

SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO GÁS SÓLIDO EM RISERS UTILIZANDO O SOFTWARE CFX

Andrey Oliveira de Souza¹, **Antonio Tavernard P. Neto**², **José Jailson Nicácio Alves**³

¹UFCG/DEQ, Av. Aprígio Veloso, 882, Bodocongó, 58101-014-Campina Grande-PB, Andrey_PB@yahoo.com.br

²UFCG/DEQ, Av. Aprígio Veloso, 882, Bodocongó, 58101-014-Campina Grande-PB, Tavernard.eng@ig.com.br

³UFCG/DEQ, Av. Aprígio Veloso, 882, Bodocongó, 58101-014-Campina Grande-PB, Jailson@deq.ufcg.edu.br

Palavras-chave: Modelagem, Simulação, Fluidodinâmica, Riser

Área do Conhecimento: III- Engenharias

Resumo- Nas unidades de craqueamento catalítico (FCC) do gasóleo, a conversão acontece em reatores de leito fluidizado circulante (CFB's). Existe atualmente na literatura uma grande discussão em torno dos modelos que representam a fluidodinâmica dos reatores CFB's, principalmente com relação à fase "particulada", precisamente na representação matemática das interações partícula-partícula. Dois pontos na simulação numérica de escoamento multifásico encontram-se em fase de desenvolvimento. São estes, os modelos matemáticos representativos do processo e as técnicas numéricas adequadas para a solução destes modelos. Com o entendimento do aplicativo comercial CFX-4.4, teve-se como meta a simulação de um escoamento multifásico no riser em duas dimensões, utilizando o modelo de turbulência $k-\varepsilon$ para as duas fases e admitindo-se a fase particulada como sendo invíscida. Os resultados obtidos foram apresentados na forma gráficos de concentração de partículas e velocidade axial e radial para a fase particulada.

Introdução

De um modo geral os métodos analíticos são aplicáveis apenas aos problemas mais simples de engenharia, enquanto os métodos experimentais são dispendiosos e trabalhosos, embora necessários; uma alternativa bastante viável para solucionar este problema, desenvolvendo e otimizando processos químicos, é a simulação numérica, devido à flexibilidade, rapidez, economia e confiabilidade dos resultados numéricos, que serão, então, verificados se são válidos e precisos, através dos métodos analíticos.

É de nosso interesse, nesse sentido, a otimização do processo de craqueamento catalítico do petróleo; que faz com que frações mais pesadas (gasóleo) convertam-se em frações mais leves; aumentando a produção de GLP e gasolina, que por sua grande demanda mundial, tem maior valor agregado que os óleos combustíveis [1].

Diante da importância da modelagem e simulação dos reatores de leito fluidizado circulante (onde ocorre o craqueamento catalítico do gasóleo), a iniciação científica nesta área do conhecimento de engenharia química é de fundamental importância do ponto de vista de transferência e manutenção do conhecimento da área, bem como para o aprimoramento dos modelos matemáticos utilizados e das técnicas computacionais empregadas na solução numérica destes modelos.

Atualmente, vários pesquisadores estão dedicando esforços na área de escoamentos multifásicos no sentido de se desenvolver modelos matemáticos representativos dos processos multifásicos e técnicas numéricas adequadas à solução destes modelos [2, 3]. Os modelos matemáticos mais recentes dos CFB's disponíveis na literatura utilizam o modelo de turbulência $k-\varepsilon$ e a teoria cinética do escoamento de materiais granulares para estimar os coeficientes de transporte das fases gasosa e particulada, respectivamente [4, 5 e 6].

Procedimento de abordagem

O conjunto de programas que constituem o CFX-4.4 é formado pelo Pré-Processador, o Processador e o Pós Processador. Um problema típico pode envolver primeiro o uso do Pré-Processador, para construção do arquivo de geometria (CFX-Build), e, gerar e editar o arquivo de comando (CFX-Setup). Depois o CFX-Solver, como Processador, para resolução do problema e o Pós-Processador, CFX-Analyse, para analisar os resultados, conforme manual do CFX.

Para a criação da geometria utilizou-se o CFX-Build seguindo a seqüência: criou-se a geometria, definiu-se os patches (entrada e saída), e criou-se a malha. Ainda fazendo parte do Pré-Processamento, partiu-se para o CFX-Setup, onde nele determinou-se o sistema de coordenadas a ser utilizado, o regime de escoamento, as propriedades físicas do fluido e da partícula, a velocidade de entrada, os critérios de

convergência, entre tantos outros fatores. A resolução do problema foi obtida no CFX-Solver, podendo-se identificar a qualidade deste resultado através de um gráfico da convergência do resíduo de massa versus o número de interações. A visualização e análise dos resultados foi feita no CFX – Analyse, por exemplo, através de mapas de contorno.

Com o entendimento do aplicativo CFX-4.4, teve-se como meta a simulação de um escoamento multifásico, onde inicialmente a fase particulada, admitida como invíscida, tinha um escoamento laminar; e, posteriormente, testou-se o modelo de turbulência $k-\epsilon$.

Definição do sistema

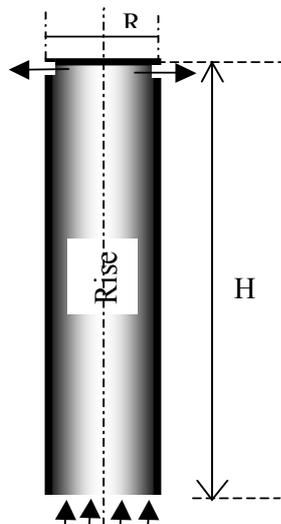


Figura 1: Geometria do Riser

Tabela 1: Características do sistema simulado

Raio do Tubo	0,152 m
Altura	10,00 m
Velocidade do Gás	3,78 m/s
Densidade do Gás	1,22 kg/m^3
Viscosidade do Gás	4,0.10 ⁻⁵ $kg/m \cdot s$
Fração Volumétrica de Sólidos	0,0218
Velocidade dos Sólidos	2,62 m/s
Densidade do Sólido	1714,0 kg/m^3
Diâmetro das Partículas	76.10 ⁻⁶ m

O objetivo principal deste trabalho foi utilizar o software CFX – 4.4 como ferramenta para a otimização de processos em reatores de leito fluidizado circulante, pela simulação numérica, simulando-se um escoamento multifásico em um riser, com características vistas tabela 1,

expresso em duas dimensões (figura 1), onde a fase particulada, invíscida, seguia um modelo de turbulência $k-\epsilon$. Apresentando-se os resultados obtidos de concentração de partículas, velocidade axial e radial para a fase particulada.

Modelo matemático

As equações que descrevem o processo são as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, aplicadas as fases sólida e gasosa.

Continuidade:

$$\frac{\partial[\rho_i \epsilon_i]}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_i \epsilon_i \vec{v}_i] = 0 \quad (1)$$

onde: ρ é a densidade da fase, ϵ a fração volumétrica e v o vetor velocidade. O subscrito “i” identifica a fase (i = g ou s, gás ou sólido).

Quantidade de movimento:

$$\frac{\partial[\rho_i \epsilon_i \vec{v}_i]}{\partial t} + \nabla \cdot [\epsilon_i (\rho_i v_i v_i - \mu_i (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T))] = \epsilon_i (\rho_i \vec{g} - \nabla P_i) + \beta_{ij} [\vec{v}_i - \vec{v}_j] \quad (2)$$

onde: μ_i é a viscosidade efetiva da fase “i”, P_i é a pressão, β_{ij} é o coeficiente de transferência de momentum entre as fases i e j.

Parâmetros do modelo:

A viscosidade da fase gasosa pode ser estimada a partir de qualquer modelo de turbulência. Neste trabalho o modelo de turbulência $k-\epsilon$ foi utilizado.

O coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases gasosa e particulada foi calculado baseado na equação de Ergun ($\epsilon_g < 0,8$) ou baseado no coeficiente de arrasto da esfera ($\epsilon_g > 0,8$) [4 e 7].

Resultados

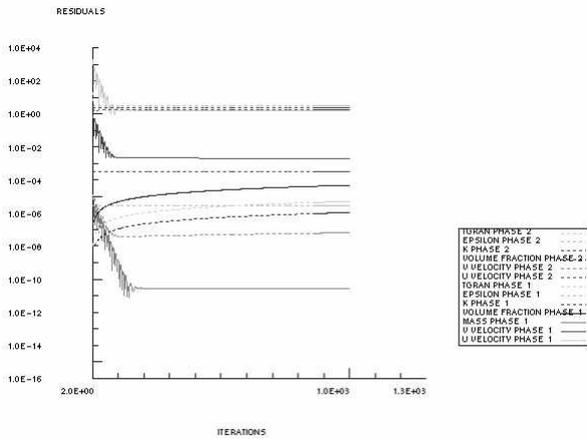


Figura 2: Gráfico da convergência do resíduo de massa versus número de interações

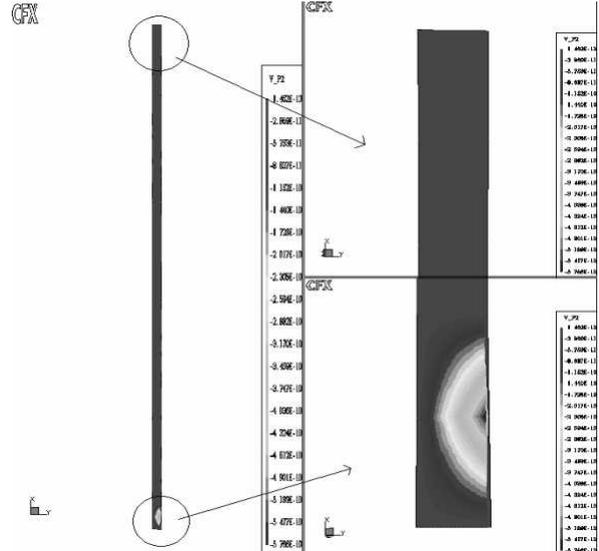


Figura 5: Velocidade radial da fase particulada

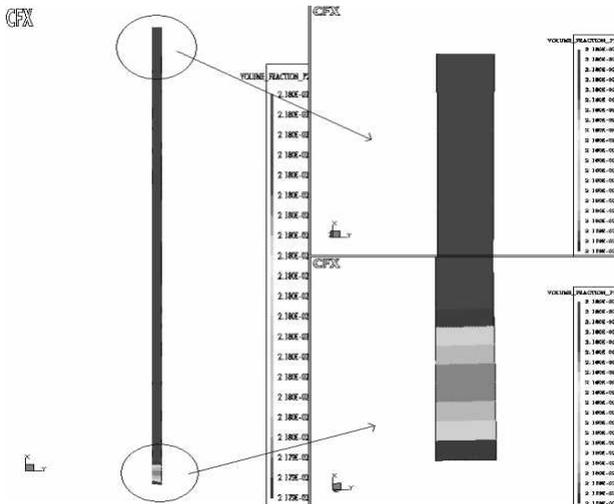


Figura 3: Fração volumétrica da fase particulada

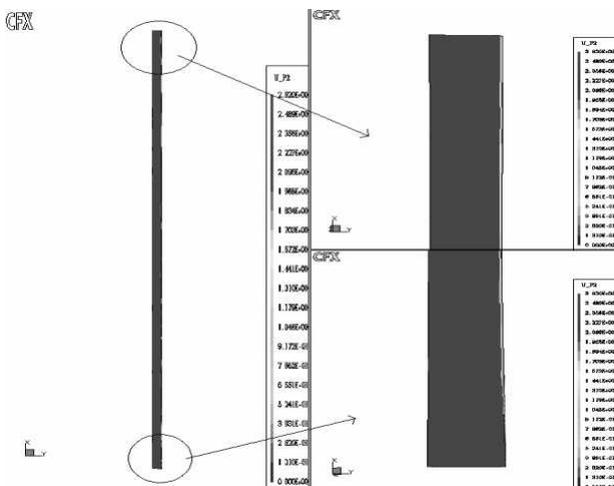


Figura 4: Velocidade axial da fase particulada

Discussão

Diante do gráfico do resíduo de massa versus interações (Figura 2), percebeu-se uma notável tendência de convergência, estacionando em um resíduo de massa desprezível, atingindo tal estado com um número relativamente reduzido de interações. O gráfico foi obtido com uma tolerância de resíduo de massa de 10^{-15} kg e com um número de no máximo 1000 interações.

Os resultados para a fração volumétrica, velocidade axial e velocidade radial para a fase particulada foram obtidos a partir do CFX-Analyse, através de mapas de contornos (Figuras 3, 4 e 5, respectivamente). Diante destes resultados viu-se que o modelo não previu concentração de partículas na parede, no que diz respeito ao visto na figura 3. Em relação às figuras 4 e 5 notou-se resultados qualitativamente coerentes, uma vez que no caso da velocidade axial, esta diminui ao se aproximar da parede, e no caso da velocidade radial, mostra um perfil de velocidade característico na entrada.

Conclusão

A convergência, quando na utilização do modelo de turbulência k-epsilon, para a fase particulada, é um fato de interesse; levantando a questão se tal modelo pode ser aplicado para esta fase, já que esta foi tratada como fluido.

Com respeito aos resultados obtidos, esperava-se uma concentração de partículas na parede, o que não foi observado. Percebendo-se que, provavelmente, o efeito da geometria sobrepõe-se sobre os efeitos do modelo. A simulação do riser em três dimensões está, portanto, em fase de andamento.

Referências

[1] COUTINHO, S.A. Aplicação do Modelo de Turbulência k-epsilon para a fase Particulada na Simulação 3D do escoamento Gás-Sólido, COBEQ, 2002.

[2] ALVES, J.J.N., and MORI M., Modelagem e Simulação da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante Usando a Teoria Cinética dos Materiais Granulares: Análise de Sensibilidade Paramétrica, XVIII Congresso Ibero Latino-Americano de Métodos Computacionais para Engenharia, pp 1789-1796, Brasília, outubro, 1997.

[3] MEIER, H. F., ALVES, J. J. N. and MORI, M. Comparison of Finite Volume Method with Staggered and Colocated Grids for Multiphase Flows, XVIII Congresso Ibero Latino-Americano de Métodos Computacionais para Engenharia, Vol. 1, pp 957-964, Outubro, 1997.

[4] ALVES, J.J.N., Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante, Tese de Doutorado, UNICAMP, Janeiro, 1998.

[5] SAMUELSBERG, A., and HJERTAGER H., An Experimental and Numerical Study of Flow Patterns in a Circulating Fluidized Bed Reactor, Int. J. Multiphase Flow, Vol. 22, No.3, pp. 575-591, 1996.

[6] Sinclair, J. L. and Jackson R., Gas-Particle Flow in Vertical Pipe with Particle-Particle Interactions, AIChE Journal, Vol. 35, No. 9, pp. 1473-11486, 1989.

[7] CFX-3D Solver Manual, 1997