erosão é dominante quando utilizado altos fluxos de sólidos enquanto que a erosão na

região da extensão do topo ocorre com baixo fluxo de sólidos. A erosão na região do fundo da tubulação horizontal é alterada dependendo do fluxo de sólidos utilizado.

Chen e outros (2006) estudaram experimentalmente e através de CFD as saídas curva e abrupta do tipo T comparando a erosão causada por partículas de areia. Os autores verificaram que na saída do tipo T, a erosão ocorre em duas regiões claramente definidas: no final da extensão e na região entre a extensão e a tubulação horizontal. O final da extensão é a região que ocorreu a máxima erosão enquanto que na região entre a extensão e a tubulação horizontal ocorreu uma erosão considerável. Na saída curva, altas erosões ocorreram na projeção da região de entrada. Constatou-se que apesar das saídas do tipo T ser usualmente utilizadas para redução da erosão na indústria ao invés das saídas curvas, nem sempre apresentam menor erosão. Os autores concluíram que a erosão relativa entre as duas configurações depende diretamente do diâmetro do *riser* e do tamanho das partículas sólidas.

3. CFD

O termo Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics*, CFD) é definido como um conjunto de técnicas de simulação computacional usadas para resolver numericamente as equações de conservação de massa, momento e energia. Desta forma, o CFD é capaz de predizer os fenômenos físicos e físico-químicos que ocorrem em escoamentos.

A utilização de CFD tem crescido muito nos últimos anos e está sendo aplicado em diversas áreas como aerodinâmica, automotiva, industrial, etc. Na engenharia, está se tornando uma ferramenta cada vez mais importante em projetos de equipamentos e uma poderosa ferramenta de pesquisa. O CFD também é bastante utilizado para prever o comportamento do fluido em novas geometrias, pois tem a capacidade de prever o escoamento do fluido no interior do equipamento somente com o conhecimento da geometria e de parâmetros operacionais.

Algumas vantagens do uso de CFD em relação aos métodos experimentais incluem a redução substancial do tempo e do custo de novos projetos, a possibilidade de estudar sistemas com escoamento e geometria complexos e a obtenção de resultados de forma detalhada. No entanto, embora os métodos computacionais ofereçam diversas vantagens, resultados experimentais são de extrema importância na validação dos resultados simulados. Isto porque, mesmo que um caso simulado resulte em dados coerentes do ponto de vista numérico, pode se tratar de um resultado inconsistente com a realidade.

Os pacotes comerciais de CFD são geralmente divididos em cinco etapas:

- geração da geometria;
- geração da malha;
- pré-processamento;
- solver;
- pós-processamento.

Este trabalho foi desenvolvido utilizando os seguintes softwares da ANSYS na versão 13.0: DESIGN MODELER para a geração da geometria, MESHING para a geração da malha, FLUENT para o pré-processamento e *solver*, e CFD-POST e FLUENT para o pós-processamento.

A primeira etapa consiste em determinar o tipo de geometria (2D ou 3D) em que se deseja a solução do problema. Uma vez isto definido, a geometria é criada no DESIGN MODELER através de componentes geométricos (pontos, curvas, superfícies e volumes). As geometrias utilizadas no desenvolvimento deste trabalho serão definidas na seção 6.1.

Após a criação da geometria computacional, as superfícies de entrada e saída do processo serão definidas no MESHING. A etapa de geração da malha consiste na divisão do volume de controle (geometria) em elementos, onde serão empregados métodos numéricos na solução das equações de transporte. As malhas utilizadas serão apresentadas na seção 6.2.

O pré-processamento é a etapa onde é especificada a modelagem física do problema no FLUENT para que o *solver* possa usá-las. Nesta etapa, são introduzidas as propriedades físicas dos fluidos, os modelos físicos e químicos coerentes com o tipo de escoamento a ser estudado e as condições de contorno. No capítulo 4 serão demonstradas as equações de

conservação, turbulência, fechamento e erosão; e na seção 6.4 serão definidas a modelagem, as condições de contorno e as propriedades dos fluidos utilizadas neste trabalho.

As equações de conservação de massa, momento e energia são equações diferenciais parciais não lineares. Para obter a solução numérica destas equações utilizam-se técnicas numéricas que normalmente se baseiam nos seguintes passos: discretização das equações, linearização, definição da estratégia e solução do sistema das equações algébricas resultante.

Existem várias técnicas numéricas de discretização que se diferenciam quanto à forma com que as variáveis são aproximadas e ao procedimento de discretização. Porém, todas elas fornecem um sistema de equações algébricas que necessita de uma metodologia numérica para serem resolvidas. No capítulo 5 serão apresentadas as técnicas de discretização e metodologias para solução de sistemas lineares; e na seção 6.4 será definida a modelagem numérica utilizada no solver do FLUENT.

A etapa de pós-processamento possui uma interface gráfica que facilita o entendimento dos fenômenos físicos presentes e a análise dos resultados numéricos obtidos. Algumas ferramentas de visualização estão disponíveis nesta etapa como vetores, curvas de nível, linhas de corrente, trajetória de partículas, etc. Os resultados deste trabalho serão apresentados no capítulo 7.

4. Modelagem Matemática

4.1 Escoamento Multifásico

Atualmente existem duas abordagens numéricas no FLUENT da ANSYS para o cálculo de um escoamento multifásico: euler-lagrange e euler-euler.

Na abordagem euler-lagrange, ou formulação do modelo de fase discreta (*dense phase model*, DPM), a partícula é tratada através de uma trajetória individual. As equações de movimento de Newton são resolvidas para cada partícula. O fluido é tratado como uma fase contínua sendo resolvido pelas equações de conservação de Navier-Stokes. Este modelo presume que a fase dispersa ocupe uma pequena fração volumétrica, ou seja, necessita que a fase dispersa esteja suficientemente diluída com efeitos de colisão entre as partículas negligenciáveis.

Já na abordagem euler-euler, ou formulação euleriana, as duas fases são tratadas matematicamente como contínuas. As equações de conservação de Navier-Stokes são aplicáveis tanto para a fase contínua quanto para a fase particulada e o acoplamento entre elas é feito pela pressão e pelo coeficiente de troca de interface. Para esta abordagem, o comportamento que as partículas adquirem ao serem fluidizadas é o comportamento pseudofluido, ou seja, as partículas apresentam tanto propriedades como comportamento dinâmico semelhante ao dos fluidos. Uma das propriedades impostas às partículas que precisa ser determinada para solução da formulação euleriana é a viscosidade que pode ser obtida por meio da teoria cinética granular. Esta formulação é indicada para leitos fluidizados e para *risers* onde o valor da fração volumétrica da fase particulada excede o limite recomendado na abordagem euler-lagrange.

Em geral, a abordagem euleriana com a teoria cinética granular é a modelagem mais utilizada em escoamento de gás sólido para estudos em *risers* (DE WILDE et al, 2003; HARTGE et al, 2009; VAN ENGELANDT et al, 2011; LOPES et al, 2012). A grande vantagem de utilizar abordagem euleriana é o menor custo computacional empregado em escoamentos de alta concentração de partículas como ocorre no escoamento dentro do *riser*. Entretanto, modelos de erosão devem ser implementados para estimar a incidência e reflexo das partículas nas superfícies para a utilização da abordagem euleriana no cálculo da erosão (LEE et al, 2002).

A abordagem euler-lagrange normalmente é utilizada em estudos relacionados à erosão, pois fornecem diretamente a velocidade e o ângulo de impacto das partículas nas superfícies (CHEN et al, 2006). Porém, a aplicação da abordagem euler-lagrange neste trabalho para o cálculo da erosão se tornaria impraticável, pois diversas equações deveriam ser resolvidas devido a um grande número de partículas e consequentemente haveria um grande esforço computacional para a solução deste problema (BASTOS, 2005).

Uma nova formulação disponível no FLUENT da ANSYS é o modelo de fase densa discreta (*dense discrete phase model*, DDPM) que utiliza uma abordagem híbrida entre as abordagens euler-lagrange e euler-euler. Enquanto que na formulação euler-lagrange a fração volumétrica da fase discreta não é considerada, na abordagem DDPM a fração volumétrica é incorporada nas equações da fase contínua. Com isso, a abordagem DDPM pode ser usada em escoamentos concentrados onde a fração volumétrica da fase discreta é maior que 10%. A fração volumétrica da fase discreta utilizada nas equações de conservação da fase contínua é calculada pela abordagem euler-lagrange. As interações entre as partículas podem ser dadas

pela teoria cinética granular. A abordagem DDPM é indicada em problemas com ciclones, leitos fluidizados e *risers*.

Cloete e outros (2010) constataram que esta abordagem possui grandes vantagens em relação à abordagem euler-euler normalmente utilizada. Os autores concluíram que na abordagem DDPM o gasto computacional é cerca de dez vezes menor quando comparado com a abordagem euler-euler.

Neste trabalho, foram utilizadas as abordagens euler-euler e DDPM para a solução do problema de escoamento bifásico gás/sólido. As equações utilizadas em cada abordagem serão apresentadas a seguir.

4.1.1 Equações de Transporte

4.1.1.1 Abordagem euleriana

Na formulação euleriana, as equações de conservação de massa e momento são resolvidas para cada fase (gasosa e particulada).

Equação de conservação da massa ou equação da continuidade

As equações de conservação da massa para a fase gasosa e particulada podem ser dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla.(\alpha_g \rho_g \vec{u}_g) = (\dot{m}_{sg} - \dot{m}_{gs}) + S_g^{\rho} \tag{4.1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla.(\alpha_s \rho_s \vec{u}_s) = (\dot{m}_{gs} - \dot{m}_{sg}) + S_s^{\rho} \tag{4.2}$$

Os subscritos g e s indicam que o termo é aplicado para fase gasosa e particulada, respectivamente. A variável α representa a fração volumétrica, ρ a massa específica, $\vec{u}$ o vetor velocidade e $\dot{m}$ o fluxo mássico. Os termos S_g^{ρ} e S_s^{ρ} representam o termo fonte para cada fase, e $\dot{m}_{sg}$ e $\dot{m}_{gs}$, a transferência de massa entre as fases. No presente estudo, estes termos são nulos, pois não ocorre transferência de massa entre as fases gasosa e particulada.

Equação de conservação do momento

A equação da conservação do momento para a fase gasosa é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \vec{u}_g) + \nabla.(\alpha_g \rho_g \vec{u}_g \vec{u}_g) = -\alpha_g \nabla p + \nabla.\bar{\bar{\tau}}_g + \alpha_g \rho_g \vec{g} + \vec{F}_g \tag{4.3}$$

em que p é a pressão estática e $\bar{\bar{\tau}}_g$ é o tensor tensão da fase gasosa. A força do campo gravitacional é representada por $\rho_g \vec{g}$, sendo $\vec{g}$ a aceleração da gravidade. As forças externas representadas por $\vec{F}_g$ serão descritas mais adiante.

O tensor tensão da fase gasosa pode ser calculado pela equação:

$$\bar{\bar{\tau}}_g = \alpha_g \mu_g (\nabla \vec{u}_g + \nabla \vec{u}_g^T) + \alpha_g (\lambda_g - \frac{2}{3}\mu_g) \nabla . \vec{u}_g \bar{\bar{I}} \tag{4.4}$$

em que μ_g e λ_g representam a viscosidade cisalhante e a viscosidade global da fase gasosa. O segundo termo do lado direito da equação representa o efeito da dilatação do volume sendo $\bar{\bar{I}}$ o tensor unitário.

A equação da conservação de momento para a fase particulada pode ser dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \vec{u}_s) + \nabla.(\alpha_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) = -\alpha_s \nabla p - \nabla p_s + \nabla . \bar{\bar{\tau}}_s + \alpha_s \rho_s \vec{g} + \vec{F}_s \tag{4.5}$$

em que p_s é a pressão dos sólidos determinado pela teoria cinética granular, seção 4.3 (equação 4.59). O tensor tensão da fase particulada, $\bar{\bar{\tau}}_s$, é dado por:

$$\bar{\bar{\tau}}_s = \alpha_s \mu_s (\nabla \vec{u}_s + \nabla \vec{u}_s^T) + \alpha_s (\lambda_s - \frac{2}{3}\mu_s) \nabla . \vec{u}_s \bar{\bar{I}} \tag{4.6}$$

As variáveis μ_s e λ_s são a viscosidade cisalhante e a viscosidade global da fase particulada determinadas pela teoria cinética granular, seção 4.3 (equações 4.51 e 4.53).

<u>Termos Fonte da equação de conservação de momento</u>

Os termos $\vec{F}_g$ e $\vec{F}_s$ das equações de conservação de momento (equações 4.3 e 4.5) incluem a força de troca de momento e as forças externas. As forças externas podem ser representadas pela força de sustentação ($\vec{F}_{lift}$), força de massa virtual ($\vec{F}_{vm}$) e força externa ao corpo ($\vec{F}_e$).

$$\vec{F}_g = \vec{R}_{sg} + \vec{F}_{e,g} + \vec{F}_{lift,g} + \vec{F}_{vm,g} \tag{4.7}$$

$$\vec{F}_s = \vec{R}_{gs} + \vec{F}_{e,s} + \vec{F}_{lift,s} + \vec{F}_{vm,s} \tag{4.8}$$

A força de sustentação ($\vec{F}_{lift}$) atua nas partículas devido ao gradiente de velocidade no campo de fluxo da fase gasosa. Esta força é normalmente desprezível na grande maioria dos sistemas particulados.

A força de massa virtual ($\vec{F}_{vm}$) inclui o efeito de inércia das partículas que são relativamente aceleradas pela fase contínua. Este efeito só é significante quando a densidade das partículas é muito menor que a densidade da fase contínua.

A força que mais contribui para o escoamento gás-sólido em um *riser* é a força de arraste ($\vec{R}$) dada pela interação entre as fases. O FLUENT da ANSYS utiliza um termo de interação simples para a força de arraste que é dado por:

$$\vec{R}_{sg} = \beta(\vec{u}_s - \vec{u}_g) \tag{4.9}$$

$$\vec{R}_{gs} = \beta(\vec{u}_g - \vec{u}_s) \tag{4.10}$$

em que β é o coeficiente de transferência de momento definido por:

$$\beta = \frac{\alpha_s \rho_s}{\tau_s} f \tag{4.11}$$

em que τ_s é o tempo de relaxação da partícula dado por:

$$\tau_s = \frac{\rho_s d_s^2}{18\mu_g} \tag{4.12}$$

sendo d_s o diâmetro das partículas.

O parâmetro f é função do coeficiente de arraste (C_D) e do número de Reynolds relativo (Re_s). Para determinar o parâmetro f, o FLUENT recomenda a utilização do modelo Syamlal-O'Brien (1989) quando a viscosidade cinética da tensão cisalhante é modelada pelas equações de Syamlal et al (1993), as quais serão usadas neste trabalho na teoria cinética granular, seção 4.3 (equação 4.51). Este modelo é baseado em medidas de velocidade terminal das partículas em leitos fluidizados com correlações em função da fração volumétrica e do número de Reynolds relativo.

O modelo de Syamlal-O'Brien (1989) define f como:

$$f = \frac{C_D \operatorname{Re}_s \alpha_l}{24 u^2{}_{r,s}} \tag{4.13}$$

em que o coeficiente de arraste pode ser dado por:

$$C_D = \left(0{,}63 + \frac{4{,}8}{\sqrt{\dfrac{\operatorname{Re}_s}{u_{r,s}}}} \right)^2 \tag{4.14}$$

A velocidade terminal da fase particulada $u_{r,s}$ pode ser dada por:

$$u_{r,s} = 0{,}5\left(A - 0{,}06 \operatorname{Re}_s + \sqrt{(0{,}06 \operatorname{Re}_s)^2 + 0{,}12 \operatorname{Re}_s (2B - A) + A^2} \right) \tag{4.15}$$

em que A e B são parâmetros do modelo dados por:

$$A = \alpha_g^{4,14} \tag{4.16}$$

$$B = 0{,}8\alpha_g^{1,28} \quad \text{para } \alpha_g \leq 0{,}85 \tag{4.17}$$

$$B = \alpha_g^{2,65} \quad \text{para } \alpha_g > 0{,}85 \tag{4.18}$$

e número de Reynolds relativo Re_s é definido como:

$$\mathrm{Re}_s = \frac{\rho_g d_s \left|\vec{u}_s - \vec{u}_g\right|}{\mu_g} \tag{4.19}$$

Logo, o coeficiente de interação entre as fases pode ser resumido por:

$$\beta = \frac{3\alpha_s \alpha_g \rho_g}{4u_{r,s}^2 d_s} C_D \left(\frac{\mathrm{Re}_s}{u_{r,s}}\right) \left|\vec{u}_s - \vec{u}_g\right|$$

4.1.1.2 Abordagem DDPM

Na formulação do modelo de fase densa discreta (DDPM), as equações de conservação de massa e momento para a fase contínua são dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla.(\alpha_g \rho_g \vec{u}_g) = 0 \tag{4.20}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \vec{u}_g) + \nabla.(\alpha_g \rho_g \vec{u}_g \vec{u}_g) = -\alpha_g \nabla p + \nabla.\left[\alpha_g \mu_g \left(\nabla \vec{u}_g + \nabla \vec{u}_g^{\,T}\right)\right] + \alpha_g \rho_g \vec{g} + \vec{F}_g + K_{DPM}(\vec{u}_{DPM} - \vec{u}_p) + S_{DPM} \tag{4.21}$$

Nesta formulação, as equações da conservação de massa e momento para a fase particulada não são resolvidas. A fração volumétrica utilizada nas equações é obtida pela solução do modelo lagrangeano.

O FLUENT prevê a trajetória da partícula por meio do balanço de forças para cada partícula. O balanço de forças equaciona a inércia das partículas com as forças atuando na partícula e pode ser dado por:

$$\frac{\partial \vec{u}_s}{\partial t} = F_D(\vec{u}_g - \vec{u}_s) + \frac{\vec{g}(\rho_s - \rho_g)}{\rho_s} + \vec{F} + \vec{F}_{\mathrm{int}} \tag{4.22}$$

O termo $F_D(u_g - u_s)$ é a força de arraste dada por:

$$F_D = \frac{18\mu_g}{\rho_s d_s^{\,2}} \frac{C_D \,\mathrm{Re}}{24} \tag{4.23}$$

em que o Reynolds relativo é descrito por:

$$\mathrm{Re} = \frac{\rho_g d_s \left|\vec{u}_s - \vec{u}_g\right|}{\mu_g} \tag{4.24}$$

$\vec{F}$ é o termo de adição de outras forças (de massa virtual, rotacional, termoforética, Browniana e de sustentação). Neste trabalho não foi considerado forças externas e, desta forma, este termo será nulo.

$\vec{F}_{\mathrm{int}}$ é a adição de forças resultante da interação entre as partículas dada por:

$$\vec{F}_{\mathrm{int}} = -\frac{1}{\rho_s} \nabla . \bar{\bar{\tau}}_s \tag{4.25}$$

em que o tensor tensão da fase particulada $\bar{\bar{\tau}}_s$ é representado pela equação (4.6).

4.1.2 Turbulência

A turbulência é originada pelo aparecimento de instabilidades em um escoamento laminar (estável) como ocorre em escoamentos cisalhantes onde existe uma diferença de velocidade entre os fluidos no interior de um escoamento (camada de mistura), em jatos e em esteiras. Também é possível ocorrer instabilidade na camada limite, em escoamentos com rotação e sob efeito de transferência de calor. Após a geração, as instabilidades se amplificam gerando os vórtices que se degeneram em um processo turbulento.

A maior parte dos escoamentos encontrados na natureza é turbulento. Os escoamentos turbulentos possuem um comportamento caótico de grande complexidade fornecendo movimentos irregulares. Desta forma, permitem uma maior eficiência na mistura de massa, energia e quantidade de movimento em um processo altamente difusivo. Além disso, a turbulência é um fenômeno altamente dissipativo, pois ocorre a transformação de energia cinética em aquecimento. A turbulência ocorre em escoamentos com elevado número de Reynolds e uma das características mais importantes é a presença de vórtices com uma larga faixa de escalas de comprimento e de tempo que se caracterizam desde as maiores estruturas controladas pela geometria até as menores estruturas as quais são controladas pela viscosidade do fluido.

A simulação numérica direta (DNS) de toda a escala turbulenta requer um enorme gasto computacional. Uma alternativa para simulação do escoamento turbulento é a aplicação da média temporal das equações de Navier-Stokes, o que resulta na redução de recursos computacionais requeridos.

De acordo com Reynolds, a solução das variáveis instantâneas das equações de Navier-Stokes pode ser decomposta em um valor médio e um componente da flutuação. No caso da velocidade, o valor instantâneo é dado por:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \tag{4.26}$$

em que $\bar{u}$ é a velocidade média e u' é a flutuação de velocidade nas componentes *i*.

Substituindo esta expressão nas equações de Navier-Stokes e aplicando a média temporal, serão produzidas equações do tipo RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*).

As equações do tipo RANS têm a mesma forma das equações de Navier-Stokes para variáveis instantâneas, porém com as variáveis sendo representadas por valores médios temporais. Um novo termo chamado de tensor de Reynolds ($-\overline{\rho u_i' u_j'}$), representando os efeitos da turbulência, surge nestas equações e deve ser modelado.

Um método bastante empregado é a hipótese de Boussinesq dada por:

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_T \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \tag{4.27}$$

em que μ_T é a viscosidade turbulenta (uma propriedade do escoamento), k é a energia cinética das flutuações da velocidade dada por $k = \frac{\overline{u_i u_i}}{2}$, e δ_{ij} é o delta de Kronecker.

Seguindo esta hipótese, alguns modelos foram criados para a determinação da viscosidade turbulenta que vão desde relações algébricas simples a modelos com uma ou duas equações de transporte.

Modelo de turbulência κ-ε

O modelo de turbulência κ-ε proposto por Launder e Spalding (1972) é um modelo a duas equações amplamente difundido, podendo ser considerado o modelo de turbulência padrão em simulações industriais. No caso específico de escoamento multifásico em *riser*, o modelo de turbulência κ-ε é o mais utilizado (HARTGE et al, 2009; CORNELISSEN et al 2007; WU et al, 2010; VAN ENGELANDT et al, 2011; LOPES et al, 2012). Esse modelo é considerado robusto, econômico e razoavelmente preciso para uma larga faixa de escoamentos turbulentos.

O modelo de turbulência κ-ε resolve uma equação de transporte para a energia cinética turbulenta (κ) e outra para a taxa de dissipação turbulenta (ε). A equação de transporte para a energia cinética turbulenta é derivada diretamente da equação exata, enquanto que a modelagem para a taxa de dissipação turbulenta é obtida por conclusões fenomenológicas e possui certa semelhança com o seu equacionamento matemático direto. Este modelo assume que o escoamento é completamente turbulento e os efeitos de viscosidade molecular são negligenciáveis.

Desta maneira, a viscosidade turbulenta definida nos tensores de Reynolds pode ser calculada por meio da combinação de energia cinética turbulenta (κ) e da taxa de dissipação turbulenta (ε).

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{4.28}$$

em que C_μ é uma constante dada pela Tabela 4.1.

A energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação turbulenta para um escoamento multifásico podem ser calculadas por três modelos de turbulência κ-ε distintos no FLUENT: Mistura, Disperso e Por Fase.

O modelo de turbulência κ-ε Mistura é a primeira extensão do modelo monofásico κ-ε onde assume uma contribuição média das propriedades e das velocidades das fases. É apenas

aplicado quando as propriedades das fases são similares. Portanto, para um escoamento gás-sólido onde as propriedades de cada fase não apresentam similaridade, esta abordagem não deve ser utilizada.

O modelo mais geral para escoamento multifásico é o modelo de turbulência κ-ε por Fase que resolve as equações de κ e ε para cada fase. É apropriado quando a transferência de turbulência entre as fases é dominante. Por resolver duas equações de transporte a mais para cada fase, o modelo por Fase possui o maior gasto computacional quando comparado com os outros modelos.

O modelo de turbulência κ-ε Disperso é apropriado quando a concentração de sólidos no escoamento multifásico for diluída. Neste caso, as colisões entre as partículas são negligenciáveis e a turbulência da fase particulada é controlada principalmente pelos movimentos aleatórios da fase gasosa.

O modelo de turbulência κ-ε Disperso é o mais usado para simular o escoamento dentro do *riser* (DE WILDE et al, 2003; WU et al, 2010; VAN ENGELANDT et al, 2011). Além disso, Hartge e outros (2009) concluíram que o modelo de turbulência κ-ε Disperso é o que mais se ajusta às medidas experimentais nas regiões acima do *riser* em comparação ao modelo de turbulência κ-ε por Fase. Desta forma, neste trabalho será usado o modelo de turbulência κ-ε Disperso.

<u>κ-ε Disperso</u>

O modelo de turbulência κ-ε Disperso utiliza para a fase contínua o modelo κ-ε modificado com um termo adicional que inclui a transferência de momento turbulenta entre as fases. Para a fase dispersa, a turbulência é dada pela equação que se baseia na teoria de Tchen de dispersão das partículas discreta em turbulência homogênea (HINZE, 1975).

As equações de turbulência κ-ε disperso modificado para a fase contínua são dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g k_g) + \nabla.(\alpha_g \rho_g \vec{U}_g k_g) = \nabla.(\alpha_g \frac{\mu_{T,g}}{\sigma_k} \nabla k_g) + \alpha_g G_{k,g} - \alpha_g \rho_g \varepsilon_g + \alpha_g \rho_g \Pi_{kg} \tag{4.29}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \varepsilon_g) + \nabla.(\alpha_g \rho_g \vec{U}_g \varepsilon_g) = \nabla.(\alpha_g \frac{\mu_{T,g}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon_g) + \alpha_g \frac{\varepsilon_g}{k_g}(C_{1\varepsilon} G_{k,g} - C_{2\varepsilon} \rho_g \varepsilon_g) + \alpha_g \rho_g \Pi_{\varepsilon g} \tag{4.30}$$

em que o valor das constantes $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, σ_k e σ_ε são dados na Tabela 4.1. A variável $\vec{U}_g$ é a velocidade ponderada da fase gasosa, $\mu_{T,g}$ é a viscosidade turbulenta da fase gasosa, $G_{k,g}$ é a produção da energia cinética turbulenta na fase gasosa, Π_{kg} e $\Pi_{\varepsilon g}$ representam a influência da fase particulada na fase gasosa. Essas variáveis são modeladas pelas seguintes equações:

$$\mu_{T,g} = \rho_g C_\mu \frac{k_g^{\ 2}}{\varepsilon_g} \tag{4.31}$$

$$G_{k,g} = -\overline{\rho u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \tag{4.32}$$

$$\Pi_{kg} = \frac{\beta}{\alpha_g \rho_g}(k_{sg} - 2k_g + \vec{u}_{sg}.\vec{u}_{dr}) \tag{4.33}$$

$$\Pi_{\varepsilon g} = C_{3\varepsilon} \frac{\varepsilon_g}{k_g} \Pi_{kg} \tag{4.34}$$

em que os valores das constantes $C_{3\varepsilon}$ e C_μ são dados na Tabela 4.1. A variável k_{sg} é a covariância entre as velocidades das fases gasosa e particulada, $\vec{u}_{sg}$ é a velocidade relativa e $\vec{u}_{dr}$ é a velocidade de arraste definidas por:

$$k_{sg} = 2k_g \left(\frac{b + \eta_{sg}}{1 + \eta_{sg}} \right) \tag{4.35}$$

$$\vec{u}_{dr} = -\left(\frac{D_s}{\sigma_{sg}\alpha_s} \nabla \alpha_s - \frac{D_g}{\sigma_{sg}\alpha_g} \nabla \alpha_g \right) \tag{4.36}$$

em que o valor da constante σ_{sg} é o número de dispersão de Prandtl dado na Tabela 4.1. D_s e D_g são as difusividades de cada fase dada pela equação 4.44. Pela teoria de Tchen, considera que para fluxos multifásico as difusividades são iguais para as fases, $D_s = D_g$.

A variável η_{sg} é a razão do tempo característico dependente de dois parâmetros: tempo de relaxamento das partículas ($\tau_{F,sg}$) que relaciona os efeitos inerciais atuando na fase particulada, e o tempo integral Lagrangeano ($\tau_{t,sg}$) que sofre efeito da trajetória da partícula.

$$\eta_{sg} = \frac{\tau_{t,sg}}{\tau_{F,sg}} \tag{4.37}$$

O tempo de relaxamento das partículas pode ser calculado por:

$$\tau_{F,sg} = \frac{\alpha_g \rho_g}{\beta} \left(\frac{\rho_s}{\rho_g} + C_U \right) \tag{4.38}$$

E tempo integral Lagrangeano por:

$$\tau_{t,sg} = \frac{\tau_{t,g}}{\sqrt{1 + C_\beta \xi^2}} \tag{4.39}$$

As variáveis ξ e C_β são dadas pelas equações abaixo:

$$\xi = \frac{\left|\vec{u}_{sg}\right|\tau_{t,g}}{L_{t,g}} \tag{4.40}$$

$$C_\beta = 1{,}8 - 1{,}35\cos^2\theta \tag{4.41}$$

em que θ é o ângulo entre a velocidade média da partícula e a velocidade média relativa. As variáveis $\tau_{t,g}$ e $L_{t,g}$ representam o tempo característico e o comprimento de escala dos turbilhões da fase contínua dados por:

$$\tau_{t,g} = \frac{3}{2}C_\mu \frac{k_g}{\varepsilon_g} \tag{4.42}$$

$$L_{t,g} = \sqrt{\frac{3}{2}}C_\mu \frac{k_g^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon_g} \tag{4.43}$$

A difusividade de cada fase pode ser calculada por:

$$D_s = D_{t,sg} + \left(\frac{2}{3}k_s - b\frac{1}{3}k_{sg}\right)\tau_{F,sg} \tag{4.44}$$

sendo $D_{t,sg}$ dado por:

$$D_{t,sg} = \frac{1}{3}k_{sg}\tau_{t,sg} \tag{4.45}$$

e a quantidade de turbulência para a fase dispersa:

$$k_s = k_g\left(\frac{b^2 + \eta_{sg}}{1 + \eta_{sg}}\right) \tag{4.46}$$

em que *b* definido por:

$$b = \left(1 + C_U\right)\left(\frac{\rho_s}{\rho_g} + C_U\right)^{-1} \tag{4.47}$$

e o valor da constante C_U é dado na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Constantes do modelo de turbulência κ-ε.

Constantes	Valores
C_μ	0,09
$C_{1\varepsilon}$	1,44
$C_{2\varepsilon}$	1,92
$C_{3\varepsilon}$	1,2
σ_k	1,0
σ_ε	1,0
σ_{sg}	0,75
C_U	0,5

Efeito da turbulência na trajetória de partículas (formulação DDPM)

A dispersão das partículas devido à turbulência da fase gasosa pode ser prevista usando o modelo de trajetória estocástico (*stochastic tracking model*). Este modelo inclui os efeitos das flutuações da velocidade turbulenta da fase gasosa na trajetória das partículas usando métodos estocásticos. Para cada partícula injetada no domínio, o cálculo da trajetória é feito repetidamente (denominado número de tentativas) a fim de gerar efeitos randômicos da turbulência na dispersão das partículas.

A velocidade instantânea da fase gasosa, assim como na abordagem euleriana, é dada pela soma da velocidade média e da flutuação no campo de velocidade.

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \tag{4.26}$$

O valor da flutuação no campo de velocidade obedece à distribuição da probabilidade Gaussiana e para o modelo κ-ε pode ser dada por:

$$u'_i = \varsigma \sqrt{\frac{2k}{3}} \tag{4.48}$$

em que ς é um número de distribuição randômico.

4.1.3 Teoria cinética granular

A abordagem euler-euler trata as fases gasosa e particulada como contínuas, ou seja, uma fase não pode ocupar o volume de outra fase. Com isso, as equações de conservação são definidas tanto para a fase particulada quanto para a fase gasosa.

Na equação de conservação de momento para a fase particulada, equação 4.5, o tensor tensão da fase particulada ($\bar{\bar{\tau}}_s$) é dado em função da viscosidade cisalhante e da viscosidade global dos sólidos. Visando a obtenção destas propriedades e, por consequência, do tensor

tensão da fase particulada, surgiu o modelo de teoria cinética granular que é apresentado a seguir.

Viscosidade cisalhante

A viscosidade cisalhante da fase particulada utilizada na equação do tensor tensão (equação 4.6) é dada pela mudança de momento das partículas devido à translação e pela colisão entre partículas. O componente friccional da viscosidade também pode ser incluído quando a fase sólida atinge a fração máxima volumétrica. Logo, a viscosidade cisalhante para a fase particulada pode ser dada por:

$$\mu_s = \mu_{s,col} + \mu_{s,kin} + \mu_{s,fr} \tag{4.49}$$

A viscosidade colisional, $\mu_{s,col}$, pode ser definida pela expressão de Gidaspow et al (1994):

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5}\alpha_s \rho_s d_s g_{0,ss}(1+e_{ss})\left(\frac{\Theta_s}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\alpha_s \tag{4.50}$$

em que d_s é o diâmetro da fase particulada, $g_{0,ss}$ é a função radial de distribuição definida na equação 4.60, e_{ss} é o coeficiente de restituição da colisão de partículas e Θ_s é a temperatura granular definida na equação 4.54.

A viscosidade cinética ($\mu_{s,kin}$) pode ser definida pela expressão (SYAMLAL et al, 1993):

$$\mu_{s,kin} = \frac{\alpha_s d_s \rho_s \sqrt{\Theta_s \pi}}{6(3-e_{ss})}\left[1+\frac{2}{5}(1+e_{ss})(3e_{ss}-1)\alpha_s g_{0,ss}\right] \tag{4.51}$$

A viscosidade cisalhante friccional ($\mu_{s,fr}$) é utilizada quando a fração volumétrica da fase sólida se aproxima do valor máximo de empacotamento e, com isso, ocorre uma tensão devido à fricção entre as partículas. Esta viscosidade é importante na simulação em *risers*, pois em algumas regiões do *riser* ocorre o empacotamento máximo. A viscosidade friccional definida pelo modelo de Schaeffer (1987) foi utilizada neste trabalho:

$$\mu_{s,fr} = \frac{P_s sen\phi}{2\sqrt{I_{2D}}} \tag{4.52}$$

em que P_s é a pressão dos sólidos definida na equação 4.59, ϕ é o ângulo interno de fricção e I_{2D} é a segunda invariante do tensor tensão.

Viscosidade global

A viscosidade global representa a resistência das partículas a compressão e expansão. A equação do modelo de Lun et al (1984) é dada por:

$$\lambda_s = \frac{4}{3}\alpha_s \rho_s d_s g_{0,ss}(1+e_{ss})\left(\frac{\Theta_s}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{4.53}$$

Temperatura Granular

Tanto a viscosidade cisalhante quanto a viscosidade global necessitam da especificação da temperatura granular da fase sólida. A temperatura granular da fase sólida é proporcional à energia cinética do movimento randômico das partículas e pode ser determinada por meio da equação de transporte:

$$\frac{3}{2}\left[\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \Theta_s) + \nabla.(\alpha_s \rho_s \vec{u}_s \Theta_s)\right] = \left(-p_s \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_s\right) : \nabla \vec{u}_s + \nabla.(k_{\theta s} \nabla \Theta_s) - \gamma_{\theta s} + \phi_{gs} \tag{4.54}$$

com os temos definidos abaixo:

$\left(-p_s \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_s\right) : \nabla \vec{u}_s$ é a geração de energia pelo tensor tensão do sólido,

$(k_{\theta s} \nabla \Theta_s)$ é a difusão de energia ($k_{\theta s}$ é o coeficiente de difusão),

$\gamma_{\theta s}$ é a dissipação colisional de energia,

ϕ_{gs} é a transferência de energia entre a fase gasosa e a fase particulada.

As equações constitutivas para o fechamento deste sistema são descritas abaixo:

Coeficiente de difusão

O coeficiente de difusão para energia granular ($k_{\theta s}$) utilizado neste trabalho foi dado pelo modelo de Syamlal et al (1993):

$$k_{\theta s} = \frac{15 d_s \alpha_s \rho_s \sqrt{\Theta_s \pi}}{4(41-33\eta)}\left[1 + \frac{12}{5}\eta^2(4\eta-3)\alpha_s g_{0,ss} + \frac{16}{15\pi}(41-33\eta)\eta\alpha_s g_{0,ss}\right] \tag{4.55}$$

em que η é dado por:

$$\eta = \frac{1}{2}(1+e_{ss}) \tag{4.56}$$

Dissipação colisional

A dissipação colisional de energia ($\gamma_{\theta s}$) representa a taxa de dissipação de energia devido às colisões entre as partículas, e pode ser determinada pela equação (LUN et al, 1994):

$$\gamma_{\theta s} = \frac{12(1-e_{ss}^2) g_{0,ss}}{d_s \sqrt{\pi}} \rho_s \alpha_s^2 \Theta_s^{\frac{3}{2}} \tag{4.57}$$

Transferência de energia cinética flutuante

A transferência de energia cinética da flutuação aleatória da velocidade da fase particulada para a fase gasosa é dada por (GIDASPOW et al, 1992):

$$\phi_{gs} = -3k_{gs}\Theta_s \tag{4.58}$$

Pressão dos sólidos

A pressão dos sólidos é calculada independentemente e é usada em termos de gradiente de pressão ∇p_s na equação de momento da fase granular (equação 4.5) e na determinação da temperatura granular da fase particulada (equação 4.54). A pressão dos sólidos é composta pelo termo cinético e pelo termo referente à colisão das partículas:

$$p_s = \alpha_s \rho_s \Theta_s + 2\rho_s (1+e_{ss})\alpha_s{}^2 g_{0,ss}\Theta_s \tag{4.59}$$

Função de distribuição radial

A função de distribuição radial, $g_{0,ss}$ é um fator que modifica a probabilidade de colisões entre as partículas quando a fase particulada se torna densa. A função de distribuição radial para uma fase sólida é definida por uma equação dada por (OGAWA et al, 1980):

$$g_{0,ss} = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}}\right)^{\frac{1}{3}}\right]^{-1} \tag{4.60}$$

O termo $\alpha_{s,máx}$ é a fração volumétrica máxima dos sólidos ou empacotamento máximo, cujo valor padrão é de 0,63.

Tensão nas paredes pela fase particulada

A tensão nas paredes causada pela fase particulada pode ser dada pela seguinte expressão:

$$\vec{\tau}_s = -\frac{\pi}{6}\sqrt{3}\phi\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}}\rho_s g_{0,ss}\sqrt{\Theta_s}\vec{U}r \tag{4.61}$$

em que $\vec{U}r$ é a velocidade relativa de deslizamento da partícula na parede e ϕ é o coeficiente de especularidade entre a partícula e a parede.

4.2 Lei de parede

A turbulência é significativamente afetada pela presença de paredes. Muito próximo às paredes, devido à condição de aderência, a produção de energia cinética turbulenta diminui em direção à parede onde se anula. Ao se afastar da parede, a turbulência é rapidamente aumentada pela produção de energia cinética turbulenta devido aos altos gradientes no campo de velocidade. Desta forma, a complexidade do escoamento, a intensidade dos gradientes de velocidade e as altas taxas de produção e dissipação de energia cinética existente tornam a modelagem numérica do escoamento na camada limite difícil e computacionalmente cara.

Experimentos mostraram que a camada limite pode ser dividida em três sub-regiões como mostra a Figura 4.1, em que $y^+ = \frac{\rho u_t y}{\mu}$ sendo u_t a velocidade de atrito definida por $u_t = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$ e τ_w é a tensão local na parede. A região mais próxima da parede é chamada de sub-região viscosa onde o escoamento é praticamente laminar e a viscosidade tem maior efeito na transferência de momento, energia e massa. A sub-região intermediária sofre efeito tanto da viscosidade quanto da turbulência. A região mais distante da parede sofre maior efeito da turbulência é chamada de sub-região logarítmica ou sub-região turbulenta.

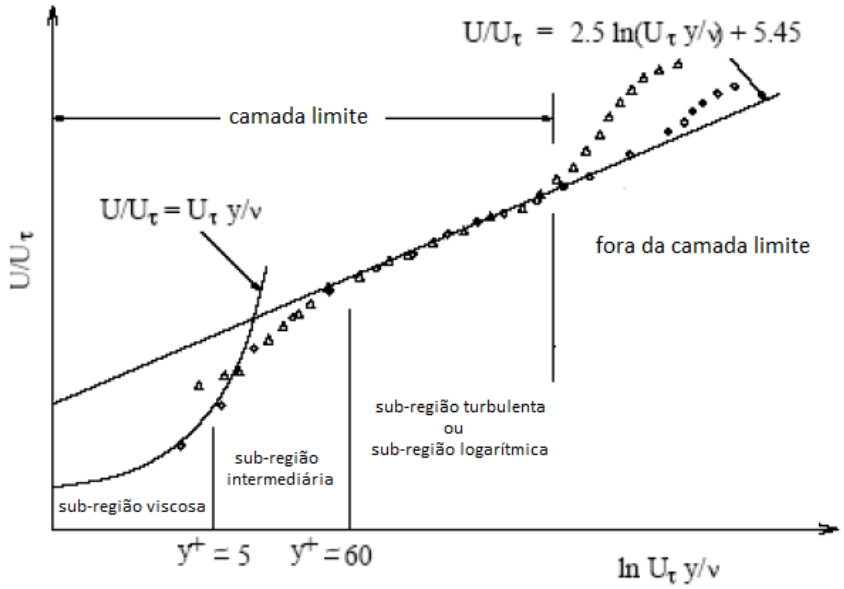

Figura 4.1: Sub-regiões próximas à parede.

Tradicionalmente, existem duas abordagens para modelar a região próxima à parede. A primeira abordagem é a utilização de modelos de turbulência modificados para resolver as sub-regiões que sofrem o efeito da viscosidade: sub-região viscosa e intermediária. Dentre os modelos estão o $k-\omega$ e Spalart-Allmaras desenvolvidos especialmente para este propósito.

Na segunda abordagem, as sub-regiões viscosa e intermediária não são resolvidas. São utilizadas equações semiempíricas chamadas de funções de parede que vinculam a parede com a sub-região turbulenta. As funções de parede são baseadas nos trabalhos de Launder e Spalding (1972) e são amplamente utilizadas na indústria por serem mais econômicas, robustas e razoavelmente precisas.

A função de parede para o campo de velocidade médio é dada por:

$$U^* = \frac{1}{k}\ln(Ey^*) \tag{4.62}$$

em que U^* é o adimensional de velocidade: $U^* = \dfrac{U_p C_\mu^{\frac{1}{4}} k_p^{\frac{1}{2}}}{\dfrac{\tau_w}{\rho}}$

e y^* é o adimensional da distância da parede: $y^* = \dfrac{\rho C_\mu^{\frac{1}{4}} k_p^{\frac{1}{2}} y_p}{\mu}$

sendo k a constante de Von Kármán igual a 0,4187,
E é uma constante empírica igual a 9,793,
U_p é a velocidade média do fluido no nó próximo à parede,
k_p é a energia cinética turbulenta no nó próximo à parede,
y_p é a distância entre parede e o nó próximo à parede,
μ é a viscosidade dinâmica do fluido.

No FLUENT, esta equação é aplicada para a faixa de 11,225 < y^* < 300. Para y^* <11,225 aplica-se a relação $U^* = y^*$.

4.3 Erosão

O fluxo da erosão é definido como a massa removida por unidade de área e tempo durante o impacto de partículas sólidas na superfície de um material. A erosão em uma superfície depende principalmente da velocidade e do ângulo de incidência da partícula na superfície.

No FLUENT, o fluxo de erosão nas paredes é monitorado pela seguinte equação:

$$R_{Erosão} = \sum_{p=1}^{Nparticulas} \frac{\dot{m}_p C(d_p) f(\alpha) v^{b(v)}}{A_{face}} \tag{4.63}$$

em que $\dot{m}_p$ é o fluxo mássico da partícula, $C(d_p)$ é uma função do diâmetro da partícula, $f(\alpha)$ é uma função do ângulo de impacto da partícula com a superfície da parede, v é a velocidade relativa da partícula, $b(v)$ é uma função da velocidade relativa da partícula e A_{face} é a área da face na parede. $C(d_p)$ e $b(v)$ são parâmetros dependentes das características dos materiais envolvidos.

Neste presente trabalho, foram empregados os parâmetros experimentais obtidos por Haugen et al (1995) para uma superfície de aço em que: $C(d_p)$ é igual a $2{,}0 \times 10^{-9}$ e $b(v)$ é igual a 2,6. A função do ângulo de impacto $f(\alpha)$ é dada por:

$$F(\alpha) = \sum Ai \left(\frac{\alpha \pi}{180} \right)^i \tag{6.64}$$

em que Ai são os coeficientes apresentados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Coeficientes da função do ângulo de impacto na equação 6.64.

A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	A8
9,370	-42,295	110,864	-175,804	170,137	-98,398	31,211	-4,170

5. Métodos Numéricos

O objetivo de um método numérico é transformar equações diferenciais, definidas em um domínio, em um sistema de equações algébricas. As diversas maneiras existentes para esta transformação caracterizam o tipo de método numérico.

Os métodos tradicionais para a solução numérica são os Métodos de Diferenças Finitas (MDF), Métodos de Volumes Finitos (MVF) e Métodos de Elementos Finitos (MEF).

O método numérico mais utilizado em softwares comerciais de CFD e utilizado neste trabalho é o MVF devido a sua robustez e característica conservativa.

Métodos de Volumes Finitos

O método de volumes finitos utiliza a formulação de volumes finitos descrito com maiores detalhes por Maliska (2004) e Patankar (1980).

Primeiramente, o domínio da solução é subdividido em um número finito de volumes de controle. A figura 5.1 mostra, em 2D, dois volumes de controle com centros c_0 e c_1, e a variável f representa a face entre eles.

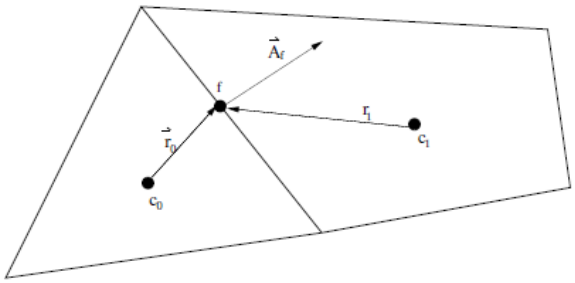

Figura 5.1: Representação em 2D de um volume de controle triangular e um quadrático.

O MVF usa como princípio a forma integral das equações de conservação. A equação de conservação na forma integral de uma variável incógnita pode ser dada por:

$$\int_V \frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} dV + \oint \rho\Phi\vec{u}.d\vec{A} = \oint \Gamma^{\Phi}\nabla\Phi.d\vec{A} + \int_V S dV \qquad (5.1)$$

em que ρ é a densidade, $\vec{u}$ é o vetor velocidade, $\vec{A}$ é o vetor da área da superfície, S é o termo fonte e V é o volume da célula.

Φ é a variável incógnita que representa uma propriedade qualquer. No caso da equação de conservação de energia, a variável incógnita é a temperatura. Na equação de conservação de momento, a variável incógnita é a velocidade.

Γ é o coeficiente de difusão da variável Φ.

Integrando a equação 5.1 para cada volume de controle, temos:

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t}V + \sum_{f}^{Nfaces}\rho_f\vec{u}_f\Phi_f.\vec{A}_f = \sum_{f}^{Nfaces}\Gamma^{\Phi}\nabla\Phi_f.\vec{A}_f + SV \qquad (5.2)$$

em que N_{faces} é o número de faces *f* do volume de controle,

Φ_f é o valor da variável incógnita através da face *f*,

$\rho_f\vec{u}_f\Phi_f.\vec{A}_f$ é o fluxo mássico na face *f*,

$\Gamma^{\Phi}\nabla\Phi_f.\vec{A}_f$ é o fluxo difusivo na face *f*.

Esta equação representa os fluxos advectivos e difusivos da variável Φ nas faces de um volume de controle.

Para a solução desta integral, devemos conhecer o valor da variável incógnita em todas as faces do volume de controle. Como o valor da variável incógnita é apenas conhecido nos centros dos volumes de controle, é necessário assumir uma função de interpolação espacial da variável incógnita para todas as outras posições.

A substituição de uma função de interpolação espacial da variável incógnita nas equações de conservação integrada (equação 5.2) fornece equações discretizadas para um número finito de volumes de controle.

O maior atrativo desta formulação é o resultado da solução que implica que a conservação das quantidades de massa, momento e energia é satisfeita para qualquer grupo de volumes de controle e, como consequência, para todo domínio calculado.

Discretização Espacial

O FLUENT armazena os valores discretos da variável incógnita Φ apenas no centro dos volumes de controle. Porém, para o termo advectivo da equação 5.2, é necessário o valor da variável incógnita nas faces do volume de controle (Φ_f), por isso métodos de interpolação da variável incógnita são usados.

Existem diversos esquemas de interpolação da variável Φ dependendo da dimensão do problema. O FLUENT permite o uso de alguns métodos de interpolação como: Upwind, Power Law e QUICK.

Abaixo serão apresentados os esquemas de interpolação utilizados neste trabalho.

a) First-Order Upwind

Este método considera que o valor da variável incógnita na face Φ_f é igual ao valor da variável incógnita no centro do volume de controle à montante. Possui a precisão de primeira ordem e produz soluções bastante estáveis, obtendo-se sempre uma solução realística, mas com alta dissipação embutida. Este método é indicado quando o fluxo está alinhado com a malha (exemplo: fluxo laminar com uma malha quadrática ou hexaédrica).

b) Second-Order Upwind

Neste método, a quantidade da variável incógnita na face Φ_f é computada usando uma reconstrução linear multidimensional. O valor de Φ_f é calculado por:

$$\Phi_f = \Phi + \nabla\Phi.\vec{r} \tag{5.3}$$

em que Φ e $\nabla\Phi$ são os valores da variável incógnita no centro do volume de controle e o seu gradiente à montante, e $\vec{r}$ é o vetor distância do centro do volume de controle à montante e a face.

Este método é indicado quando o fluxo não é alinhado com a malha, ou seja, quando a malha é triangular ou tetraédrica.

c) Upwind Quadrática (QUICK)

O método QUICK é baseado na média ponderada do Second-Order Upwind e da interpolação central de uma variável. Este método é mais preciso em malhas estruturadas alinhadas com o fluxo.

<u>Gradientes</u>

Na equação 5.2, o gradiente da variável incógnita é usado para discretizar o termo da difusão nas equações de conservação. Existem três métodos no FLUENT da ANSYS para computar os gradientes: Green-Gauss Cell-Based, Green-Gauss Node-Based e Least Square Cell-Based.

O método Least Square Cell-Based, utilizado neste trabalho, assume que a solução varia linearmente. No caso da Figura 5.2, a mudança do valor da variável incógnita no volume de controle varia entre os valores nos centroides c_0 e ci ao longo do vetor $\vec{r}_i$.

$$(\nabla\Phi)_{c0}.\Delta r_i = (\Phi_{ci} - \Phi_{c0}) \tag{5.4}$$

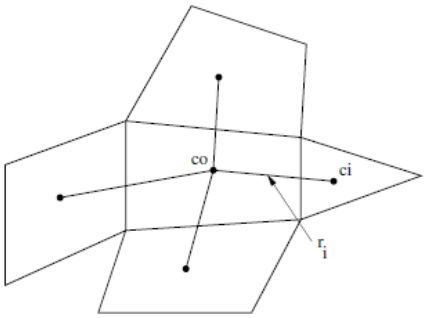

Figura 5.2: Centroide do volume de controle.

Discretização Temporal

Em simulações transientes, as equações de transporte devem ser discretizadas no tempo e espaço. A discretização temporal envolve a integração de cada termo nas equações diferenciais no passo de tempo Δt.

A equação genérica para a evolução no tempo de uma variável incógnita Φ é dada por:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = F(\Phi) \tag{5.5}$$

em que $F(\Phi)$ incorpora qualquer discretização espacial. Discretizando a derivada usando diferenças finitas, a discretização de primeira ordem é dada por:

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^{n}}{\Delta t} = F(\Phi) \tag{5.6}$$

e a discretização de segunda ordem por:

$$\frac{3\Phi^{n+1} - 4\Phi^{n} + \Phi^{n-1}}{\Delta t} = F(\Phi) \tag{5.7}$$

sendo:

Φ^{n+1} é o valor da variável incógnita no tempo à frente, $t + \Delta t$,

Φ^{n} é o valor da variável incógnita no tempo atual, t,

Φ^{n-1} é o valor da variável incógnita no tempo anterior, $t - \Delta t$,

O método utilizado para avaliar a função $F(\Phi)$ em escoamentos incompressíveis é a integração implícita. A integração implícita considera que a variável Φ^{n+1} se relaciona com as variáveis Φ^{n+1} dos volumes de controle vizinhos por meio de uma função no tempo à frente, dada por:

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^{n}}{\Delta t} = F(\Phi^{n+1}) \tag{5.8}$$

Esta equação é resolvida interativamente a cada passo de tempo.

Acoplamento pressão-velocidade

A linearização da equação 5.2 fornece uma equação da forma:

$$a_P \Phi = \sum_{nv} a_{nb} \Phi_{nb} + b \tag{5.9}$$

em que o subscrito *nb* se refere aos volumes de controle vizinhos, a_P e a_{nb} são os coeficientes linearizados para Φ e Φ_{nb}.

A equação 5.9 é empregada para cada célula da malha fornecendo um grupo de equações algébricas com uma matriz de coeficientes que podem ser resolvidas de forma segregada ou acoplada como mostra a Figura 5.3.

A solução acoplada resolve um sistema de equações contendo as equações de momento e equação da continuidade baseada na pressão. As equações resolvidas de forma acoplada fornecem uma melhor convergência quando comparada com a solução segregada, porém a memória requerida se torna inviável para soluções de matrizes com grandes dimensões.

A solução segregada utiliza um algoritmo onde as equações de transporte são resolvidas sequencialmente. Neste caso, a equação de transporte de cada variável incógnita é resolvida separadamente das outras. Um método iterativo deve ser utilizado para obtenção da convergência numérica.

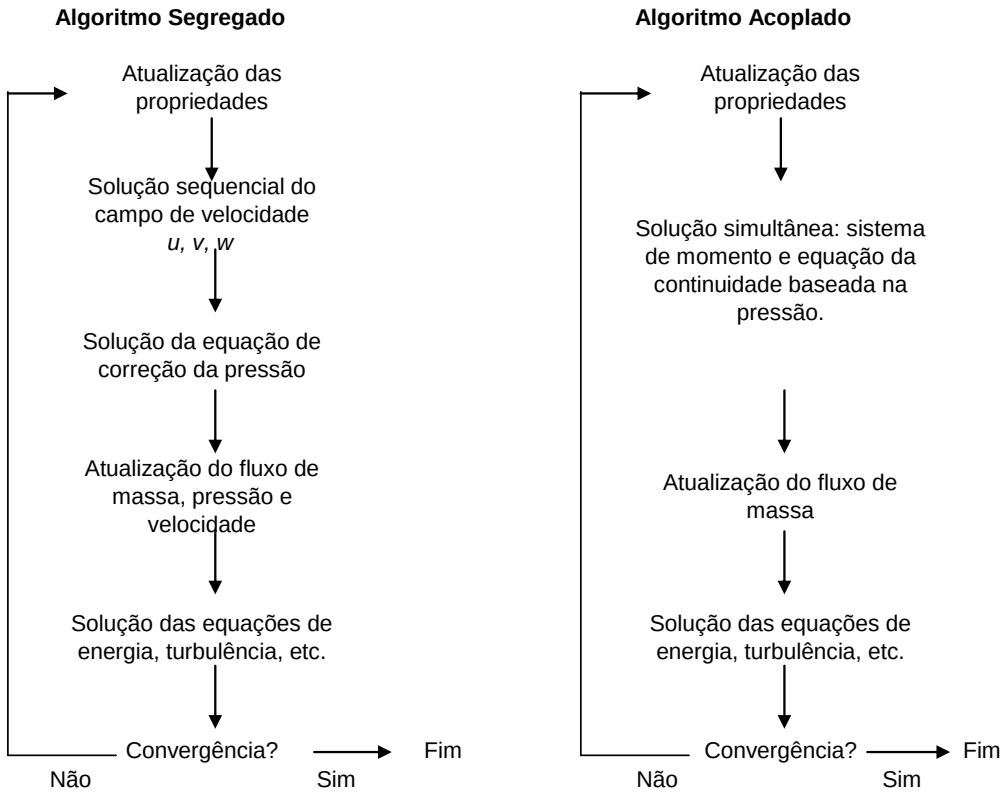

Figura 5.3: Métodos de solução segregado e acoplado.

A discretização da equação de momento substituindo Φ pela velocidade *u* e adicionando o gradiente de pressão pode ser dada por*:*

$$a_P u = \sum_{nv} a_{nb} u_{nb} + \sum p_f A.\hat{i} + S \tag{5.10}$$

Na equação 5.10, o campo de pressão e os fluxos mássicos devem ser conhecidos para obter o campo de velocidade. Porém, esses valores não são conhecidos, o que gera um problema de acoplamento pressão-velocidade. Desta forma, é necessário determinar um campo de pressão que, quando inserido nas equações do movimento, origine um campo de velocidades que satisfaça a equação da conservação de massa. O problema de acoplamento pressão-velocidade só ocorre quando o método de solução é segregado.

Praticamente, todos os métodos acoplamento pressão-velocidade envolvem alguns passos para a sequência de cálculos: no primeiro, estima-se um valor de pressão (P^*) que inserido nas equações de movimento fornece um campo de velocidade estimado (u^*, v^* e w^*). Através da equação da continuidade, a correção da pressão (P') é obtida e, com isso, determina-se o

campo de velocidade corrigido (u, v e w) de modo a satisfazer a equação da conservação de massa. A pressão corrigida é então determinada por $P=P^{*}+P'$, e o procedimento recomeça com o valor de pressão estimado (P^{*}) igual à pressão corrigida (P) até atingir a convergência e terminar o ciclo iterativo.

Os métodos mais conhecidos são o Método SIMPLE, Método SIMPLER, Método PRIME e Método SIMPLEC, que podem ser encontrados em Maliska (2004).

Para o escoamento multifásico, existem três métodos de solução para o acoplamento pressão-velocidade no FLUENT: Phase Coupled SIMPLE, Multiphase Coupled e Full Multiphase Coupled. No presente trabalho será usado o método Phase Coupled SIMPLE que é uma extensão do algoritmo SIMPLE para fluxos multifásicos. Neste método, as velocidades são resolvidas acopladas pela fase, porém pelo método de solução segregado. A diferença entre o método SIMPLE é a correção da pressão baseada na equação da continuidade volumétrica total.

6. Metodologia

Neste capítulo será apresentada a metodologia utilizada para o desenvolvimento deste trabalho: a geração da geometria e da malha, os modelos matemáticos, as propriedades dos fluidos, as condições de contorno e as condições da simulação.

6.1 Geometria

Primeiramente, foi criado no DESIGN MODELER um *riser* com as dimensões encontradas no trabalho de Pärssinen e Zhu (2001). O *riser* é composto por uma tubulação com saída curva com diâmetro de 76 milímetros e altura total de 10 metros. A 0,17-0,25 metros acima do fundo do *riser*, existe uma entrada lateral de mesmo diâmetro da tubulação principal. Neste artigo, foram apresentados perfis radiais da fração volumétrica das partículas para várias alturas diferentes no interior do riser obtidos experimentalmente e que serão comparados com os resultados obtidos nas simulações deste presente trabalho.

O desenho do domínio pode ser visto na Figura 6.1.

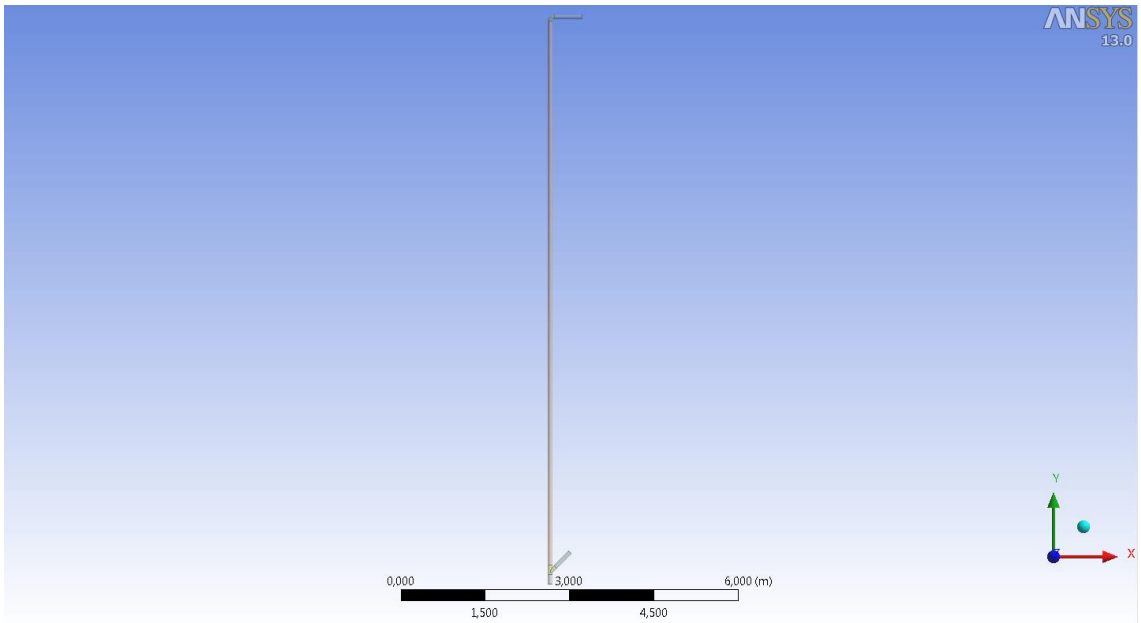

Figura 6.1: Configuração geométrica 3D do *riser* (saída curva).

O domínio (denominado *part*) foi dividido em 6 subdomínios (denominados *bodies*), como mostrado na Figura 6.2, com a finalidade de gerar uma malha híbrida com elementos tetraédricos e hexaédricos que possua coincidência de nós nas interfaces na próxima etapa.

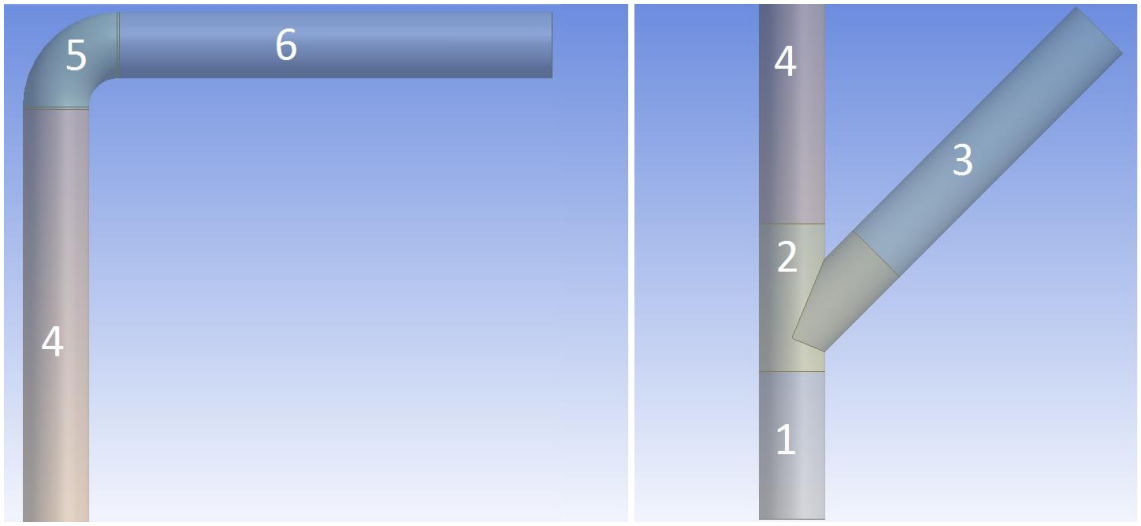

Figura 6.2: Domínio dividido em 6 subdomínios.

Adicionalmente, foram analisadas três configurações de saída: saída do tipo L e saída do tipo T descritas por Meer e outros (2000), e uma nova configuração.

A saída do tipo L possui um cotovelo com ângulo de 90º sem extensão na tubulação principal como mostra a Figura 6.3.

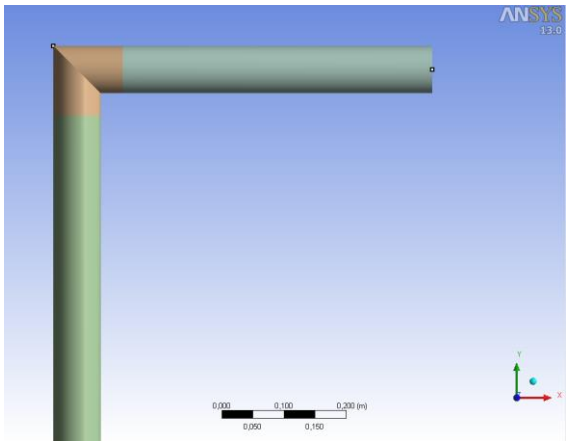

Figura 6.3: Saída do tipo L.

Na saída abrupta do tipo T existe uma extensão acima do cotovelo com altura de 0,065m como mostra a Figura 6.4.

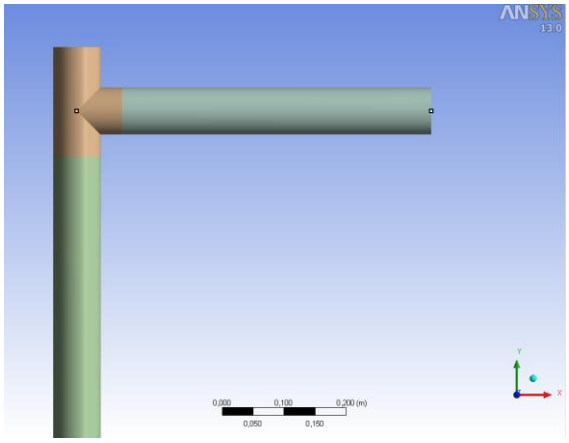

Figura 6.4: Saída do tipo T.

Além das geometrias já mencionadas, uma nova configuração para saída do *riser* foi testada. Sabendo que a erosão é fortemente influenciada pela velocidade das partículas, uma tubulação com maior diâmetro foi criada no topo do *riser* com o objetivo de diminuir a velocidade da partícula e, consequentemente, diminuir a erosão causada nesta região. Esta nova geometria, mostrada na Figura 6.5, é composta por uma tubulação com diâmetro de 0,2 metros interligada com a tubulação principal do *riser* por uma seção cônica de 0,1 metros de altura.

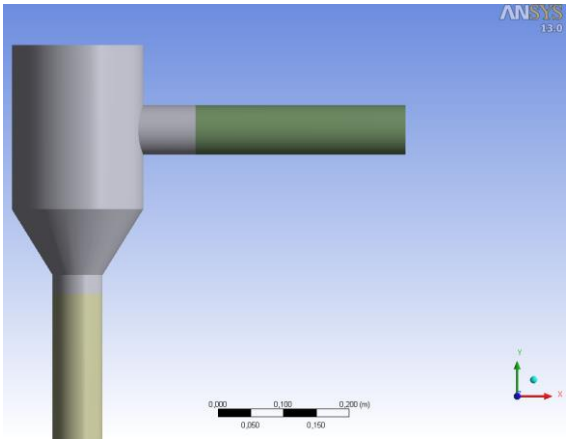

Figura 6.5: Nova configuração para saída do *riser*.

6.2 Malha

A geometria criada na etapa anterior foi subdividida em pequenos elementos onde serão empregados métodos numéricos na solução das equações de transporte.

A precisão da solução melhora com o aumento do número de elementos, pois melhora a representação da geometria, porém aumenta consideravelmente seu custo computacional. Com isso, deve-se encontrar uma malha que garanta a qualidade da resposta desejada com menor custo computacional através de um teste de malha.

O teste de malha consiste primeiramente em elaborar uma malha grosseira com o menor número total de elementos. A partir desta malha, criam-se malhas mais refinadas com maior número total de elementos diminuindo o tamanho dos elementos. Tendo-se malhas contendo diferentes números totais de elementos, aplica-se um teste para verificar a dependência dos

resultados calculados com o tamanho da malha e, desta forma, determinar a malha de menor refino, mas ainda capaz de gerar os mesmos resultados das malhas mais refinadas.

Neste trabalho, foram definidas quatro malhas diferentes para a geometria com terminação curva. A malha 1 representando a malha grosseira com um menor número de elementos, a malha 4 representando a malha mais refinada e as malhas 2 e 3 representando malhas intermediárias.

Para a geração da malha, primeiramente determinou-se o tipo de malha a ser usada nas regiões criadas na etapa anterior. Em situações onde o escoamento do fluido é simples e pode ser alinhado com a malha, é desejável usar malha hexaédrica para obter soluções com um menor número de elementos. Como a maior parte do escoamento é alinhada com a tubulação, foi usada a malha hexaédrica nas regiões 1, 3, 4, 5 e 6. Na região 2, por ser uma região mais complexa, preferiu-se usar malha tetraédrica.

O controle do tamanho da malha foi feito pelo tamanho dos elementos ou pelo número de divisões ao longo de uma aresta. Nas regiões da geometria com malha hexaédrica (regiões 1, 3, 4, 5 e 6) foram feitas divisões axiais e na malha tetraédrica (região 2) definiu-se o tamanho dos elementos.

As diferentes malhas criadas estão mostradas na Tabela 6.1 com suas respectivas divisões axiais, divisões radiais e tamanho de elementos para cada região.

Tabela 6.1 :Características das malhas empregadas no teste de malha para a saída curva.

	Divisões axiais					Tamanho dos elementos (m)	Divisões radiais	Número total de elementos
	Região 1	Região 2	Região 3	Região 4	Região 5	Região 6		
Malha 1	26	44	400	52	61	5.10^{-3}	55	348012
Malha 2	45	60	600	75	90	4.10^{-3}	60	575472
Malha 3	60	75	800	100	120	3.10^{-3}	65	943588
Malha 4	60	85	950	120	140	$2,7.10^{-3}$	70	1271838

Adicionalmente, para utilização correta da função de parede e uma melhor precisão da solução, a espessura do primeiro volume de controle próximo à parede foi mantida em 1 mm de modo a garantir valores de y^+ entre 11,2 e 300.

A Figura 6.6 mostra o perfil da média temporal da fração volumétrica dos sólidos ao longo do *riser* para as diferentes malhas. O tempo total de escoamento foi fixado em 20 segundos, o que representa 8 ciclos de 2,5 segundos, fornecendo uma garantia nos resultados obtidos de acordo com Bastos (2005). Foi utilizada a modelagem euleriana tanto para a fase gás quanto para a fase particulada com as condições de simulação apresentadas na seção 6.4.

Pode-se perceber que a malha 1 (malha grosseira), a malha 2 e a malha 3 apresentam diferenças nos valores da variável medida. Porém, a mudança nos resultados entre a malha 3 e a malha 4 são praticamente imperceptíveis.

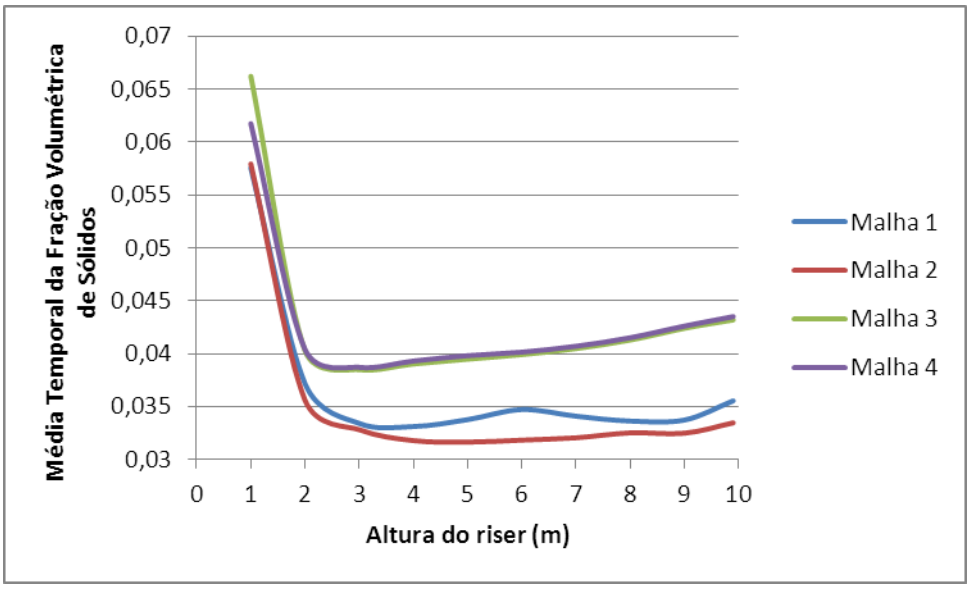

Figura 6.6: Análise da média temporal da fração volumétrica de sólidos no teste de malha.

A queda de pressão do sistema ao longo do *riser* também foi analisada no teste de malha como pode ser observado na Figura 6.7. Nota-se que a malha 1 apresenta um comportamento não esperado e com valores de queda de pressão bastante diferentes das demais malhas. Para facilitar a análise do efeito nos resultados causado pelo refino, a Figura 6.8 mostra a queda de pressão do sistema ao longo do *riser* apenas para as malhas 2, 3 e 4, as quais forneceram um comportamento semelhante nos resultados. Nota-se que novamente a malha 3 apresenta resultados próximos aos da malhas 4. Desta forma, a malha 3 foi a escolhida para as demais simulações.

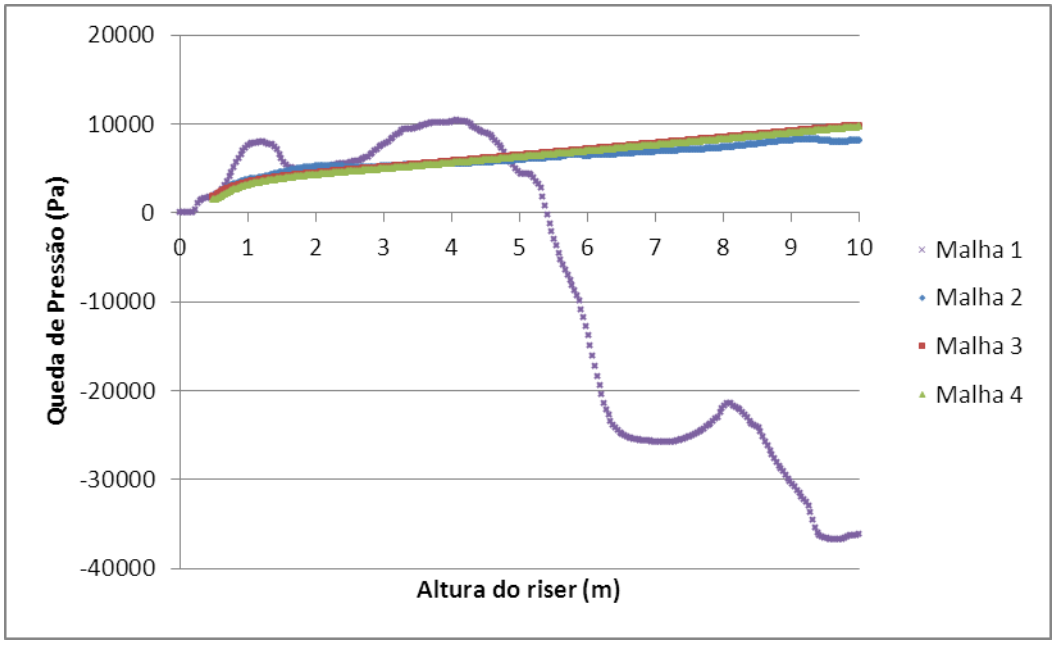

Figura 6.7: Primeira análise da queda de pressão no teste de malha.

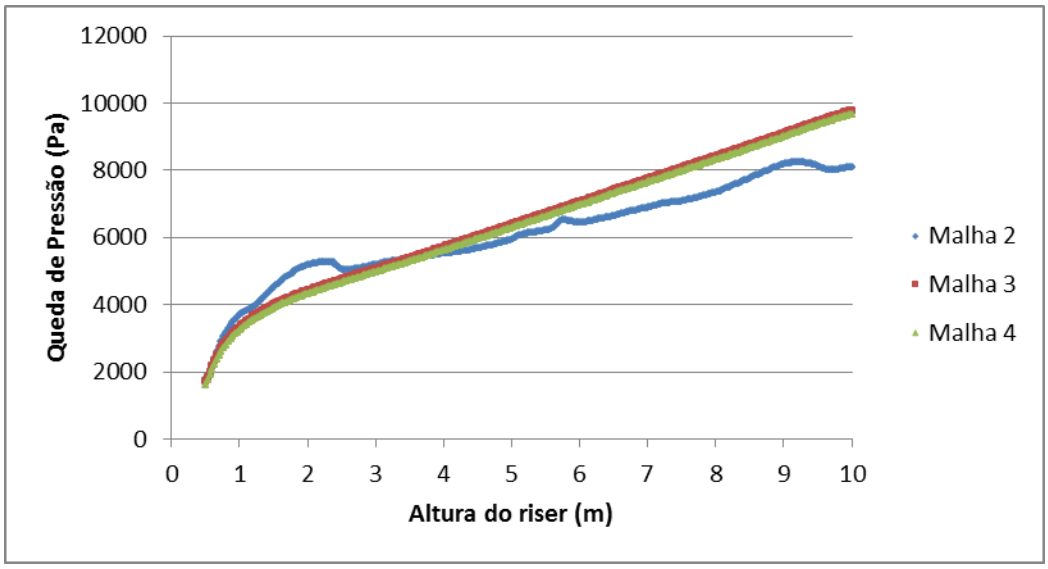

Figura 6.8: Segunda análise da queda de pressão no teste de malha.

A Figura 6.9 ilustra a malha 3 nas regiões de topo e fundo do *riser* para a saída curva.

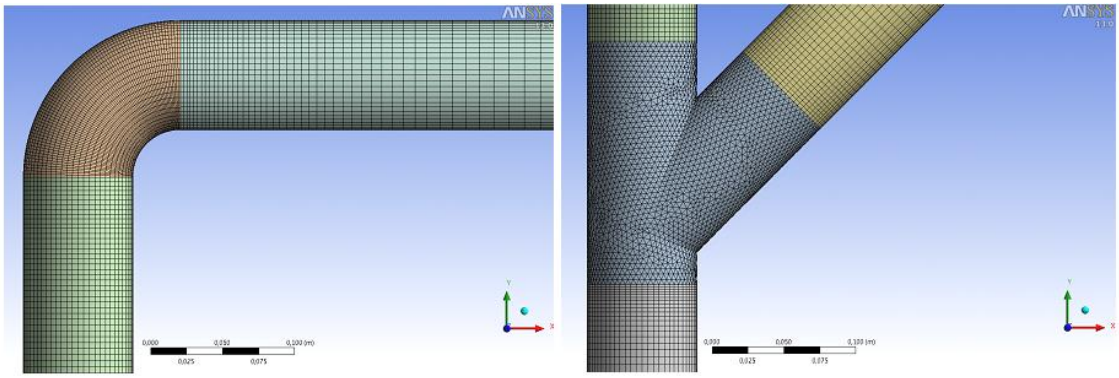

Figura 6.9: Malha 3 no topo e fundo do *riser* para a saída curva.

A adequação da malha para a lei de parede foi verificada para a região de topo do *riser* através da Figura 6.10, sendo especificados os valores de Y^+ para a fase gasosa. É possível verificar que na maior parte dessa região os valores de Y^+ ficaram bem próximos do valor de 11,2 e não excederam o limite máximo recomendado de 300. Desta forma, a malha próxima à região da parede está adequada para este trabalho.

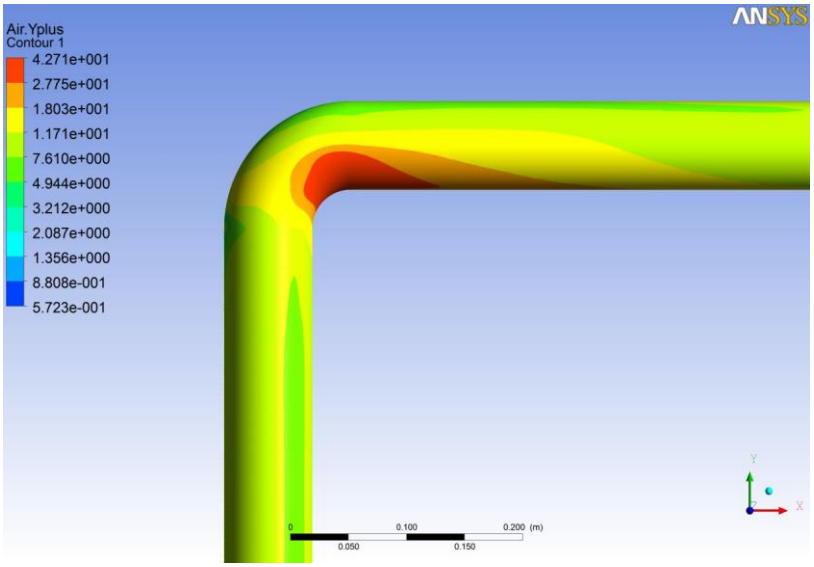

Figura 6.10: Contornos de Y^+ para a fase contínua.

A qualidade da malha é de grande importância para a precisão e estabilidade da solução numérica. Diferentes critérios podem ser utilizados para verificar a qualidade da malha, dentre eles estão a qualidade mínima ortogonal e a máxima razão de aspecto. É desejável uma qualidade mínima ortogonal acima de 0,2 e uma máxima razão de aspecto menor que 100.

Foi encontrada uma qualidade mínima ortogonal e a máxima razão de aspecto para malha 3 iguais a 0,295 e 47,07, respectivamente. Portanto, a qualidade da malha gerada está de acordo com os critérios de qualidade recomendados.

Para as demais geometrias somente a malha da região 5, correspondente à mudança de direção do escoamento no topo do *riser*, foi alterada como mostra a Tabela 6.2. As Figuras 6.11, 6.12 e 6.13 ilustram a malha das saídas do tipo L, do tipo T e da nova geometria.

Tabela 6.2: Característica da região 5 para as demais geometrias.

	Saída do tipo L	Saída do tipo T	Nova geometria
Região 5	120 divisões axiais	Tetraedros de tamanho 3.10^{-3} m	Tetraedros de tamanho 3.10^{-3} m

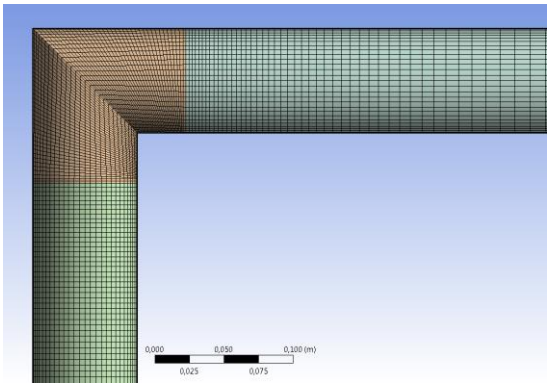

Figura 6.11: Malha no topo do *riser* para a saída do tipo L.

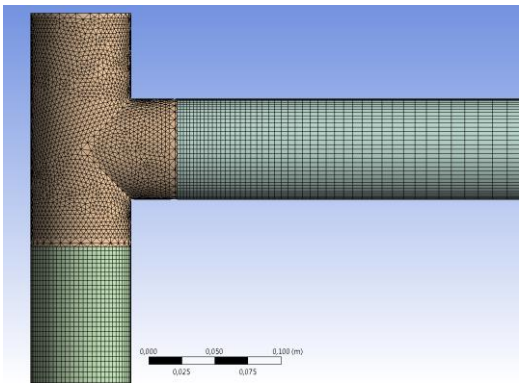

Figura 6.12: Malha no topo do riser para a saída do tipo T.

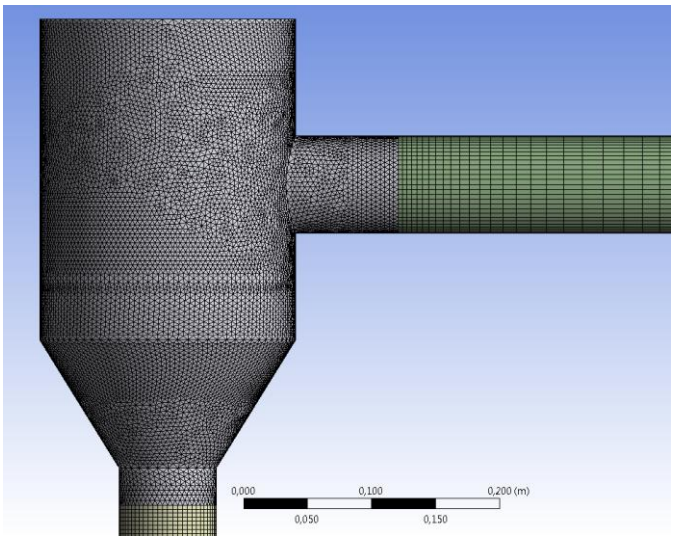

Figura 6.13: Malha no topo do riser para nova geometria.

6.3 Tempo total de escoamento

O escoamento gás-sólido dentro do *riser* é altamente instável e caótico. As variáveis que descrevem este escoamento variam randomicamente com o tempo, impedindo que o regime estacionário seja alcançado. Entretanto, a partir de um determinado tempo de escoamento, observa-se uma significativa atenuação das oscilações das variáveis em torno de valores médios. Nesta condição, pode-se afirmar que o escoamento encontra-se no regime chamado de pseudoestacionário.

No presente trabalho, todas as simulações foram realizadas em regime transiente com o tempo total de escoamento determinado quando as médias temporais da fração volumétrica do catalisador e queda de pressão ao longo do riser se tornaram constantes com o tempo, ou seja, quando o estado pseudoestacionário foi atingido.

A Figura 6.14 mostra a média temporal da fração volumétrica dos sólidos ao longo do tempo para as alturas de 1, 5 e 10 metros do *riser*. A Figura 6.15 mostra a média temporal da queda de pressão do equipamento ao longo do tempo.

Em todos os gráficos observa-se uma significativa atenuação das oscilações dos valores das variáveis à medida que o tempo de escoamento avança. Na Figura 6.14, nota-se que a partir de 13 segundos de escoamento são obtidos valores constantes da média temporal da

fração volumétrica dos sólidos e, na Figura 6.15, a média temporal da queda de pressão se torna constante a partir de 18 segundos de escoamento. Esses resultados sugerem que 20 segundos de escoamento sejam suficientes para que o regime pseudoestacionário seja atingido.

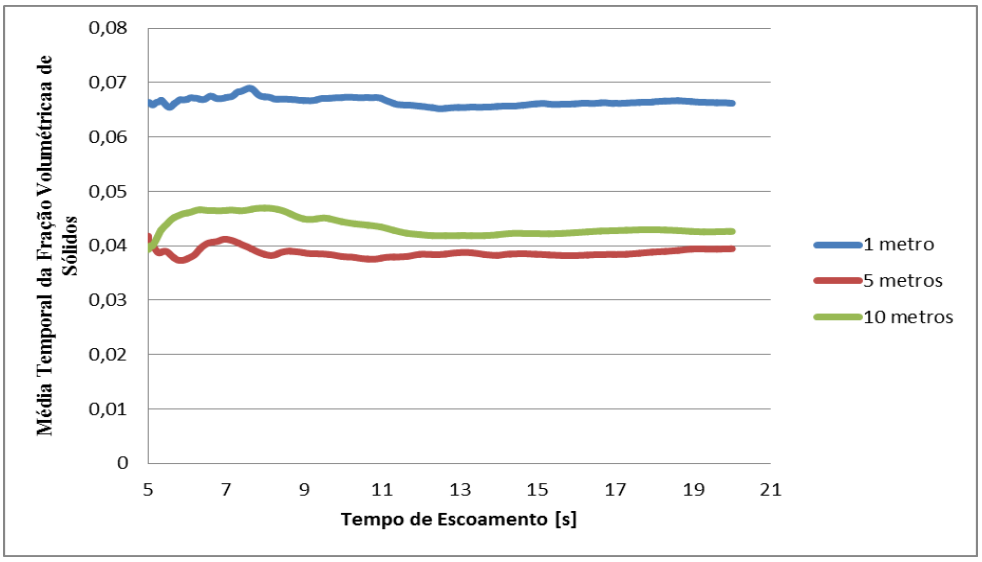

Figura 6.14: Análise do tempo de escoamento pela média temporal da fração volumétrica de sólidos.

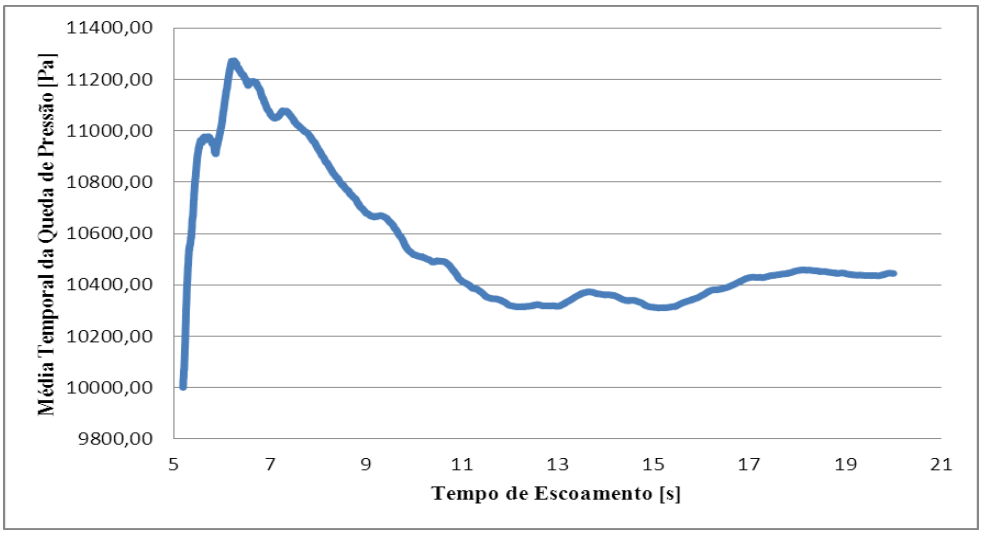

Figura 6.15: Análise do tempo de escoamento pela média temporal da queda de pressão.

6.4 Condições das simulações

6.4.1 Modelagem

Como dito anteriormente, foram usadas as abordagens euler-euler e DDPM nas simulações deste trabalho.

Na abordagem euler-euler, utilizou-se a modelagem euleriana tanto para a fase gás quanto para a fase particulada para avaliar o perfil da fração volumétrica, o perfil da velocidade dos sólidos e a tensão cisalhante gerada nas diferentes geometrias.

Na abordagem DDPM, pôde-se monitorar a trajetória das partículas individualmente e a erosão causada no topo do *riser* em cada geometria.

Para ambas as abordagens, empregou-se o modelo de turbulência κ-ε disperso para o escoamento das fases contínuas e as funções de parede padrão para a região próxima à parede do *riser*.

6.4.2 Condições de contorno

Neste item, serão definidas as condições de entrada e de saída do *riser* idênticas às do trabalho experimental de Pärssinen e Zhu (2001).

Entrada da carga

A base da tubulação principal do *riser* (entrada da carga) foi definida como *Velocity-Inlet* com a velocidade do ar atmosférico de 8 m/s.

Entrada de catalisador

A lateral da tubulação do *riser* (entrada de catalisador) foi definida como *Mass-Flow-Inlet*.

Para abordagem euler-euler, o fluxo de sólidos foi de 300 kg/m²s e o fluxo de ar atmosférico de 0,245 kg/m²s (fração volumétrica igual a 0,5).

Para a abordagem DDPM, o fluxo de ar atmosférico foi mantido em 0,245 kg/m²s. Adicionalmente foi criada uma injeção de partículas inertes na superfície com vazão mássica de 1,36 kg/s. O cálculo da trajetória das partículas foi realizado para cada 5 iterações da fase gasosa.

Os efeitos da turbulência foram incluídos na dispersão das partículas através do modelo de trajetória estocástico. Neste modelo, um número representativo de partículas é calculado ao invés de simular o número exato de partículas correspondente à vazão mássica. Para obter o número representativo apropriado de partículas que não influencie estatisticamente nos resultados da erosão no topo do *riser*, um teste de independência do número representativo de partículas foi realizado variando o número de tentativas na faixa de 2 a 20.

A Figura 6.16 mostra o maior valor de fluxo de erosão obtido na região de topo do *riser* para diferentes números representativos de partículas. Verifica-se que a partir de 4000 partículas o fluxo de erosão máxima se torna praticamente constante. Com os dados obtidos, foi possível especificar o número de 5270 partículas (que representou o número de tentativas igual a 10) para as demais simulações.

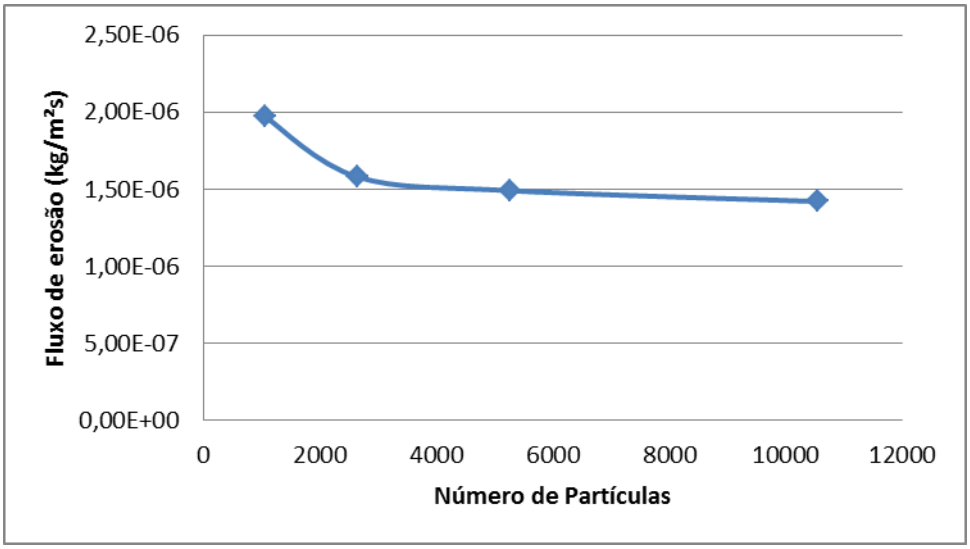

Figura 6.16: Análise do número representativo de partículas pelo fluxo de erosão máxima.

Saída

A saída do *riser* terá a condição de contorno do tipo *outflow* para abordagem a euleriana e do tipo *escape* para a abordagem DDPM.

Parede

As condições de contorno para a parede foram retiradas do trabalho de Cloete e outros (2010).

A interação da fase gasosa com a parede foi de aderência (*no-slip*) indicando que a fase terá a mesma velocidade da parede.

Para a interação da fase particulada com a parede foi definido um coeficiente de restituição igual a 0,9. O coeficiente de restituição partícula-parede descreve a quantidade de momento que é retido pela partícula após uma colisão com a parede (igual a um, indica que a partícula retém toda a quantidade de momento, ou seja, a colisão é elástica).

O coeficiente de especularidade é a medida de tensão cisalhante fornecida pelas colisões das partículas na parede variando de zero a um (valor igual a zero indica nenhuma tensão cisalhante na parede e valor próximo de um indica uma grande quantidade de transferência de momento lateral da partícula para a parede). Foi utilizado o valor de especularidade igual a 0,5.

Um resumo das condições de contorno utilizadas é apresentado na Tabela 6.3.

Tabela 6.3: Resumo das condições de contorno utilizadas.

	Abordagem Euleriana		Abordagem DDPM	
Entrada de carga	*Velocity-Inlet* Fase Gasosa - 8 m/s			
Entrada de catalisador	*Mass-Flow-Inlet*		*Mass-Flow-Inlet*	
	Fase Gasosa 0,245 kg/m²s	Fase Particulada 300 kg/m²s	Fase Gasosa 0,245 kg/m²s	Fase Particulada Injeção de partículas a 1,6 kg/s
Saída	*Outflow*			
Parede	*Wall* Fase Gasosa Não deslizamento Fase Particulada Coeficiente de especularidade = 0,5 Coeficiente de restituição partícula-parede = 0,9			

6.4.3 Propriedades das fases

As propriedades do ar das partículas foram as mesmas utilizadas no trabalho de Pärssinen e Zhu (2001) e estão apresentadas na Tabela 6.5.

Tabela 6.4: Propriedades das fases.

Densidade do ar	1,225 kg/m³
Viscosidade do ar	$1{,}7894e^{-5}$ kg/m.s
Diâmetro das partículas	67μm
Densidade das partículas	1500 kg/m³

Na abordagem DDPM, as partículas foram consideradas inertes de mesmo diâmetro e igual a 67 μm.

A interação entre as fases em um escoamento granular é dada através da função de arraste e do coeficiente de restituição entre partículas. Neste trabalho, a função de arraste foi determinada pela equação de Syamlal-O'brien (1989) e o valor do coeficiente de restituição partícula–partícula foi igual a 0,9, como utilizado no caso base de Cornelissen et al (2007) (Tabela 6.6).

Tabela 6.5: Interação entre as fases.

Função de arraste	Syamlal-O'brien
Coeficiente de restituição	0,9

A viscosidade das partículas foi calculada pela teoria cinética granular com os valores utilizados em Cornelissen et al (2007), como mostra a Tabela 6.7.

Tabela 6.6: Modelagem da Teoria Cinética Granular.

Viscosidade Colisional	Gidaspow et al
Viscosidade Cinética	Syamlal et al
Viscosidade Friccional	Schaeffer
Viscosidade global	Lun et al

6.4.4 Métodos de solução

Os métodos de simulação foram os mesmos usados no trabalho de Cloete e outros (2010). A resolução do problema foi realizada de forma segregada utilizando o método Phase Coupled SIMPLE para solução do acoplamento pressão-velocidade. Foi utilizada a discretização espacial de segunda ordem para todas as equações, exceto para a fração volumétrica que foi discretizada usando o método QUICK. Para a discretização temporal foi utilizada a discretização de segunda ordem implícita.

Convencionou-se o passo de tempo (*time step*) fixo de 5.10^{-3} segundos com 5 iterações por passo de tempo. O valor do passo de tempo foi escolhido de modo a obter o número de Courant próximo a 1, o que fornece um cálculo eficiente e estável.

O resumo dos métodos de solução é mostrado na Tabela 6.8.

Tabela 6.7: Resumo dos métodos de solução.

Regime	Transiente
Passo de tempo	5.10^{-3} segundo
Tempo total da simulação	20 segundos
Acoplamento pressão-velocidade	Phase-Coupled SIMPLE
Gradiente	Least Square Cell-Based
Pressão	Second Order Upwind
Momento	Second Order Upwind
Energia Cinética Turbulenta	Second Order Upwind
Taxa de Dissipação turbulenta	Second Order Upwind
Energia	Second Order Upwind
Fração Volumétrica	QUICK

6.5 Validação dos resultados

O modelo fluidodinâmico empregado foi validado através dos resultados experimentais obtidos por Pärssinen e Zhu (2001) através da comparação da distribuição da fração volumétrica de sólidos em três elevações axiais distintas situadas no fundo (3,96 metros), meio (6,34 metros) e topo (9,42 metros) do *riser*.

Os resultados experimentais mostraram que no perfil radial da fração volumétrica dos sólidos no fundo do *riser* existiam três zonas distintas: uma zona central que se estende de 0 a 0,02 metros do raio com concentração de partículas baixa e praticamente constante; uma zona intermediária que se estende de 0,02 a 0,03 metros do raio onde a concentração de partículas aumenta significativamente; e uma zona próxima à parede de 0,03 a 0,038 metros do raio com uma maior concentração de partículas. No topo do *riser*, foi observada uma concentração de partículas significativamente menor quando comparada com o fundo do *riser* e com duas zonas: uma extensa zona central com baixa concentração de partículas e um aumento repentino da concentração de sólidos próximo à parede.

As Figuras 6.17, 6.18 e 6.19 mostram a distribuição radial da concentração de sólidos nas elevações de 3,96; 6,34 e 9,42 metros do *riser*, respectivamente. Pode ser observado que os resultados simulados possuem o mesmo comportamento dos resultados experimentais: uma concentração de sólidos relativamente constante no centro do *riser* com um aumento do seu valor próximo à parede. Nota-se que a comparação dos resultados melhora quantitativamente à medida que se aproxima do topo do *riser*, ou seja, na região de maior interesse deste trabalho.

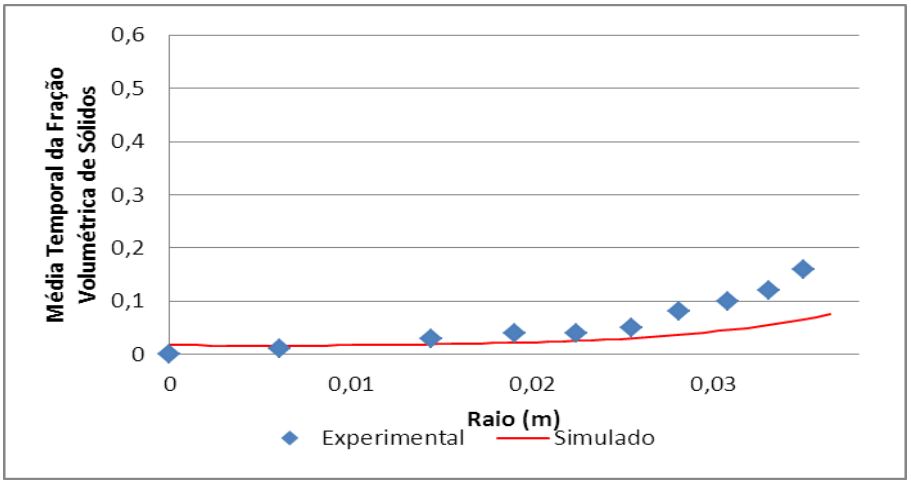

Figura 6.17: Distribuição radial da concentração de sólidos na elevação de 3,96 metros do *riser*.

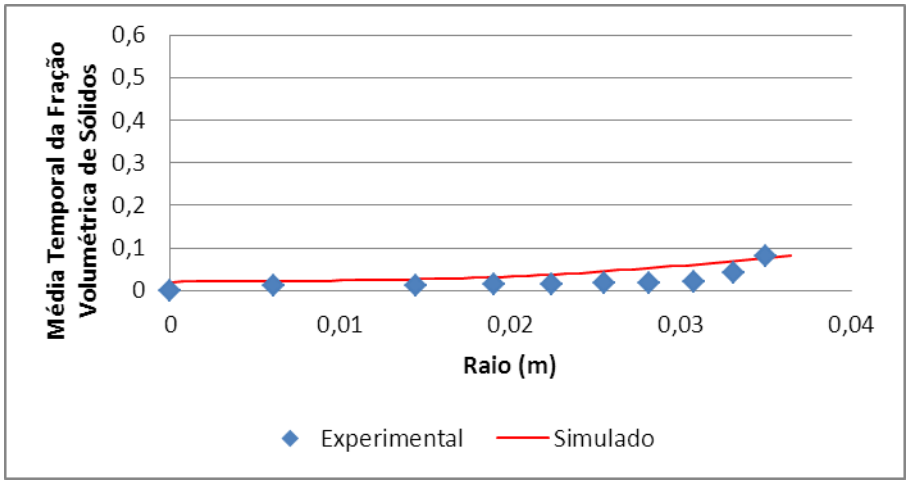

Figura 6.18: Distribuição radial da concentração de sólidos na elevação de 6,34 metros do *riser*.

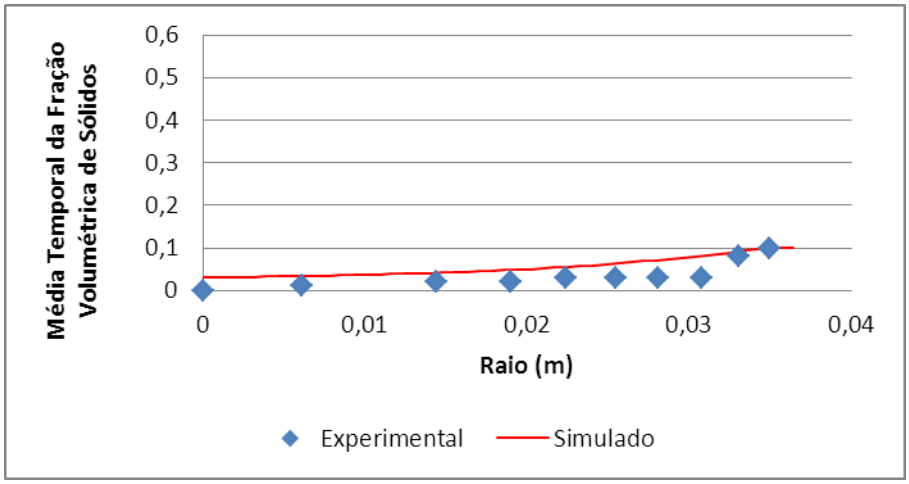

Figura 6.19: Distribuição radial da concentração de sólidos na elevação de 9,42 metros do *riser*.

7. Resultados e Discussão

7.1 Resultados pela abordagem euleriana

Nesta seção, são apresentados os resultados obtidos nas simulações utilizando a abordagem euleriana. Serão analisados a fração volumétrica de sólidos, o perfil de velocidade e a tensão cisalhante para cada geometria criada.

O perfil axial da concentração de sólidos ao longo do *riser* para as diferentes geometrias de saída foi analisado através da Figura 7.1, onde a média temporal da fração volumétrica de sólidos foi calculada nos planos transversais em diferentes elevações do *riser*. Nesta figura, verifica-se que, para todas as geometrias, a fração volumétrica de sólidos é maior no fundo do *riser* com valor acima de 0,15 e diminui gradativamente até atingir a altura próxima a 1 metro. Acima de 1 metro, a fração volumétrica de sólidos se torna relativamente constante até atingir a altura de 9 metros do *riser*.

O perfil axial da concentração de sólidos encontrado para as duas saídas abruptas do tipo L e do tipo T foi o perfil C, o mesmo verificado por Bai e outros (1992). Neste perfil, o fundo e o topo do *riser* possuem uma maior concentração de sólidos, enquanto que a região intermediária é mais diluída. Para as saídas do tipo L e do tipo T, a fração volumétrica de sólidos entre 1 e 9 metros de altura do *riser* permanece com valor relativamente constante em torno de 0,06 com um aumento considerável no topo do *riser* (altura acima de 9 metros) com valor acima de 0,1. Como o valor da fração volumétrica de sólidos é maior apenas na altura acima de 9 metros do *riser*, o perfil axial de concentração de sólidos indica que o efeito da geometria de saída ocorre apenas no topo do *riser*, ou seja, não se estende até o fundo do *riser*.

Para a saída curva, constatou-se que a concentração de sólidos é relativamente constante em todo o *riser* com valor da fração volumétrica de sólidos em torno de 0,04, não existindo aumento do seu valor no topo (altura acima de 9 metros do *riser*) como ocorreu para as saídas abruptas do tipo L e do tipo T. Este tipo de comportamento foi verificado por diversos autores, como Pugsley (1997), Pärssinen (2001), Wu (2010) e outros.

Nota-se que a fração volumétrica de sólidos entre 1 e 9 metros de altura do *riser* para a saída curva em torno de 0,04 é consideravelmente menor quando comparada com as saídas do tipo L e do tipo T que possui um valor em torno de 0,06.

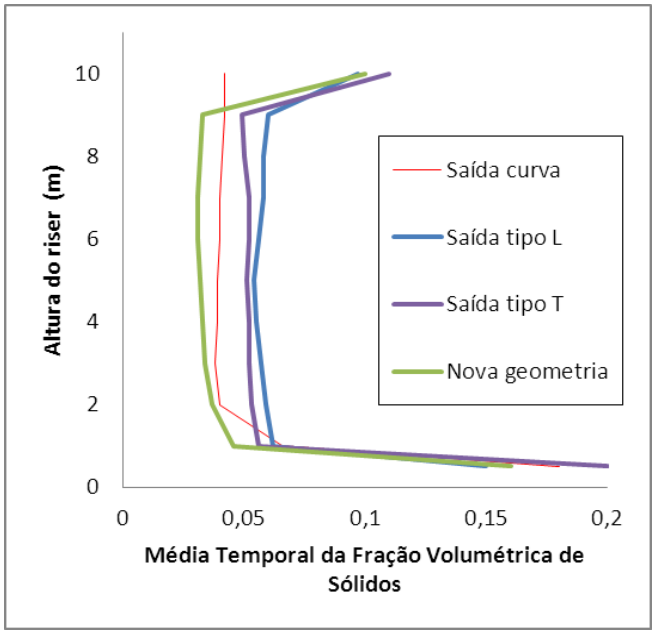

Figura 7.1: Distribuição axial da fração volumétrica de sólidos ao longo do *riser*.

Para a nova geometria, verifica-se que a fração volumétrica de sólidos entre 1 e 9 metros de altura do *riser* é menor quando comparada com as demais geometrias, com valor em torno de 0,03. Nota-se também que no topo do *riser* (altura acima de 9 metros) houve um aumento repentino da fração volumétrica de sólidos como ocorreu com as saídas abruptas do tipo L e do tipo T, indicando que o perfil axial da concentração de sólidos é um perfil C.

A concentração de sólidos no topo do *riser* para as diferentes geometrias também pode ser analisada na Figura 7.2, onde é apresentada a média temporal da fração volumétrica de sólidos em um plano axial central do *riser*. Foi observado um acúmulo de sólidos na parede do topo do *riser* em todos os casos. Este fato ocorre porque a densidade dos sólidos é bem maior que a do gás e, consequentemente, a inércia dos sólidos também é maior. Desta forma, os sólidos são facilmente separados do fluxo do gás seguindo em direção à parede do topo do *riser* enquanto que o gás segue em direção à saída do *riser*. Esses resultados estão de acordo com os mecanismos de trajetória dos sólidos em um *riser* sugeridos por Bai (1992), Harris (2003) e outros.

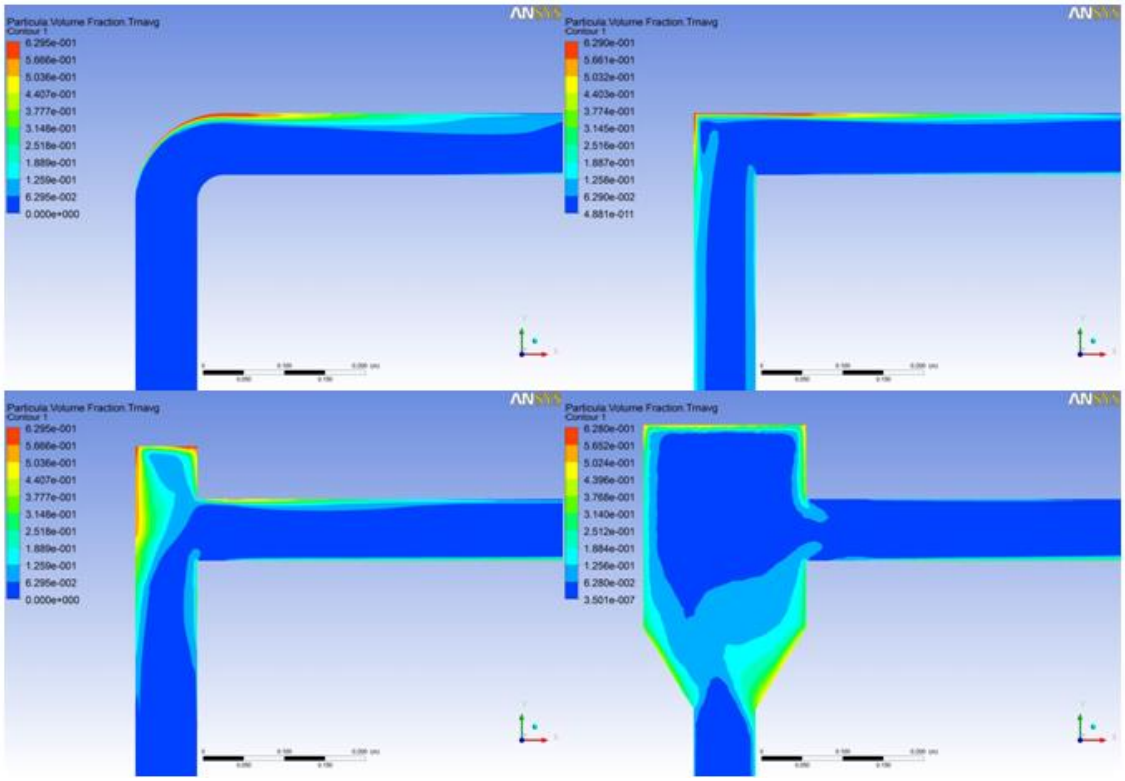

Figura 7.2: Distribuição axial da fração volumétrica de sólidos no topo do *riser*.

No caso das saídas abruptas do tipo L e do tipo T, o acúmulo de sólidos também foi observado no lado oposto ao da saída. Isto ocorre devido à resistência formada pelo fluxo descendente da mistura gás-sólido após o impacto com a parede do topo do *riser*, como foi verificado por De Wilde (2003), Van Engelandt (2011) e outros. Pode-se constatar que a saída do tipo T forneceu um maior acúmulo de sólidos no topo em comparação com a saída do tipo L.

Na nova geometria verificou-se um aumento da fração volumétrica próximo às paredes da maior tubulação e, principalmente, na região cônica. Porém, na região central da maior tubulação, não foi observado um aumento considerável da fração volumétrica de sólidos.

O acúmulo de sólidos observado na região próxima às geometrias abruptas do tipo L e do tipo T foi confirmado na Figura 7.3, onde é mostrada a média temporal da fração volumétrica de sólidos nos planos horizontais localizados nas elevações 5 e 10 metros do *riser*. Na altura de 5 metros, encontramos o perfil *core-annulus* bastante similar para todas as geometrias: uma região central com uma pequena concentração de sólidos e uma região anular próxima à parede com um maior acúmulo de sólidos.

Observou-se que, para a saída curva, o acúmulo de sólidos na região anular é bastante similar em 5 e 10 metros do *riser*, comprovando que não ocorre efeito de saída para esta configuração. Em contrapartida, nas saídas abruptas do tipo L e do tipo T próximo à saída do *riser* (na altura de 10 metros) a região anular se torna mais concentrada, resultado do fluxo descendente de sólidos na região. Também foi observado um acúmulo de sólidos maior na região anular na altura de 10 metros para a nova geometria.

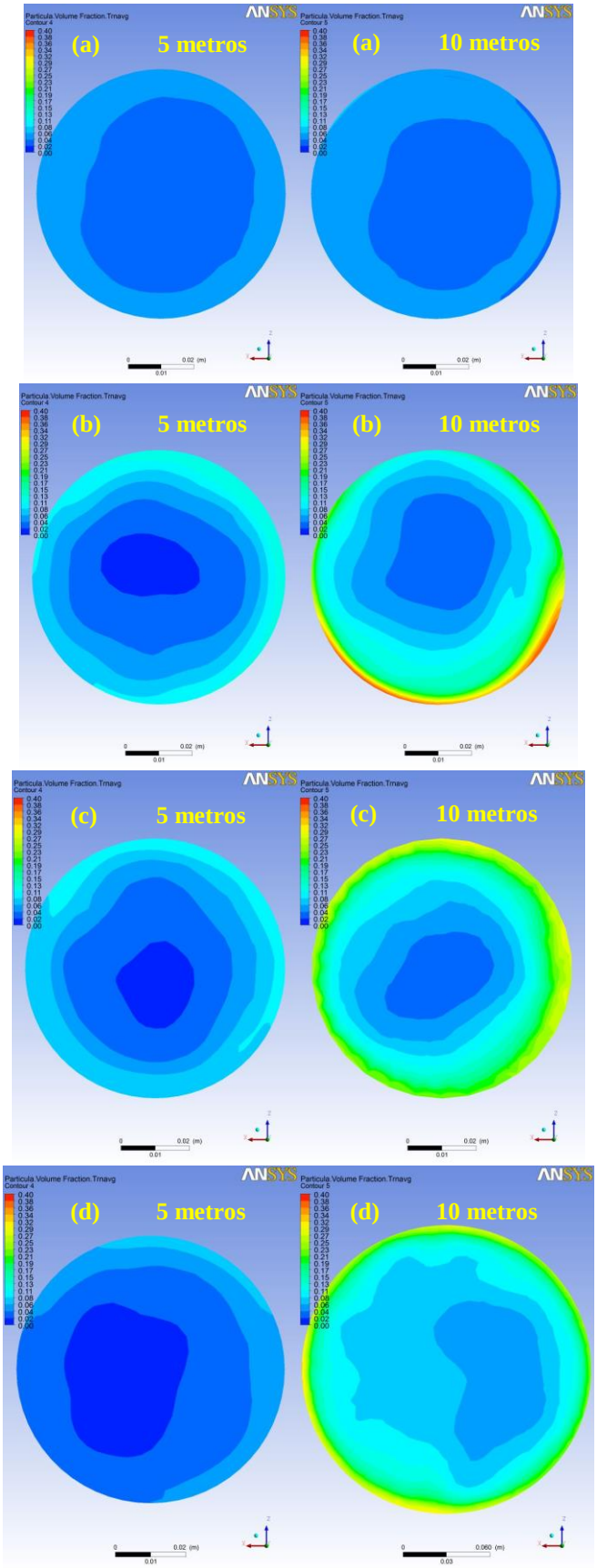

Figura 7.3: Distribuição radial da fração volumétrica de sólidos em 5 e 10 metros de altura do *riser* para: (a) saída curva, (b) saída do tipo L, (c) saída do tipo T e (d) nova geometria.

Para uma melhor análise do comportamento das partículas nas geometrias estudadas, o perfil de velocidades e os vetores velocidade das partículas no topo do *riser* são apresentados na Figura 7.4. Para a geometria curva, não foi observado um fluxo de partículas descendente na região de topo. Neste caso, como não houve refluxo de sólidos devido à geometria de saída, a região de topo da saída curva não apresentou um aumento de fração volumétrica de sólidos, o que justifica os resultados encontrados nas Figuras 7.2 e 7.3. Para a geometria abrupta do tipo L, foi encontrado um fluxo descendente de sólidos bem próximo à parede oposta à saída do *riser* indicando o início da formação de um vórtice. Já a geometria abrupta do tipo T apresentou nitidamente a formação de um vórtice na extensão do *riser* com um grande fluxo descendente de sólidos no lado oposto ao da saída do *riser*, como foi observado por De Wilde (2003), Van Engelandt (2011) e outros.

Ao comparar as Figuras 7.2 e 7.4, percebe-se que a formação do vórtice aumenta consideravelmente a concentração de sólidos nas suas imediações, porém no centro do vórtice a concentração de sólidos não é aumentada.

Para a nova geometria, nota-se um fluxo ascendente de sólidos no lado oposto ao da saída e um fluxo descendente de sólidos desde o topo até a região cônica no lado próximo à saída do *riser*. Este comportamento indica a formação de um grande vórtice no centro da maior tubulação se estendendo da parede do topo até a região cônica. Desta forma, conclui-se que o aumento da fração volumétrica na nova geometria próximo à parede do *riser* ocorre devido ao grande vórtice formado.

Como na abordagem euleriana a fase particulada é considerada um pseudofluido (a trajetória das partículas não é calculada e, com isso a velocidade e o ângulo de impacto das partículas na parede devem ser estimados), não é possível obter a erosão causada pelas partículas na superfície diretamente. Desta forma, para esta abordagem, a tensão cisalhante é um bom indicativo para prever qualitativamente possíveis regiões que sofrem erosão causada pelas partículas. A Figura 7.5 mostra a tensão cisalhante causada pelas partículas no topo do *riser*.

Para a saída curva, a região com maior tensão cisalhante causada pelas partículas é observada na superfície que é projeção da região de entrada. A máxima tensão cisalhante para esta saída é de 662 Pa.

O mesmo comportamento foi observado para saída abrupta do tipo L, porém com a máxima tensão cilhante igual a 506 Pa, valor menor que o encontrado para a saída curva.

Para a saída abrupta do tipo T, foram observadas duas regiões que apresentaram uma maior tensão cisalhante: a extensão do *riser* e a região entre a extensão e a tubulação horizontal. Na extensão do *riser*, tanto o final da extensão quanto as laterais sofreram tensão, porém em menores valores que a região entre a extensão e a tubulação horizontal. A máxima tensão cisalhante encontrada entre a extensão e a tubulação horizontal é de 802 Pa.

Analisando o efeito da geometria na tensão cisalhante em topo de *risers*, conclui-se que a saída do tipo L apresentou o menor valor de tensão cisalhante máxima (506 Pa) seguido da saída curva (662 Pa) e saída so tipo T (802 Pa).

Na nova geometria, a região com maior tensão cisalhante foi observada no final da maior tubulação e na região cônica. Porém, nota-se que a máxima tensão cisalhante para esta saída é de 75 Pa, o menor valor obtido comparando com as demais geometrias típicas usadas em *risers* das unidades de FCC.

Com o objetivo de analisar visualmente a influência da geometria na tensão cisalhante, a Figura 7.6 mostra a tensão cisalhante na escala de 0 a 100 Pa para todas as geometrias estudadas. Visualmente, as saídas curva, abrupta do tipo L e abrupta do tipo T apresentaram uma área de tensão cisalhante bastante similar. Em contrapartida, a nova geometria, em comparação com as demais saídas, não apresentou altos valores de tensão cisalhante.

Analisando a tensão cisalhante com os vetores velocidade da fase particulada (Figura 7.4), é possível concluir que o aumento da tensão cisalhante ocorre nas regiões que sofrem impacto direto das partículas, o que corrobora a relação entre esta e a erosão, como mencionado no parágrafo anterior.

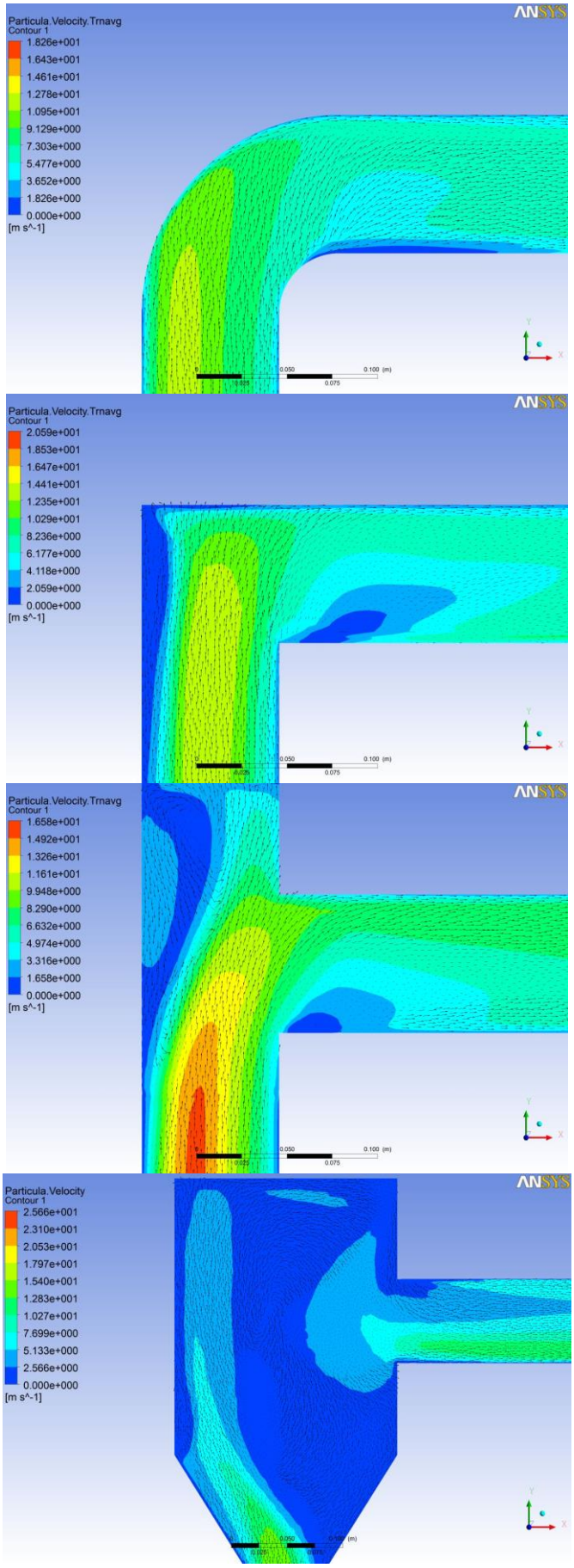

Figura 7.4: Vetores velocidade da fase particulada no topo do riser (m/s).

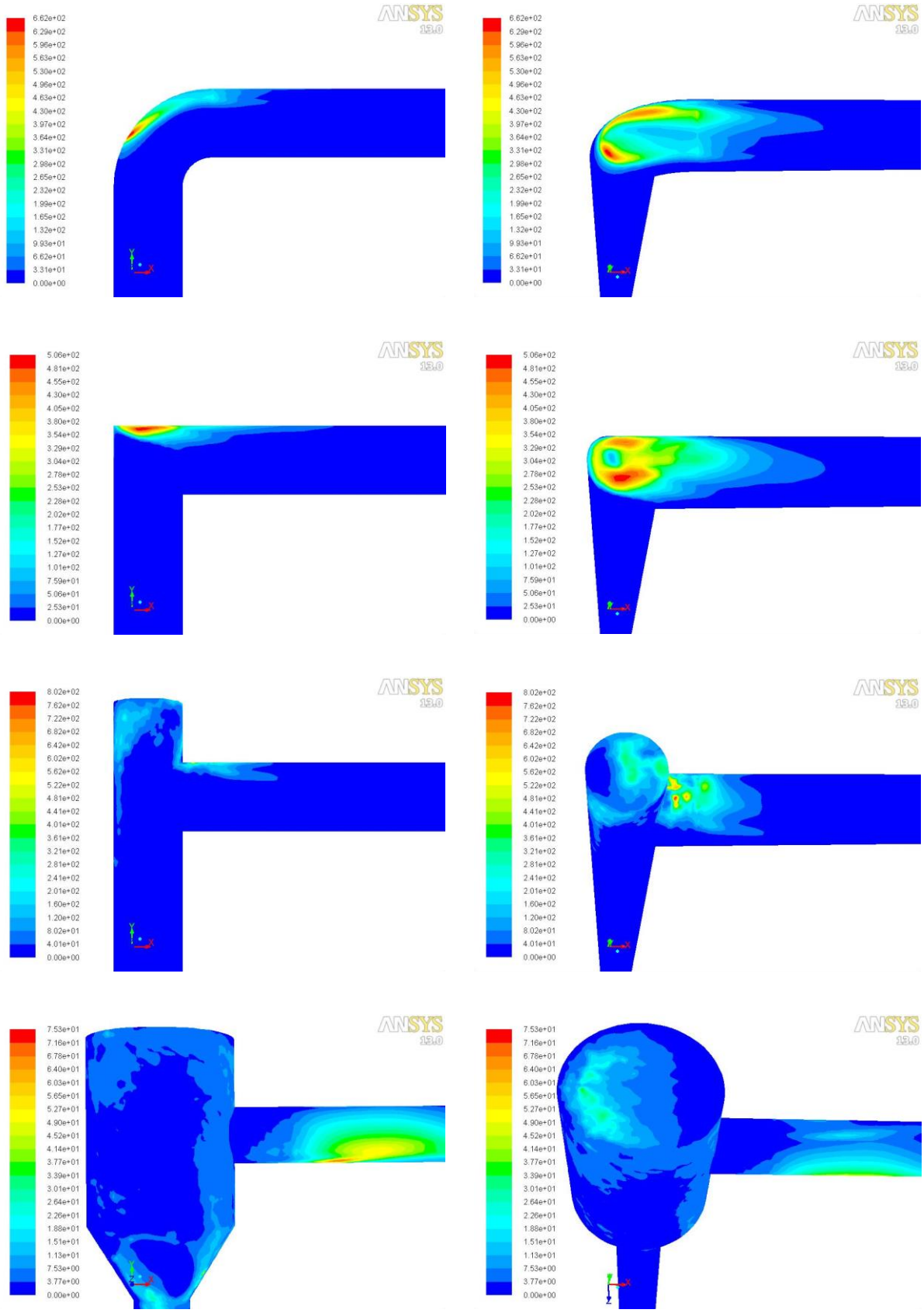

Figura 7.5: Tensão cisalhante da fase particulada no topo do *riser* (Pa).

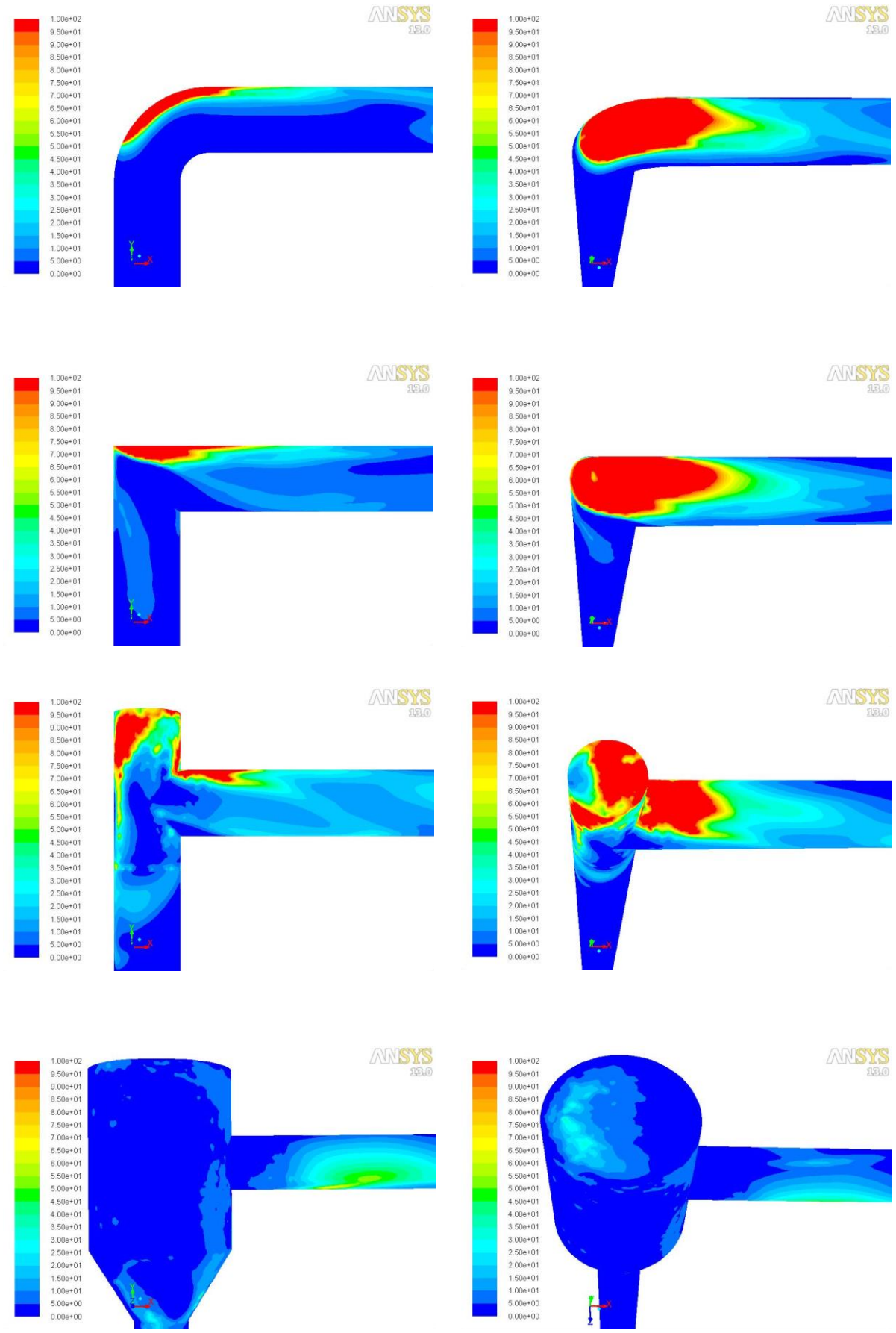

Figura 7.6: Tensão cisalhante da fase particulada no topo do *riser* (escala de 0 a 100 Pa).

7.2 Resultados pela abordagem DDPM

Nesta seção, serão apresentados os resultados obtidos utilizando a abordagem DDPM. Adicionalmente, os resultados obtidos pela abordagem DDPM serão comparados com os resultados obtidos pela abordagem euleriana.

Na abordagem DDPM, a fase particulada é descrita pela trajetória de partículas individualmente e desta forma pode-se analisar o efeito da geometria de saída pela trajetória das partículas e pela erosão causada.

A Figura 7.7 mostra a trajetória das partículas no topo do *riser* para as diferentes geometrias estudadas. Para a saída curva, verifica-se que a maioria das partículas choca na parede do topo e segue para a saída do *riser* pela seção superior da tubulação horizontal. Este mesmo efeito pode ser observado na Figura 7.4, com os resultados de tensão cisalhante obtidos com a abordagem euleriana.

Para a saída abrupta do tipo L, parte das partículas choca na parede do topo e segue para a saída do *riser*, e a outra parte das partículas choca na parede, desce por uma pequena distância no lado oposto ao da saída e depois segue para a saída do *riser*. É possível notar que o fluxo descendente de sólidos apenas no lado oposto ao da saída do *riser* aumenta a fração volumétrica de sólidos nesta região como verificado na Figura 7.2, e gera um pequeno vórtice como encontrado na Figura 7.4.

Para a saída abrupta do tipo T, pode-se verificar que parte das partículas choca na extensão do *riser*, desce por uma pequena distância no lado oposto ao da saída e segue para a saída do *riser* com o fluxo de gás ou são novamente levadas pelas partículas que estão subindo para a extensão do *riser*. Este processo cíclico de descida e subida das partículas leva à formação do vórtice na extensão do *riser* com o aumento da fração volumétrica de sólidos nesta região, como verificado na Figura 7.2. Outra parte das partículas choca diretamente na região entre a extensão e a tubulação horizontal e segue para a saída do *riser*.

Para a nova geometria, as partículas percorrem uma longa trajetória até a saída do *riser*. As partículas se chocam na parede do topo e retornam à seção cônica; outra parte não consegue atingir a parede do topo, retorna do meio da tubulação maior para a seção cônica em um processo cíclico até conseguir sair do *riser*. Na seção cônica, as partículas descem pela parede em movimentos espiralados até serem levadas pelo fluxo ascendente da mistura sólido-gás. Desta forma, conclui-se que os movimentos espiralados repetidos pelas partículas na seção cônica levam a um aumento da fração volumétrica de sólidos nesta região como foi visto na Figura 7.2.

O fluxo da erosão causada pelas partículas no topo do *riser* é mostrado na Figura 7.8. De modo a comparar a erosão causada pelas diferentes geometrias estudadas no presente trabalho, a Figura 7.9 mostra o fluxo da erosão na escala de 0 a 1,6e-06 kg m^{-2} s^{-1}.

Na figura 7.8, observa-se que a saída curva e a saída do tipo L apresentam maiores valores de fluxo de erosão na parede que é projeção da região de entrada, com valor máximo igual a 1,4e-06 e 9,2e-07 kg m^{-2} s^{-1}, respectivamente. A região de maior erosão sofre diretamente os impactos das partículas conforme a Figura 7.7. Este mesmo perfil também foi verificado em saídas curvas por Chen e outros (2006).

Na Figura 7.9, nota-se que a dimensão da área no topo do *riser* que sofre um maior fluxo de erosão para a saída curva é praticamente a mesma da saída do tipo L, porém a saída curva apresenta pequenas regiões com fluxo de erosão intenso.

A saída do tipo T possui maiores valores de fluxo de erosão na extensão (lateral e final da extensão) e na região entre a extensão e a tubulação horizontal, com valor máximo igual a 2,7e-06 kg m^{-2} s^{-1}. Parslow e outros (1999), através de dados experimentais, também constataram que estas duas regiões sofrem maior erosão em uma saída do tipo T. Pela Figura 7.7, nota-se que o final da extensão e a região entre a extensão e a tubulação horizontal são as regiões mais propensas aos impactos das partículas e, por isso, apresentam maiores valores de fluxo de erosão. Na lateral da extensão do *riser*, o principal motivo do maior fluxo de erosão estar localizado nesta região pode ser dado pela circulação das partículas com movimentos repetidos na extensão.

Na figura 7.9, a saída do tipo T apresenta uma área de maior dimensão de fluxo de erosão intensa em comparação com a saída curva e a saída do tipo L, principalmente no final da extensão.

A nova geometria possui duas principais regiões que sofrem os efeitos da erosão: o final da maior tubulação do *riser* e a região cônica, com valor máximo do fluxo da erosão igual a 7,0e-05 kg m^{-2} s^{-1}. O final da maior tubulação apresenta a erosão devido aos impactos diretos das partículas, assim como também é observado no topo das demais geometrias. Entretanto, a erosão gerada na região cônica é mais influenciada pelos movimentos espiralados das partículas nesta região como mostra a Figura 7.7.

Em relação às demais geometria, a nova geometria apresenta uma maior área de erosão intensa, principalmente na região cônica, como mostra a Figura 7.9.

Analisando os resultados de erosão obtidos pela abordagem DDPM (Figura 7.9) e os resultados obtidos de tensão cisalhante pela abordagem euleriana (Figura 7.6) nota-se que a tensão cisalhante pode prever as regiões com maior tendência à erosão de forma qualitativa. Entretanto, uma análise comparativa dos efeitos da geometria na erosão só pode ser feita através dos resultados da erosão pela abordagem DDPM, visto que a nova geometria, em comparação com as demais saídas, não apresentou valores altos de tensão cisalhante, porém apresentou a maior área de erosão intensa. Esta diferença nos resultados pode ser atribuída ao fato da erosão ser mais influenciada pelo movimento espiralado das partículas na região cônica que a tensão cisalhante.

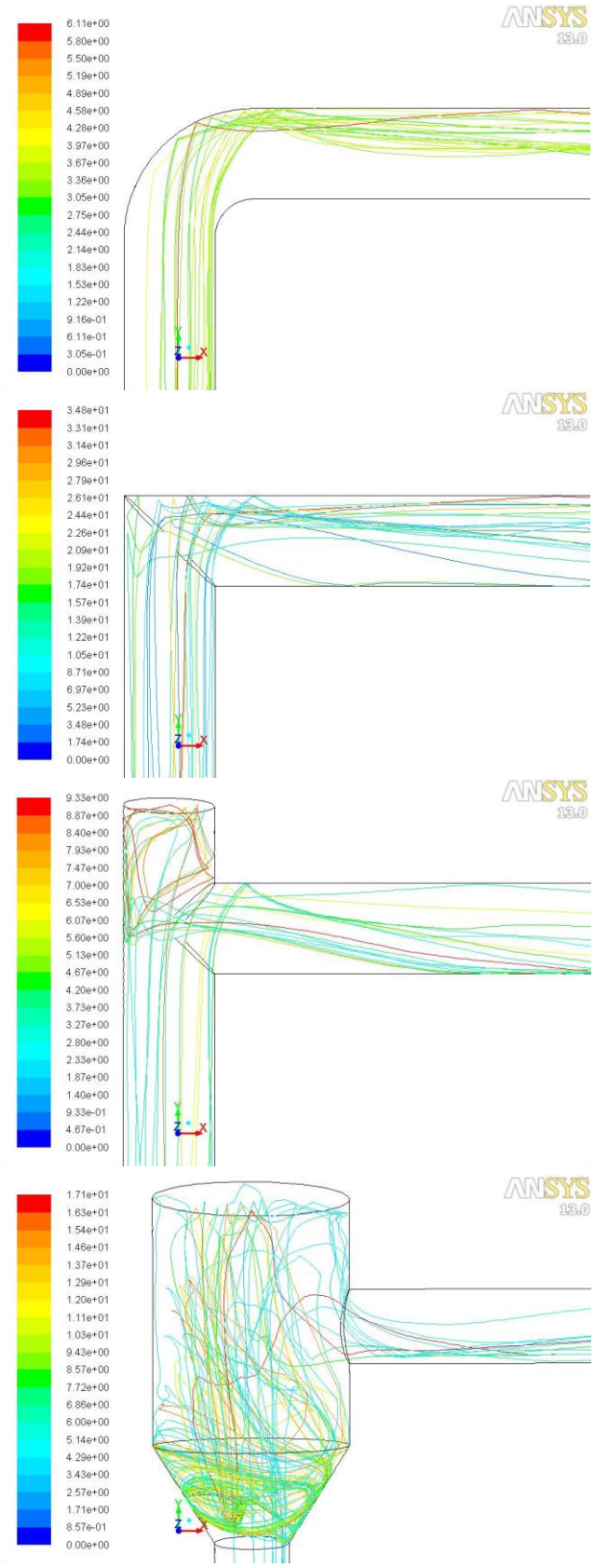

Figura 7.7: Trajetória das partículas no topo do *riser* (colorida pelo tempo de residência em segundos).

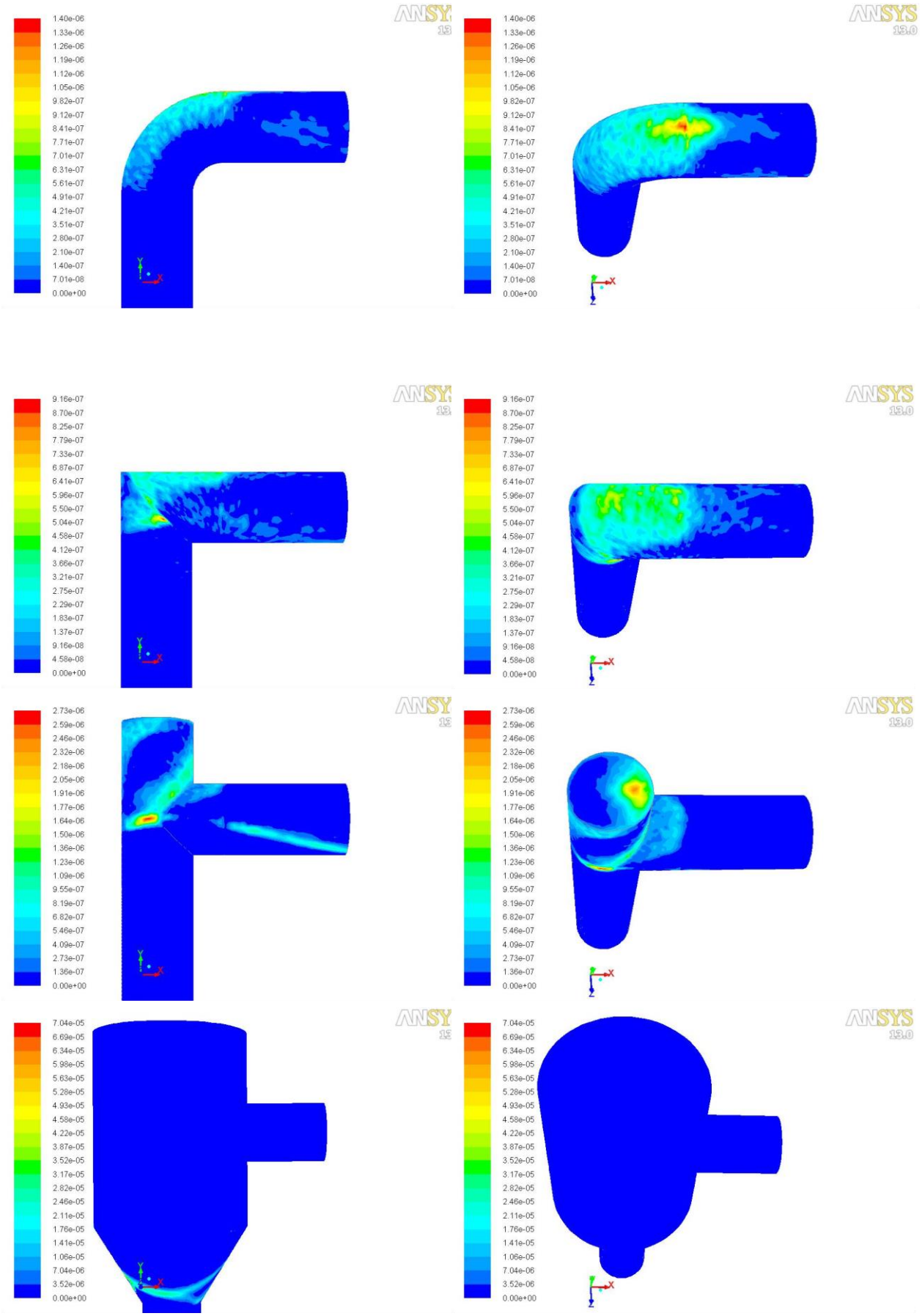

Figura 7.8: Fluxo de erosão causada pelas partículas no topo do *riser* (kg m^{-2} s^{-1}).

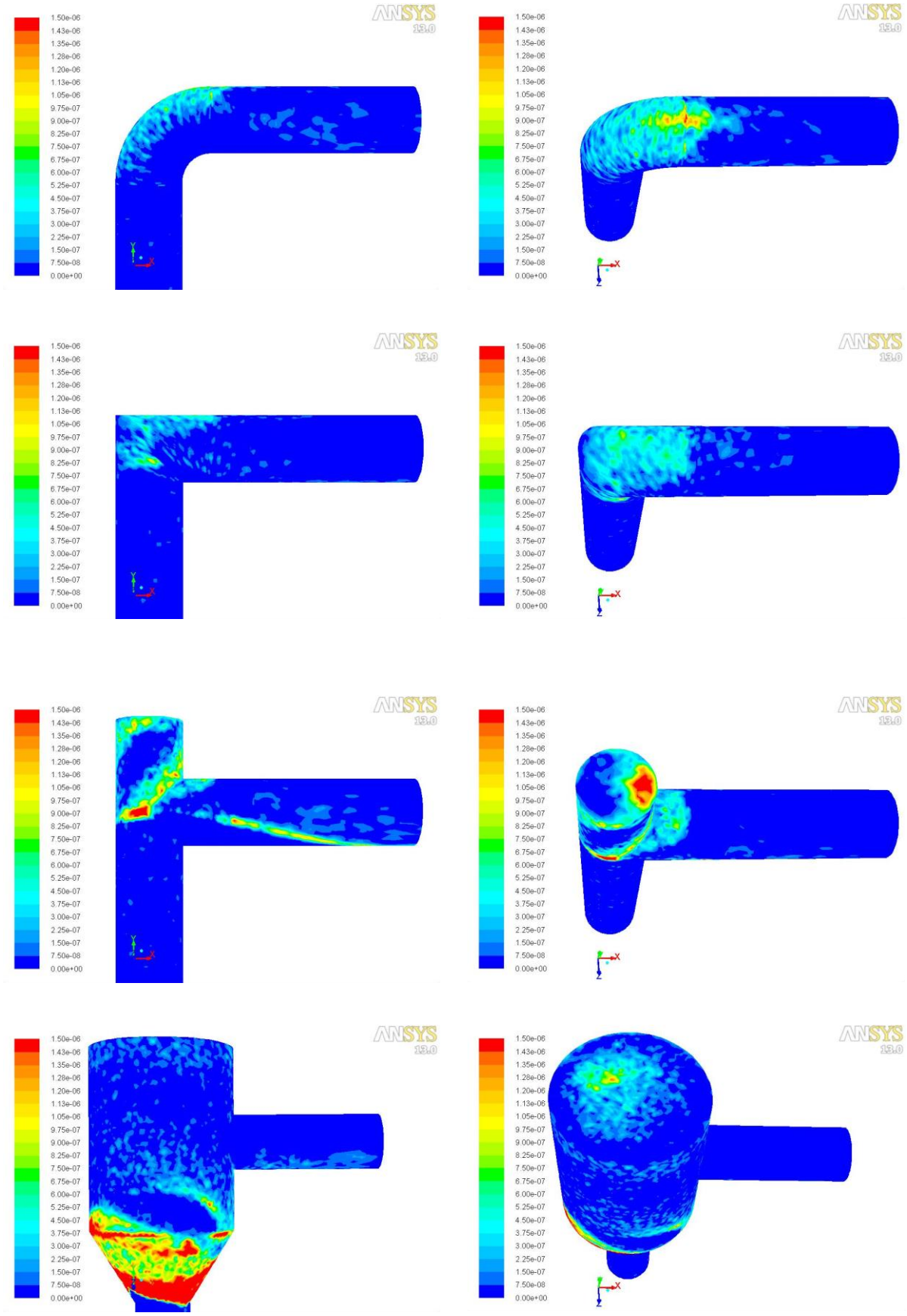

Figura 7.9: Fluxo de erosão causada pelas partículas no topo do *riser* (escala de 0 a 1,6e-06 kg m^{-2} s^{-1}).

Com o objetivo de obter a influência da geometria na erosão em topo de *risers* de forma quantitativa, a Tabela 7.1 apresenta o maior valor de fluxo de erosão causada pelas partículas no topo do *riser* (erosão máxima). Os resultados indicam que as saídas curva, abrupta do tipo L e abrupta do tipo T apresentam o fluxo de erosão máximo na mesma ordem de grandeza, porém a saída curva apresenta o menor valor igual a 1,4e-06 kg m^{-2} s^{-1}. Em contrapartida, observa-se que a nova geometria forneceu o maior fluxo de erosão máxima, igual a 7,0e-0,5 kg m^{-2} s^{-1}, em relação às demais saídas.

A Tabela 7.2 apresenta a média em área do fluxo de erosão no topo do *riser* (erosão média). Os valores da erosão média foram calculados na superfície acima da altura de 9,7 metros do *riser*. Nota-se que a saída do tipo L apresenta o menor valor de erosão média no topo do *riser*, igual a 4,8e-0,8 kg m^{-2} s^{-1}. Em relação a esta geometria, a saída do tipo T fornece uma erosão média em torno de 2 vezes maior, enquanto que a erosão média da nova geometria chega a ser 22 vezes maior.

Tabela 7.1: Fluxo da erosão máxima no topo do *riser*.

	Saída curva	Saída do tipo L	Saída do tipo T	Nova geometria
Erosão máxima no topo do *riser* (kg m^{-2} s^{-1})	1,4e-06	9,2e-06	2,7e-06	7,0e-05

Tabela 7.2: Fluxo da erosão média no topo do *riser*.

	Saída curva	Saída do tipo L	Saída do tipo T	Nova geometria
Erosão média no topo do *riser* (kg m^{-2} s^{-1})	5,7e-08	4,8e-08	9,5e-08	1,1e-06
Erosão média no topo do *riser* (mm/ano)	1,2	1,0	2,0	22,1
Relação da erosão entre as geometrias e a saída do tipo L	1	-	2	22

8. Conclusões

O estudo do comportamento das partículas de catalisador foi avaliado para diferentes configurações de saída do *riser* de uma unidade de FCC através do software FLUENT 13.0 da ANSYS. Foi avaliada a influência da geometria de saída do *riser* na erosão através de duas abordagens diferentes: euleriana e DDPM.

Para saída curva foi identificado um perfil exponencial de concentração de sólidos, em que a fração volumétrica de sólidos é praticamente constante ao longo do *riser* (valor em torno de 0,04), porém com um aumento da fração volumétrica somente no fundo do *riser* (valor acima de 0,15). Não foi observado um fluxo descendente de partículas (refluxo de sólidos) para esta saída. A erosão máxima foi observada na parede da tubulação que é projeção da entrada do *riser* com um valor de fluxo de erosão igual a 1,4e-0,6 kg m^{-2} s^{-1}. O local de erosão máxima sofre o impacto direto das partículas na parede.

Para as saídas abruptas do tipo L e do tipo T foi identificado um perfil C de concentração de sólidos, em que a fração volumétrica de sólidos é praticamente constante ao longo do *riser* (valor em torno de 0,06), com uma maior fração volumétrica de sólidos no topo e no fundo do *riser* (valores acima de 0,1 e 0,15, respectivamente). Notou-se um fluxo descendente de sólidos no lado oposto da saída do *riser* (refluxo de sólidos) que gerou o aumento da concentração de sólidos no topo do *riser*. Foi observada a formação de um vórtice para as duas saídas devido ao refluxo de sólidos, porém notou-se a formação de vórtice com maiores dimensões para a saída do tipo T. O perfil de erosão para a saída do tipo L foi semelhante ao encontrado para a saída curva, com uma erosão máxima na parede da tubulação que é projeção da entrada do *riser*, porém com um valor de fluxo de erosão maior e igual a 9,2e-0,6 kg m^{-2} s^{-1}. Já para a saída do tipo T, foram identificadas duas regiões de erosão máxima com um valor de fluxo de erosão igual a $2{,}7.10^{-6}$ kg m^{-2} s^{-1}: na extensão do *riser* e na região entre a extensão e a tubulação horizontal.

A nova geometria também apresentou um perfil C de concentração de sólidos, com uma fração volumétrica de sólidos praticamente constante ao longo do *riser* e em menor valor em ralação às demais geometrias (valor em torno de 0,03) e uma maior fração volumétrica de sólidos no topo e no fundo do *riser* (valores acima de 0,1 e 0,15, respectivamente). No topo, a região de maior concentração de sólidos foi observada próxima à parede da maior tubulação e na região cônica devido à formação de um grande vórtice. A erosão máxima foi obtida na parede da região cônica com um valor de fluxo de erosão igual a 7,0e-0,5 kg m^{-2} s^{-1}, local onde ocorre um movimento espiralado das partículas.

Comparativamente entre as saídas comumente utilizadas em *risers* de unidades de FCC, as saídas curva e abrupta do tipo L apresentaram o menor valor de erosão média, iguais a 1,2 e 1,0 mm/ano, respectivamente. Entretanto, a saída do tipo T apresentou praticamente o dobro da erosão média em relação à saída do tipo L. A nova geometria proposta apresentou a maior erosão média, cerca de 22 vezes maior que a saída do tipo L, e com isso a sua utilização apresenta desvantagens para prevenção da erosão quando comparada com as geometrias normalmente utilizadas.

Foi observado que os resultados de tensão cisalhante obtidos pela abordagem euleriana podem prever qualitativamente as regiões com maior tendência à erosão.

Porém, a influência da geometria na erosão só pode ser analisada através dos resultados obtidos pela abordagem DDPM.

Recomendações para trabalhos futuros

Como trabalho futuro, sugere-se a construção da geometria proposta para testes experimentais e a utilização de outros modelos de erosão como os utilizados por Njobuenwu e Fairweather, 2012 (modelo de Grant e Tabakoff, modelo de Menguturk and Sverdrup, modelo de erosão E/CRC, modelo de Oka, Okamura, and Yoshida e o modelo de Huang et al), a fim de verificar qual dos modelos de erosão melhor se ajusta aos dados experimentais.

Outra sugestão para trabalho futuro é o estudo de outras geometrias com o objetivo de minimizar o efeito da erosão causado pelas partículas de catalisador em *risers* de unidades de FCC.

Referências

AMEZCUA, A. C., Muñhoz, A. G., Romero, C. A., Czerwiec, Z. M., Amezcua, R. C. Numerical investigation of the solid particle erosion rate in a steam turbine nozzle. *Applied Thermal Engineering*, n. 27, p. 2394-2403, 2007.

ANSYS FLUENT 13.0 - Theory Guide. Ansys Inc. USA, 2011.

ANSYS FLUENT 13.0 – User's Guide. Ansys Inc. USA, 2011.

Bai, D. R., Jin, Y., Yu, Z. Q., Zhu, J. X. The axial distribution of the cross-sectionally averaged voidage in fast fluidized beds. *Powder Technology*, n. 71, p. 51-58, 1992.

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. Dissertação de Mestrado.

Blazek, J. Computational Fluid Dynamics - Principles and Applications, 1ª ed. Kidlington, UK: Elsevier Science, 2001.

Chen, X., McLaury, B. S., Shirazi, S. A. Numerical and experimental investigation of the relative erosion severity between plugged tees and elbows in dilute gas/solid two-phase flow. Wear, n. 261, p. 715-729, 2006.

Cloete, S., Johansen, S., Braun, M., Popoff, B., Amini, S. Evaluation of a Lagrangian Discrete Phase Modeling Approach for Resolving Cluster Formation in CFB Risers. In: 7th International Conference on Multiphase Flow, 2010, FL USA.

Cornelissen, J. T., Taghipour, F., Escudié, R., Ellis, N., Grace, J. R. CFD modelling of a liquid–solid fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, n. 62, p. 6334-6348, 2007.

De Wilde, J., Marin, G. B., Heynderickx, J. The effects ofabrupt T-outlets in a riser: 3D simulation using the kinetic theory of granular flow. *Chemical Engineering Science*, n. 58, p. 877-885, 2003.

Finnie, I. Erosion of Surfaces by Solid Particles. *Wear*, n. 3, p.87-103, 1960.

Freire, A. P. S., Menut, P. P. M., Su, J., Turbulência. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Ciências Mecânicas, 1998. vol. 1 e 5. (Coleção Cadernos de Turbulência).

Gidaspow, D., Bezburuah, R., Ding , J. Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds, Kinetic Theory Approach. In Fluidization VII, Proceedings of the 7th Engineering Foundation Conference on Fluidization, p. 75–82, 1992.

Gidaspow, D. Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions. New York: Academic Press, 1994.

Grant, G., Tabakoff, W. Erosion Prediction in Turbomachinery Resulting from Environmental Solid Particles. *Journal of Aircraft*, vol. 12, p. 471-478, 1975

Gupta, S. K., Berruti, F. Evaluation of the gas–solid suspension density in CFB risers with exit effects. *Powder Technology*, n. 108, p. 21-31, 2000.

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. *AIChE Journal*, vol. 49, n. 1, p. 52-64, 2003.

Hartge, E., Ratschow, L., Wischnewski, R., Werther, J. CFD-simulation of a circulating fluidized bed riser. Particuology, n. 7, p.283-296, 2009.

Haugen, K., Kvernvold, O., Ronold, A., Sandberg, R. Sand Erosion of Wear Resistant Materials. *Wear*, vol. 186-187, p. 179-188, 1995.

Hinze, J. O. Turbulence. McGraw-Hill Publishing Co., New York, 1975.

Humphrey, J. A. C. Fundamentals of fluid motion in erosion by solid particle impac. *Heat and Fluid Flow*, vol. 11, n. 3, p. 170-195, 1990

Índio do Brasil, N. , Araújo, M. A. S., Sousa, E. C. M. Processamento de Petróleo e Gás, 1ª ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora, 2011.

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

Issangya, A. S., Bai, D. Bi, H. T., Lim, K. S., Zhu, J., Grace, J. R. Suspension densities in a high-density circulating fluidized bed riser. *Chemical Engineering Science*, n. 54, p. 5451-5460, 1999.

Kunii, D., Levenspiel, O. Fluidization Engineering, 2ª ed. Boston: Butterworth-Heinemann, 1991

Lackermeier, U., Werther, J. Flow phenomena in the exit zone of a circulating fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, n. 41, p. 771-783, 2002.

Launder, B. E., Spalding, D. B. The Numerical Computation of Turbulent Flows. *Computer Methods in* Applied *Mechanics and Engineering*, n. 3, p. 269–289, 1974.

Lee, B. E., Tu, J. Y., Fletcher, C. A. J. On numerical modeling of particle-wall impaction in relation to erosion prediction: Eulerian versus Lagrangian method. *Wear,* n. 252, p. 179-188, 2002.

Lim, K. S., Zhu, J. X., Grace, J. R. Hydrodynamics of Gas-Solid Fluidization. *Int. J. Multiphase Flow,* vol. 21 (suppl.), p. 141-193, 1995.

Lopes, G. C., Rosa, L. M., Mori, M., Nunhez, J. R., Martignoni, W. P. *International Journal of Chemical Engineering,* vol. 2012, p. 1-16, 2012.

Lun, C. K. K., Savage , S. B., Jeffrey, D. J., Chepurniy, N. Kinetic Theories for Granular Flow: Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flow Field. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 140, p. 223–256, 1984.

Maliska, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, 2ª ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora, 2004.

Martin, M. P., Turlier, P., Bernard, J. R., Wild, G. Gas and solid behavior in cracking circulating fluidized beds. *Powder Technology,* n. 70, p. 249-258, 1992.

Meer, E. H. van der, Thorpe, R. B., Davidson, J. F. Flow patterns in the square cross-section riser of a circulating fluidised bed and the effect of riser exit design. *Chemical Engineering Science,* n. 55, p. 4079-4099, 2000.

Mishra, R., Singh, S. N., Seshadri, V. Study of wear characteristics and solid distribution in constant area and erosion-resistant log-radius pipe bends for the flow of multisized particulate slurries. *Wear,* n. 217, p. 297-306, 1998.

Njobuenwu, D. O., Fairweather, M. Modelling of pipe bend erosion by dilute particle suspensions. *Computers and chemical Engineering,* 233-235, p. 737-745, 1999.

Ogawa, S., Umemura, A., Oshima, N. On the Equation of Fully Fluidized Granular Materials. *Journal of Applied Mathematics and Physics*, vol. 31, p. 483-493, 1980.

Parslow, G. I., Stephenson, D. J., Strutt, J. E., Tetlow, S. S. Investigation of solid particle erosion in components of complex geometry. *Wear,* vol. 233-235, p. 737-745, 1999.

Pärssinen, J. H., Zhu, J. X. Axial and Radial Solids Distribution in a Long and High-Flux CFB Riser. AIChE *Journal*, vol. 47, n. 10, p. 2197-2205, 2001.

Patankar, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. New York, USA: McGraw-Hill, 1980.

Pugsley, T., Lapointe, D., Hirachberg, B. Werther, J. Exit Effects in Circulating Fluidized Bed Risers. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol 75, p. 1001-1010, 1997.

Rosa, L.M. Aplicação de Técnica CFD para o Cálculo de Escoamento em Meio Reativo em Riser. Campinas: UNICAMP/LMSPQ, 2008. Tese de Doutorado.

Rosa, L.M. Simulação de Reações Químicas e Consumo de Calor em Reatores Riser. Campinas: UNICAMP/LMSPQ, 2002. Dissertação de Mestrado.

Schaeffer, D. G. Instability in the Evolution Equations Describing Incompressible Granular Flow. *Journal of Differential Equations*, n. 66, p.19–50, 1987.

Syamlal, M., Rogers, W., O'Brien, T. J. MFIX Documentation: Volume 1, Theory Guide. National Technical Information Service, Springfield, VA, 1993.

Syamlal, M., O'Brien, T. J. Computer Simulation of Bubbles in a Fluidized Bed. *AIChE Symp*, n. 85, p. 22–31, 1989.

Song, X. G., Park, J. H., Kim, S.G., Park, Y.C., Performance comparison and erosion prediction of jet pumps by using a numerical method. *Mathematical and Computer Modelling*, n. 57, p. 245-253, 2013.

Tan, Y., Zhang, H., Yang, D., Jiang, S., Song, J., Sheng, Y. Numerical simulation of concrete pumping process and investigation of wear mechanism of the piping wall. *Tribology International*, n. 46, p. 137-144, 2012.

Van Engelandt, G., Heynderickx, G. J., De Wilde, J. Marin, G. B. Experimental and computational study of T- and L-outlet effects in dilute riserflow. *Chemical Engineering Science*, n. 66, p. 5024-5044, 2011.

Wilson, J. W. Fluid Catalytic Craking – Technology and Operation. Tulsa, Oklahoma: PennWell Publishing Company, p. 6-18, 1997

Wu, X., Jiang, F., Xu, X., Xiao, Y. CFD simulation of smooth and T-abrupt exits in circulating fluidized bed riser. *Particuology*, n. 8, p. 343-350, 2010.

Zhang, H., Tan, Y., Yang, D. Tria, F. X., Jiang, S., Sheng, Y., Oliva, A. Numerical investigation of the location of maximum erosive wear damage in elbow. *Powder Technology*, n. 217, p. 467-476, 2012.

http://www.anp.gov.br acessado em 06/01/13.