

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**Simulação Numérica da
Termofluidodinâmica de um Reator (*Riser*)
de Craqueamento Catalítico em Leito
Fluidizado**

Autora: Danielle de Lima Vieira

Orientador: Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima

Campina Grande, setembro de 2017
PB - Brasil

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**Simulação Numérica da
Termofluidodinâmica de um Reator (*Riser*)
de Craqueamento Catalítico em Leito
Fluidizado**

Autor: **Danielle de Lima Vieira**

Orientador: **Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima**

Curso: Engenharia Mecânica

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte e Energia.

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, como requisito para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Campina Grande, setembro de 2017.
PB - Brasil

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

V658s Vieira, Danielle de Lima.
 Simulação numérica da termofluidodinâmica de um reator (*Riser*) de craqueamento catalítico em leito fluidizado / Danielle de Lima Vieira. – Campina Grande, 2017.
 99 f. : il. color.

 Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2017.
 "Orientação: Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima".
 Referências.

 1. Fluidodinâmica Computacional. 2. Escoamento Multifásico. 3. Fluent. I. Lima, Antonio Gilson Barbosa de. II. Título.

CDU 66.096.5(043)

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Simulação Numérica da
Termofluidodinâmica de um Reator (*Riser*)
de Craqueamento Catalítico em Leito
Fluidizado**

Dissertação **aprovada** em ____ setembro de 2017.

**Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima, Presidente
UAEM/CCT/UFCG**

**Prof. Dr. Laércio Gomes de Oliveira, Examinador Externo
UAEQ/CCT/UFCG**

**Profa. Dra. Rucilana Patrícia Bezerra Cabral, Examinador Externo
UAEPetro/CCT/UFCG**

Campina Grande, setembro de 2017.
PB - Brasil

DEDICATÓRIA

Dedico a minha família: meus pais Francisco e Francisca e meu irmão Ricardo.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus por tudo o que fez e proporcionou em minha vida, dando-me força para superar as muitas adversidades e dúvidas.

Aos meus pais Francisco e Francisca e meu irmão Ricardo, sem os quais jamais teria chegado aqui.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima, por me receber em seu laboratório, permitindo que eu fizesse parte de uma equipe de trabalho muito especial. Pela excelente orientação, amizade, confiança e todos os ensinamentos.

Aos meus amigos, em especial Bruno Oliveira, Hortência Luma, Jéssica Barbosa e Jéssica Ferreira, e a todos os demais companheiros do LCTF pela amizade, companheirismo e conselhos.

Aos Professores Dr. Enivaldo Santos Barbosa e Dr. Tony Herbert Freire de Andrade por sua amizade e colaboração. Também ao Prof. Dr. Severino Rodrigues pela colaboração neste trabalho. E a todos os demais professores que têm me auxiliado ao longo do caminho acadêmico.

Aos professores Dra. Rucilana Patrícia Bezerra Cabral e Dr. Laércio Gomes de Oliveira, pela participação e contribuições neste documento em todas as fases de avaliação.

E a todos os demais que direta ou indiretamente contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho.

*Se você quiser alguém
Em quem confiar
Confie em si mesmo
Quem acredita sempre alcança!*

Renato Russo e Flávio Venturini

SUMÁRIO

Resumo	x
Abstract	xi
Lista de Figuras	xii
Lista de Tabelas	xiv
Nomenclatura	xv
1 Introdução	19
1.1 Objetivos	22
1.1.1 Objetivo Geral	22
1.1.2 Objetivos específicos	22
2 Revisão da Literatura	24
2.1 Leito fluidizado	24
2.2 Regimes de fluidização	25
2.3 Classificação de sólidos de Geldart	28
2.4 Processo de craqueamento catalítico	28
2.4.1 <i>Riser</i> (Reator)	30
2.5 Estado da arte	31
3 Modelagem Teórica	38
3.1 Equações Governantes	38
3.1.1 Equações da continuidade	38
3.1.2 Equações da conservação do momento linear	39
3.1.3 Equações de conservação da energia	41
3.2 Equações constitutivas	42
3.2.1 Coeficiente da quantidade de movimento na interface	42

3.2.2 Pressão de sólidos	43
3.2.3 Tensor tensão da fase sólida	44
3.2.4 Temperatura granular	45
3.2.5 Coeficiente de transferência de calor	46
3.3 Modelo de Turbulência	46
3.3.1 Modelo k- ϵ Disperso	48
4 Metodologia Numérica	52
4.1 Pré-Processamento	53
4.1.1 Geometria e malha	54
4.1.2 Simulação	56
4.2 <i>Solver</i>	58
4.3 Pós-Processamento	58
5 Resultados e Discussões	60
5.1 Comparação entre os resultados numéricos e analíticos	60
5.2 Comparação entre resultados numéricos e experimentais	64
5.3 Análise hidrodinâmica dos casos simulados 1 e 2	67
5.4 Análise da influência do diâmetro das partículas sobre a hidrodinâmica dos casos simulados 6 e 7	76
5.5 Análise termodinâmica dos casos simulados 8 e 9	78
6 Considerações Finais	81
6.1 Conclusões	81
6.2 Sugestões para futuros trabalhos	84
Referências Bibliográficas	85

RESUMO

VIEIRA, Danielle de Lima, *Simulação Numérica da Termofluidodinâmica de um Reator (Riser) de Craqueamento Catalítico em Leito Fluidizado*, Campina Grande: Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Campina Grande, 2017. 99 p. Dissertação (Mestrado).

Na indústria petroquímica e de processamento de petróleo o *riser* é o principal equipamento da unidade de craqueamento catalítico fluido (FCC), utilizado para o refino de frações pesadas do petróleo. Para o projeto e otimização do *riser* é essencial compreender a termofluidodinâmica da mistura gás-sólido no seu interior. Neste aspecto a fluidodinâmica computacional (CFD) tem demonstrado ser uma boa alternativa para o estudo de sistemas complexos. Portanto, este trabalho tem como objetivo estudar a termofluidodinâmica de um *riser* de FCC com alto fluxo, via CFD usando o *software* comercial Ansys Fluent versão 15. O modelo matemático é baseado na abordagem Euleriana – Euleriana, considerando a Teoria Cinética do Escoamento Granular (KTGF) e o modelo de turbulência de duas equações $k-\epsilon$ Disperso. Resultados numéricos dos campos de velocidade, fração volumétrica e pressão das fases gasosa e particulada, a temperatura constante, são apresentados, analisados e comparados com dados de uma planta experimental com 76 mm ID e altura de 10 m, apresentando boa concordância, exceto nas regiões com alta densidade de partículas. Assim, o modelo proposto mostrou-se mais adequado a representação do fluxo em regiões e condições operacionais que resultam em menores concentrações de partículas (menor fluxo de sólidos e/ou maior vazão do gás).

Palavras Chave:

-Fluidodinâmica Computacional; Escoamento multifásico; Fluent.

ABSTRACT

VIEIRA, Danielle de Lima, *Numerical Simulation of Thermo Fluid Dynamics of a Fluidized Catalytic Cracking Reactor (Riser)*, Campina Grande: Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Campina Grande, 2017. 99 p. Dissertação (Mestrado).

In the petrochemical and oil processing industry riser is the main equipment of the fluid catalytic cracking (FCC) unit, used for the refining of heavy petroleum fractions. For design and optimization of riser, it is essential to understand the thermo fluid dynamics of the gas-solid mixture inside. In this respect, computational fluid dynamics (CFD) has been shown to be a good alternative for the study of complex systems. Therefore, this work aims to study the thermo fluid dynamics of a FCC riser with high flux, via CFD using commercial software Ansys Fluent version 15. The mathematical model is based on the Eulerian - Eulerian approach, considering a Kinetic Theory of Granular Flow (KTGF) and the $k-\varepsilon$ two equations turbulence model. Numerical results of fields of velocity, volumetric fraction and pressure of the gas and particulate phases, at constant temperature, are presented, analyzed and compared with data of an experimental plant with 76 mm ID and 10 m height, presenting good agreement, except in regions with high particle density. Thus, the proposed model showed better representation of the flow in regions and operating conditions that result in lower particle concentrations (lower solids flow and / or higher gas flow).

Key Words:

- Computational Fluid Dynamics; Multiphase Flow; Fluent.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Diferentes regimes de fluidização com o aumento da velocidade.	26
Figura 2.2 – Unidade de Craqueamento Catalítico Fluido (UFCC).	29
Figura 4.1 – Geometria tridimensional do <i>riser</i> .	55
Figura 4.2 – Detalhes de malha numérica nas entradas e saída do equipamento.	56
Figura 5.1 – Comparação entre os perfis de velocidade para um escoamento turbulento de gás, obtidos numérica e analiticamente. (●●) Fox <i>et al.</i> (2011) e (—) resultados simulados.	62
Figura 5.2 – Campos de pressão para cortes da seção transversal em Y igual a 6 m e na curvatura de saída.	63
Figura 5.3 – Concentração radial de sólidos sob diferentes condições de fluxo em oito níveis axiais. (●●) Pärssinen e Zhu (2001) e (—) resultados simulados.	65
Figura 5.4 – Perfil axial da concentração de sólidos para os casos 1 e 2.	68
Figura 5.5 – Perfil da fração volumétrica de sólidos para os casos 1 e 2.	70
Figura 5.6 – Padrão <i>core-annulus</i> na seção transversal do <i>riser</i> em diferentes níveis axiais.	71
Figura 5.7 – Velocidade e direção do escoamento da fase sólida.	71
Figura 5.8 – Perfis de velocidade da fase particulada nos planos axial e radial.	73
Figura 5.9 – Perfis de velocidade da fase gasosa nos planos axial e radial.	74
Figura 5.10 – Perfis de pressão ao longo do <i>riser</i> .	75
Figura 5.11 – Perfil axial da velocidade de deslizamento para diferentes diâmetros de partículas.	76
Figura 5.12 – Perfil axial da concentração média de sólidos para diferentes diâmetros de partículas.	77

Figura 5.13 – Perfis de temperatura média na direção Y da fase gasosa e particulada.	79
Figura 5.14 – Campos de temperatura da fase gasosa nos planos XY e XZ.	80

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Constantes do modelo de turbulência $k-\epsilon$.	51
Tabela 4.1 – Propriedades dos materiais.	57
Tabela 4.2 – Condições operacionais e de contorno.	57
Tabela 5.1 – Queda de pressão obtida analiticamente e numericamente para Y entre 3 e 6 m.	62

NOMENCLATURA

Letras Latinas

$C_{1c}, C_{2c}, C_{3c}, C_{\mu}, C_{VM}$	Constantes do modelo de turbulência	
C_{β}	Parâmetro do tempo de interação partícula – turbilhão	
C_D	Coefficiente de arrasto	
c_p	Calor específico do gás a pressão constante	[J / kg K]
d_{riser}	Diâmetro do <i>riser</i>	[m]
d_s	Diâmetro dos sólidos	[m]
D	Difusividade das fases	[m ² / s]
e_{ss}	Coefficiente de restituição	
f	Fator de atrito	
\vec{F}	Forças interfaciais	[N]
\vec{g}	Aceleração gravitacional	[m / s ²]
$g_{0,ss}$	Função de distribuição radial	
$G_{k,g}$	Produção de energia cinética turbulenta	
h	Entalpia específica da fase	[J / kg]
$\bar{\bar{I}}$	Tensor unitário	
K_{sg}	Coefficiente de transferência da quantidade de movimento entre as fases	[kg / m ³ s]
K_1, K_2, K_3 e K_4	Coefficientes do regime granular	

k	Energia cinética turbulenta	$[m^2 / s^2]$
L	Comprimento do tubo	$[m]$
m	Massa	$[kg]$
n	Parâmetro da equação da lei de potência	
Nu	Número de Nusselt	
P	Pressão	$[kg / m s^2]$
P_s	Pressão de sólidos	$[kg / m s^2]$
Pr	Número Prandtl	
r	Posição radial	$[m]$
R	Raio do <i>riser</i>	$[m]$
Re	Número de Reynolds	
S'	Termo fonte no balanço de massa	$[kg / m^3]$
S	Módulo do tensor da taxa média de deformação	$[s^{-1}]$
T	Temperatura	$[K]$
\vec{u}	Vetor velocidade	$[m / s]$
\bar{u}	Velocidade média	$[m / s]$
$u_{máx}$	Velocidade da linha	$[m / s]$

Letras Gregas

α	Condutividade térmica	$[J / m K]$
γ	Coefficiente de transferência de calor entre as fases	$[J / m^2 K]$
ε	Fração volumétrica	
$\varepsilon_{s,máx}$	Limite de empacotamento	
ϵ	Taxa de dissipação turbulenta	$[m^2 / s^3]$
η_{sg}	Razão entre tempo de interação partícula – turbilhão e o tempo de relaxamento das partículas	
Θ	Temperatura granular	$[m^2 / s^2]$
λ	Viscosidade volumétrica da fase	$[kg / m s]$
μ_s	Viscosidade cisalhante	$[kg / m s]$

μ_g	Viscosidade dinâmica da fase gasosa	[kg / m s]
$\mu_{s,col}$	Componente da viscosidade cisalhante da fase sólida devido a colisão entre as partículas	[kg / m s]
$\mu_{s,kin}$	Componente da viscosidade cisalhante da fase sólida devido ao livre movimento das partículas	[kg / m s]
$\mu_{t,g}$	Viscosidade turbulenta da fase gasosa	[kg / m s]
ξ_τ	Parâmetro do tempo de interação partícula – turbilhão	
\prod_{kg}	Termo fonte de energia cinética turbulenta interfase	[m ² / s ²]
\prod_{tg}	Termo fonte de dissipação de energia turbulenta interfase	[m ² / s ²]
ρ	Massa específica	[kg / m ³]
$\sigma_k, \sigma_\epsilon$ e σ_{sg}	Constantes do modelo de turbulência	
$\bar{\tau}$	Tensor tensão	[kg / m s ²]
τ_{sg}^F	Tempo de relaxamento das partículas característico	[s]
τ_g^t	Tempo característico dos turbilhões da fase contínua	[s]
τ_{sg}^t	Tempo de interação partícula – turbilhão	[s]

Subscritos

ϵ	Dissipação turbulenta
g	Fase gasosa
gs	Da fase gás para a fase sólida
k	Energia cinética turbulenta
p	Partícula
s	Fase sólida
sg	Da fase sólida para a fase gás
t	Turbulento

Abreviações

CAD	<i>Computer Aided Design</i>
CFB	<i>Circulating fluidized bed</i>
CFD	<i>Computational fluid dynamics</i>
DNS	<i>Direct numerical simulations</i>
E – E	Euleriano – Euleriano
EMMS	<i>Energy Minimization Multi-Scale</i>
FB	<i>Fluidized beds</i>
FCC	<i>Fluidized catalytic cracking</i>
GLP	Gás liquefeito de petróleo
KTGF	<i>Kinetic theory of granular flow</i>
LES	<i>Large eddy simulation</i>
MDF	Método de Diferenças Finitas
MEF	Método de Elementos Finitos
MVF	Método de Volumes Finitos
NS	Navier-Stokes
RANS	<i>Reynolds averaged Navier-Stokes</i>
TFM	<i>Two fluid model</i>
UFCC	<i>Fluidized catalytic cracking unit</i>

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O desenvolvimento da matemática, especialmente a criação do cálculo diferencial integral, possibilitou uma descrição mais detalhada dos fenômenos físicos. A representação de um escoamento se tornou possível com as equações gerais desenvolvidas por Cauchy e, para um caso particular, as equações que levam o nome de Navier-Stokes (NS). Porém, a complexidade destas equações faz com que a resolução analítica destas, que descrevem o sistema físico, seja apenas possível quando várias hipóteses simplificadoras são consideradas. Para uma descrição mais acurada de um escoamento, a resolução das equações precisa ser feita através de um método numérico (HODAPP, 2009).

As soluções numéricas se tornaram viáveis com o advento da computação. A dinâmica de fluidos computacional ou em inglês *computational fluid dynamics* (CFD) é a área da computação científica que estuda métodos computacionais para simulação de fenômenos que envolvem fluidos em movimento com ou sem trocas de calor. Isso inclui tanto o movimento de fluidos ao redor de um corpo como dentro de tubulações ou turbinas. Basicamente, o usuário da CFD está interessado em obter as distribuições de velocidades, pressões e temperaturas na região do escoamento (FORTUNA, 2000).

A utilização de CFD tem crescido muito nos últimos anos e está sendo aplicado em diversas áreas como aerodinâmica, automotiva, industrial, entre outras. Na Engenharia, CFD está se tornando uma ferramenta cada vez mais importante em projetos de equipamentos e uma poderosa ferramenta de pesquisa. Ela também é bastante utilizada 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 (FAISCA, 2013). No entanto, o objetivo principal da CFD é complementar, e não substituir, os estudos teóricos e experimentais sobre o movimento de fluidos.

Com a existência da CFD, novos modelos matemáticos estão sendo desenvolvidos de forma a incluir o máximo de fenômenos que estão presentes nos escoamentos multifásicos. Assim, a fluidodinâmica computacional nada mais é do que uma compilação de técnicas numéricas para modelagem, simulação e análise de sistemas dinâmicos onde estão presentes fluidos. Na prática muitos sistemas são tratados com os conceitos de CFD (RIBEIRO, 2001). Dentre estes sistemas, pode-se citar o craqueamento catalítico fluidizado ou *fluid catalytic cracking* (FCC), que é um dos mais importantes processos para o refino de petróleo.

A demanda global de combustíveis para abastecer o setor de transporte continua crescendo e essa demanda continuará a ser atendida em grande parte por combustíveis como a gasolina e o diesel. O processo de FCC continua a desempenhar um papel fundamental em uma refinaria como um processo de conversão de frações pesadas do petróleo em produtos mais leves. Nas próximas duas décadas o processo de FCC será provavelmente usado para os biocombustíveis e, possivelmente, para reduzir as emissões de CO₂. Para muitas refinarias, o craqueamento catalítico ou “*cat cracker*” é a chave para a lucratividade, devido ao bom funcionamento da unidade determinar se uma refinaria pode permanecer competitiva no mercado (SADEGHBEIGI, 2012).

Desde a inauguração da primeira unidade comercial de FCC em 1942, muitos aprimoramentos foram feitos para aumentar a confiabilidade mecânica da unidade, e sua capacidade de craqueamento de matérias-primas mais pesadas e de menor valor agregado. A UFCC tem uma história notável de adaptação às mudanças contínuas em demandas do mercado (SADEGHBEIGI, 2012).

Nas unidades de FCC é empregado um regime de fluidização onde são utilizadas velocidades de gás muito acima da velocidade terminal das partículas, sendo estas sopradas para fora do leito pela parte superior e repostas pela parte inferior do mesmo. A este tipo de leito fluidizado denomina-se de leito fluidizado circulante, em inglês *circulating fluidized bed* (CFB). Os dois principais parâmetros de um CFB são a velocidade superficial do gás e o fluxo total de sólidos. Tipicamente, os *risers* operam com velocidades de gás superiores a 2 m/s e fluxos mássico específico de sólidos superiores a 10 kg/m²s. Na combustão e em outras reações gás – sólido com fase sólida inerte, os fluxos de massa para os sólidos são geralmente inferiores a 100 kg/m²s e são utilizadas partículas pertencentes à classificação do Grupo B de Geldart. Estas condições são bastante diferentes das aplicações catalíticas, onde fluxos de sólidos de mais de 250 kg/m²s são típicos, e partículas do Grupo A de Geldart (classificação na página 28) são utilizadas. Idealmente, os *risers* de CFB operam a uma temperatura relativamente uniforme, a qual é conseguida e mantida por uma taxa de recirculação de sólidos elevada, renovando o inventário do *riser*. As reações catalíticas são geralmente executadas à temperaturas relativamente baixas (250- 650 °C) em comparação com os processos de combustão (> 800 °C) (BERRUTI *et al.*, 1995).

A unidade de FCC utiliza um catalisador na forma de “micropartículas” que se comporta como um líquido quando é adequadamente fluidizado. O principal objetivo da UFCC é converter as frações de petróleo com elevado ponto de ebulição, chamadas gasóleo, em combustíveis de maior valor econômico (gasolina, combustível de aviação e diesel). A carga frequentemente utilizada na UFCC é a fração de gasóleo com ponto de ebulição normalmente na faixa de 330-550°C. (SADEGHBEIGI, 2012).

Em um *riser* de FCC, o processo de conversão das cargas (principalmente gasóleo pesado da destilação a vácuo) é tipicamente de fluxo turbulento e multifásico com reação, e compreende numerosos e complexos subprocessos mútuos, tais como reação de craqueamento e transferências de momento, calor e massa, os quais são conhecidos por serem inter-relacionados (SANTOS, 2013). Além disso, o seu desempenho depende de diversos parâmetros, tais como composição da alimentação, tempo de residência, temperatura de reação, razão catalisador/óleo, pressão parcial de hidrocarbonetos, as propriedades do catalisador e a fluidodinâmica do *riser*, que influenciam no processo de conversão a seu modo (LAN *et al.*, 2009). Assim, uma investigação, tanto experimental quanto teórica, detalhada de *risers* de FCC

é uma tarefa desafiadora devido a hidrodinâmica complexa, as várias reações que ocorrem simultaneamente e à falta de técnicas de medição/ensaio adequadas. Portanto, a Dinâmica de Fluidos Computacional é uma ferramenta útil para explorar estes processos complexos da indústria petroquímica (CHANG *et al.*, 2014).

Na forma técnica, uma abordagem comum é usar um modelo de dois fluidos, *two fluid model* (TFM), onde a fase particulada é assumida como contínua (SYAMLAL *et al.*, 1993; LUN *et al.*, 1984). A fase sólida é governada pela teoria cinética do fluxo granular, *kinetic theory of granular flow* (KTGF), onde o comportamento da fase sólida é análogo à teoria cinética para os gases e a temperatura granular representa a energia cinética do movimento aleatório das partículas sólidas. Foi demonstrado que a TFM pode capturar qualitativamente os fenômenos observados em configurações experimentais de leitos fluidizados, incluindo a formação de aglomerados de partículas. Boas comparações quantitativas têm sido feitas com dados experimentais para certas condições, mas em muitos casos se mostrou difícil conseguir uma boa correspondência entre resultados experimentais e numéricos em *risers* (CLOETE *et al.*, 2016).

Apesar das diversas pesquisas reportadas na literatura, múltiplos desafios persistem para investigações numéricas dos *risers*, de tal forma que encontrar uma forma prática de simular um *riser* de FCC tridimensional, com reações, permanece como uma meta a ser alcançada.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo Geral

Este trabalho tem como objetivo geral o estudo teórico e numérico da termofluidodinâmica no interior de um sistema *riser* de FCC via CFD.

1.1.2 Objetivos específicos

Como objetivos específicos pode-se citar:

- Apresentar uma modelagem matemática que descreva a termofluidodinâmica em *risers* de FCC;
- Simular a distribuição de pressão, temperatura, fração volumétrica e velocidade das fases presentes em várias condições operacionais;
- Comparar os resultados obtidos pela simulação com resultados analíticos e experimentais da literatura.
- Obter informações sobre o escoamento gás-sólido em *riser* de FCC que possam ser úteis na compreensão do processo, e de uma forma geral, que possam ser utilizadas como subsídios para que estudos mais aprofundados possam ser realizados e implementados futuramente.

CAPÍTULO 2

REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Leito fluidizado

A fluidização é o processo pelo qual um leito de partículas sólidas é transformado em algo de comportamento muito semelhante a um líquido. Isto é conseguido pelo bombeamento de um fluido ascendente, que pode ser um gás ou um líquido, através do leito, a uma taxa que é suficiente para exercer uma força sobre as partículas capaz de contrabalancear seu peso. Desta forma, em lugar de uma estrutura rígida mantida no lugar por meio de forças de contato e gravitacional, o leito adquire propriedades semelhantes a um fluido, livre para fluir e deformar-se, com as partículas capazes de se movimentarem com certa liberdade umas em relação às outras (GIBILARO, 2001).

Esse tipo de fluxo permite altas taxas de transferência de calor e massa e um eficiente contato gás-sólido, uma vez que toda área superficial das partículas fica disponível. Devido a essas características, tem sido amplamente utilizado em processos que envolvem partículas sólidas, tais como a pirólise, combustão, gaseificação, entre outros processos.

Todavia, a maior aplicação da tecnologia de leitos fluidizados ou “*fluidized beds*” (FB) ocorre nos reatores de craqueamento catalítico, sendo este um dos principais processos de refino do petróleo (GIBILARO, 2001).

A modelagem matemática do fluxo gasoso em leitos fluidizados teve início na década de 60 com Davidson e Harrison (1963) e Kunii e Levenspiel (1969), que analisaram principalmente o movimento de bolhas, instabilidades dos sistemas e transferência de massa. Baseado nesses modelos, muitos autores têm estudado esse tema, tais como: Wen e Yu (1966), Geldart (1973), entre outros que contribuíram para a modelagem de reatores de leito fluidizado com o objetivo de desenvolver um maior controle do sistema (PHILIPPSEN *et al.*, 2015).

Há diversos regimes de fluidização, cada um consistindo de diferentes comportamentos das fases gasosa e sólida, como descrito a seguir.

2.2 Regimes de fluidização

Quando partículas sólidas são fluidizadas, o leito fluidizado apresenta diferentes comportamentos à medida que a velocidade do gás é variada. Devido a isto, torna-se bastante evidente a existência de vários regimes de fluidização, como ilustrado na Figura 2.1 (DECHSIRI, 2004).

Inicialmente, partindo-se de uma velocidade nula para o fluido e aumentando-se esta gradativamente, se o fluido ascendente passa através de um leito de partículas finas, a uma baixa velocidade, este percola através dos espaços vazios entre as partículas estacionárias, sem promover a movimentação do material, isto caracteriza um leito fixo, Figura 2.1(a). Conforme a velocidade do fluido aumenta as partículas se separam e começam a vibrar e se movimentar em pequenas regiões. Com a velocidade do gás ainda maior, atinge-se um ponto em que a força de arrasto transmitida pelo gás é igual ao peso das partículas e a fração de vazios do leito aumenta ligeiramente (velocidade de mínima fluidização): é o início da fluidização, que é chamado de regime de mínima fluidização, Figura 2.1(b). Aumentando mais o fluxo de gás, ocorre a formação de bolhas. Neste ponto, ocorre um leito fluidizado borbulhante (DECHSIRI, 2004; MARINI, 2008), como ilustrado pela Figura 2.1(c).

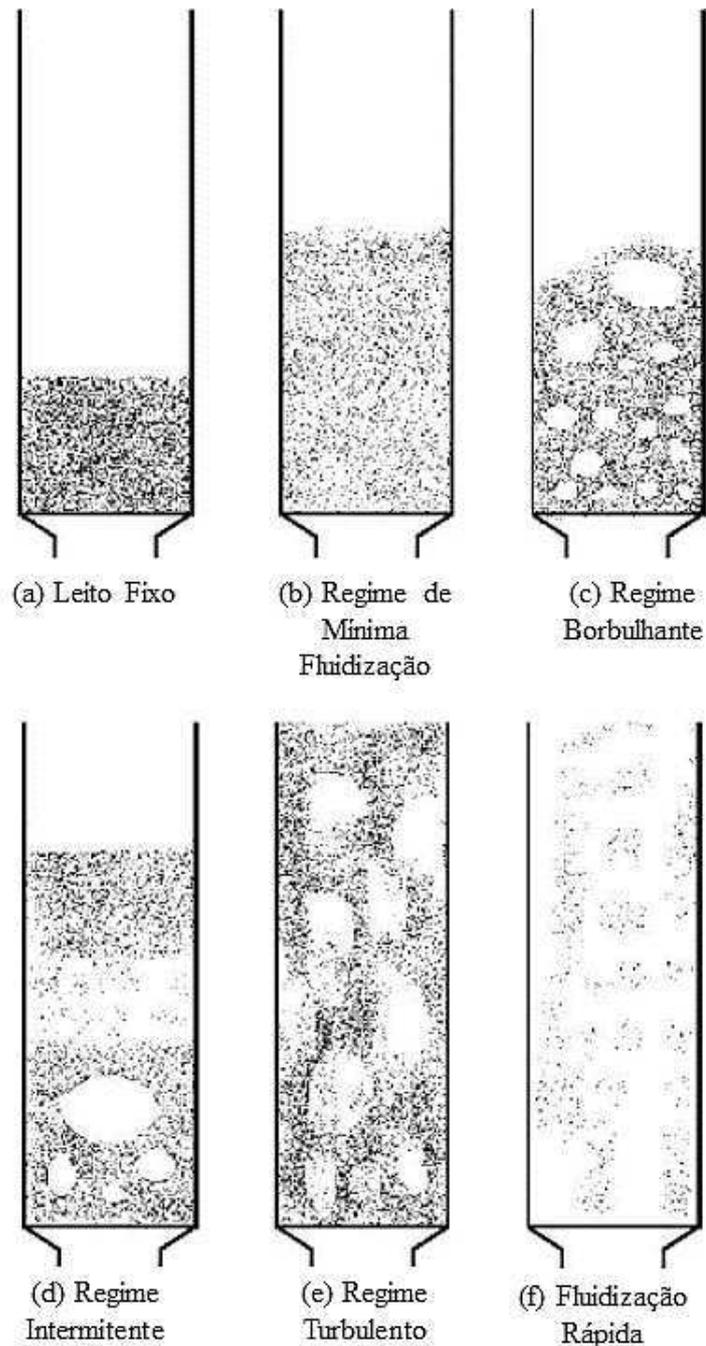


Figura 2.1 – Diferentes regimes de fluidização com o aumento da velocidade. Fonte: Marini (2008), adaptado de Kunii e Levenspiel (1990).

Seguindo com o incremento do fluxo de gás, as bolhas em um leito fluidizado borbulhante irão coalescer e crescer conforme sobem, e num leito suficientemente profundo e de diâmetro reduzido, elas podem se tornar grandes o bastante e se movimentar através do leito em um fluxo pistonado. No caso de partículas finas, elas escoam para baixo ao redor de bolhas de gás ascendentes e próximas à parede. Para partículas mais grosseiras, a porção de leito acima da bolha é empurrada para cima, como em um pistão. Nesse regime observam-se grandes

flutuações na queda de pressão do gás. A Figura 2.1(d) exemplifica este regime de fluidização, denominado fluidização intermitente. Se as partículas são fluidizadas com um fluxo de gás suficiente elevado, a velocidade excede a velocidade terminal de sedimentação das partículas (velocidade constante com a qual uma partícula cairia num fluido estagnado) e a superfície superior do leito desaparece. Desta forma, no lugar das bolhas observa-se um movimento turbulento de aglomerados sólidos (*clusters*) e vazios de gás de vários tamanhos e formas. Os leitos sob estas condições são chamados de leitos turbulentos, como pode ser observado na Figura 2.1(e) (DECHSIRI, 2004; MARINI, 2008). Na fluidização turbulenta, as oscilações de queda de pressão no leito diminuem, pois as grandes bolhas desaparecem (BI *et al.*, 2000).

Na condição em que são empregadas velocidades do gás muito acima da velocidade terminal das partículas, estas são sopradas para fora do leito pela parte superior. Este é o denominado regime de fluidização rápida, Figura 2.1(f). Devido à importância do contato dessas partículas no processo de interesse, tem-se a necessidade de reposição rápida dos sólidos, o que é feito pela parte inferior do leito, definindo assim o regime de fluidização recirculante (SANTOS, 2008), característico do processo de craqueamento catalítico.

O escoamento gás-sólido em leitos fluidizados circulantes caracteriza-se por: (a) distribuição não uniforme de partículas sólidas no interior do leito; (b) velocidades de deslizamento acentuadas entre gás e partícula; (c) recirculação de partículas e (d) escoamento descendente de partículas próximo às paredes do leito. Basicamente as causas da complexidade deste tipo de escoamento são interações partícula – partícula e partícula – gás (SANTOS, 2008).

Diferentes aspectos fluidodinâmicos do escoamento gás-sólido em CFB são estudados numericamente, experimentalmente, ou utilizando ambas as abordagens. Por exemplo, aspectos ligados ao tipo de regime de escoamento, dependendo dos parâmetros estabelecidos, tais como formação de cluster (HELLAND *et al.*, 2000; HO e SOMMERFELD, 2002; TSUJI *et al.*, 1998; ZELENGO *et al.*, 1996), fluidização rápida (BAI *et al.*, 1992), transporte pneumático (HUBER e SOMMERFELD, 1998), turbulência (MANSOORI *et al.*, 2004), turbulência em coluna de bolhas (PEIRANO *et al.*, 2001; PORTELA *et al.*, 2002) dentre outros, são importantes para a compreensão do processo de fluidização. Assim, devido à importância, Bi *et al.*, (2000) fornece uma revisão sobre o regime de fluidização gás-sólido turbulento (SANTOS, 2008).

2.3 Classificação de sólidos de Geldart

A fluidização é largamente influenciada pelas características das partículas, ou seja, conclusões obtidas através da fluidização de um determinado grupo de materiais não podem, a priori, serem extrapoladas para outro. Devido a isso, em seu trabalho, Geldart (1973) classificou o comportamento das partículas em fluidização em quatro grupos. Partículas muito finas (grupo C) são coesas e de difícil fluidização. Leitos de particulado um pouco maior (grupo A) manifestam um intervalo de expansão estável do leito antes de iniciar a formação de bolhas. Mesmo partículas maiores (grupo B) apresentam a formação de bolhas imediatamente após a fluidização. Considerando que tipicamente, as velocidades de ascensão das bolhas em leitos de particulados pertencentes aos grupos A e B são maiores do que a velocidade intersticial do gás na fase densa, o oposto é verdadeiro em leitos de partículas muito grandes que pertencem ao grupo D. Como consequência, o padrão de mistura em leitos borbulhantes com partículas do grupo D difere significativamente daqueles apresentados pelos grupos A e B (SUNDARESAN, 2003). No trabalho de Yang (2003) é possível encontrar muitas correlações sobre a fluidização das partículas, tais como: correlações para o cálculo velocidade de mínima fluidização das partículas, força de arrasto exercida pelo gás, transferência de calor e massa, queda de pressão através do leito, tempo de residência das partículas, entre outras.

2.4 Processo de craqueamento catalítico

Uma das maiores aplicações de um leito fluidizado circulante é o craqueamento catalítico fluidizado ou *fluidized catalytic cracking* (FCC). O FCC é um dos mais comuns processos de conversão de frações pesadas de óleo (resíduos de outras unidades da refinaria) em todo o mundo, pois permite que produtos de maior valor agregado tais como a gasolina, diesel, destilados médios e olefinas leves como o propileno possam ser obtidos a partir de frações pesadas e de menor valor agregado (YANG *et al.*, 2016).

O craqueamento catalítico fluidizado é semelhante ao processo de quebra térmica, sendo que, o uso de catalisador facilita a conversão, em condições menos severas de operação. Tipicamente um processo destes é operado à temperaturas entre 727 K e 900 K e pressões entre 69 a 138 kPa. O catalisador utilizado geralmente é um material sólido finamente dividido

(partículas de $30\mu m - 100\mu m$), como, por exemplo, zeólitas, hidrossilicato de alumínio, bauxita, sílica, entre outros, mantido em fluidização pela fase contínua.

Há um grande número de configurações possíveis para as unidades de FCC, que diferem entre si pelo arranjo dos principais equipamentos da seção de reação: *riser*, regenerador e vaso separador. Contudo, uma unidade de FCC é composta tipicamente pelas seguintes seções: a de conversão, a de fracionamento e a de recuperação de gases.

O craqueamento da carga (gasóleo e/ou resíduos) e a regeneração do catalisador ocorrem efetivamente na seção de conversão. Esta seção é composta pelo *riser*, vaso separador/*stripper*, regenerador de catalisador, além de outros equipamentos auxiliares como, trocadores de calor, sopradores e a caldeira de CO. Do regenerador saem os gases com elevada temperatura provenientes da queima do coque (PENTEADO, 2003). Um desenho esquemático típico do conjunto conversor é apresentado na Figura 2.2.

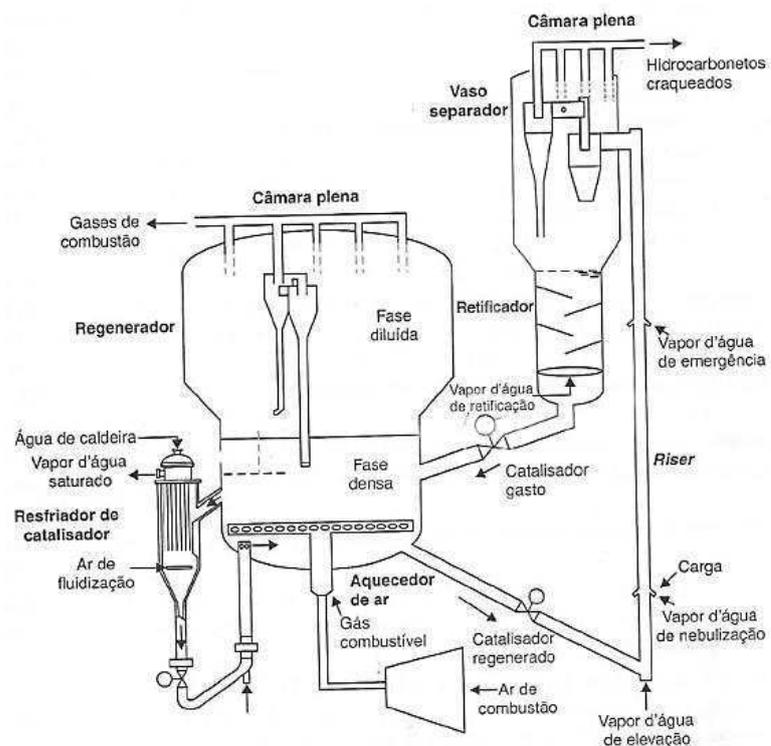


Figura 2.2 – Unidade de Craqueamento Catalítico Fluido (UFCC). Fonte: Quelhas *et al.* (2011).

Os produtos do craqueamento, efluentes do reator, são encaminhados à seção de fracionamento. Por intermédio de uma torre de destilação, obtém-se a separação primária dos

cortes produzidos. Pelo fundo da torre, produz-se o resíduo de craqueamento (óleo pesado e denso). Lateralmente, é produzido o óleo leve de reciclo (diesel de craqueamento) e no topo retira-se uma corrente gasosa contendo nafta de craqueamento e hidrocarbonetos mais leves. Esta corrente gasosa é enviada à seção de recuperação de gases que realiza operações de compressão, absorção, retificação e destilação para obtenção e separação dos produtos mais leves como gás combustível, GLP e gasolina (PENTEADO, 2003).

2.4.1 Riser (Reator)

Na seção de conversão de uma unidade de FCC existem principalmente dois equipamentos básicos: um reator, onde o catalisador quente entra em contato com a carga do processo, promovendo o craqueamento das moléculas pesadas, e um regenerador, onde o coque depositado sobre o catalisador é queimado para regenerar o catalisador (PAHWA e GUPTA, 2016).

O gasóleo produzido na refinaria e qualquer outra matéria-prima suplementar para o FCC são normalmente aquecidos a uma temperatura de 260-370°C. A carga pré-aquecida entra em um reator tubular de fluxo ascendente, denominado *riser*, próximo à base onde entra em contato com o catalisador regenerado. O calor absorvido pelo catalisador no regenerador provê a energia para aquecer a carga na temperatura desejada no reator, uma vez que a reação global que ocorre no *riser* é endotérmica. Essa energia necessária é fornecida pelo catalisador em circulação, que tipicamente apresenta uma faixa de temperatura entre 680-730°C (MOTLAGH, 2015) e taxa de circulação de sólidos variando de 400 kg/m²s a 1200 kg/m²s.

A mistura de reagentes se expande à medida que os gases são formados pelas reações de craqueamento. A mistura catalisador/carga é rapidamente transportada para o topo do *riser* a uma velocidade superficial do gás que varia de 6 m/s a 28 m/s, fazendo com que o tempo efetivo de reação seja muito pequeno (2 s a 5 s), suficiente, entretanto, para que ocorram as reações desejadas, gerando os produtos.

Um contato eficiente entre a carga e o catalisador é um fator crítico para alcançar as reações de craqueamento desejadas. O vapor é comumente utilizado para atomizar a carga pois, quanto menor as gotículas de óleo melhor o acesso destas aos sítios ácidos reativos do

catalisador. Após deixar o *riser*, o catalisador segue para o vaso separador. No vaso separador ocorrem novas reações de craqueamento, bem como a separação do catalisador dos produtos do processo. O catalisador gasto cai dentro do retificador onde a adição de vapor remove os hidrocarbonetos arrastados junto com as partículas do catalisador (MOTLAGH, 2015). Por fim, o catalisador escoo para o vaso regenerador através da tubulação de catalisador gasto, conhecido como *standpipe* de catalisador gasto. Nesta tubulação existe uma válvula corredeira que controla o nível de catalisador no retificador (QUELHAS *et al.*, 2011).

Nos leitos fluidizados existem muitas variáveis a serem tratadas, onde a interação gás-sólido e as reações químicas caracterizam um processo complexo. Pesquisas anteriores indicam que esse tipo de escoamento pode ser descrito por possuir uma área densa na parte inferior do *riser* e uma região diluída em sua seção superior. Devido a essa complexidade, existe uma crescente demanda por modelos matemáticos que permitam a descrição e análise para o desenvolvimento de uma melhor compreensão dos processos e para a criação de novos projetos de reatores (PHILIPPSEN *et al.*, 2015)

2.5 Estado da arte

Aos *risers* de CFB podem ser empregadas diferentes formulações matemáticas para prever a relação entre a concentração de sólidos no interior do *riser*, condições operacionais e a geometria do equipamento. Harris *et al.* (1994) propuseram três grandes categorias desses modelos: (i) os modelos que predizem a variação da densidade da suspensão sólida apenas na direção axial; (ii) os modelos que predizem a variação radial da fração de sólidos e as altas velocidades de deslizamento entre as fases, assumindo duas ou mais regiões, tais como os modelos *core-annulus* ou *clustering annulus*, e (iii) os modelos que se baseiam nas equações de conservação da massa, momento e energia para as fases gasosa e sólida. A seleção de um tipo particular de modelo depende da aplicação pretendida. Os modelos do tipo (i) e do tipo (ii) são os mais adequados para investigar o efeito das condições operacionais e dimensionais sobre a estrutura de fluxo do *riser*. Estes modelos podem ser facilmente acoplados com os modelos cinéticos de reação para simular o desempenho dos *risers* de FCC (PUGSLEY *et al.*, 1992). Os modelos do tipo (iii) são adequados para investigar a estrutura de fluxo local e o impacto da geometria dos *risers* sobre o fluxo das fases (SHARMA, 2011). Os modelos de tipo (iii) são os mais rigorosos por se basearem nas equações de conservação, enquanto que para os modelos

do tipo (i) e (ii), baseados em correlações empíricas, as suposições simplificadoras limitam sua utilidade para fins de projeto.

Os modelos do tipo (i) apresentam um valor da fração de sólidos maior do que o previsto utilizando as velocidades de sedimentação das partículas. Yerushalmi *et al.* (1976) estudaram experimentalmente a distribuição axial dos sólidos em *risers* de CFB. Eles observaram que o aumento da fração de sólidos leva a formação dos *clusters* (agregados de partículas). Estes *clusters* são responsáveis pelas grandes velocidades de deslizamento medidas experimentalmente, devido à alta velocidade de sedimentação do *cluster* em comparação com a velocidade de sedimentação das partículas isoladas (GUPTA *et al.*, 2010).

Os modelos do tipo (ii) apresentam a distribuição radial de sólidos e explicam a razão para as maiores frações de sólidos. Horio e Kuroki (1994), Landeghem *et al.* (1996), Mathiesen *et al.* (2000) e Zhang *et al.* (1991) mostraram que escoamentos gás-sólido em leito fluidizado possuem padrões de distribuição volumétrica das fases conhecidos como *core-annulus*, no qual a fase sólida se acumula nas paredes do reator, deixando um núcleo central para a passagem da fase gasosa. Esse padrão de escoamento foi observado para as mais diversas condições de fluxos, diâmetros de coluna e propriedades dos sólidos. Em um estudo bastante completo sobre escoamentos gás-sólido em leito fluidizado circulante, Zhang *et al.* (1991) concluíram que, para um mesmo valor médio de concentração de sólidos, seu perfil radial é independente do diâmetro da coluna, da massa específica, da distribuição granulométrica das partículas e das condições operacionais (tais como velocidade do gás e fluxo de sólidos) para partículas pertencentes à classe A da escala de Geldart (LOPES, 2012).

Outro importante aspecto foi observado por Landeghem *et al.* (1996), no escoamento gás-sólido: apesar dos altos valores do número de Reynolds, os perfis de velocidade da fase gasosa não são achatados, como seria esperado para o escoamento monofásico turbulento. Em vez disso, os perfis são mais parabólicos por causa do acúmulo de partículas na parede, o que restringe o fluxo de gás, assemelhando-se com aqueles obtidos em escoamentos laminares. A influência da geometria do *riser* sobre os padrões do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados circulantes à frio, também foi estudada por diversos grupos de pesquisa. Harris *et al.* (2003) e Wang *et al.* (2010) mostraram que, quando são usadas saídas consideradas abruptas, com forte restrição ao escoamento gás-sólido, há a formação de uma zona densa no topo do

riser. Wang *et al.* (2010) também observaram que quando utilizadas saídas desse tipo ocorre o aumento da recirculação de partículas, gerando um maior acúmulo nas paredes e produzindo aglomerados de partículas maiores e mais densos (LOPES, 2012). Yang (1988) resumiu a concentração axial de sólidos como do tipo "S" e distribuição exponencial. A distribuição exponencial pode ser dividida em duas situações: uma referente a seção de transição na zona superior, e a outra referente a seção de transição na zona inferior. Weinstein e Li (1989) e Li *et al.* (1998) verificaram que a distribuição axial da porosidade foi afetada pela massa total (inventário) de catalisador circulando na unidade (WANG *et al.*, 2010).

Nas últimas duas décadas, muitos pesquisadores têm demonstrado o grande potencial da CFD para a simulação de modelos do tipo (iii). Duas classes diferentes de modelos de CFD podem ser utilizadas: modelos Euleriano – Euleriano (E – E) e modelos Euleriano - Lagrangeano. Os modelos Euleriano - Euleriano consideram ambas as fases gasosa e sólida como contínuas e completamente interpenetrantes (THEOLOGOS e MARKATOS, 1993; LAN *et al.*, 2009). As equações empregadas são uma generalização das equações de Navier-Stokes para interação contínua. Os modelos Euleriano-Lagrangeano resolvem as equações newtonianas do movimento para cada partícula individual, levando em consideração os efeitos de colisões de partículas e forças que agem sobre as mesmas devido ao gás. Na abordagem Euleriana, um volume de controle arbitrário em um sistema estacionário de referência é usado para derivar as equações governantes básicas (GUPTA *et al.*, 2010).

Poucos trabalhos têm usado a abordagem euleriana-lagrangiana (NAYAK *et al.*, 2005; WU *et al.*, 2010). Nesta abordagem, o movimento das partículas sólidas é modelado na estrutura Lagrangeana e o movimento de fase contínua é modelado na estrutura Euleriana. Essa abordagem oferece uma maneira mais natural de simular processos complexos ao nível de partículas, como reações de craqueamento. Além disso, a transferência de calor e massa e as reações químicas que ocorrem na escala de partículas individuais podem ser convenientemente contabilizadas utilizando esta abordagem. A abordagem, no entanto, requer recursos computacionais significativamente mais elevados e, portanto, raramente é usada para escoamentos gás – sólidos densos em *risers* (GUPTA *et al.*, 2010).

Em uma estrutura Euleriana, cada fase é representada por apenas uma equação de movimento. No entanto, esses modelos exigem um conjunto de leis de fechamento para definir

adequadamente os termos das equações governantes, requerendo a solução de um grande número de equações. Nos modelos contínuos mais recentes são incorporadas equações constitutivas de acordo com a teoria cinética do escoamento granular. Diferentemente dos modelos lagrangeanos, os modelos eulerianos podem ser aplicados a fluxos de interesse prático com relativamente pouco esforço computacional (MONTLAG, 2015).

Para a turbulência da fase particulada são utilizados dois diferentes modelos do tipo (iii): o modelo da viscosidade de sólidos dependente da concentração e o modelo da teoria cinética do escoamento granular com e sem turbulência do gás. A viscosidade dos sólidos é necessária para ter em conta a dissipação de energia entre partículas sólidas. Miller e Gidaspow (1992) determinaram a viscosidade de sólidos das partículas de FCC a partir de um balanço de momento da mistura, desprezando os efeitos transientes e assumindo que os gradientes de velocidade das fases gás e sólido são da mesma ordem. Os autores propuseram uma correlação linear entre a viscosidade de sólidos e a concentração de sólidos. Sun e Gidaspow (1999) usaram os dados de viscosidade preditos por Miller e Gidaspow (1992) em seu modelo (GUPTA *et al.*, 2010).

Lun *et al.* (1984) aplicaram a teoria cinética dos gases ao escoamento granular. A aplicação mais significativa da teoria cinética do escoamento granular para a fluidização foi a predição do regime *core-annulus* nos *risers* por Sinclair e Jackson (1989). Atualmente, a teoria cinética é usada por muitos grupos de pesquisa em vários países. O grupo de Arastoopour simulou com sucesso grandes *risers* (BENYAHIA *et al.*, 2000) e estendeu a teoria cinética à partículas coesivas (KIM e ARASTOPOUR, 2002). O grupo de Sundaresan (AGRAWAL *et al.*, 2001) usou conceitos da teoria cinética em seus cálculos dos *clusters*. Já Balzer (2000) e o grupo de Simonin (BALZER *et al.*, 1996) na França modelaram *risers* e leitos borbulhantes usando a teoria cinética (GIDASPOW *et al.*, 2004).

Na teoria cinética do escoamento granular, o conceito básico é a temperatura granular, que é como a temperatura térmica na teoria cinética dos gases. Ela mede o grau de agitação das partículas, relacionado às flutuações de velocidade das mesmas. A intensidade das flutuações de velocidade das partículas determina as tensões, viscosidade e pressão da fase particulada. No escoamento granular as partículas dissipam energia devido a colisões inelásticas. Assim, a equipartição de energia não se sustenta. Portanto, normalmente se define a temperatura granular

como sendo a energia cinética aleatória por unidade de massa, que é proporcional aos quadrados das componentes de velocidade das partículas nas três direções (GIDASPOW *et al.*, 2004).

Segundo Mineto (2009) os mecanismos e formulações das forças de interações entre as fases sólida e gasosa têm sido estudados com detalhes por diversos autores. Dos estudos na dinâmica de partícula em fluido, diversos mecanismos foram encontrados: força de arrasto, causada por diferenças nas velocidades entre as fases; empuxo, causada pelo gradiente de pressão do fluido; efeito de massa virtual, causada por aceleração relativa entre as fases; força de elevação de Saffman, causada pelo gradiente de velocidade do fluido; força Magnus, causada pela rotação da partícula; força Basset, a qual depende do movimento das partículas através do fluido; força Faxen, a qual é uma correção aplicada para o efeito de força virtual e força de Basset para o gradiente de velocidade do fluido e forças devido a gradientes de temperatura e pressão (SYAMLAL *et al.*, 1993). Nas equações de escoamentos das fases gás e sólida devido a grande diferença entre a densidade das fases, as forças interfaciais são menos significantes, exceto a força de arrasto. Essa força é modelada em função da velocidade relativa entre as fases e do coeficiente de quantidade de movimento na interface, também denominado função de arrasto (MINETO, 2009).

Os modelos de arrasto disponíveis para o fluxo em *risers* podem ser divididos em três categorias, a saber: (i) modelos de arrasto convencionais, (ii) modelos de arrasto multiescala ou de *cluster*, e (iii) os derivados de simulações numéricas diretas (DNS). Convencionalmente, os modelos do tipo (i) de Wen-Yu (WEN e YU, 1966), de Gidaspow (GIDASPOW, 1994) e de Syamlal e O'Brian (SYAMLAL e O'BRIEN, 1987; SYAMLAL *et al.*, 1993) são utilizados para as simulações em *risers*. O modelo Gidaspow é uma combinação das correlações de Ergun e Wen-Yu. O modelo de Syamlal e O'Brian baseia-se nas correlações de velocidade – fração volumétrica derivadas usando experimentos de sedimentação e fluidização de Richardson e Zaki (1954) e Garside e Al-Dibouni (1977). Os modelos de arrasto convencionais são correlações empíricas que derivam de observações experimentais sobre as velocidades de sedimentação de uma única partícula no líquido e de quedas de pressão dentro do leito empacotado de sólidos (SHAH *et al.*, 2016).

No entanto, o fluxo no *riser* exhibe a formação de *clusters* (YERUSHALMI e CANKURT, 1979; HORIO e KUROKI, 1994), que coexistem e interagem com a fase diluída circundante.

Devido à presença de *clusters*, o diâmetro aparente dos sólidos torna-se maior e a velocidade terminal das partículas no aglomerado torna-se então mais elevada. Isto conduz a um fluxo descendente de sólidos e a uma maior segregação dos sólidos perto da parede (NOYMER e GLICKSMAN, 2000; PANDEY *et al.*, 2004). Além disso, devido à formação dos aglomerados, o gás tende a fluir em torno dos *clusters* sem penetrar dentro deles. Isto resulta em uma resistência significativamente menor ao fluxo (LI e KWAUK, 1994), levando à redução do arrasto gás-sólido (SHAH *et al.*, 2016).

Uma outra abordagem é usar o modelo de arraste EMMS (*Energy Minimization Multi-Scale*), o qual tem sido bastante utilizado no estudo de escoamentos gás-sólido, onde a formação dos *clusters* apresenta forte influência sobre a hidrodinâmica das fases. Sun e Yan (2017) utilizaram o modelo de dois fluidos (E – E) que incorpora o modelo EMMS, com equações de fechamento da teoria cinética do escoamento granular, para simular um *riser* de CFB com partículas de Geldart A, baseado na configuração experimental utilizada por Li e Kwauk (1994).

Theologos e Markatos (1993) propuseram um modelo matemático tridimensional considerando o fluxo de duas fases, transferência de calor e esquema de reação de três *lumps* no reator *riser*. Os autores desenvolveram um conjunto completo de equações diferenciais parciais que descreve a conservação de massa, momento linear, energia e espécies químicas para ambas as fases, juntamente com as correlações empíricas sobre a fricção interfásica, transferência de calor interfase e forças friccionais do fluido para a parede. O modelo pode prever queda de pressão, fração de catalisador, velocidade de deslizamento interfase, distribuição de temperatura em ambas as fases e distribuição de rendimento por todo o *riser*. Por outro lado, Krishnaiah *et al.* (2007) investigaram uma simulação em regime permanente para o craqueamento fluido. Eles estudaram o efeito das variáveis operacionais sobre o desempenho da unidade de FCC, sendo a razão catalisador – óleo, fluxo de ar e temperatura de entrada do gás-óleo escolhidos como variáveis operacionais (FADHIL, 2012).

A escolha dos modelos e suposições apropriados determina a precisão dos resultados da simulação. Dimensão das partículas (LIU e LU, 2009; ZHANG *et al.*, 2008), forma dos *clusters* (por exemplo, esféricas ou cilíndricas) (MORAN e GLICKSMAN, 2003), o tipo de forças consideradas (por exemplo, inter-partícula) (HOPKINS *et al.*, 1993), deslizamento/cisalhamento ou Saffman (HELLAND *et al.*, 2007; MORAN e GLICKSMAN, 2003),

deslizamento/rotação ou forças de Magnus (HELLAND *et al.*, 2007), entre outros, causam diferenças entre os resultados da simulação e entre a simulação e os resultados experimentais. Outros fatores mais relacionados às condições operacionais também levam à discrepâncias entre os resultados da simulação, incluindo a velocidade do sólido e a distribuição da concentração de sólidos (HARTGE *et al.*, 2009; ZHANG *et al.*, 2010), segregação e dispersão de sólidos (HUA *et al.*, 2004; JIRADILOK *et al.*, 2008), padrão de fluxo e configuração geométrica (HUSSAIN *et al.*, 2013; LI *et al.*, 2013), distribuição de tempo de residência (ANDREUX *et al.*, 2008), entre outros (CAHYADI *et al.*, 2017).

CAPÍTULO 3

MODELAGEM TEÓRICA

De acordo com Sinclair (1997), os modelos numéricos que descrevem o comportamento do fluxo de misturas gás-sólido podem ser classificados como Lagrangianos ou Eulerianos com base na abordagem com a qual são desenvolvidos. Na abordagem Lagrangiana, uma equação da quantidade de movimento separada deve ser resolvida para cada partícula no campo de fluxo, enquanto na abordagem Euleriana as fases são tratadas como meios contínuos interpenetrantes e as leis de conservação da massa e momento são resolvidas para cada fase. Assim, o modelo Euleriano-Euleriano resolve um conjunto de n equações de momentum e continuidade, fazendo com que seja um dos mais complexos modelos multifásicos disponíveis (TEATERS, 2012).

3.1 Equações governantes

Segundo ANSYS FLUENT 15.0 – Theory Guide (2013), as equações de conservação para as fases gasosa e sólida são dadas, respectivamente, por:

3.1.1 Equações da continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g) = (\dot{m}_{sg} - \dot{m}_{gs}) + S'_g \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s) = (\dot{m}_{gs} - \dot{m}_{sg}) + S'_s \quad (3.2)$$

onde, os subscritos g e s são indicativos dos termos aplicados a fase gasosa ou fase primária e a fase particulada ou fase secundária, respectivamente. O termo ε representa a fração volumétrica, ρ é a massa específica, \vec{u} é o vetor velocidade, e \dot{m} caracteriza a transferência de massa entre as fases. As variáveis S'_g e S'_s representam os termos fonte para cada fase.

No modelo Euleriano – Euleriano, ambas as fases são consideradas como meios contínuos e interpenetrantes, e cada uma compartilha o volume de controle com a outra. A suposição de contínuos interpenetrantes introduz o conceito de fração volumétrica fásica, onde, em qualquer tempo um volume de controle tem ε_g da fase gasosa e ε_s da fase sólida, com as duas frações volumétricas seguindo (SHAH *et al.*, 2016):

$$\varepsilon_s + \varepsilon_g = 1 \quad (3.3)$$

Para um escoamento gás – sólido, em regime permanente, sem transferência de massa e fontes de massa, a equação da continuidade para cada fase tem a seguinte forma (SHAH *et al.*, 2016):

$$\nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g) = 0 \quad (3.4)$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s) = 0 \quad (3.5)$$

3.1.2 Equações da conservação do momento linear

As equações da conservação do momento linear para as fases gasosa e particulada são dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g \vec{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_g + \varepsilon_g \rho_g \vec{g} + \vec{F}_g \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) = -\varepsilon_s \nabla P - \nabla P_s + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_s + \varepsilon_s \rho_s \vec{g} + \vec{F}_s \quad (3.7)$$

O primeiro termo do lado esquerdo das Equações (3.6) e (3.7) representa a taxa de variação em função do tempo da quantidade de movimento e o segundo termo é a advecção da quantidade de movimento. O primeiro termo à direita das equações considera as variações de pressão, sendo P a pressão do sistema. A variável P_s , que aparece na Equação 3.7 é denominado pressão de sólidos, e é utilizada para calcular as flutuações na velocidade devido aos choques entre as partículas. O segundo termo do lado direito é o tensor tensão da fase gasosa (Equação 3.8) e da fase sólida (Equação 3.9), expressos por:

$$\bar{\bar{\tau}}_g = \varepsilon_g \mu_g (\nabla \vec{u}_g + \nabla \vec{u}_g^T) + \varepsilon_g \left(\lambda_g - \frac{2}{3} \mu_g \right) \nabla \vec{u}_g \bar{\bar{I}} \quad (3.8)$$

$$\bar{\bar{\tau}}_s = \varepsilon_s \mu_s (\nabla \vec{u}_s + \nabla \vec{u}_s^T) + \varepsilon_s \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \vec{u}_s \bar{\bar{I}} \quad (3.9)$$

Em que μ e λ representam a viscosidade cisalhante e a viscosidade volumétrica (*bulk viscosity*) das fases e $\nabla \vec{u}^T$ é a transposta do gradiente de velocidade. O segundo termo do lado direito das Equações (3.8) e (3.9) representa o efeito da dilatação do volume sendo $\bar{\bar{I}}$ o tensor unitário. A pressão de sólidos P_s , a viscosidade cisalhante μ_s e a viscosidade volumétrica λ_s da fase particulada são determinadas pela teoria cinética granular, seção 3.2.3 (Equações 3.20 e 3.23). O terceiro termo do lado direito das Equações (3.6) e (3.7) representa a força gravitacional, enquanto que o quarto termo \vec{F}_g e \vec{F}_s representa a força interfacial total que atua no escoamento bifásico gás-sólido, ou seja, a interação entre as fases no que diz respeito ao seu movimento relativo. Portanto, os termos \vec{F}_g e \vec{F}_s são a soma de diversas forças, como por exemplo, as forças *lift*, arraste, corpo externo, massa virtual, dispersão turbulenta e lubrificação de parede.

No modelo de escoamentos de duas fases, devido a grande diferença de densidades entre as fases, as forças interfaciais são menos significantes, exceto a força de arrasto predominante neste tipo de escoamento. Desta forma, as demais forças interfaciais podem ser desprezadas sem nenhum tipo de prejuízo em termos de resultado (ARMELLINI, 2015; MINETO, 2009).

Considerando as simplificações feitas para as equações da continuidade e para as forças interfaciais no regime permanente, as equações da conservação do momento linear assumem a seguinte forma:

$$\nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g \vec{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla P + \nabla \cdot \vec{\tau}_g + \varepsilon_g \rho_g \vec{g} + K_{sg} (\vec{u}_s - \vec{u}_g) \quad (3.10)$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) = -\varepsilon_s \nabla P - \nabla P_s + \nabla \cdot \vec{\tau}_s + \varepsilon_s \rho_s \vec{g} + K_{sg} (\vec{u}_g - \vec{u}_s) \quad (3.11)$$

O último termo das Equações (3.10) e (3.11) constituem o termo de interação simples utilizado pelo *software* FLUENT para modelar a força de arraste. Esta é modelada em função do coeficiente da quantidade de movimento na interface, ou função de arrasto (K_{sg}), e da velocidade relativa entre as fases. A função de arrasto é determinada a partir do coeficiente de arrasto (C_D).

Correlações para K_{sg} podem ser formuladas de diferentes formas. Por exemplo, a partir de correlações para a queda de pressão no escoamento de gás através de um leito empacotado (leito na condição de mínima fluidização), como a correlação de Ergun (1952), que dá origem à correlação de Gidaspow (1994) para K_{sg} . Outro modo é a obtenção de K_{sg} a partir de correlações para a velocidade terminal (velocidade uniforme quando ocorre o equilíbrio entre as forças de arrasto e gravitacional) em um leito fluidizado, expresso como função da fração de vazio e do número de Reynolds. A correlação de Syamlal e O'Brien (1987) foi obtida desse modo (PHILIPPSSEN, 2012).

3.1.3 Equações de conservação da energia

A transferência de calor entre as fases tem um papel importante nos processos que ocorrem no interior do *riser*, uma vez que o catalisador regenerado quente entra em contato com as demais fases e fornece grande parte da energia necessária durante o processo.

Assim para modelar a transferência de calor entre as fases, considerando apenas as fases gás e sólido, em regime permanente e sem a presença de reações químicas, são necessárias equações de energia para estas duas fases, respectivamente expressas como:

$$\nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g h_g) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \alpha_g \nabla T_g) + \gamma (T_s - T_g) \quad (3.12)$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s h_s) = \nabla \cdot (\varepsilon_s \alpha_s \nabla T_s) + \gamma (T_g - T_s) \quad (3.13)$$

Nestas Equações h representa a entalpia específica de cada fase, α é a condutividade térmica T é a temperatura e γ representa o coeficiente de transferência de calor entre as fases, calculado pelo número de Nusselt através da correlação de Rans-Marshall (RANZ e MARSHALL, 1952), descrito na seção 3.2.5, Equação 3.29.

3.2 Equações constitutivas

3.2.1 Coeficiente da quantidade de movimento na interface

Para modelar o termo de transferência de quantidade de movimento entre as fases, K_{sg} , presente nas Equações (3.10) e (3.11), foi utilizado o modelo de arraste de Gidaspow (GIDASPOW, 1994), que utiliza a equação de Ergun (1952) para regiões densas, e a correlação de Wen e Yu (1966) com os coeficientes de arrasto de Rowe (1961), nas regiões diluídas do domínio fluido (ROTAVA, 2008).

O modelo de arrasto de Wen e Yu é baseado nos dados experimentais de Richardson e Zaki (1954), válido quando as forças internas são desprezadas e o comportamento do fluxo é dominado pelas forças viscosas. Este modelo é descrito pela Equação (3.14) quando $\varepsilon_g > 0,8$. O fator de arrasto C_D , neste modelo, é para uma partícula esférica quando $Re < 1000$ (Equação 3.16). A equação de Ergun, através de meios porosos, relaciona o arrasto com a queda de pressão, descrito pela Equação (3.15) quando $\varepsilon_g \leq 0,8$. Segundo Lundberg e Halvorsen (2008)

esta equação é uma combinação da equação de Carman, que descreve a viscosidade para um número de Reynolds baixo, e a equação de Plummer, que descreve a cinética para um número de Reynolds alto (PHILIPPSEN, 2012).

$$K_{sg} = \frac{3}{4} C_D \frac{\varepsilon_s \varepsilon_g \rho_g |\bar{u}_s - \bar{u}_g|}{d_s} \varepsilon_g^{-2,65}, \quad \varepsilon_g > 0,8 \quad (3.14)$$

$$K_{sg} = 150 \frac{\varepsilon_s (1 - \varepsilon_g) \mu_g}{\varepsilon_g d_s^2} + 1,75 \frac{\rho_g \varepsilon_s |\bar{u}_s - \bar{u}_g|}{d_s}, \quad \varepsilon_g \leq 0,8 \quad (3.15)$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{\varepsilon_g \text{Re}_s} [1 + 0,15(\varepsilon_g \text{Re}_s)^{0,687}] & \text{Re}_s < 1000 \\ 0,44 & \text{Re}_s \geq 1000 \end{cases} \quad (3.16)$$

$$\text{Re}_s = \frac{\rho_g d_s |\bar{u}_s - \bar{u}_g|}{\mu_g} \quad (3.17)$$

sendo μ_g a viscosidade dinâmica da fase gasosa, d_s o diâmetro das partículas e Re o número de Reynolds.

3.2.2 Pressão de sólidos

Para fluxos granulares em regime compressível (ou seja, quando a fração volumétrica dos sólidos é menor do que seu máximo valor permitido), uma pressão de sólidos é calculada para o segundo termo do gradiente de pressão da Equação (3.7). A pressão de sólidos P_s é uma medida da transferência de momento linear devido ao movimento aleatório das partículas e compreende duas partes: um termo cinético que predomina nas regiões onde o fluxo é diluído e outro devido às colisões entre as partículas, o qual é significativo nas regiões de fluxo denso. A correlação para P_s pode ser escrita seguindo (LUN *et al.*, 1984):

$$P_s = \varepsilon_s \rho_s \Theta_s + 2\rho_s (1 + e_{ss}) \varepsilon_s^2 g_{0,ss} \Theta_s \quad (3.18)$$

Em que e_{ss} é o coeficiente de restituição para colisões entre partículas e representa a elasticidade e/ou inelasticidade das partículas durante a colisão. Consequentemente, através deste termo é possível equacionar a dissipação de energia devido às colisões entre as partículas (ARMELLINI, 2015). Este parâmetro depende das propriedades do material e seu valor para os catalisadores de FCC é desconhecido. Como resultado, este termo atua como um parâmetro de ajuste empírico (SHAH *et al.*, 2016). Nesta dissertação, um valor de 0,9 foi adotado para o coeficiente de restituição. O termo $g_{0,ss}$ é a função de distribuição radial (Equação 3.19) e Θ_s é a temperatura granular, a qual será descrita na seção 3.2.4.

$$g_{0,ss} = \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,máx}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (3.19)$$

A função de distribuição radial ($g_{0,ss}$) descreve a probabilidade de encontrar duas partículas em grande proximidade. É um fator de correção que modifica a probabilidade de colisões entre as partículas quando a fração volumétrica destas se torna densa (SHAH *et al.*, 2016) e governa a transição entre a condição “compressível” ($\varepsilon_s < \varepsilon_{s,máx}$), em que o espaço entre as partículas ainda pode diminuir, e a “incompressível” ($\varepsilon_s = \varepsilon_{s,máx}$), em que não há mais espaço entre elas (ANSYS FLUENT 15.0 – Theory Guide, 2013). Um valor de 0,63 foi adotado, neste trabalho, para o limite de empacotamento ($\varepsilon_{s,máx}$).

3.2.3 Tensor tensão da fase sólida

O tensor tensão da fase sólida ($\bar{\bar{\tau}}_s$), descrito na seção 3.1.2 (Equação 3.9) contém a viscosidade cisalhante e a viscosidade volumétrica geradas pela troca de momento linear entre as partículas devido à translação e colisão. A viscosidade cisalhante (Equação 3.20), ou viscosidade granular, é composta por duas partes: uma cinética ($\mu_{s,kin}$), predominante nas regiões diluídas e uma parte colisional ($\mu_{s,col}$), que atua nas regiões densas. A viscosidade cisalhante pode ser definida como:

$$\mu_s = \mu_{s,col} + \mu_{s,kin} \quad (3.20)$$

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5} \varepsilon_s \rho_s d_s g_{0,ss} (1 + e_{ss}) \left(\frac{\Theta_s}{\pi} \right)^{1/2} \varepsilon_s \quad (3.21)$$

$$\mu_{s,kin} = \frac{10 \rho_s d_s \sqrt{\Theta_s \pi}}{96 \varepsilon_s (1 + e_{ss}) g_{0,ss}} \left[1 + \frac{4}{5} g_{0,ss} \varepsilon_s (1 + e_{ss}) \right]^2 \varepsilon_s \quad (3.22)$$

A viscosidade volumétrica dos sólidos leva em consideração a resistência das partículas à compressão e expansão, e pode ser equacionada como (LUN *et al.*, 1984):

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \varepsilon_s^2 \rho_s d_s g_{0,ss} (1 + e_{ss}) \left(\frac{\Theta_s}{\pi} \right)^{1/2} \quad (3.23)$$

3.2.4 Temperatura granular

Tanto a viscosidade cisalhante quanto a viscosidade volumétrica necessitam da especificação da temperatura granular da fase sólida. Na Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares o movimento aleatório das partículas é comparado ao movimento térmico das moléculas em um gás. A energia cinética destas flutuações aleatórias é quantificada pela temperatura granular.

Para o cálculo da temperatura granular, foi utilizada uma formulação algébrica assumindo que os termos difusivo e convectivo podem ser desprezados sobre a premissa de uma condição de equilíbrio local onde a geração de energia pseudo-térmica se iguala à sua dissipação (SYAMLAL *et al.*, 1993):

$$\Theta_s = \left\{ \frac{-K_1 \varepsilon_s \nabla \cdot \vec{u}_s + \sqrt{(K_1 \varepsilon_s \nabla \cdot \vec{u}_s)^2 + 4K_4 \varepsilon_s [K_2 (\nabla \cdot \vec{u}_s)^2 + 2K_3 (\nabla \cdot \vec{u}_s^2)]}}{2\varepsilon_s K_4} \right\}^2 \quad (3.24)$$

sendo K_1 , K_2 , K_3 e K_4 calculados por:

$$K_1 = 2(1 + e_{ss}) \rho_s g_{0,ss} \quad (3.25)$$

$$K_2 = \frac{4d_s \rho_s (1 - e_{ss}) \varepsilon_s g_{0,ss}}{3\sqrt{\pi}} - \frac{2}{3} K_3 \quad (3.26)$$

$$K_3 = \frac{d_s \rho_s}{2} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{3(3 - e_{ss})} \left[1 + 0,4(1 - e_{ss})(3e_{ss} - 1) \varepsilon_s g_{0,ss} \right] + \frac{8\varepsilon_s g_{0,ss} (1 + e_{ss})}{5\sqrt{\pi}} \right\} \quad (3.27)$$

$$K_4 = \frac{12(1 - e_{ss}^2) \rho_s g_{0,ss}}{d_s \sqrt{\pi}} \quad (3.28)$$

3.2.5 Coeficiente de transferência de calor

O coeficiente de transferência de calor convectivo (γ) entre as partículas e o gás é dado por:

$$\gamma = \frac{Nu\alpha}{d_p} \quad (3.29)$$

Em que α é a condutividade térmica da fase gás e Nu representa o número de Nusselt, modelado através da correlação de Ranz-Marshall, que leva em consideração o número Prandtl (Pr), com c_p (Equação 3.31) sendo o calor específico do gás à pressão constante:

$$Nu_p = 2,0 + 0,6 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad (3.30)$$

$$Pr = \frac{c_p \mu_g}{\alpha_g} \quad (3.31)$$

3.3 Modelo de Turbulência

Todos os escoamentos encontrados na engenharia se tornam instáveis, ou turbulentos, acima de um certo número de Reynolds. A turbulência pode ser definida como um fenômeno convectivo não-linear transiente que ocorre nas três dimensões cartesianas. É uma propriedade intrínseca ao escoamento e não ao fluido, ocorrendo nas mais variadas escalas de tempo e comprimento (HODAPP, 2009).

O número adimensional de Reynolds caracteriza se as condições do escoamento geram um escoamento laminar ou turbulento. Em tubulações circulares, para fluidos Newtonianos, a faixa entre 2100 a 4000 é atribuída como divisor entre os regimes laminar (< 2100) e turbulento (> 4000) (HODAPP, 2009).

A consideração do efeito da turbulência sobre o escoamento pode ser feita de diferentes formas. É possível, por exemplo, descrever escoamentos turbulentos usando apenas as equações de Navier-Stokes, sem acrescentar nenhuma informação adicional. Esta abordagem é conhecida como DNS (do inglês, *Direct Numerical Simulation*). Nesse tipo de simulação, para que se possa estudar todas as estruturas da turbulência, o domínio do problema precisa ser dividido em volumes ainda menores que o tamanho dos menores vórtices dentro da escala de Kolmogorov. Já a abordagem LES (do inglês, *Large Eddy Simulation*) consiste na solução das equações de Navier-Stokes nas regiões onde se encontram os maiores vórtices e na aplicação de um modelo algébrico simples para a predição dos menores vórtices. Ambas as abordagens requerem um alto grau de refino da malha numérica e o uso de valores baixos para o passo de tempo, o que torna sua aplicação limitada para a maioria dos casos. Assim, uma alternativa viável que vem sendo utilizada com sucesso são as equações conhecidas por RANS (do inglês, “*Reynolds Averaged Navier-Stokes*”), que aproximam as flutuações turbulentas por um valor médio (LOPES, 2012).

Dentro dos modelos que se encaixam neste tipo de abordagem (RANS), o modelo $k-\epsilon$ proposto por Launder e Spalding (1974) é o modelo de duas equações mais utilizado. Este modelo usa a hipótese da viscosidade turbulenta, isto é, onde as tensões de Reynolds podem ser relacionadas linearmente com os gradientes médios de velocidade.

O modelo de turbulência $k-\epsilon$ resolve duas equações de transporte, sendo uma para a energia cinética turbulenta (k) e outra para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ), assumindo que o escoamento é completamente turbulento e os efeitos de viscosidade molecular são negligenciáveis.

Existe no FLUENT três modelos $k-\epsilon$ aplicáveis, sendo eles o de Mistura, Disperso e Por Fase. Neste trabalho foi utilizado o modelo Disperso.

3.3.1 Modelo k-ε Disperso

De acordo com Faisca (2013), o modelo de turbulência $k-\epsilon$ Disperso é o mais usado para simular o escoamento dentro do *riser*. Este modelo utiliza para a fase contínua o modelo $k-\epsilon$ modificado com um termo adicional que inclui a transferência de momento turbulenta entre as fases (Equações 3.32 e 3.33).

$$\nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g \vec{u}_g k_g) = \nabla \cdot \left[\epsilon_g \left(\mu_g + \frac{\mu_{t,g}}{\sigma_k} \right) \nabla k_g \right] + \epsilon_g G_{k,g} - \epsilon_g \rho_g \epsilon_g + \epsilon_g \rho_g \Pi_{kg} \quad (3.32)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g \vec{u}_g \epsilon_g) = \nabla \cdot \left[\epsilon_g \left(\mu_g + \frac{\mu_{t,g}}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon_g \right] + \epsilon_g \frac{\epsilon_g}{k_g} (C_{1\epsilon} G_{k,g} - C_{2\epsilon} \rho_g \epsilon_g) + \epsilon_g \rho_g \Pi_{\epsilon g} \quad (3.33)$$

Nas Equações (3.32) e (3.33) foi desconsiderado o termo transiente. Nestas equações os termos Π_{kg} e $\Pi_{\epsilon g}$ são termos fonte que podem ser incluídos para modelar a influência da fase dispersa sobre a fase contínua, $G_{k,g}$ é a produção de energia cinética turbulenta e $\mu_{t,g}$ é a viscosidade turbulenta da fase gasosa. Estes termos são modelados pelas Equações (3.34) – (3.39). O termo \vec{u}_g é a velocidade ponderada da fase gasosa e $C_{1\epsilon}$, $C_{2\epsilon}$, σ_k e σ_ϵ são constantes cujos valores são apresentados na Tabela 3.1, como pode ser visto na página 51 deste trabalho.

$$G_{k,g} = \mu_{t,g} S^2 \quad (3.34)$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (3.35)$$

$$\mu_{t,g} = \rho_g C_\mu \frac{k_g^2}{\epsilon_g} \quad (3.36)$$

onde, S é o modulo do tensor da taxa média de deformação e C_μ uma constante dada na Tabela 3.1.

De acordo com o modelo de Simonin e Viollet (1990) os termos fonte são calculados por:

$$\prod_{k_g} = \frac{K_{sg}}{\varepsilon_g \rho_g} (k_{sg} - 2k_g) \quad (3.37)$$

$$\prod_{\varepsilon_g} = C_{3\varepsilon} \frac{\varepsilon_g}{k_g} \prod_{k_g} \quad (3.38)$$

onde, $C_{3\varepsilon}$ é uma constante apresentada na Tabela 3.1.

Para a fase dispersa, o tempo de relaxamento característico das partículas τ_{sg}^F , que está ligado aos efeitos inerciais atuando sobre a fase dispersa, é definido como:

$$\tau_{sg}^F = \frac{\rho_g d_s^2}{18\mu f(\text{Re}, \varepsilon_g)} \left(\frac{\rho_g}{\rho_s} C_{VM} + 1 \right) \quad (3.39)$$

O tempo característico dos turbilhões da fase contínua é definido por:

$$\tau_g^t = \frac{3}{2} C_\mu \frac{k_g}{\varepsilon_g} \quad (3.40)$$

e o tempo de interação partícula – turbilhão, que sofre efeito da trajetória da partícula, é dado por:

$$\tau_{sg}^t = \frac{\tau_g^t}{\sqrt{1 + C_\beta \xi_\tau^2}} \quad (3.41)$$

sendo o parâmetro ξ_τ definido como segue:

$$\xi_\tau = \frac{|\vec{u}_s - \vec{u}_g|}{\sqrt{\frac{2}{3} k_g}} \quad (3.42)$$

O parâmetro C_β é dado por:

$$C_\beta = 1,8 - 1,35 \cos^2 \theta \quad (3.43)$$

em que θ é o ângulo entre a velocidade média da partícula e a velocidade média relativa. A razão entre esses dois tempos característicos é escrita como:

$$\eta_{sg} = \frac{\tau_{sg}^t}{\tau_{sg}^F} \quad (3.44)$$

Seguindo Simonin e Viollet (1990), pode-se escrever as quantidades de turbulência para a fase dispersa como segue:

$$k_s = k_g \left(\frac{b^2 + \eta_{sg}}{1 + \eta_{sg}} \right) \quad (3.45)$$

$$k_{sg} = 2k_g \left(\frac{b + \eta_{sg}}{1 + \eta_{sg}} \right) \quad (3.46)$$

$$b = (1 + C_{VM}) \left(\frac{\rho_s}{\rho_g} + 1 \right)^{-1} \quad (3.47)$$

A difusividade de cada fase pode ser calculada por:

$$D_s = D_{sg}^t + \left(\frac{2}{3} k_s - b \frac{1}{3} k_{sg} \right) \tau_{sg}^F \quad (3.48)$$

$$D_{sg}^t = \frac{1}{3} k_{sg} \tau_{sg}^t \quad (3.49)$$

onde o valor da constante C_{VM} é dado na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Constantes do modelo de turbulência $k-\epsilon$.

Constantes	Valores
C_μ	0,09
$C_{1\epsilon}$	1,44
$C_{2\epsilon}$	1,92
$C_{3\epsilon}$	1,20
σ_k	1,00
σ_ϵ	1,00
C_{VM}	0,50

CAPÍTULO 4

METODOLOGIA NUMÉRICA

Na modelagem matemática do problema em questão foram utilizadas equações diferenciais parciais não lineares que não possuem solução analítica. A dificuldade de se encontrar soluções analíticas decorre do fato de que a teoria matemática dessa classe de equações ainda não está suficientemente desenvolvida para permitir a obtenção de soluções analíticas em regiões arbitrárias e condições de contorno gerais. Com o advento do computador digital a partir dos anos de 1950, surgiu uma alternativa para a obtenção da solução numérica destas equações utilizando técnicas computacionais (FORTUNA, 2000).

A dinâmica de fluidos computacional é a área da computação científica que estuda métodos computacionais para simulação de fenômenos que envolvem fluidos em movimento com ou sem trocas de calor. Isso inclui tanto o movimento de fluidos ao redor de um corpo como dentro de tubulações ou turbinas. Basicamente, o usuário da CFD está interessado em obter as distribuições de velocidades, pressões e temperaturas na região do escoamento (FORTUNA, 2000).

No geral, a CFD apresenta um versátil conjunto de diversos métodos numéricos desenvolvidos para a discretização e resolução dos problemas de escoamento, tais como

Método de Diferenças Finitas (MDF), Método de Volumes Finitos (MVF) e Método de Elementos Finitos (MEF). Existem outros métodos tais como os métodos espectroscópicos, métodos de elementos de contorno ou autômatos celulares, mas são geralmente restritos a casos específicos. A aplicabilidade de cada algoritmo depende da situação tratada, sendo importante o conhecimento tanto dos aspectos físicos do problema quanto dos aspectos numéricos da metodologia de solução adotada

Softwares comerciais, tais como ANSYS CFX, ANSYS Fluent e STAR-CD aplicam o Método dos Volumes Finitos na discretização das equações diferenciais. A preferência é devido às suas características conservativas, já que, para o escoamento de fluidos é importante satisfazer os princípios de conservação no nível discreto. Com este método, não há a possibilidade da existência de fontes/sumidouros de grandezas como massa, quantidade de movimento e energia dentro domínio de solução (MALISKA, 2004)

No Método dos Volumes Finitos, o domínio do problema é subdividido em uma série de volumes de controle finitos sobre os quais devem ser aplicadas as equações aproximadas provenientes da aplicação do método numérico, de forma que estas satisfaçam o balanço da propriedade em questão em cada um desses volumes (LOPES, 2012).

A fim de fornecer acesso fácil ao seu poder de resolução, todos os pacotes de CFD comerciais incluem interfaces de usuário sofisticadas para introduzir parâmetros do problema e para examinar os resultados. Assim, todos os códigos contêm três elementos principais: (i) pré-processamento, (ii) solver e (iii) pós-processamento.

4.1 Pré-Processamento

A etapa de pré-processamento consiste na criação/reprodução da geometria e da malha computacional. A geometria é construída em um *software* de CAD (*Computer Aided Design*), onde são atribuídas as dimensões assim como as entradas e saídas do domínio de solução. A malha consiste na divisão do domínio de solução em volumes de controle, sobre os quais serão resolvidas as equações de transporte, mediante o uso de métodos numéricos. A precisão dos resultados da simulação depende em grande parte da qualidade da malha, a qual é medida mediante parâmetros como o ângulo mínimo entre os volumes, e o determinante da matriz jacobiana. Ainda na etapa de pré-processamento, são inseridas as variáveis das equações de

transporte, equações de estado, modelos físicos, condições iniciais e de contorno e demais propriedades, com o objetivo de caracterizar adequadamente o sistema (SILVA, 2012).

4.1.1 Geometria e malha

A construção da geometria e a geração da malha utilizadas neste trabalho foram feitas com base nas dimensões do *riser* de uma planta experimental a frio encontrada no trabalho de Pärssinen e Zhu (2001). Esta unidade foi escolhida devido a suas dimensões experimentais estarem em melhor acordo com a finalidade desejada, o estudo da termofluidodinâmica do escoamento gás-sólido, e por sua operação à frio, o que significa que os efeitos devido à transferência de massa e reações químicas podem ser negligenciados, fornecendo dados experimentais que consideram apenas a fluidodinâmica do escoamento. Neste trabalho de dissertação, estes dados foram comparados com os resultados numéricos obtidos para a validação do modelo adotado.

O *riser* da unidade é composto por uma tubulação com saída curva em um ângulo de 90° , 76 milímetros de diâmetro interno e altura total de 10 metros. No intervalo de 0,22 a 0,275 metros acima do fundo do *riser* encontra-se a entrada de sólidos com diâmetro de 40 mm formando um ângulo de 45° com a tubulação principal.

A geometria do *riser*, foi construída usando as ferramentas de desenho do *software* ICEM 15, da ANSYS. Dentro do *software* é possível desenhar e construir a geometria do *riser* através de retas, curvas e superfícies tridimensionais, especificando as regiões de entrada e saída do escoamento, conforme ilustrado pela Figura 4.1.

A geometria criada na etapa anterior, ainda dentro do *software* ICEM, foi subdividida em pequenos elementos (malha) 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, no entanto, isso aumenta consideravelmente seu custo computacional. Com isso, deve-se encontrar uma malha que garanta a qualidade da resposta, com adequado refinamento em regiões nas quais os gradientes das variáveis dependentes são elevados, e menor custo computacional possível.

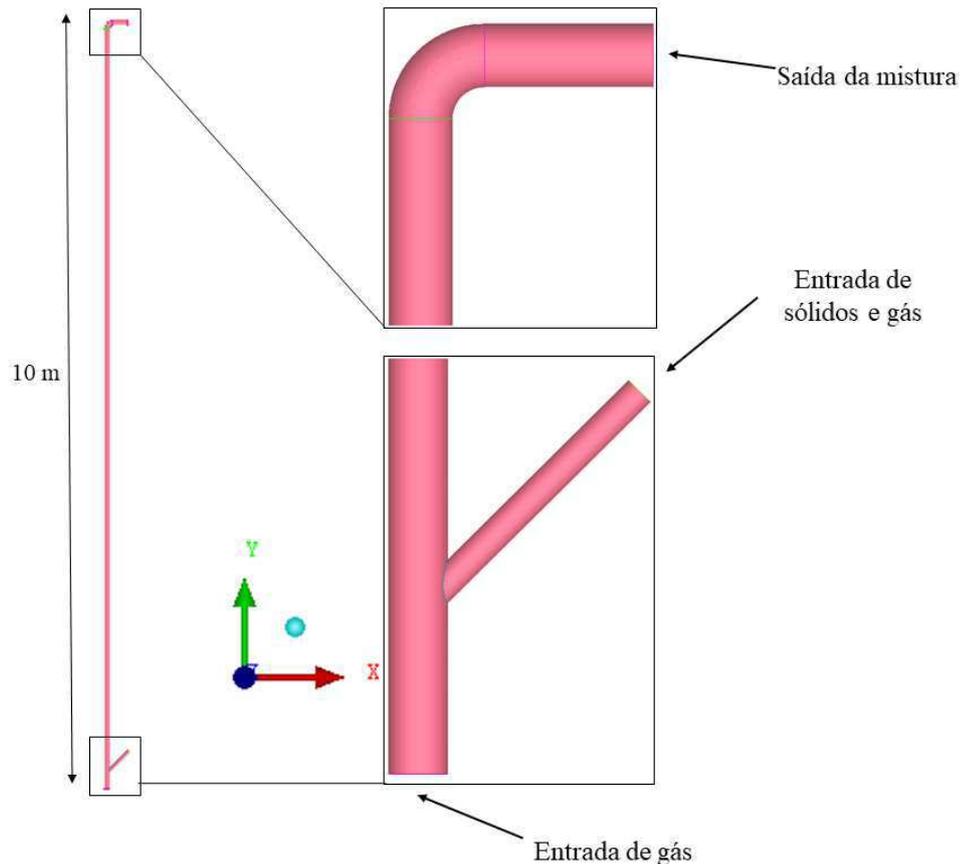


Figura 4.1 - Geometria tridimensional do *riser*.

Para tanto, através da técnica de multi-blocos, foi construída uma malha hexaédrica com 900 mil elementos, a qual foi dada um maior refinamento nas regiões que apresentam maiores gradientes, não só para assegurar a qualidade dos resultados, como também por a estabilidade numérica do modelo ter se mostrado sensível ao refinamento nessas regiões. São elas: a região de entrada de sólidos, principalmente aquela onde ocorre o primeiro contato entre gás e sólidos, próximo as paredes do *riser*, onde aparecem as maiores concentrações de sólidos devido ao atrito em relação à parede, e na curvatura da saída, onde o fluxo muda de direção abruptamente. Nas demais regiões do domínio utilizou-se uma malha menos refinando buscando reduzir o custo computacional do problema. Na Figura 4.2 observa-se o detalhamento da malha gerada.

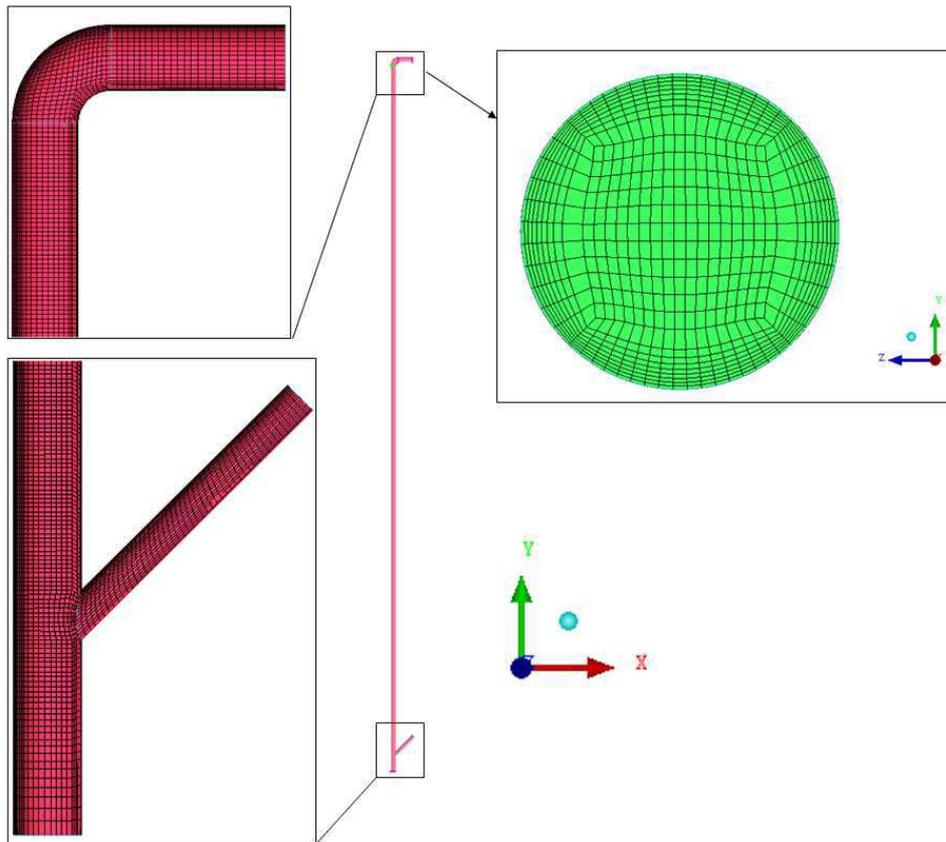


Figura 4.2 – Detalhes de malha numérica nas entradas e saída do equipamento.

4.1.2 Simulação

O modelo simulado consiste basicamente em um fluxo turbulento, em regime permanente, onde duas fases entram em contato, uma fase gasosa (incompressível) formada por ar a $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ e uma fase particulada constituída por catalisador. As partículas são consideradas lisas, esféricas e inelásticas, com um diâmetro médio de $67\text{ }\mu\text{m}$ e uma densidade de 1500 kg/m^3 .

Devido à força de arraste provocada pela fase gasosa, que supera o peso das partículas, estas aceleram e se movem na direção do fluxo, desenvolvendo o regime fluidizado rápido num curto espaço de tempo ao longo do equipamento. No *riser* assume-se que o ar introduzido a partir do fundo do mesmo possui uma distribuição uniforme com uma velocidade superficial especificada, enquanto que a fase sólida é alimentada pela entrada lateral próxima a base.

A malha gerada foi importada para o pacote comercial de *software* de CFD ANSYS Fluent 15.0, o qual foi aplicado para resolver as equações constitutivas e de conservação

descritas no Capítulo 3, com as propriedades dos materiais, os parâmetros numéricos e condições de contorno sob diferentes condições de operação apresentados nas Tabelas 4.1 e 4.2.

Tabela 4.1 – Propriedades dos materiais.

	Gás	Catalisador
Massa específica (kg/m ³)	1,225	1500
Viscosidade (Pa.s)	1,78×10 ⁻⁵	-

Tabela 4.2 – Condições operacionais e de contorno.

Casos	Fase Particulada				Fase Gás		
	ε_s	G_s (kg/m ² s)	d_s (m)	T_s (K)	ε_g	u_g (m/s)	T_g (K)
1	0,63	300	6,7×10 ⁻⁵	-	0,37	8,0	298,15
2	0,63	300	6,7×10 ⁻⁵	-	0,37	10,0	298,15
3	0,63	300	6,7×10 ⁻⁵	-	0,37	5,5	298,15
4	0,63	400	6,7×10 ⁻⁵	-	0,37	8,0	298,15
5	0,63	550	6,7×10 ⁻⁵	-	0,37	8,0	298,15
6	0,63	300	7,6×10 ⁻⁵	-	0,37	8,0	298,15
7	0,63	300	4,0×10 ⁻⁵	-	0,37	8,0	298,15
8	0,63	300	6,7×10 ⁻⁵	913,15	0,37	8,0	298,15
9	0,63	300	6,7×10 ⁻⁵	913,15	0,37	8,0	643,15

Por fim, na parede do *riser* foi considerada a condição de não deslizamento (*no – slip*) para ambas as fases gasosa e particulada e a pressão do sistema foi definido na saída com o valor de 1,034 atm.

Com o intuito de avaliar a influência de alguns parâmetros e variáveis relacionadas ao escoamento, 9 casos foram simulados considerando diferentes condições operacionais apresentadas na Tabela 4.2. Vale ressaltar que apenas nos casos 8 e 9 foi considerada a equação de conservação da energia. Os casos de 1 à 5 foram estudados experimentalmente por Pärssinen e Zhu (2001), em uma planta cujo *riser* apresenta as mesmas dimensões da geometria utilizada neste trabalho, e para o mesmo tipo de catalisador.

Na Tabela 4.2, os termos ε_s e ε_g representam a fração volumétrica de entrada de catalisador e gás, respectivamente, como condição de contorno na entrada lateral (entrada de sólidos e gás), u_s e u_g são as velocidades de entrada de catalisador e gás, e G_s é a taxa de circulação de sólidos ou fluxo mássico específico de sólidos no interior do *riser*.

4.2 Solver

Com o problema definido passa-se ao solver numérico. Após definir o sistema, são configurados os ajustes do solver; tais como o tipo de discretização espacial e temporal. Também é possível acompanhar a evolução da solução através do monitoramento dos resíduos numéricos das principais variáveis ou através de pontos de monitoramento para variáveis-chaves, definidos no pré-processamento (HODAPP, 2009).

Em linhas gerais o algoritmo numérico consiste nas seguintes etapas (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007):

- Integração das equações governantes do fluxo dos fluidos sobre todos os volumes de controle (finitos) do domínio;
- Discretização - conversão das equações integrais resultantes em um sistema de equações algébricas;
- Solução das equações algébricas por um método iterativo.

Todas as equações diferenciais foram resolvidas pelo método de volumes finitos e o esquema *second order upwind* foi utilizado para a discretização espacial das equações. O algoritmo *Coupled* foi utilizado para o acoplamento pressão-velocidade e todas as equações foram resolvidas até o critério de convergência RMS (*Root Mean Square*) de 10^{-3} ser alcançado.

4.3 Pós-Processamento

Finalmente, na etapa de pós-processamento é possível verificar o comportamento da fluidodinâmica do problema em qualquer estágio da solução, mesmo que ainda não totalmente convergida.

Existem várias ferramentas versáteis para a visualização desses dados, entre elas (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007):

- Geometria de domínio e exibição da malha;
- *Plot* de vetores;
- *Plot* de linhas e contornos;
- *Plot* de superfícies 2D e 3D;
- Visualização da trajetória de partículas;
- Manipulação da visualização (translação, rotação, escala, etc.);
- Geração de imagens e vídeos de diferentes *plots*.

Portanto, são avaliados os resultados obtidos mediante a observação de perfis das variáveis de resposta e gráficos ou contornos em 2D para a comparação com dados experimentais ou a visualização clara dos resultados da simulação. O *software* utilizado para esta etapa corresponde ao pacote comercial de pós-processamento da ANSYS CFD – Post 15.0.

CAPÍTULO 5

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Apesar da simulação ser um recurso imprescindível nos dias de hoje, deve-se tomar muito cuidado com os modelos utilizados, já que os mesmos podem produzir resultados enganosos, sem relação com a realidade. Desta forma, uma etapa importante do processo é a validação dos modelos que serão utilizados durante a etapa de simulação e, para isso, os resultados numéricos obtidos através da simulação devem ser comparados à resultados obtidos experimentalmente (ARMELLINI, 2015). Deste modo, neste trabalho foi feita a validação dos resultados tanto por método analítico, quanto por comparação com dados experimentais.

5.1 Comparação entre os resultados numéricos e analíticos

Foi realizada uma simulação utilizando a modelagem multifásica proposta por este trabalho para um escoamento gás – sólido com fluxo mínimo da fase particulada ($u_g = 5,5$ m/s e $G_s = 4,16 \times 10^{-4}$ kg/m²s), ou seja, este escoamento se aproxima de um escoamento monofásico de gás, estacionário, turbulento e isotérmico. Para este fluxo mássico específico da fase particulada, utilizou-se $u_s = 0,01$ m/s e $\varepsilon_s = 0,0001$. A partir do perfil de velocidade e da queda de pressão obtidos numericamente, avaliou-se a validade do modelo matemático proposto através de solução analítica disponível na literatura.

Para a determinação do perfil de velocidade analítico e da queda de pressão de um escoamento turbulento completamente desenvolvido em um tubo liso, utilizou-se a equação da lei de potência, apresentada pelas Equações (5.1) – (5.3) e a equação de perda de carga por atrito (FOX *et al.*, 2011), apresentada pelas Equações (5.4) e (5.5), respectivamente:

$$u = u_{m\acute{a}x} \left(1 - \left| \frac{r}{R} \right| \right)^{\frac{1}{n}} \quad (5.1)$$

$$n = -1,7 + 1,8 \log(Re) \quad (5.2)$$

$$u_{m\acute{a}x} = \bar{u} \frac{(n+1)(2n+1)}{2n^2} \quad (5.3)$$

onde, $u_{m\acute{a}x}$ é a velocidade da linha de centro, isto é, a velocidade máxima no centro do tubo, r é a posição radial, R é o raio do tubo, \bar{u} é a velocidade média, e o expoente n um valor que varia com o número de Reynolds para um $Re > 2 \times 10^4$ (FOX *et al.*, 2011).

$$\Delta P = \rho f \frac{L}{d_{riser}} \frac{\bar{u}^2}{2} \quad (5.4)$$

onde, f é o fator de atrito, determinado através da equação de Blasius, Equação (5.5), válida para escoamento turbulento em tubos lisos com $Re \leq 10^5$, L é o comprimento do tubo, e d_{riser} é o diâmetro do *riser*.

$$f = \frac{0,316}{Re^{0,25}} \quad (5.5)$$

Na Figura 5.1(a) estão ilustrados os perfis de velocidade obtidos analiticamente a partir da Equação 5.1 e numericamente na posição axial Y igual a 3 m a partir da entrada do *riser*. Esta posição axial foi escolhida com o auxílio da correlação para o comprimento de entrada hidrodinâmico $L = 4,4D(Re)^{1/6}$ disponível em Fox *et al.* (2011), buscando assegurar o regime

turbulento desenvolvido. Na Tabela 5.1 estão apresentados os valores para a queda de pressão obtidos analiticamente e numericamente para Y entre 3 e 6 m. Observou-se uma boa concordância dos resultados, tanto de velocidade quanto de pressão, indicando que o modelo matemático proposto foi capaz de prever adequadamente o escoamento do gás no interior do *riser* em regime turbulento e permanente, o que válida a malha numérica e o modelo utilizado. Uma pequena discrepância foi percebida no centro do perfil da Figura 5.1(a), porém, Fox *et al.* (2011) explicaram que, embora o perfil analítico ajuste-se aos dados próximos da linha de centro, ele falha por não possuir inclinação nula nessa região. Apesar destes inconvenientes, o perfil da lei de potência permite obter resultados adequados em muitos cálculos, apresentando maior fidelidade a medida que o número de Reynolds aumenta e conseqüentemente o valor de n . Isto pode ser percebido através da Figura 5.1(b), onde a simulação anterior foi refeita considerando $u_g = 500$ m/s, o que resultou em um número de Reynolds de aproximadamente $Re = 2.615.169$, $n = 9,85$ e menor inclinação do perfil analítico na região próxima a linha de centro.

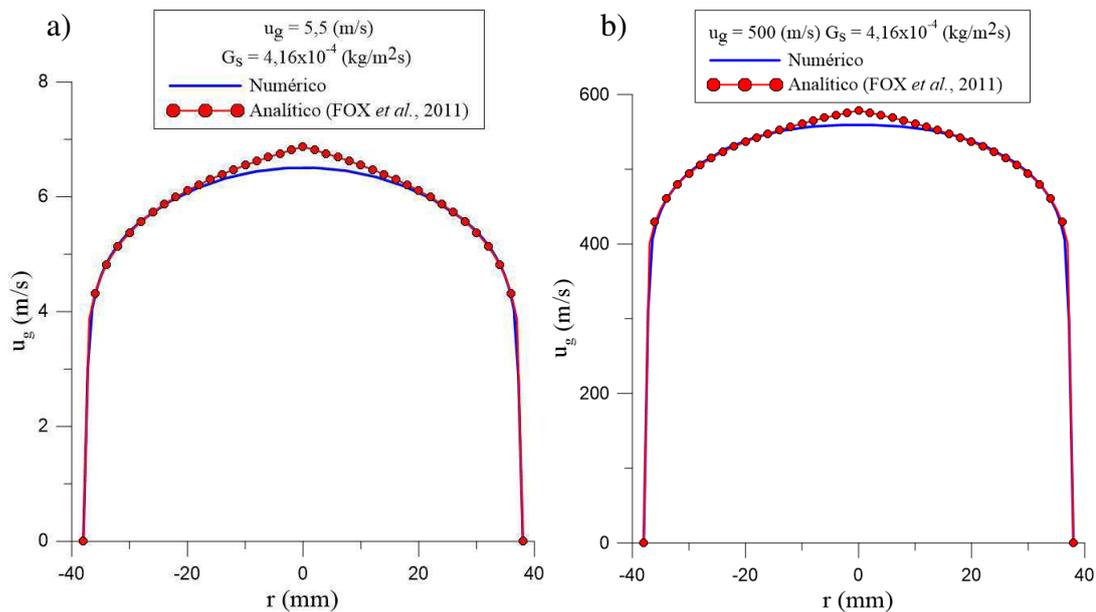


Figura 5.1 – Comparação entre os perfis de velocidade para um escoamento turbulento de gás, obtidos numérica e analiticamente. (●●) Fox *et al.* (2011) e (—) resultados simulados.

Tabela 5.1 – Queda de pressão obtida analiticamente e numericamente para Y entre 3 e 6 m.

	Analítico	Numérico	Erro %
ΔP (Pa)	17,74	17,00	4,17

Os campos de pressão para cortes da seção transversal do *riser* em uma altura Y igual a 6 m, Figura 5.2 (a), e na curva de saída, Figura 5.2 (b) para a simulação com $u_g = 5,5$ m/s, são apresentados na Figura 5.2.

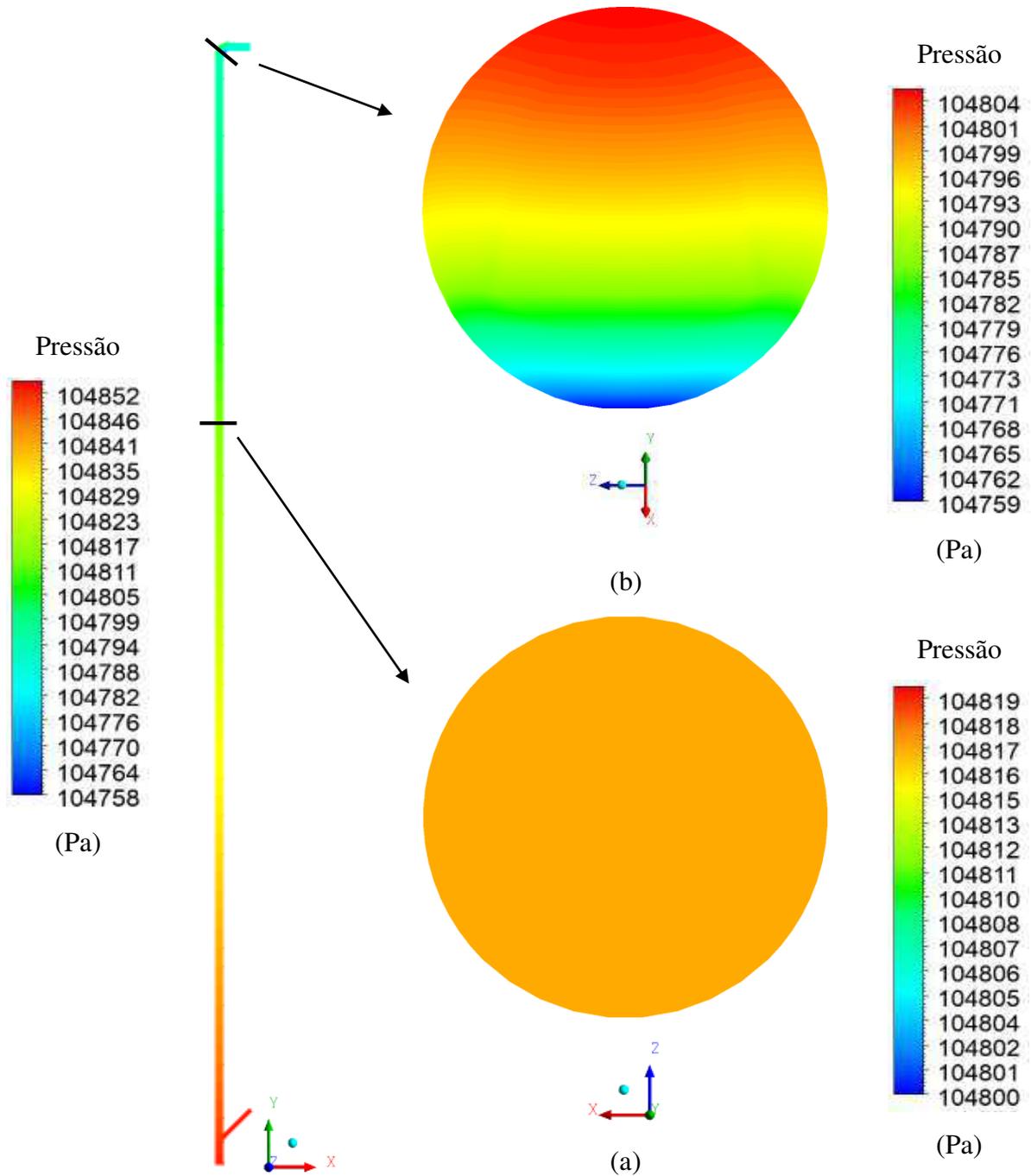


Figura 5.2 – Campos de pressão para cortes da seção transversal em Y igual a 6 m e na curvatura de saída.

Verificou-se uma notável diferença na distribuição radial da pressão entre a região a 6 m e a curvatura de saída. Esta diferença se deve ao fato de que a pressão tende a aumentar para fora na direção normal as linhas de corrente a partir do centro de curvatura dessas linhas, pois a única força agindo sobre o fluido é a força líquida de pressão, ou seja, é o campo de pressão que cria a aceleração centrípeta necessária para que o escoamento mude de direção. Assim, a pressão varia radialmente, aumentando no sentido de dentro para fora da curvatura de saída. O mesmo não foi observado para o corte a 6 m, posto que em regiões onde as linhas de corrente são retas, o raio de curvatura das linhas é infinito, de forma que não houve variação de pressão na direção radial (normal as linhas de corrente). Deste modo, a variação de pressão nas regiões onde as linhas de corrente são retas ocorre apenas na direção das mesmas (eixo Y), e está relacionada com a velocidade do fluido, pois este é acelerado em direção as regiões de baixa pressão e desacelerado quando se aproxima das regiões de alta pressão. Fox *et al.* (2011) demonstraram esse comportamento através da equação de Euler, na direção tangente e normal as linhas de corrente, para o escoamento em regime permanente, desconsiderando as forças de campo e viscosas.

5.2 Comparação entre resultados numéricos e experimentais

Na Figuras 5.3 observa-se as comparações entre a distribuição média de sólidos (fração volumétrica) dos casos simulados 1 à 5 com os dados experimentais de Pärssinen e Zhu (2001) medidos em 11 posições radiais ($r/R = 0,00; 0,16; 0,38; 0,50; 0,59; 0,67; 0,74; 0,81; 0,87; 0,92; e 0,98$) e em oito níveis axiais ($Y = 1,53; 2,73; 3,96; 5,13; 5,90; 6,34; 8,74 e 9,42$ m) sob cinco condições operacionais, variando-se as velocidades de fluxo na entrada de gás ou o fluxo das partículas sólidas, como descrito na Tabela 4.2.

A partir dos resultados apresentados na Figuras 5.3 é possível observar que ao longo do *riser* existe uma distribuição não uniforme da fração de sólidos, sendo perceptível uma clara diferença entre a região central (*core*) e a região próxima a parede (*annulus*). Verifica-se que a retenção de sólidos foi baixa e relativamente uniforme na região central até cerca de 70% -80% do raio da coluna, após a qual a concentração de sólidos aumenta consideravelmente em direção à parede, especialmente na porção inferior do *riser* (região densa) que apresenta maior concentração de sólidos do que a porção superior (região diluída). Tal comportamento é característico e esperado sob essas condições, tendo sido reportado na literatura por muitos autores (WANG, 2013; BENYAHIA, 2012; YAN e ZHU, 2004).

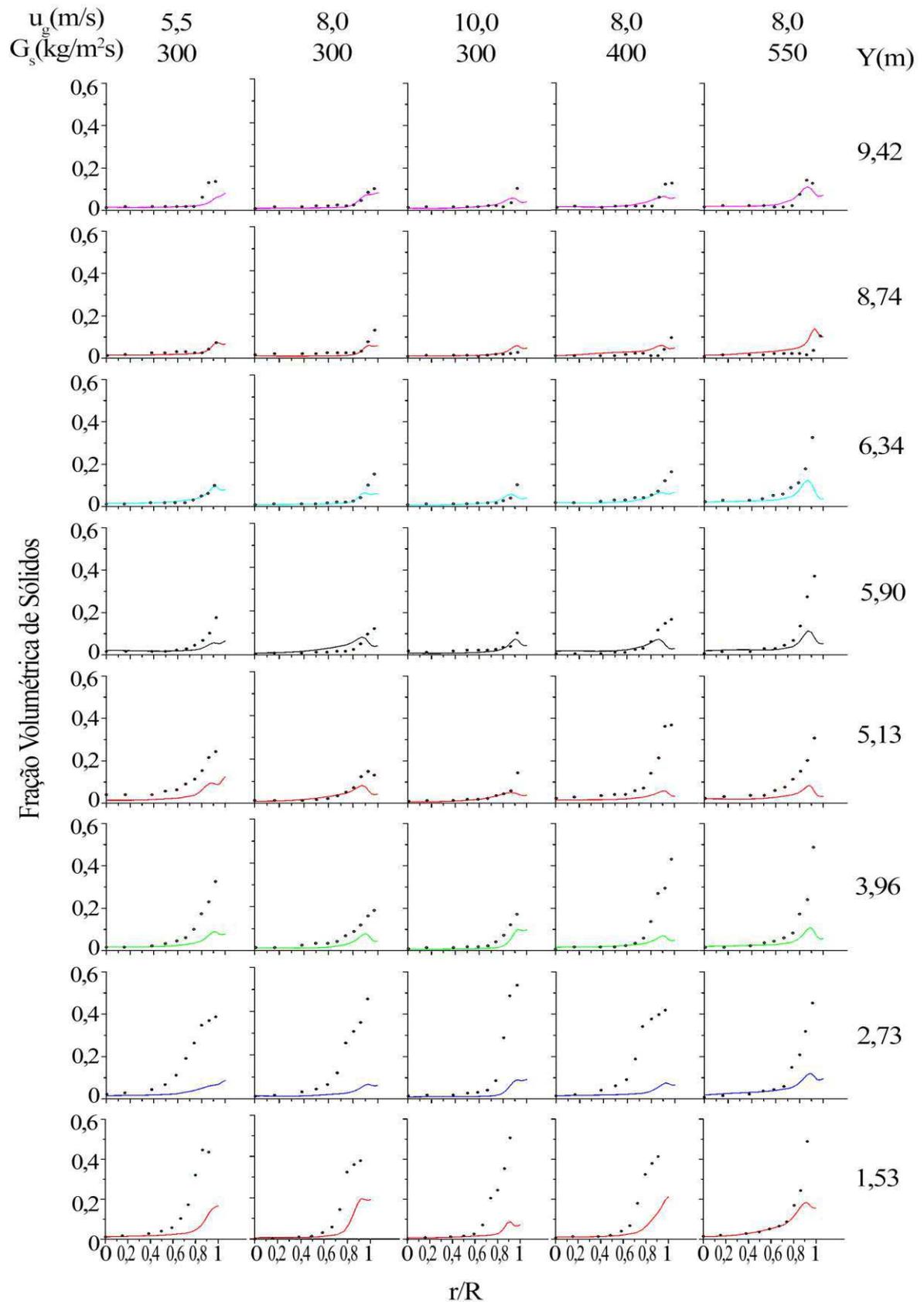


Figura 5.3 – Concentração radial de sólidos sob diferentes condições de fluxo em oito níveis axiais. (●●) Pärssinen e Zhu (2001) e (—) resultados simulados.

A densidade da suspensão gás-sólido é afetada por parâmetros como a escala e geometria do *riser*, a velocidade superficial do gás e o fluxo mássico específico de catalisador, entre outros, os quais influenciam diretamente a transferência de calor, transferência de massa e as taxas de reação química no *riser* (BERRUTI *et al.*, 1995). Desta forma, com o incremento da taxa de circulação de sólidos, G_s (300 – 550 kg/m²s), e/ou redução da velocidade superficial do gás (10 – 5.5 m/s), u_g , notou-se um ligeiro aumento da concentração de sólidos em direção à parede ao longo do *riser*. Também foi possível constatar que esta concentração na região central permanece próxima a um valor constante, mesmo sob as diferentes condições operacionais.

Conclusões análogas foram obtidas por Pärssinen e Zhu (2001) em seu trabalho experimental, assim, foi possível afirmar que os resultados simulados possuem o mesmo comportamento dos resultados obtidos por estes autores: uma densidade de partículas relativamente constante no centro do *riser* com um aumento do seu valor próximo à parede. Contudo, comparando os resultados percebeu-se que o modelo apesar de ser capaz de apresentar o padrão de fluxo esperado (*core-annulus*) não foi capaz de representar quantitativamente a concentração de sólidos próximo à parede, subestimando seu valor. Além disso, a influência dos parâmetros operacionais sobre a distribuição de sólidos nos resultados simulados foi apenas perceptível, com valores que oscilam próximo a parede entre (10 – 15%), exceto para o nível $Y = 1,53$ m que se encontra próximo a entrada de catalisador, onde o fluxo ainda não é desenvolvido e, por isso, apresenta maior concentração de partículas, enquanto que nos resultados de Pärssinen e Zhu (2001), a variação das condições operacionais gera diferenças bastantes significativas nos perfis de distribuição radial da concentração de sólidos.

Percebe-se ainda que a comparação dos resultados melhorou quantitativamente à medida que se aproxima do topo do *riser*, inclusive na região da parede, ou seja, em concordância com a boa representação das regiões *core* e *annulus* na seção diluída. Tanto qualitativa quanto quantitativa foi possível inferir que o modelo proposto se adequa melhor a representação do fluxo em regiões e condições operacionais que resultam em menores concentrações de sólido (menor fluxo de sólidos e/ou maior vazão do gás). Deste modo, por possuir maior conformidade com o modelo proposto, as condições operacionais de velocidade de gás e fluxo de sólidos dos casos 1, 2 foram selecionadas para a realização das análises seguintes.

Como justificativa para este comportamento, um ponto importante a ser notado é que o presente modelo é baseado na teoria cinética do escoamento granular. Está última possui

limitações no cálculo das flutuações mesofásicas em função da formação dos *clusters*, principalmente se o regime permanente for utilizado (DAS *et al.*, 2003), como no presente trabalho. Estas estruturas heterogêneas, presentes principalmente no *annulus*, são conhecidas por aumentarem a velocidade de deslizamento em fluxos com partículas pequenas, reduzindo o arraste efetivo entre gás e particulado, o que leva a um fluxo descendente de sólidos e a uma maior segregação destes perto da parede. Em adição, o comportamento do fluxo pode ser influenciado por colisões inelásticas entre partículas resultando em dissipação de energia cinética. O coeficiente de restituição, e_{ss} , representa a elasticidade das colisões das partículas e varia de totalmente inelástica ($e_{ss} = 0$) à totalmente elástica ($e_{ss} = 1$). Goldschmidt *et al.* (2001) e Therdthianwong *et al.* (2003) relataram que no modelo da teoria cinética há um grau de sensibilidade ao coeficiente de restituição. Gao *et al.* (2009) descreveram que aumentando o valor do coeficiente de restituição de 0,9 para 0,95, as fases diluída e densa coexistentes no leito fluidizado turbulento poderiam ser corretamente previstas (GUPTA *et al.*, 2010). A limitação para este parâmetro está no fato de seu valor depender de características do escoamento e das partículas, e necessitar ser determinado experimentalmente.

5.3 Análise hidrodinâmica dos casos simulados 1 e 2

A Figura 5.4 ilustra um comparativo da concentração de partículas na direção axial para os casos 1 e 2. Em primeiro lugar percebeu-se que o perfil axial, para ambos os casos, foi aproximadamente de forma exponencial com uma distribuição de sólidos constante, entre 0,03 e 0,06, a partir da altura de 1 m. Nestes perfis existem três regiões distintas: (i) uma região densa logo acima da entrada de sólidos, até cerca de 1 m, (ii) uma seção diluída no topo, e (iii) uma seção intermediária de transição do fluxo denso para o diluído (aproximadamente entre 1 e 4 m). No fundo do *riser*, a fração de sólido foi maior devido ao efeito de aceleração inicial do sólido. Esta última resulta da menor velocidade de entrada da fase particulada, o que implica em alta fração de particulado para um determinado fluxo de massa sólida. No entanto, as partículas são rapidamente aceleradas devido à força de arrasto exercida pelo gás, resultando em uma diminuição da fração sólida que se torna relativamente constante na região diluída, indicando uma seção de fluxo desenvolvido iniciada por volta dos 4 m. Já na altura em torno de 9 m, a concentração radial média de sólidos apresenta novamente um ligeiro incremento devido ao efeito da curvatura na saída. O comportamento fluidodinâmico das fases para este leito fluidizado de alto fluxo foi, portanto, semelhante ao observado em condições de baixo

fluxo, porém, a concentração de sólidos próximo a parede é muito maior em um leito de alto fluxo do que o encontrado sob condições de baixo fluxo. O mesmo comportamento foi relatado por Bastos *et al.* (2008) para um fluxo mássico específico de $300 \text{ kg/m}^2\text{s}$ e velocidade superficial do gás de 8 m/s . O modelo, proposto por este trabalho de dissertação, também foi capaz de captar a maior fração de sólidos esperada para o caso 1, segundo as razões explicitadas anteriormente para a Figura 5.3.

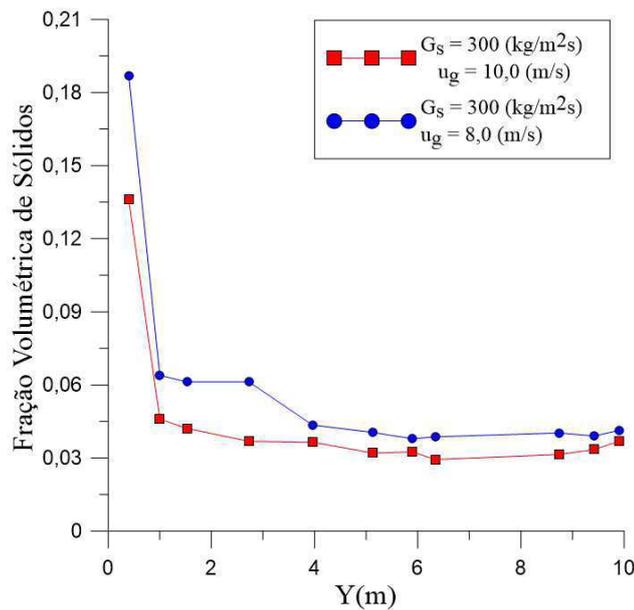


Figura 5.4 – Perfil axial da concentração média de sólidos para os casos 1 e 2.

As frações volumétricas da fase sólida são mostradas na Figuras 5.5 em cortes no plano axial XY e ao longo da parede, e na Figura 5.6 na seção transversal do *riser*. As localizações dos cortes da Figura 5.6 estão marcadas na Figura 5.5. Pode-se verificar claramente, a partir destas, a formação do padrão de fluxo *core-annulus*. Observou-se uma região anular com pequena fração de sólidos e uma região próxima a parede com alta densidade, bem como uma maior concentração de sólidos na seção do *riser* que se encontra logo acima da entrada de catalisador, além de uma menor concentração de sólidos na parede para o caso 2, o qual apresenta maior velocidade para a fase gasosa, corroborando desta forma com o visto na Figura 5.3.

A Figura 5.5 também ilustra um comportamento ondulante dos sólidos na parede, o qual concorda com os resultados obtidos em trabalhos experimentais (SHAFFER *et al.*, 2013) e numéricos (HUILIN *et al.*, 2006). Esses agregados de sólidos na parede dificultam o fluxo de

gás na região e, uma vez que, o gás é mais propenso à não penetrar os agregados seguindo caminhos de menor resistência, forma caminhos preferenciais. Segundo Huili e Gidaspow (2003), o comportamento *core-annulus* pode aumentar a ineficiência do contato gás-sólido. Silva (2012) descreve que o fenômeno *core-annulus* e a difusão radial de partículas para a parede ocorre devido aos gradientes de concentração na fase diluída, formando acúmulos de partículas próximos das paredes. Assim, o fenômeno de *cluster* prevalece ao longo da linha principal do *core-annulus* e explica o comportamento ondulante encontrado.

No topo da saída curva do *riser* existe um grande aglomerado de partículas, constatado na Figura 5.5. Segundo Faisca (2013), este fato ocorre porque a densidade dos sólidos é bem maior que a do gás e, conseqüentemente, 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. Esses resultados estão de acordo com os mecanismos de trajetória dos sólidos em um *riser*, como sugerido por Bai *et al.* (1992) e Harris *et al.* (2003).

A geometria de saída do *riser* é considerada suave, apresentando um acúmulo de sólidos com pequena variação entre o corte feito a 5,13 m e o corte próximo a saída (9,9 m), mostrados na Figura 5.6, comprovando que não ocorreu efeito significativo da saída sobre o resto do fluxo, mesmo com o aglomerado de partículas existente na curvatura. Este efeito também foi observado na Figura 5.4, onde a concentração de sólidos mantém um valor praticamente constante na seção de topo do *riser*, em função da geometria de saída não promover refluxo de sólidos, formação de vórtices, nem apresentar um fluxo de partículas descendentes nessa região, como constata-se a partir dos vetores de velocidade que caracterizam o fluxo das partículas na Figura 5.7. Esta tendência é consistente com os resultados relatados por Lopes *et al.* (2012).

Os perfis velocidade da fase sólida na direção radial para diferentes alturas do *riser* e cortes no plano XY são mostrados na Figura 5.8. Em todos os casos, o perfil radial apresentado foi parabólico, sendo a velocidade maior no centro e excedendo a velocidade superficial de entrada do gás em até 20%. A velocidade diminuiu ao longo do raio até um mínimo na parede, em função da maior concentração de catalisador nessa região restringindo o fluxo de gás.

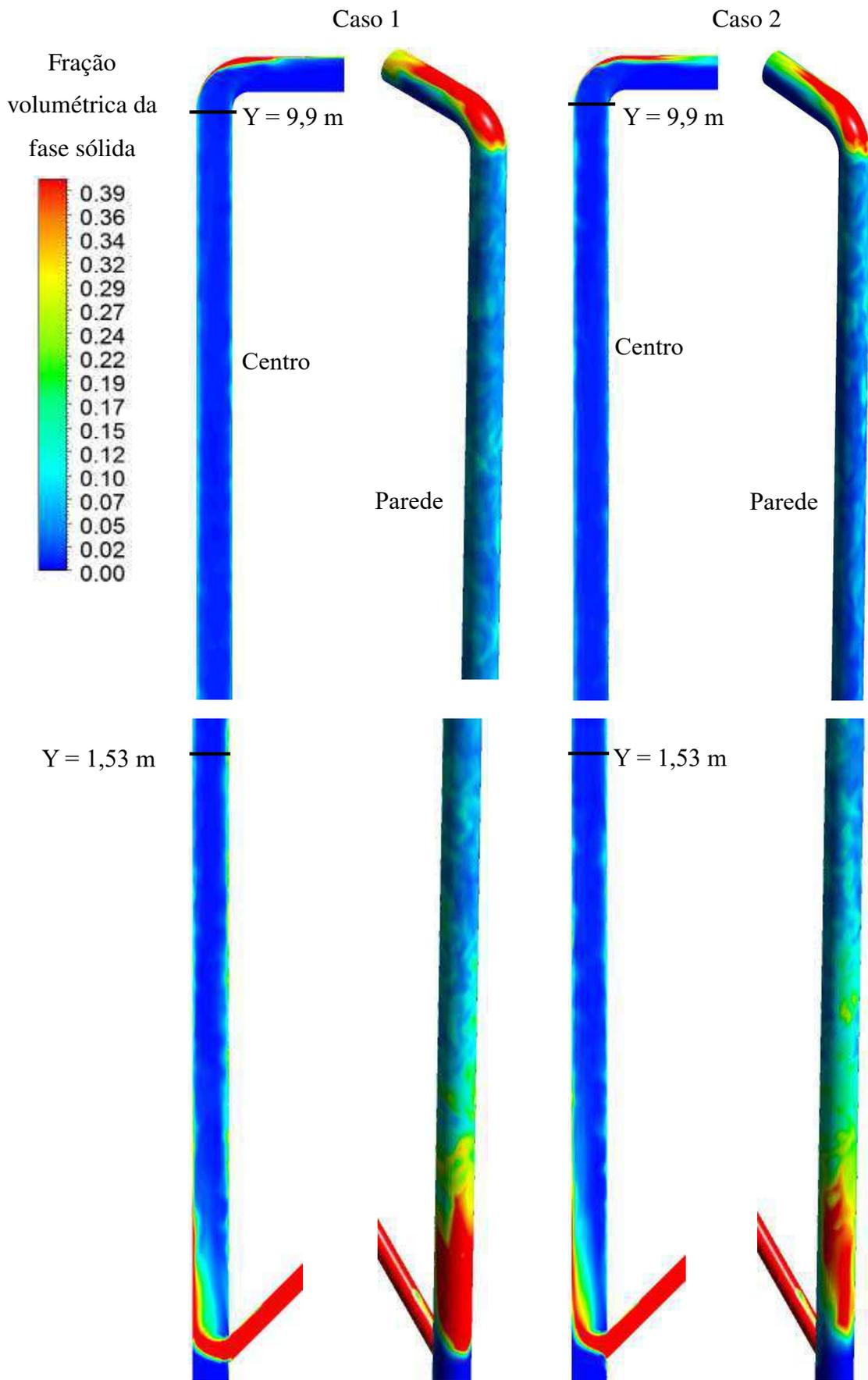
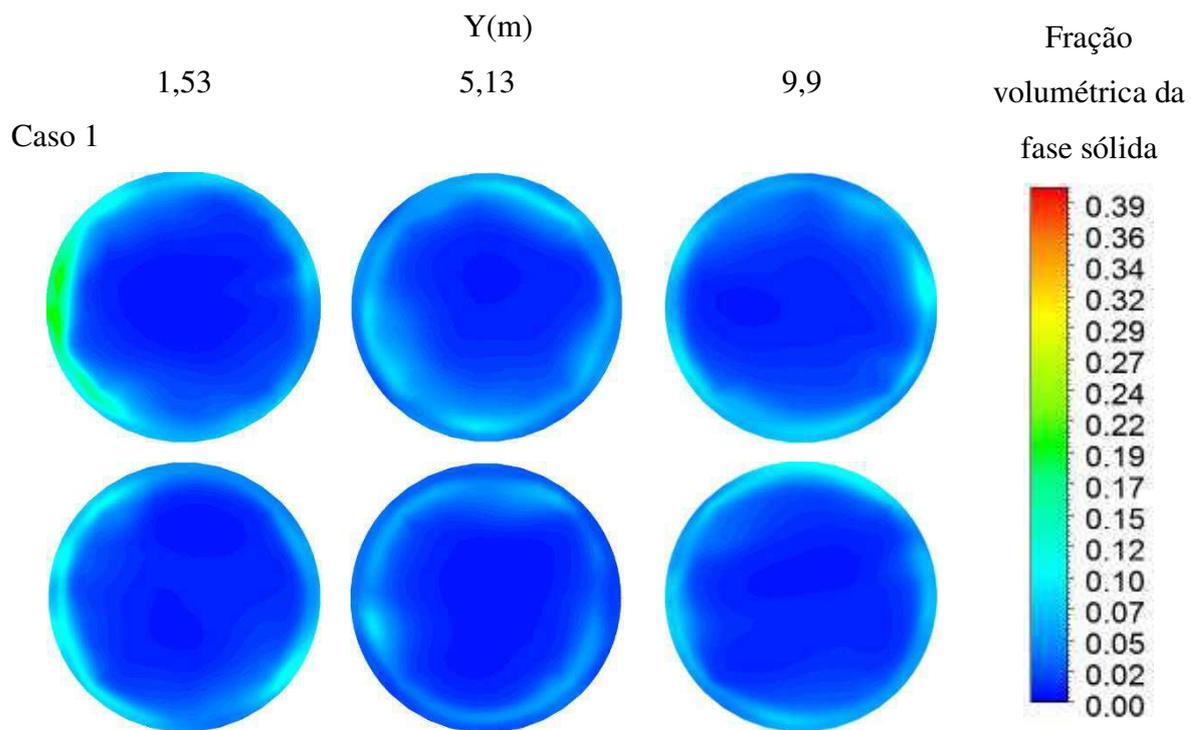


Figura 5.5 – Perfil da fração volumétrica de sólidos para os casos 1 e 2.



Caso 2

Figura 5.6 – Padrão *core-annulus* na seção transversal do *riser* em diferentes níveis axiais.

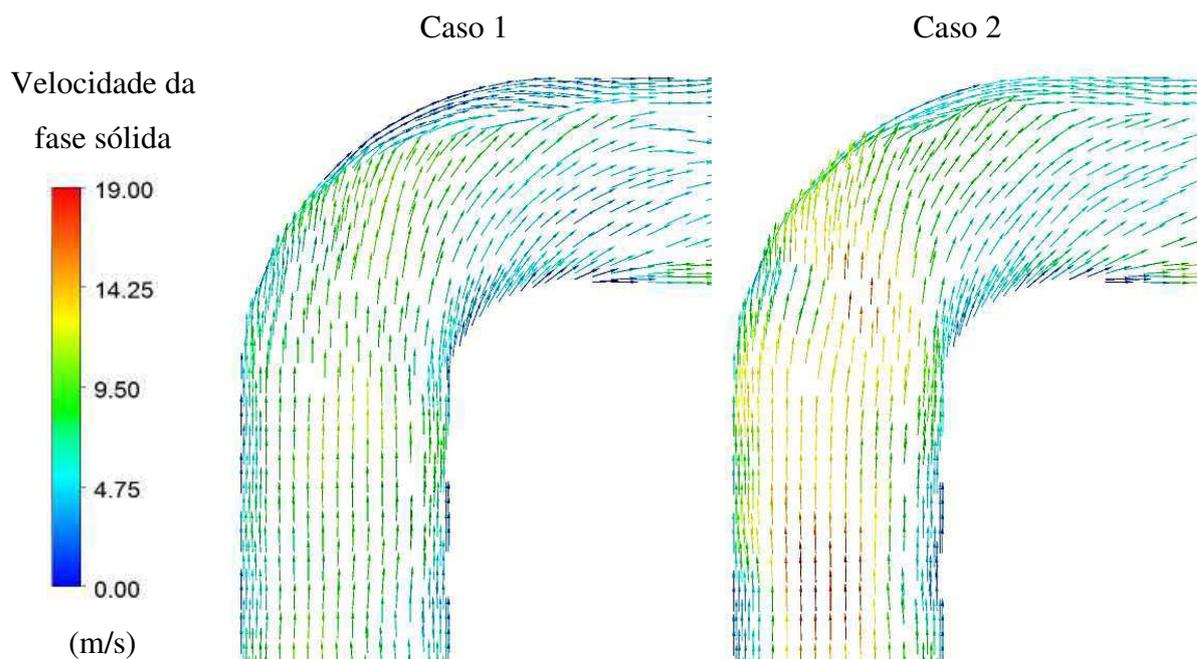


Figura 5.7 – Velocidade e direção do escoamento da fase sólida.

Nos cortes feitos no plano XY observou-se um comportamento inconstante da velocidade na zona de transição entre o *core* e o *annulus*. A razão disso pode ser devido as oscilações da concentração de catalisador na parede, como visto na Figura 5.5, gerando diferentes espessuras do *annulus* ao longo do *riser*. Assim, para manter um fluxo de partículas constante, a velocidade do particulado varia constantemente aumentando (no centro) em zonas onde a espessura do *annulus* é maior e diminuindo onde a espessura é menor. Em adição, a velocidade das partículas em cada posição radial foi positiva, mesmo sob alta taxa de circulação de sólidos, o que é totalmente diferente do encontrado sob algumas condições de baixo fluxo onde velocidades negativas são encontradas próximo a parede (WANG, 2013). Resultados similares foram reportados por outros autores (GRACE *et al.*, 1999; PÄRSSINEN e ZHU, 2001).

Todas as observações feitas para os perfis velocidade e cortes da fase sólida da Figura 5.8 podem ser atribuídas aos perfis velocidade da fase gasosa na direção radial para diferentes alturas do *riser* e cortes no plano XY, mostrados na Figura 5.9. Segundo Mineto (2009), o fato de a força de arrasto ser a única força de interação que foi considerada agindo entre as fases, justifica a similaridade dos perfis da velocidade do sólido e da fase gasosa, pois o perfil de velocidade do particulado é induzido pela força de arrasto que o gás exerce sobre as partículas.

Os perfis de pressão na direção axial Y, Figura 5.10, são consistentes com aqueles observados por outros autores, como Li e Kwauk (1980) em leitos de fluidização rápida, onde a concentração de sólidos decresce com a elevação, e a pressão cai ao longo da altura do *riser*. A maior queda de pressão próximo a entrada das partículas, até 1 m, ocorre pelo efeito da alimentação de sólidos nessa região, pois as partículas do *core* sofrem ação de arrasto relativamente grande e uma interação vigorosa com outras partículas acentuando o declínio no perfil de pressão devido ao efeito combinado da aceleração das partículas e o movimento radial das mesmas do *core* para a região de parede. A queda de pressão então diminui ao longo do comprimento do *riser*, tornando-se aproximadamente linear depois de 1 m, em decorrência da diminuição da concentração de sólidos, de acordo com Hao *et al.* (2010), indicando que as parcelas da queda de pressão devido a aceleração das partículas e a fricção são desprezíveis acima desse ponto, segundo Sharma *et al.* (2000).

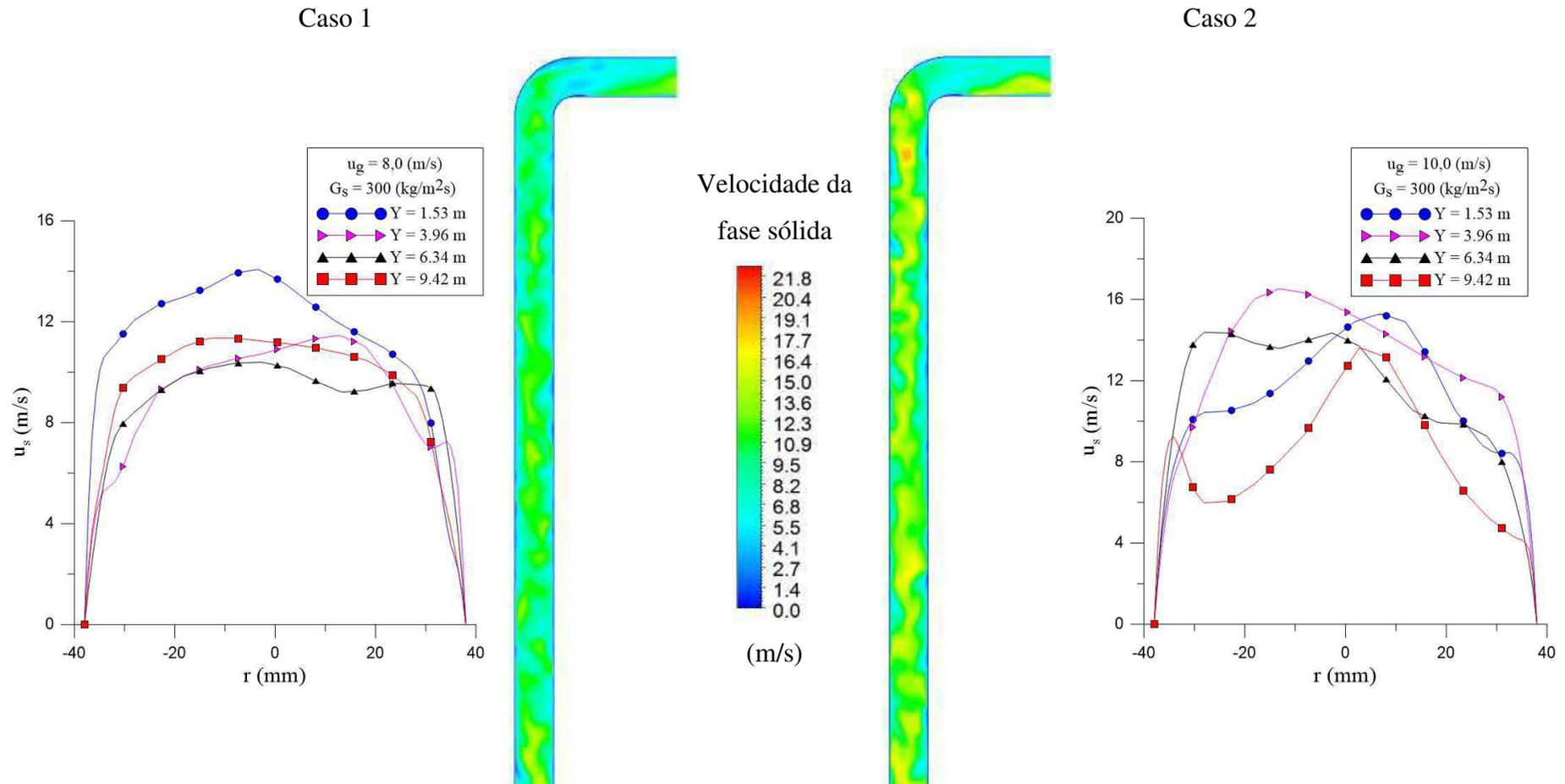
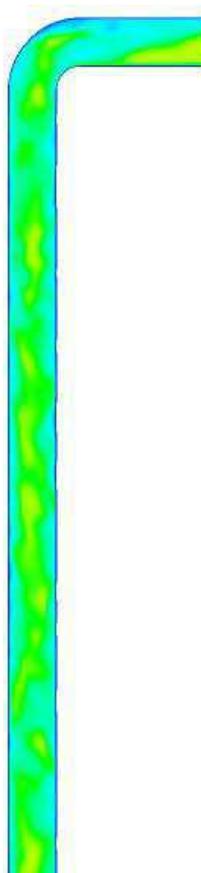
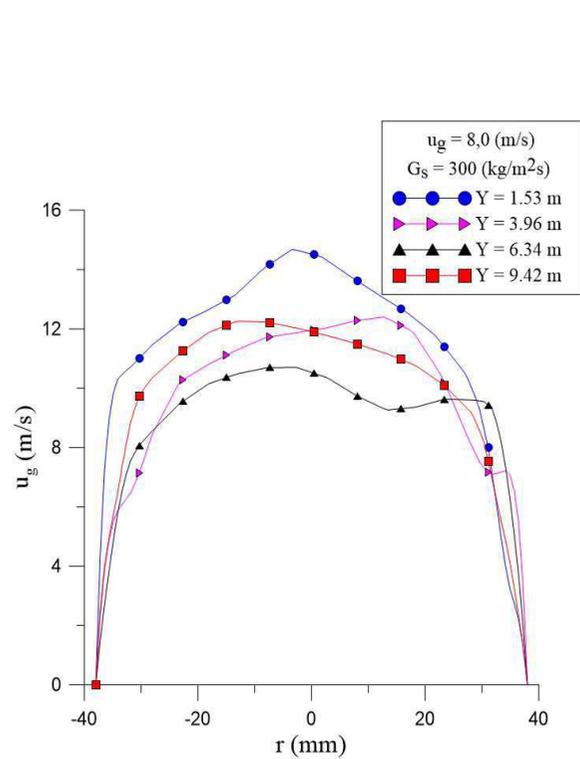
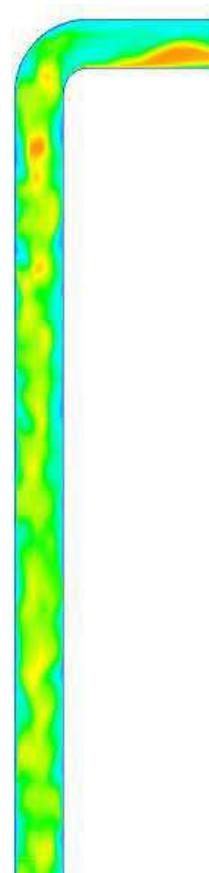
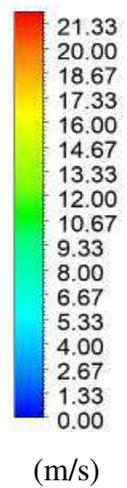


Figura 5.8 – Perfis de velocidade da fase particulada nos planos axial e radial.

Caso 1



Velocidade da fase gasosa



Caso 2

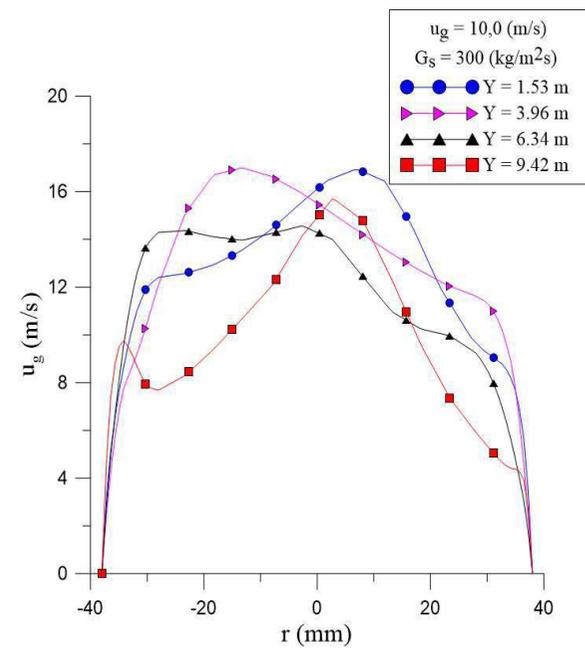


Figura 5.9 – Perfis de velocidade da fase gasosa nos planos axial e radial.

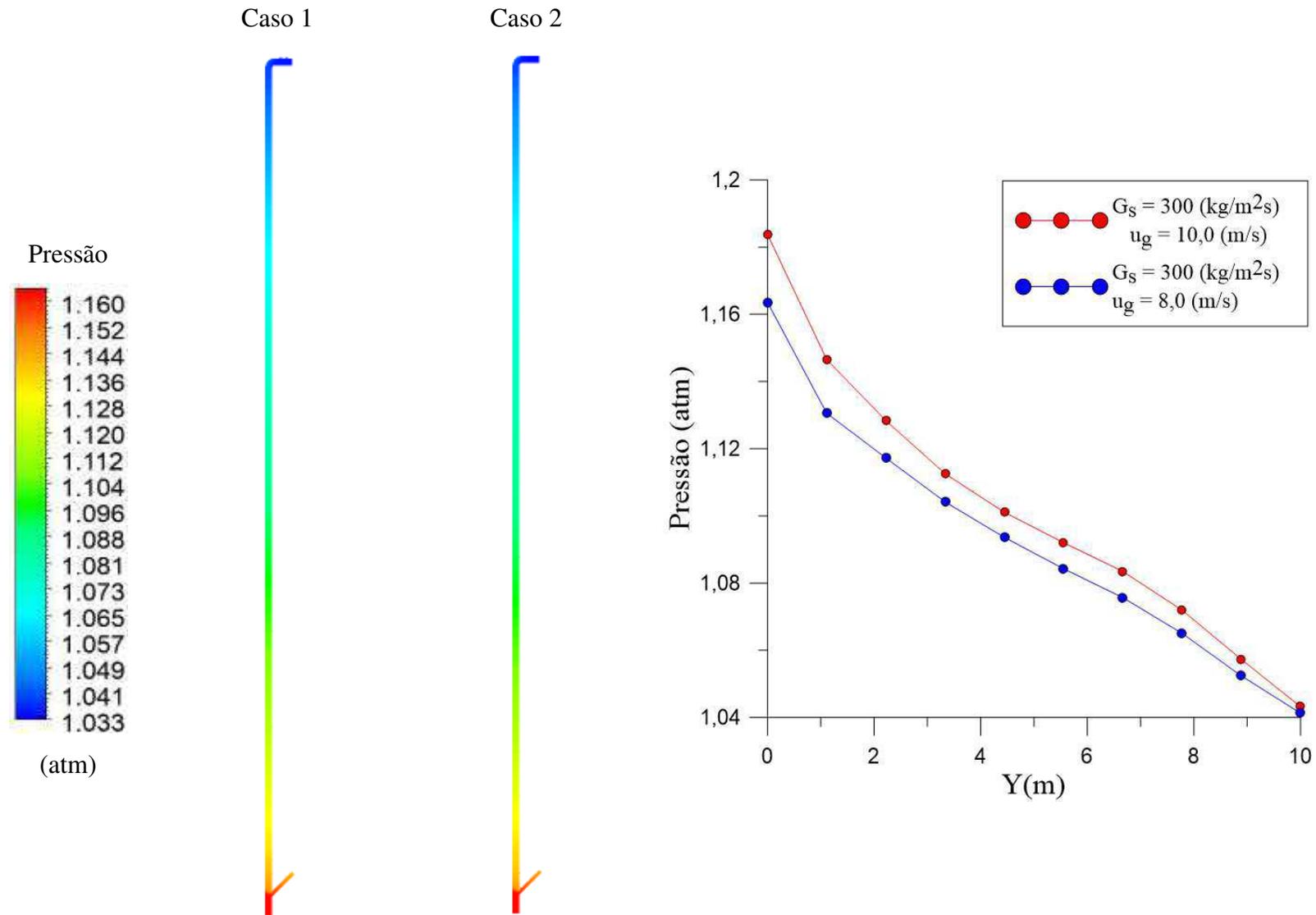


Figura 5.10 – Perfis de pressão ao longo do *riser*.

5.4 Análise da influência do diâmetro das partículas sobre a hidrodinâmica dos casos simulados 6 e 7

Para os casos 6 e 7, as simulações foram realizadas utilizando as mesmas condições de fluxo do caso 1. Porém, ao contrário do caso 1, empregou-se diâmetros de partículas de $76 \mu m$ (Caso 6) e de $40 \mu m$ (caso 7).

A avaliação da influência do diâmetro do particulado sobre o comportamento hidrodinâmico das fases foi realizada através dos perfis da velocidade de deslizamento e da concentração média dos sólidos na direção axial Y, comparando os casos 1, 6 e 7, apresentados nas Figuras 5.11 e 5.12, respectivamente.

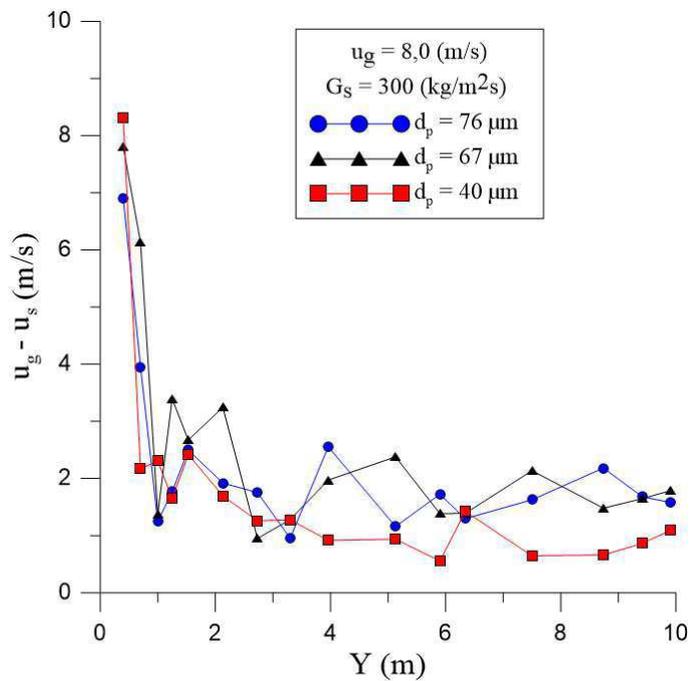


Figura 5.11 – Perfil axial da velocidade de deslizamento para diferentes diâmetros de partículas.

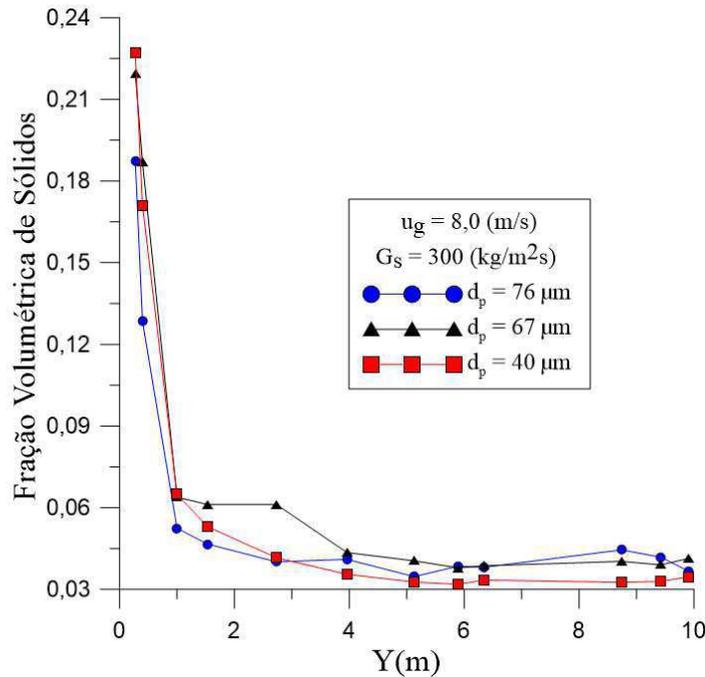


Figura 5.12 – Perfil axial da concentração média de sólidos para diferentes diâmetros de partículas.

A velocidade de deslizamento (*slip velocity*) é a diferença entre a velocidade média na seção transversal da fase gasosa e particulada, como um resultado da diferença de densidade entre as duas fases e de suas frações volumétricas. Na Figura 5.11 observa-se que os maiores valores da velocidade de deslizamento foram encontrados na região densa, onde a maior concentração de sólidos diminui o arrasto efetivo entre o gás e o catalisador, resultando em uma velocidade da fase gasosa muito maior do que a do sólido. A velocidade de deslizamento então reduz-se gradualmente em direção ao topo do riser, refletindo o desenvolvimento do fluxo e assumindo valores aproximadamente constantes na região de fluxo desenvolvido pois, nessa região, como a concentração de sólidos diminui, o arraste é mais efetivo e as partículas dispersas tendem a assumir velocidades mais próximas à velocidade da fase gasosa. Foi possível notar também que, para o catalisador com diâmetro de $40 \mu\text{m}$, a velocidade de deslizamento na região desenvolvida foi menor do que aquela apresentada para as demais partículas e mais constante, o que ocorre devido ao fato de as partículas menores serem mais facilmente fluidizadas do que partículas maiores. Essa menor velocidade de deslizamento implica que as partículas de $40 \mu\text{m}$ possuem maior velocidade e, assim, menor fração volumétrica ao longo da região de fluxo desenvolvido, como pode ser visto na Figura 5.12. Em contra partida, os perfis das partículas com $76 \mu\text{m}$ e $67 \mu\text{m}$ apresentaram comportamento bastante similar entre si. Uma possível razão seria o fato de os valores desses diâmetros serem muito próximos, uma

vez que, das partículas de 40 μm para as de 67 μm , o aumento no diâmetro é de 67,5% e das partículas de 67 μm para as de 76 μm , de apenas 13,43%, não promovendo significativas mudanças no comportamento fluidodinâmico das mesmas. Vale ressaltar, que altas velocidades de deslizamento são indesejáveis por ocasionarem uma má distribuição do sólido e contato gás sólido pouco eficiente. Observações semelhantes foram feitas por Melo (2004) e Yan e Zhu (2004).

5.5 Análise termodinâmica dos casos simulados 8 e 9

Diferentemente dos casos 1 a 7 apresentados, os casos 8 e 9, realizados tendo como base a velocidade superficial de gás e a taxa de circulação de sólidos do caso 1 ($u_g = 8,0$ m/s e $G_s = 300$ kg/m²s), foram os únicos a considerar a equação de conservação da energia. Para esses casos, o catalisador foi alimentado através da entrada lateral à uma temperatura de 913,15 K, enquanto que o gás de fluidização foi introduzido pela entrada inferior à temperatura ambiente de 298,15 K (caso 8) e aquecido a temperatura de 643,15 K (caso 9).

Os perfis de temperatura média da fase gás e sólida na direção axial Y, tomadas a partir da entrada lateral, e os campos de temperatura da fase gasosa na direção axial e em seções transversais (0,22 m, 0,26 m, 0,37 m e 0,62 m) logo acima da entrada do particulado, foram apresentados nas Figura 5.13 e 5.14. Observou-se nestas figuras a capacidade do modelo de prever a troca térmica entre as duas fases. A variação máxima na temperatura das fases ocorre perto da zona de entrada das partículas, onde, no momento do contato inicial entre o catalisador quente e a fase gasosa, esta é aquecida bruscamente, até ambas as temperaturas atingirem um valor comum, permanecendo em equilíbrio térmico até o final do riser. Pelos campos de temperatura do gás (Figura 5.14) foi possível perceber mais claramente a velocidade na qual a mudança de temperatura da fase gasosa ocorre. Para o caso 9, a distribuição de temperatura já não variou a uma altura de 0,37 m, portanto, nesse ponto a mistura se encontra em equilíbrio térmico, enquanto que para o caso 8, devido a menor temperatura inicial do gás, o equilíbrio foi atingido em uma maior altura, em torno dos 2 m, como observado no perfil da Figura 5.13. Essa variação abrupta da temperatura do gás, em ambos os casos, deve-se ao fato de o fluxo turbulento e toda área superficial das partículas disponível permitirem um eficiente contato gás-sólido, promovendo uma rápida transferência interfacial de calor entre catalisador e gás (HODAPP *et al.*, 2012; AHSAN, 2015; SOUZA *et al.*, 2006). Porém, independentemente das

temperaturas de injeção do gás de fluidização que foram utilizadas (ambiente ou próximo a temperatura de injeção da carga), estas mostraram ter uma influência mínima sobre a temperatura final do catalisador.

Na Figura 5.14, da base do riser ($Y = 0$ m) à entrada lateral, existe também uma rápida variação da temperatura do gás na direção X. Isto decorre da pequena concentração de partículas recirculadas logo abaixo da entrada lateral, promovendo o aquecimento do gás próximo a essa entrada e da injeção do gás de fluidização, mais frio, na parte inferior (HODAPP *et al.*, 2012).

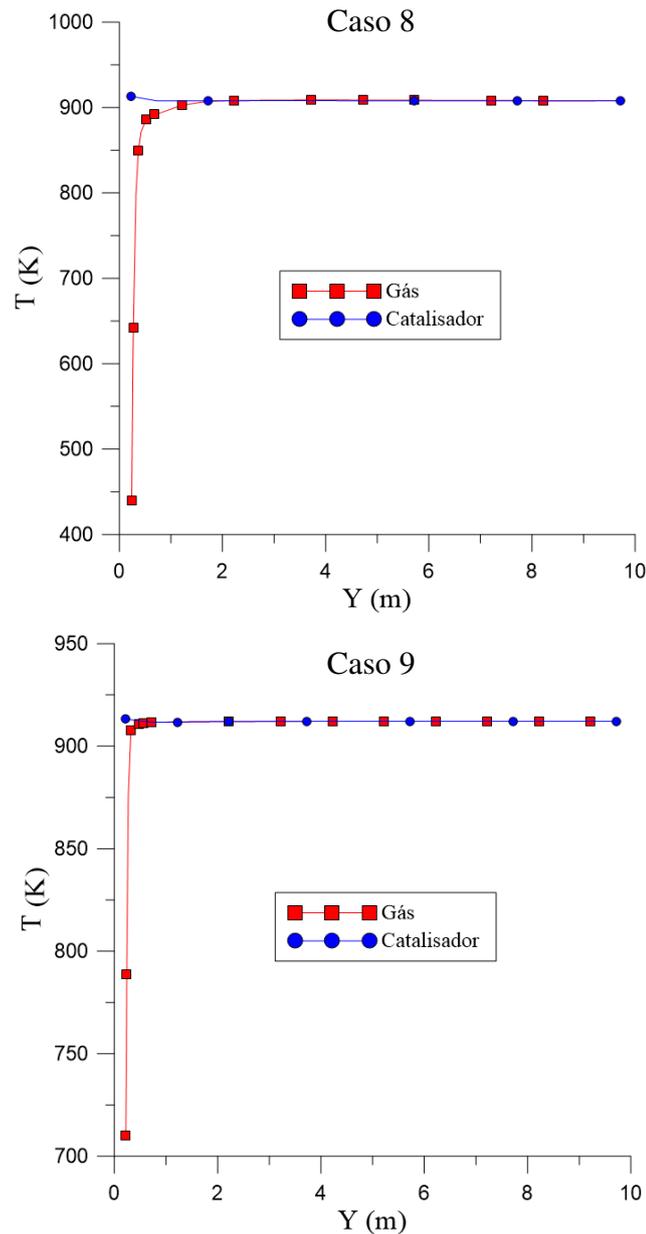


Figura 5.13 – Perfis de temperatura média na direção Y da fase gasosa e particulada.

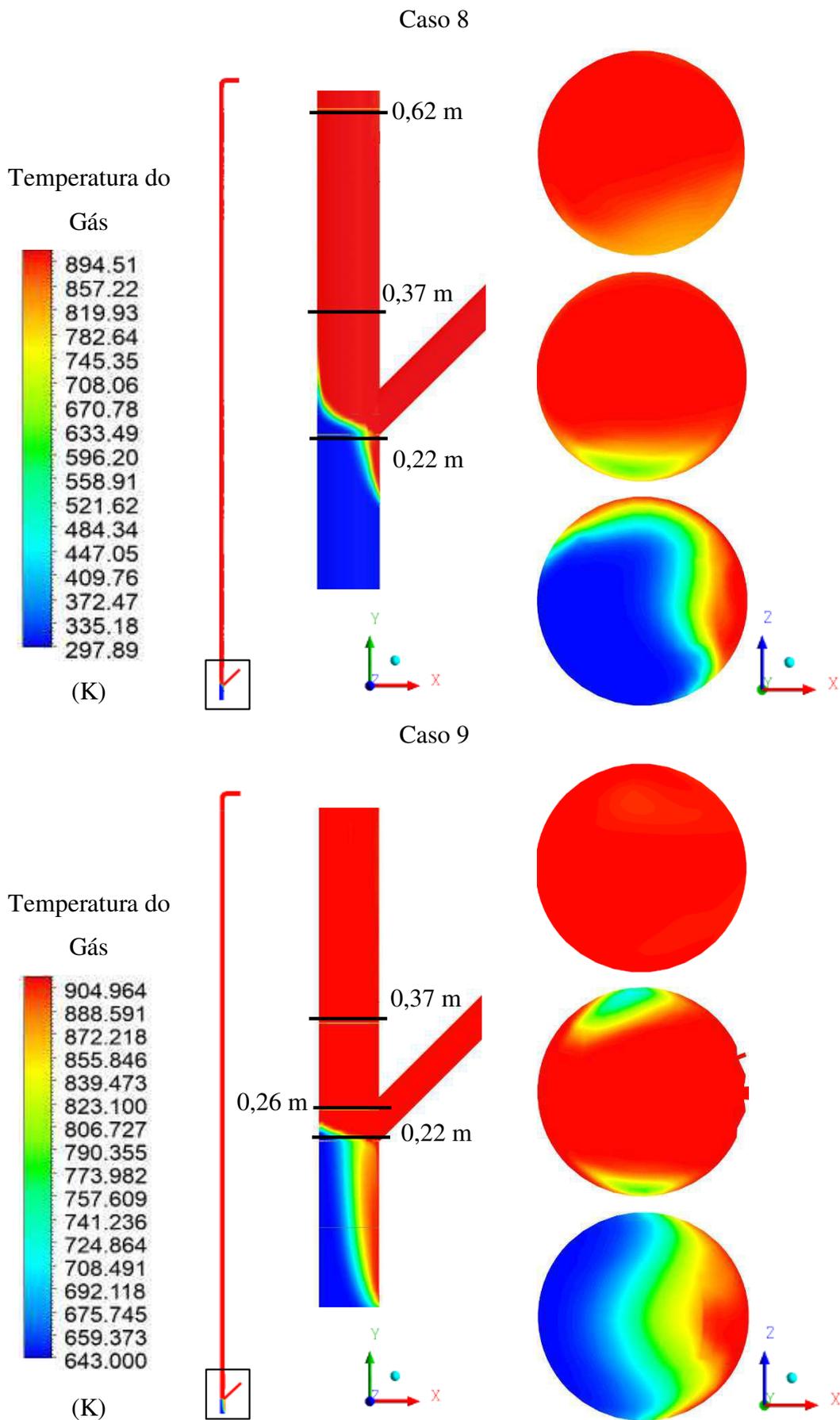


Figura 5.14 – Campos de temperatura da fase gasosa nos planos XY e XZ.

CAPÍTULO 6

CONSIDERAÇÕES FINAIS

6.1 Conclusões

Uma modelagem baseada no modelo de dois fluidos ou modelo Euleriano – Euleriano, cuja fase sólida é governada pela teoria cinética do fluxo granular, foi desenvolvida para um escoamento gás – sólido de alto fluxo na geometria tridimensional de uma planta experimental de um *riser* de FCC sob regime permanente.

Dos 9 casos avaliados, nos 5 primeiros foram variadas as velocidades superficiais do gás de fluidização, bem como o fluxo de catalisador, parâmetros estes que influenciam fortemente o comportamento fluidodinâmico do escoamento. Também foi realizada a simulação de um escoamento monofásico de gás para a validação do modelo.

Para o escoamento monofásico da fase gasosa o modelo matemático proposto foi capaz de prever adequadamente o escoamento do gás no interior do *riser* em regime turbulento e permanente, o que válida a malha numérica e o modelo utilizado.

Para os casos 1 à 5, verificou-se através dos resultados obtidos que o modelo proposto conseguiu prever adequadamente o comportamento *core-annulus* do escoamento no *riser*.

Com a variação das condições de fluxo, ou seja, o incremento da taxa de circulação de sólidos, G_s (300 – 550 kg/m²s), e/ou redução da velocidade superficial do gás (10 – 5.5 m/s), u_g , foi observada a formação de uma região anular com pequena fração de sólidos, aproximadamente constante, e uma região próxima a parede com alta densidade, cuja concentração cresce para as maiores taxas de circulação e menores velocidades da fase gasosa, bem como uma maior concentração de sólidos na seção do *riser* que se encontra logo acima da entrada de catalisador. Comparando posteriormente os resultados apenas dos casos 1 e 2, foi percebida uma menor concentração de sólidos na parede para o caso 2 ($u_g = 10,0$ m/s e $G_s = 300$ kg/m²s), a qual se deve a sua maior velocidade superficial do gás quando comparado ao caso 1 ($u_g = 8,0$ m/s e $G_s = 300$ kg/m²s).

Melhoras significativas na predição tanto qualitativa quanto quantitativamente do modelo matemático proposto ocorreram à medida que os dados foram avaliados em regiões próximas ao topo do *riser*, inclusive na região da parede, onde este modelo apresenta algumas limitações para a região densa.

Na direção axial para os casos 1 ($u_g = 8,0$ m/s e $G_s = 300$ kg/m²s) e 2 ($u_g = 10,0$ m/s e $G_s = 300$ kg/m²s), o modelo foi capaz de prever a formação de três zonas distintas para a distribuição de partículas. (i) uma região densa logo acima da entrada de sólidos, até cerca de 1 m, (ii) uma seção diluída no topo, e (iii) uma seção intermediária de transição do fluxo denso para o diluído (aproximadamente entre 1 e 4 m).

Flutuações foram verificadas para a velocidade do catalisador ao longo da parede do *riser* e na zona de transição entre o *core* e o *annulus* para os casos 1 e 2. Inferiu-se que a razão destas flutuações pode ser as oscilações da concentração de catalisador vistas na parede e geradas pela formação de aglomerados de partículas (*cluster*) que modificam a espessuras do *annulus* ao longo do *riser*. Em adição, a velocidade das partículas em cada posição radial foi positiva, mesmo sob alta taxa de circulação de sólidos, não sendo encontradas regiões de movimento descendente das partículas. As mesmas observações foram feitas para a fase gasosa.

Os perfis de pressão são consistentes com o comportamento esperado, onde a concentração de sólidos decresce com a elevação e a pressão cai ao longo da altura do *riser*. Uma maior queda de pressão próximo a entrada das partículas ocorreu pelo efeito da alimentação de sólidos nessa região. A queda de pressão então diminuiu ao longo do comprimento do *riser*, tornando-se quase linear.

O modelo estudado se adequou melhor a representação do fluxo em regiões e condições operacionais que resultam em menores concentrações de sólido (menor fluxo de sólidos e/ou maior vazão do gás).

Na avaliação da influência do diâmetro do particulado sobre o comportamento hidrodinâmico das fases, os maiores valores da velocidade de deslizamento foram encontrados na região densa, reduzindo gradualmente em direção ao topo do *riser* e assumindo valores aproximadamente constantes na região de fluxo desenvolvido. Foi possível notar também, que, para o catalisador com diâmetro de $40 \mu m$ a velocidade de deslizamento na região desenvolvida é menor do que aquela apresentada para as demais partículas e mais constante. Em contra partida, os perfis das partículas com $76 \mu m$ e $67 \mu m$ apresentaram comportamento bastante similar entre si, provavelmente por possuírem valores de diâmetros muito próximos.

Os casos 8 e 9, realizados tendo como base a velocidade superficial de gás e a taxa de circulação de sólidos do caso 1 ($u_g = 8,0 \text{ m/s}$ e $G_s = 300 \text{ kg/m}^2\text{s}$), foram os únicos a considerar a equação de conservação da energia. Observou-se a capacidade do modelo de prever a troca térmica entre as duas fases, com a variação máxima na temperatura das fases ocorrendo perto da zona de entrada das partículas. Além disso, uma rápida variação da temperatura do gás na direção X foi percebida, decorrente da pequena concentração de partículas recirculadas logo abaixo da entrada lateral e à injeção do gás de fluidização.

6.2 Sugestões para futuros trabalhos

Visando o aprofundamento do conhecimento e aperfeiçoamento do modelo desenvolvido, sugere-se para trabalhos futuros:

- Estudo e implementação de um modelo multiescala para a força de arraste, visando melhorar a sensibilidade do modelo nas regiões com maior concentração de sólidos, onde ocorre a formação dos *clusters*.
- Estudo de parâmetros como o coeficiente de especularidade e de restituição que estão ligados as características do fluxo e influenciam na precisão do modelo.
- Implementação de um modelo cinético para estudo do processo reativo de craqueamento dos hidrocarbonetos e outros processos resultantes como a deposição de coke.
- Aplicação de outras geometrias para o *riser*, buscando uma melhor dispersão do catalisador.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGRAWAL, K.; LOEZOS, P.; SYAMLAL, M.; SUNDARESAN, S. The role of meso-scale structures in rapid gas–solid flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 445, p. 151-185, 2001.

AHSAN, M. Prediction of gasoline yield in a fluid catalytic cracking (FCC) riser using k-epsilon turbulence and 4-lump kinetic models: A computational fluid dynamics (CFD) approach. **Journal of King Saud University - Engineering Sciences**, v. 27, n. 2, p. 130-136, 2015.

ANDREUX, R.; PETIT, G.; HEMATI, M.; SIMONIN, O. Hydrodynamic and solid residence time distribution in a circulating fluidized bed: Experimental and 3D computational study. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 47, n. 3, p. 463-473, 2008.

ANSYS, Inc. (US). ANSYS FLUENT 15.0 - Theory Guide. ANSYS, Inc, 2013.

ARMELLINI, V. A. D. **Estudo computacional da influência de bicos injetores e internos em risers industriais de FCC**. 2015. 131 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

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**, v. 71, n. 1, p. 51-58, 1992.

BALZER, G. Gas–solid flow modelling based on the kinetic theory of granular media: validation, applications and limitations. **Powder Technology**, v. 113, n. 3, p. 299-309, 2000.

BALZER, G.; BOELLE, A.; SIMONIN, O. Eulerian gas-solid flow modelling of dense fluidized beds. Fluidization VIII, International Symposium of the Engineering Foundation, p. 409-418, 1996.

BASTOS, J. C. S. C.; ROSA, L. M.; MORI, M.; MARINI, F.; MARTIGNONI, W. P. Modelling and simulation of a gas-solids dispersion flow in a high-flux circulating fluidized bed (HFCFB) riser. **Catalysis Today**, v. 130, n. 2-4, p. 462-470, 2008.

BENYAHIA, S.; ARASTOPOUR, H.; KNOWLTON, T. M.; MASSAH, H. Simulation of particles and gas flow behavior in the riser section of a circulating fluidized bed using the kinetic theory approach for the particulate phase. **Powder Technology**, v. 112, n. 1, p. 24-33, 2000.

BENYAHIA, S. Fine-grid simulations of gas-solids flow in a circulating fluidized bed. **AIChE Journal**, v. 58, n. 11, p. 3589–3592, 2012.

BERRUTI, F.; PUGSLEY, T. S.; GODFROY, L.; CHAOUKI, J.; PATIENCE, G. S. Hydrodynamics of circulating fluidized bed risers: A review. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 73, n. 5, p. 579-602, Oct. 1995.

BI, H. T.; ELLIS, N.; ABBA, I. A.; GRACE, J. R. A state-of-the-art review of gas-solid turbulent fluidization. **Chemical Engineering Science**, v. 55, n. 21, p. 4789-4825, 2000.

CAHYADI, A.; ANANTHARAMAN, A.; YANG, S.; KARRI, S. B. R.; FINDLAY, J. G.; COCCO, R. A.; CHEW, J. W. Review of cluster characteristics in circulating fluidized bed (CFB) risers. **Chemical Engineering Science**, v. 158, n. 2, p. 70-95, Feb. 2017.

CHANG, J.; CAI, W.; ZHANG, K.; MENG, F.; WANG, L.; YANG, Y. Computational investigation of the hydrodynamics, heat transfer and kinetic reaction in an FCC gasoline riser. **Chemical Engineering Science**, v.111, p. 170–179, 2014.

CLOETE, J. H.; CLOETE, S.; RADL, S.; AMINI, S. Evaluation of wall friction models for riser flow. **Powder Technology**, v. 303, p. 156-167, Dec. 2016.

DAS, A. K.; BAUDREZ, E.; MARIN, G. B.; HEYNDERICKX, G. J. Three-Dimensional Simulation of a Fluid Catalytic Cracking Riser Reactor. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 42, n. 12, p. 2602-2617, 2003.

DAVIDSON, J. F.; HARRISON, D. **Fluidized particles**. Cambridge: Cambridge University Press; 1963, 155 p.

DECHSIRI, C. Particle transport in fluidized beds: experiments and stochastic models. Groningen, 2004.

ERGUN, S. Fluid flow through packed columns. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, n. 2, p. 89-94, 1952.

FADHIL, W. K. **Modeling and Simulation of FCC risers**. 2012. 39 p. (Higher Diploma in Chemical Engineering/Petroleum Refining and Gas Technology). Chemical Engineering Department, University of Technology, Iraq.

FAISCA, A. T. **A influência da geometria de saída na erosão em risers de FCC: um estudo com CFD**. 2013. 67 p. Dissertação (Mestrado em Ciências em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos). Escola de Química, Programa em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

FORTUNA, A. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos**. São Carlos: SP. Editora da Universidade de São Paulo (EDUSP), 2000, 432 p.

FOX, R. W.; McDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. 7ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2011, 710 p.

GAO, J.; LAN, X.; FAN, Y.; CHANG, J.; WANG, G.; LU, C.; XU, C. CFD modeling and validation of the turbulent fluidized bed of FCC particles. **AIChE Journal**, v. 55, n. 7, p. 1680–1694, 2009.

GARSIDE, J.; AL-DIBOUNI, M. R. Velocity-voidage relationships for fluidization and sedimentation in solid-liquid systems. **Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development**, v. 16, n. 2, p. 206-214, 1977.

GELDART, D. Types of Gas Fluidization. **Powder Technology**, v. 7, n. 5, p. 285-292, 1973.

GIBILARO, L. G. **Fluidization Dynamics**. 1^a. ed. Oxford: Butterworth Heinemann, 2001. 256p.

GIDASPOW, D. **Multiphase Flow and Fluidization**. San Diego: Academic Press, 1994, 467p.

GIDASPOW, D.; JUNG, J.; SINGH, R. K. Hydrodynamics of fluidization using kinetic theory: an emerging paradigm. **Powder Technology**, v. 148, n. 2, p. 123-141, 2004.

GOLDSCHMIDT, M. J. V.; KUIPERS, J. A. M.; SWAAIJ, W. P. M. van. Hydrodynamic modelling of dense gas–fluidized beds using the kinetic theory of granular flow: effect of restitution coefficient on bed dynamics. **Chemical Engineering Science**, v. 56, n. 2, p. 571–578, 2001.

GRACE, J. R.; ISSANGYA, A. S.; BAI, D.; BI, H.; ZHU, J. Situating the high-density circulating fluidized bed. **AIChE Journal**, v. 45, n. 10, p. 2108–2116, 1999.

GUPTA, R. K.; KUMAR, V.; SRIVASTAVA, V. K. Modeling of fluid catalytic cracking riser reactor: A review. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, v. 8, n. 1, Oct. 2010, Review R6.

HAO, Z.; WANG, S.; LU, H.; LIU, G.; HE, Y.; XU, P.; WANG, J. Numerical simulation of fluid dynamics of a riser: Influence of particle rotation. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 8, p. 3585-3596, 2010.

HARRIS, A. T.; DAVIDSON, J. F.; THORPE, R. B. Influence of exit geometry in circulating fluidized-bed risers. **AIChE Journal**, v. 49, n. 1, p. 52-64, 2003.

HARRIS, B. J.; DAVIDSON, J. F.; XUE, Y. **Axial and radial variation of flow in circulating fluidized bed risers**. New York: Circulating Fluidized Bed Technology IV, American Institute of Chemical Engineers Publications, 1994, p. 103-110.

HARTGE, E.-U.; RATSCHOW, L.; WISCHNEWSKI, R.; WERTHER, J. CFD-simulation of a circulating fluidized bed riser. **Particuology**, v. 7, n. 4, p. 283-296, 2009.

HELLAND, E.; BOURNOT, H.; OCCELLI, R.; TADRIST, L. Drag reduction and cluster formation in a circulating fluidised bed. **Chemical Engineering Science**, v. 62, n. 1, p. 148-158, 2007.

HELLAND, E.; OCCELLI, R.; TADRIST, L. Numerical Study of Cluster Formation in a Gas-Particle Circulating Fluidized Bed. **Powder Technology**, v.110, n. 3, p. 210-221, 2000.

HO, C. A.; SOMMERFELD, M. Modelling of micro-particle agglomeration in turbulent flows. **Chemical Engineering Science**, v. 57, n. 15, p. 3073-3084, Aug. 2002.

HODAPP, M. J. **Modelagem e simulação de um leito fluidizado: um estudo comparativo**. 2009. 113 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

HODAPP, M. J.; RAMIREZ – BEHAINNE, J. J.; MORI, M.; GOLDSTEIN Jr., L. Numerical studies of the gas-solid hydrodynamics at high temperature in the riser of a bench-scale circulating fluidized bed. **International Journal of Chemical Engineering**, v. 2012, Article ID 786982, 13 p., 2012.

HOPKINS, M. A.; JENKINS, J. T.; LOUGE, M. Y. On the structure of three-dimensional shear flows. **Mechanics of Materials**, v. 16, n. 1, p. 179-187, 1993.

HORIO, M.; KUROKI, H. Three-dimensional flow visualization of dilutely dispersed solids in bubbling and circulating fluidized beds. **Chemical Engineering Science**, v. 49, n. 15, p. 2413-2421, 1994.

HUA, Y.; FLAMANT, G.; LU, J.; GAUTHIER, D. Modelling of axial and radial solid segregation in a CFB boiler. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 43, n. 8, p. 971-978, 2004.

HUBER, N.; SOMMERFELD, M. Modelling and numerical calculation of dilute-phase pneumatic conveying in pipe systems. **Powder Technology**, v. 99, n. 1, p. 90-101, 1998.

HUILIN, L.; YUNHUA, Z.; ZHIHENG, S.; DING, J.; JIYING, J. Numerical simulations of gas–solid flow in tapered risers. **Powder Technology**, v. 169, n. 2, p. 89-98, 2006.

HUILIN, L.; GIDASPOW, D. Hydrodynamics of binary fluidization in a riser: CFD simulation using two granular temperatures. **Chemical Engineering Science**, v. 58, n. 16, p. 3777-3792, 2003.

HUSSAIN, A.; AHMED, I.; SAIT, H. H.; BASSYOUNI, M. I.; HEGAB, A. M.; ul HASAN, S. W.; NASIR ANI, F. Experimental and simulation study of fluidization behavior of palm biomass in a circulating fluidized bed riser. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 49, p. 17529-17537, 2013.

JIRADILOK, V.; GIDASPOW, D.; BREAUULT, R. W.; SHADLE, L. J.; GUENTHER, C.; SHI, S. Computation of turbulence and dispersion of cork in the NETL riser. **Chemical Engineering Science**, v. 63, n. 8, p. 2135-2148, 2008.

KIM, H.; ARASTOPOUR, H. Extension of kinetic theory to cohesive particle flow. **Powder Technology**, v. 122, n. 1, p. 83-94, 2002.

KRISHNAIAH, D.; GOPIKRISHNA, V.; BONO, A.; SARBATLY, R. Steady state simulation of a fluid catalytic cracking unit. **Journal of Applied Science**, v. 7, n. 15, p. 2137-2145, 2007.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. **Fluidization Engineering**. 2^a. ed. Boston: Butterworth-Heinemann, 1990, 491 p.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. **Fluidization engineering**. New York: John Wiley; 1969, 534p.

LAN, X.; XU, C.; WANG, G.; WU, L.; GAO, J. CFD modeling of gas–solid flow and cracking reaction in two-stage riser FCC reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 64, n. 17, p. 3847-3858, 2009.

LANDEGHEM, F. V.; NEVICATO, D.; PITAULT, I.; FORISSIER, M.; TURLIER, P.; DEROUIN, C.; BERNARD, J. R. Fluid catalytic cracking: Modelling of an industrial riser. **Applied Catalysis A: General**, v. 138, n. 2, p. 381-405, 1996.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, n. 2, p. 269-289, 1974. ISSN 0045-7825.

LI, J.; WEN, L.; GE, W.; CUI, H.; REN, J. Dissipative structure in concurrent-up gas–solid flow. **Chemical Engineering Science**, v. 53, n. 19, p. 3367-3379, 1998.

LI, J.; LUO, Z.-H.; LAN, X.-Y.; XU, C.-M.; GAO, J.-S. Numerical simulation of the turbulent gas–solid flow and reaction in a polydisperse FCC riser reactor. **Powder Technology**, v. 237, p. 569-580, 2013.

LI, J.; KWAIK, M. **Particle-fluid two-phase flow: The energy-minimization multi-scale method**. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1994, 204 p.

LI, Y.; KWAIK, M. **The dynamics of fast fluidization**. In: J.R. Grace, J. Matsen (Eds). New York: Fluidization III Plenum, 1980, p. 537–544.

LIU, H.; LU, H. Numerical study on the cluster flow behavior in the riser of circulating fluidized beds. **Chemical Engineering Journal**, v. 150, n. 2, p. 374-384, 2009.

LOPES, G. C. **Estudo computacional da dinâmica do escoamento reativo em risers industriais de FCC**. 2012. 108 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

LOPES, G. C.; ROSA, L. M.; MORI, M.; NUNHEZ, J. R.; MARTIGNONI, W. P. CFD study of industrial FCC risers: The effect of outlet configurations on hydrodynamics and reactions. **International Journal of Chemical Engineering**, v. 2012, Article ID 193639, 16 p., 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.

LUNDBERG, J., HALVORSEN, B.M. A review of some existing drag models describing the interaction between phases in a bubbling fluidized bed. In: 49th Scandinavian Conference on Simulation and Modeling, 2008.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos, 2^a ed., 453 p., 2004.

MANSOORI, Z.; SAFFAR-AVVAL, M.; TABRIZI, H. B.; AHMADI, G. Experimental study of turbulent gas–solid heat transfer at different particles temperature. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 28, n. 6, p. 655-665, 2004.

MARINI, F. **Simulação de um leito fluidizado aplicando a técnica CFD baseada na teoria cinética do escoamento granular**. 2008. 75 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

MATHIESEN, V.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B. H. An experimental and computational study of multiphase flow behavior in circulating fluidized bed. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 26, n. 3, p. 387-419, 2000.

MELO, A. C. B. A. **Validação de modelos matemáticos para descrever a fluidodinâmica de um riser a frio utilizando atenuação gama**. 2004. 144 p. Tese (Doutorado em Ciências). Departamento de Energia Nuclear, Universidade Federal de Pernambuco, Recife.

MILLER, A.; GIDASPOW, D. Dense, vertical gas-solid flow in a pipe. **AIChE Journal**, v. 38, n. 11, p. 1801–1815, 1992.

MINETO, A. T. **Simulação numérica de escoamentos gás-sólido em leito fluidizado borbulhante utilizando a teoria cinética dos escoamentos granulares**. 2009. 88 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Departamento de Engenharia Mecânica, Faculdade de Engenharia de Bauru, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho, Bauru.

MORAN, J. C.; GLICKSMAN, L. R. Experimental and numerical studies on the gas flow surrounding a single cluster applied to a circulating fluidized bed. **Chemical Engineering Science**, v. 58, n. 9, p. 1879-1886, 2003.

MOTLAGH, A. H. A. **CFD Simulation of Two- and Three-Phase Flow in FCC Reactors**. 2015. 187 p. Thesis (Doctor of Philosophy in Chemical and Biological Engineering). The Faculty of Graduate and PostDoctoral Studies, The University of British Columbia, Vancouver.

NAYAK, S. V.; JOSHI, S. L.; RANADE, V. V. Modeling of vaporization and cracking of liquid oil injected in a gas–solid riser. **Chemical Engineering Science**, v. 60, n. 22, p. 6049-6066, 2005.

NOYMER, P. D.; GLICKSMAN, L. R. Descent velocities of particle clusters at the wall of a circulating fluidized bed. **Chemical Engineering Science**, v. 55, n. 22, p. 5283-5289, 2000.

PAHWA, R.; GUPTA, R. K. CFD Modeling of FCC Riser Reactor. **International Research Journal of Engineering and Technology**, v. 3, n. 2, p. 206-209, Feb. 2016.

PANDEY, P.; TURTON, R.; YUE, P.; SHADLE, L. Nonintrusive Particle Motion Studies in the Near-Wall Region of a Pilot-Scale Circulating Fluidized Bed. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 48, n. 18, p. 5582-5592, 2004.

PÄRSSINEN, J. H.; ZHU, J.-X. Axial and radial solids distribution in a long and high-flux CFB riser. **AIChE Journal**, v. 47, n. 10, p. 2197–2205, 2001.

PEIRANO, E.; DELLOUME, V.; LECKNER, B. Two- or three-dimensional simulations of turbulent gas–solid flows applied to fluidization. **Chemical Engineering Science**, v. 56, n. 16, p. 4787-4799, 2001.

PENTEADO, J. C. **Metodologias de solução numérica para modelos de regeneradores de unidades de craqueamento catalítico**. 2003. 136 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, Unidade de Curitiba, Departamento de Pesquisa e Pós-Graduação, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Curitiba.

PHILIPPSSEN, C. G. **Estudo do desempenho de correlações de arrasto sólido-gás na simulação numérica de um leito fluidizado borbulhante**. 2012. 79 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade do Vale do Rio dos Sinos, São Leopoldo.

PHILIPPSSEN, C. G.; VILELA, A. C. F.; ZEN, L. D. Fluidized bed modeling applied to the analysis of processes: Review and state of the art. **Journal of Materials Research and Technology**, v. 4, n. 2, p. 208-216, 2015.

PORTELA, L. M.; COTA, P.; OLIEMANS, R. V. A. Numerical study of the near-wall behaviour of particles in turbulent pipe flows. **Powder Technology**, v. 125, n. 2, p. 149-157, 2002.

PUGSLEY, T. S.; PATIENCE, G. S.; BERRUTI, F.; CHAOUKI, J. Modeling the catalytic oxidation of n-butane to maleic anhydride in a circulating fluidized bed reactor. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 31, n. 12, p. 2652- 2660, 1992.

QUELHAS, A. D.; PASSOS, C. N.; LAGE, D. F. S.; ABADIE, L.; SOUZA, E. C. M.; CORDEIRO, F. G.; KRAHL, I. M.; FARAH, M. A.; ARAÚJO, M. A. S.; BRASIL, N. I.; CAMARGO, P. R. C.; PINTO, R. R. C. **Processamento de Petróleo e Gás: petróleo e seus derivados, processamento primário, processos de refino, petroquímica, meio ambiente.** Rio de Janeiro: LTC, 2011, 266 p.

RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R. Evaporation from drops, Part I and Part II. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, n. 4, p. 173–180, 1952.

RIBEIRO, D. C. **Implementação de modelo de fechamento em risers de FCC através de código comercial CFD.** 2001. 80 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

RICHARDSON, J. F.; ZAKI, W. N. Sedimentation and fluidisation. **Transactions of the Institution of Chemical Engineers**, v. 32, p. 35-53, 1954.

ROTAVA, E. **Simulações sub-malha com modelo de dois fluidos do escoamento gás-sólido em risers de leitos fluidizados circulantes.** 2008. 80 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos.

ROWE, P. N. Drag forces in a hydraulic model of a fluidized bed. Part II. **Transactions of the Institution of Chemical Engineers**, v. 39, p. 175-180, 1961.

SADEGHBEIGI, R. **Fluid catalytic cracking handbook: An expert guide to the practical operation, design, and optimization.** 3ª. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2012, 361 p.

SANTOS, F. L. P. **Simulação numérica Euleriana de escoamento gás-sólido em riser com dimensões reduzidas aplicando malhas refinadas.** 2008. 108 p. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica). Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Paulo.

SANTOS, K. A. L. **Validação da simulação por CFD do riser de uma unidade piloto a frio de FCC utilizando Transmissão GAMA.** 2013. 96 p Dissertação (Mestrado em Engenharia

Química), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Pernambuco. Recife.

SHAFFER, F.; GOPALAN, B.; BREAUULT, R. W.; COCCO, R.; KARRI, S. B. R.; HAYS, R.; KNOWLTON, T. High speed imaging of particle flow fields in CFB risers. **Powder Technology**, v. 242, p. 86-99, 2013.

SHAH, M. T.; UTIKAR, R. P.; PAREEK, V. K.; EVANS, G. M.; JOSHI, J. B. Computational fluid dynamic modelling of FCC riser: A review. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 111, p. 403-448, 2016.

SHARMA, H. **Modeling and Simulation of Fluid Catalytic Cracking Riser Reactor**. 2011. 42 p. Thesis (Master of Technology in Chemical Engineering). Department of Chemical Engineering, Thapar University, Patiala.

SHARMA, A. K.; TUZLA, K.; MATSEN, J.; CHEN, J. C. Parametric effects of particle size and gas velocity on cluster characteristics in fast fluidized beds. **Powder Technology**, v. 111, n. 1, p. 114-122, 2000.

SILVA, G. G. **Metodologia para aplicar LES ao craqueamento catalítico fluido em um reator riser industrial**. 2012. 142 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

SIMONIN, O.; VIOLLET., P. L. Predictions of an oxygen droplet pulverization in a compressible subsonic coflowing hydrogen flow. **Numerical Methods for Multiphase Flows**, v. 91, p. 65–82, 1990.

SINCLAIR, J. L. **Hydrodynamic modeling**. In *Circulating Fluidized Beds*, [S.l.]: Academic and Professional Press, 1997, 149 p.

SINCLAIR, J. L.; JACKSON, R. Gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle interactions. **AIChE Journal**, v. 35, n. 9, p. 1473–1486, 1989.

SOUZA, J. A.; VARGAS, J. V. C.; VON MEIEN, O. F.; MARTIGNONI, W.; AMICO, S. C. A two-dimensional model for simulation, control, and optimization of FCC risers. **AIChE Journal**, v. 52, n. 5, p. 1895-1905, 2006.

SUN, B.; GIDASPOW, D. Computation of Circulating Fluidized-Bed Riser Flow for the Fluidization VIII Benchmark Test. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 38, n. 3, p. 787-792, 1999.

SUN, J.; YAN, Y. Computational characterisation of intermittent hydrodynamic behaviours in a riser with Geldart A particles. **Powder Technology**, v. 311, n. 15, p. 41-51, Apr. 2017.

SUNDARESAN, S. Instabilities in Fluidized Beds. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 35, n. 1, p. 63-88, 2003.

SYAMLAL, M., O'BRIEN, T. J. **Derivation of a drag coefficient from velocity-voidage correlation**. US Dept. of Energy, Office of Fossil Energy, National Energy Technology Laboratory, Morgantown, West Virginia, 1987.

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T. J. MFIx Documentation: Theory Guide. U.S. Department of Energy, Morgantown Energy Technology Center, Technical Note, DOE/METC-95/1013, 1993.

TEATERS, L. **A computational study of the hydrodynamics of gas-solid fluidized beds**. 2012. 67 p. Thesis (Master of Science in Mechanical Engineering). Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg.

THEOLOGOS, K. N.; MARKATOS, N. C. Advanced modeling of fluid catalytic cracking riser-type reactors. **AIChE Journal**, v. 39, n. 6, p. 1007-1017, 1993.

THERDTHIANWONG, A.; PANTARAKS, P.; THERDTHIANWONG, S. Modeling and simulation of circulating fluidized bed reactor with catalytic ozone decomposition reaction. **Powder Technology**, v. 133, n. 1, p. 1-14, 2003.

TSUJI, Y.; TANAKA, T.; YONEMURA, S. Cluster patterns in circulating fluidized beds predicted by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model). **Powder Technology**, v. 95, n. 3, p. 254-264, 1998.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method**. England: Pearson Education Limited, 2^a ed., 2007, 503 p.

WANG, C. **High density gas-solids circulating fluidized bed riser and downer reactors**. 2013. 274 p. Thesis (Doctor of Philosophy in Chemical and Biochemical Engineering). The School of Graduate and Postdoctoral Studies, The University of Western Ontario, Ontario.

WANG, X.; LIAO, L.; FAN, B.; JIANG, F.; XU, X.; WANG, S.; XIAO, Y. Experimental validation of the gas–solid flow in the CFB riser. **Fuel Processing Technology**, v. 91, n. 8, p. 927-933, 2010.

WEINSTEIN, H.; LI, J. An evaluation of the actual density in acceleration section of vertical risers. **Power Technology**, v. 57, n. 1, p. 77–79, 1989.

WEN, C.Y.; YU, Y.H. Mechanics of fluidization. **The Chemical Engineering Progress Symposium Series**, v. 62, p. 100-111, 1966.

WU, C.; CHENG, Y.; DING, Y.; JIN, Y. CFD–DEM simulation of gas–solid reacting flows in fluid catalytic cracking (FCC) process. **Chemical Engineering Science**, v. 65, n. 1, p. 542-549, 2010.

YAN, A.; ZHU, J. Scale-Up Effect of Riser Reactors (1): Axial and Radial Solids Concentration Distribution and Flow Development. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 43, n. 18, p. 5810-5819, 2004.

YANG, Q.; BERROUK, A. S.; DU, Y.; ZHAO, H.; YANG, C.; RAKIB, M. A.; MOHAMED, A.; TAHER, A. CFD investigation of hydrodynamics, heat transfer and cracking reactions in a

large-scale fluidized catalytic cracking riser. **Applied Mathematical Modelling**, v. 40, n. 21-22, p. 9378-9397, 2016.

YANG, W. C. A model for the dynamics of a circulating fluidized bed loop. In *Circulating Fluidized Bed Technology II*, 14-18, 1988. **Proceedings of the Second International Conference on Circulating Fluidized Beds, Compiègne, France, 1988.**

YANG, W. C. **Handbook of fluidization and fluid-particle systems**. New York: Marcel-Dekker Inc., Taylor & Francis Group LLC; 2003.

YERUSHALMI, J.; CANKURT, N. T. Further studies of the regimes of fluidization. **Powder Technology**, v. 24, n. 2, p. 187-205, 1979.

YERUSHALMI, J.; TURNER, D. H.; SQUIRES, A. M. The Fast Fluidized Bed. **Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development**, v. 15, n. 1, p. 47-53, 1976.

ZELENIKO, V. L.; SERGEEV, Y. A.; TJIN, T.; ISKE, P. L. Clusters and particle segregation in gas-solids flow through a vertical tube through a vertical tube. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 226, n. 3, p. 274-294, 1996.

ZHANG, M. H.; CHU, K. W.; WEI, F.; YU, A. B. A CFD–DEM study of the cluster behavior in riser and downer reactors. **Powder Technology**, v. 184, n. 2, p. 151-165, 2008.

ZHANG, N.; LU, B. N.; WANG, W.; LI, J. H. 3D CFD simulation of hydrodynamics of a 150 MWe circulating fluidized bed boiler. **The Chemical Engineering Journal**, v. 162, n. 2, p. 821–828, 2010.

ZHANG, W.; TUNG, Y.; JOHANSSON, F. Radial voidage profiles in fast fluidized beds of different diameters. **Chemical Engineering Science**, v. 46, n. 12, p. 3045-3052, 1991.