

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO**  
**CENTRO UNIVERSITÁRIO NORTE DO ESPÍRITO SANTO**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENERGIA**

**GABRIELA DE CARVALHO BRITO**

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO TRIFÁSICO**  
**GÁS-LÍQUIDO-SÓLIDO EM UM LEITO DE LAMA**

SÃO MATEUS, ES  
2018

**GABRIELA DE CARVALHO BRITO**

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO TRIFÁSICO  
GÁS-LÍQUIDO-SÓLIDO EM UM LEITO DE LAMA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Energia do Centro Universitário Norte do Espírito Santo da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito para a obtenção do grau de Mestre em Energia, na área interdisciplinar de Engenharia, Tecnologia e Gestão.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Silveira Bacelos

Coorientador: Prof. Dr. Daniel da Cunha Ribeiro

SÃO MATEUS, ES  
2018

Ficha catalográfica disponibilizada pelo Sistema Integrado de Bibliotecas - SIBI/UFES e elaborada pelo autor

---

B862s Brito, Gabriela de Carvalho, 1991-  
Simulação numérica do escoamento trifásico gás-sólido líquido em um leito de lama / Gabriela de Carvalho Brito. - 2018. 84 f. : il.

Orientador: Marcelo Silveira Bacelos.

Coorientador: Daniel da Cunha Ribeiro.

Dissertação (Mestrado em Energia) - Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Universitário Norte do Espírito Santo.

1. Escoamento multifásico. 2. Fluidodinâmica computacional. I. Bacelos, Marcelo Silveira. II. Ribeiro, Daniel da Cunha. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Universitário Norte do Espírito Santo. IV. Título.

CDU: 620.9

---



Centro Universitário Norte do Espírito Santo  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENERGIA

Ata de nº 86, da sessão da defesa de Dissertação do Programa de Pós-Graduação em Energia, do Centro Universitário Norte do Espírito Santo, da Universidade Federal do Espírito Santo, da aluna Gabriela de Carvalho Brito, candidata ao título de Mestre em Energia, realizada às 08h00min do dia vinte e nove de maio do ano dois mil e dezoito, no Anfiteatro 02 do Prédio da SUPGRAD - Secretaria Unificada de Pós-Graduação do Centro Universitário Norte do Espírito Santo, da Universidade Federal do Espírito Santo. O presidente da Banca Examinadora, Professor Doutor Marcelo Silveira Bachelos, abriu a sessão, agradecendo a presença de todos. Em seguida, passou à apresentação dos demais membros da Comissão Examinadora, constituída pelos Professores Doutores Daniel da Cunha Ribeiro (CEUNES/UFES), Ana Paula Meneguelo (CEUNES/UFES) e Renato do Nascimento Siqueira (IFES). A seguir, o senhor presidente cedeu a palavra a candidata que, em trinta e sete minutos, apresentou sua Dissertação intitulada "Simulação numérica do escoamento trifásico gás-sólido líquido em leito de lama". Terminada a apresentação da aluna, o senhor presidente retomou a palavra e a cedeu aos Membros da Comissão Examinadora, um a um, para procederem à arguição. O senhor presidente convidou a Comissão Examinadora a se reunir em separado para deliberação. Ao final, a Comissão Examinadora retornou e o senhor presidente informou aos presentes que a Dissertação havia sido aprovada. Contudo, ficou estabelecido pela banca que fossem realizados alguns ajustes no texto final em até 60 dias, cabendo ao orientador verificar se a aluna procedeu às modificações solicitadas. O Senhor Presidente, então, deu por encerrada a sessão, e eu, Danielle Andrade de Lucena Carvalho, servidora da Secretaria Unificada de Pós-graduação, lavrei a presente ata, que é assinada pelos membros da Comissão Examinadora. São Mateus, 29 de maio de 2018.

Prof. Dr. Marcelo Silveira Bachelos (UFES)  
Presidente

Prof. Dr. Daniel da Cunha Ribeiro (UFES)  
Coorientador

Profª. Drª. Ana Paula Meneguelo (UFES)  
Examinadora Interna

Prof. Dr. Renato do Nascimento Siqueira (IFES)  
Examinador Externo

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a Deus pelo dom da vida, pela saúde e por ter me sustentado durante toda esta jornada.

Agradeço à minha família, meus pais e irmãos, que me incentivaram e me motivaram.

Agradeço também aos meus colegas de mestrado e às pessoas que eu conheci durante este processo.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Marcelo Bacelos, pelos ensinamentos e por ter enfrentado o desafio de um trabalho novo.

Ao meu Coorientador Prof. Dr. Daniel Ribeiro, pela paciência e sabedoria.

Aos demais professores e colaboradores que contribuíram para este trabalho como um todo.

À Capes pelo financiamento através da bolsa de pesquisa.

Por tudo e por todos os envolvidos neste processo, meu muito obrigado.

## RESUMO

Uma série de tecnologias está disponível para transformar o gás em produtos líquidos de maior valor comercial e a técnica mais desenvolvida atualmente, e tratada neste trabalho, utiliza um reator de lama trifásico gás-líquido-sólido. Para o bom funcionamento deste tipo de reator, entre outros aspectos, é necessária a presença das três fases em todas as regiões do leito. Com o objetivo de favorecer configurações que atendam a esse critério foi utilizado o modelo Euler-Euler, implementado no *software* comercial *ANSYS Fluent* para prever o escoamento multifásico de uma coluna de bolhas de 1,05 m de altura e 0,102 m de diâmetro. Em uma altura de 0,56 m de coluna, para a velocidade superficial de ar de 0,02 m/s, foram previstos os perfis de distribuição médio-temporal radial de velocidade e fração volumétrica de ar. Estes foram comparados com dados experimentais reportados por Wu *et al.* (2008). Foi possível constatar que o uso da modelagem bidimensional Euler-Euler turbulento possibilita a melhor previsão dos dados experimentais de perfil de velocidade e de fração volumétrica do ar. Dentre as condições de entrada do ar estudadas, o uso do perfil de velocidade não-uniforme, proposto por Vitankar e Joshi (2002), prevê melhor os dados de velocidade e fração de ar. O efeito da inclusão do arraste gás-sólido na modelagem foi desprezível. Tanto a correlação de arraste de Grace (1935) quanto a de Tamakasa e Tomiyama (1977) foram adequadas para descrever a interação gás-líquido. Considerando a faixa de massa específica investigada ( $1500 < \rho_s < 3100 \text{ kg/m}^3$ ), nota-se que para o menor valor, o leito de lama apresenta uma distribuição de fração de sólidos mais uniforme na linha central. Apenas para a faixa de diâmetro de sólidos entre 50 e 60  $\mu\text{m}$  verifica-se que o leito de lama apresenta uma distribuição de fração de sólidos mais uniforme ao longo da linha central da coluna.

Palavras chave: Energia. Fluidodinâmica computacional. Coluna de bolhas. Escoamento trifásico. Turbulência.

## ABSTRACT

There are many technologies available to transform gas into liquid products with a higher commercial value. The most developed technique, discussed in this work, uses a three-phase (gas-liquid-solid) slurry bubble column reactor. The proper operation of this reactor depends on the distribution of the three phases throughout the completely fluid bed. In order to favor configurations that attend such standard, the Euler-Euler model, implemented in the commercial software ANSYS Fluent, was used to predict the multiphase flow in a bubble column 1.05 m high and 0.102 m diameter. For a superficial gas velocity of 0.02 m/s, gas velocity and holdup distribution profiles were predicted, at 0.56 m high. They were compared to experimental results reported by Wu *et al.* (2008). It was found that the Euler-Euler turbulent bi-dimensional model resulted in the best experimental data prediction for air velocity and holdup distribution. Among the air intake conditions studied, the use of the non-uniform velocity profile, proposed by Vitankar and Joshi (2002), provides better data on velocity and air fraction profile. The effect of including a gas-solid drag model was negligible. Both the drag correlation proposed by Grace (1935) and Tamakasa and Tomiyama (1977) were efficient to describe the gas-liquid interaction. Considering the specific mass range investigated ( $1500 < \rho_s < 3100 \text{ kg/m}^3$ ) it was noted that for the lowest value the slurry bed presented a more uniform distribution of solids fraction on the center line. Only for the range of solids diameter between 50 and 60  $\mu\text{m}$  it was found that the slurry bed had a more even distribution of solids fraction along the centerline of the column.

Keywords: Energy. Computational fluid dynamics. Bubble column. Three-phase flow. Turbulence.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Reator de lama. Adaptado de Gamwo <i>et al.</i> (2005). .....	18
Figura 2 – Padrões de escoamento gás-líquido em tubos verticais. (TAITEL <i>et al.</i> , 1980) .....	20
Figura 3 – Regimes de operação encontrados em sistemas gás-líquido-sólido. (SILVA JÚNIOR, 2015).....	22
Figura 4 – Esquema do experimento realizado por Wu <i>et al.</i> (2008). .....	29
Figura 5 – Condições iniciais para fração volumétrica das fases: a) gás, para casos com duas e três fases. b) sólidos, para casos com três fases .....	44
Figura 6 – Perfil da velocidade de entrada do ar na base da coluna de bolhas, conforme as propostas de Vitankar e Joshi (2002), Mori <i>et al.</i> (2012) e sem adaptação.....	46
Figura 7 – Geometria da coluna de bolhas com representação das linhas em que foram extraídos os resultados. ....	54
Figura 8 – Malhas bidimensionais estudadas. Respectivamente malhas 2DM1, 2DM2 e 2DM3.....	56
Figura 9 – Perfil de distribuição médio-temporal radial da velocidade do ar experimental e simulados para diferentes malhas 2D, à altura de 0,56 m. ....	57
Figura 10 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental e simulados para diferentes malhas 2D, à altura de 0,56 m. ....	57
Figura 11 – Distribuição dos elementos na base das malhas tridimensionais estudadas. Respectivamente malhas 3DM1, 3DM2 e 3DM3. ....	58

Figura 12 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental e simulados para diferentes malhas 3D, à altura de 0,56 m. .....	59
Figura 13 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental e simulados para diferentes malhas 3D, à altura de 0,56 m. .....	59
Figura 14 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental e simulados para as malhas 2D e 3D, à altura de 0,56 m..	60
Figura 15 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica de ar experimental e simulados para as malhas 2D e 3D, à altura de 0,56 m...	61
Figura 16 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental, simulados com o modelo de turbulência e simulados com modelo laminar, à altura de 0,56 m. ....	62
Figura 17 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental, simulados com o modelo de turbulência e simulados com modelo laminar, à altura de 0,56 m. ....	62
Figura 18 – Perfil da velocidade de entrada do ar na base da coluna de bolhas, conforme as propostas de Vitankar e Joshi (2002), Mori <i>et al.</i> (2012) e sem adaptação.....	64
Figura 19 – Perfil de distribuição médio-temporal radial da velocidade do ar , obtidas por diferentes propostas de adaptação da entrada de ar, à altura de 0,56 m. ....	64
Figura 20 – Perfil de distribuição médio-temporal radial da fração volumétrica de ar, obtidas por diferentes propostas de adaptação da entrada de ar, à altura de 0,56 m. ....	65
Figura 21 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental e simulados utilizando diferentes correlações para o arraste gás-líquido, à altura de 0,56 m. ....	66

Figura 22 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental e simulados utilizando diferentes correlações para o arraste gás-líquido, à altura de 0,56 m. ....	66
Figura 23 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental e simulados utilizando diferentes abordagens para o arraste gás-sólido, à altura de 0,56 m. ....	67
Figura 24 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental e simulados utilizando diferentes abordagens para o arraste gás-sólido, à altura de 0,56 m. ....	68
Figura 25 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental e simulados utilizando diferentes abordagens multifásicas para o modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ , à altura de 0,56 m. ....	69
Figura 26 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental e simulados utilizando diferentes abordagens multifásicas para o modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ , à altura de 0,56 m. ....	69
Figura 27 – Distribuição da fração volumétrica de sólidos na coluna, para diferentes valores de massa específica do sólidos, para o tempo de 100 s, considerando um diâmetro de sólidos de 65 $\mu\text{m}$ . ....	71
Figura 28 – Distribuição médio-temporal da fração volumétrica de sólidos ao longo de uma linha vertical na coluna de bolhas para diferentes valores de massa específica do sólido, considerando partículas com 65 $\mu\text{m}$ de diâmetro. ....	72
Figura 29 – Perfil de distribuição da velocidade do ar na coluna para diferentes valores de massa específica do sólido, para o tempo de 100 s, considerando partículas com 65 $\mu\text{m}$ de diâmetro. ....	73
Figura 30 – Perfil de distribuição da fração volumétrica de sólidos na coluna para diferentes valores de diâmetro dos sólidos, para o tempo de 100 s, considerando partículas com massa específica de 2500 $\text{kg/m}^3$ . ....	74

Figura 31 – Distribuição médio-temporal da fração volumétrica de sólidos ao longo de uma linha vertical na coluna de bolhas para diferentes valores de diâmetro de sólidos, considerando partículas com massa específica de 2500 kg/m <sup>3</sup> . .....	75
Figura 32 – Perfil de distribuição da velocidade do ar na coluna para diferentes valores de diâmetro do sólido, para o tempo de 100 s, considerando partículas com massa específica de 2500 kg/m <sup>3</sup> . .....	76

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Equações principais e de fechamento do modelo matemático.....	36
Tabela 2 – Correlação de Schiller e Naumann (1935) para o arraste líquido-sólido.	38
Tabela 3 – Correlação de Grace (1935) para o arraste gás-líquido. ....	39
Tabela 4 – Correlação de Tamakasa e Tomiyama (1999) para o arraste gás-líquido. .....	39
Tabela 5 – Equacionamento do modelo de turbulência <i>RNG</i> $\kappa - \epsilon$ .....	42
Tabela 6 – Condição inicial para os casos bifásicos e trifásicos. ....	43
Tabela 7 – Condição de contorno para as paredes e a saída do reator.....	45
Tabela 8 – Modelo de Vitankar e Joshi (2002) para entrada de gás no reator.....	46
Tabela 9 – Parâmetros e modelos numéricos para a fase sólida do escoamento multifásico. ....	48
Tabela 10 – Métodos de Solução utilizados nas simulações numéricas.....	50
Tabela 11 – Características do caso base e dos demais casos.....	52
Tabela 12 – Parâmetros de qualidade das malhas bidimensionais.....	56
Tabela 13 – Parâmetros de qualidade da malha tridimensionais.....	58

## LISTA DE SÍMBOLOS

### Geral

$C_D$	Coeficiente de arraste
$d_g$	Diâmetro médio das bolhas de gás ( $m$ )
$d_s$	Diâmetro da partícula de catalisador ( $m$ )
$D$	diâmetro do reator ( $m$ )
$Eo$	Número adimensional de Eotvos
$e_{ss}$	Coeficiente de restituição da interação sólido-sólido
$f$	Fator de atrito
$Fr$	Número adimensional de Froude
$g$	Aceleração gravitacional ( $m/s^2$ )
$g_o$	Função de distribuição radial dos sólidos
$G_\kappa$	Termo de produção de $\kappa$
$h_l$	Altura do leito de lama ( $m$ )
$H$	altura do reator ( $m$ )
$\bar{I}$	Tensor de inércia
$K_{pq}$	Coeficiente de arraste entre as fases p e q
$Mo$	Número adimensional de Morton
$P$	pressão da fase contínua ( $Pa$ )
$P_s$	Pressão de sólidos ( $kg\ m^{-1}\ s^{-2}$ )

$Re$	Número adimensional de Reynolds
$Re_g$	Número adimensional de Reynolds da bolha de gás
$T$	temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ )
$T$	tempo (s)
$v_k$	Velocidade da fase k (m/s)

### Letras gregas

$\varepsilon_k$	Fração volumétrica da fase k
$\varepsilon_{s,max}$	Fração volumétrica máxima de partículas sólidas (-)
$\epsilon$	Dissipação da energia cinética da turbulência
$\theta_s$	Temperatura granular do sólido ( $m^2 s^{-2}$ )
$\kappa$	Energia cinética da turbulência
$\lambda_s$	Viscosidade <i>bulk</i> da fase sólida, ( $kg\ m^{-1}s^{-1}$ )
$\mu_k$	Viscosidade dinâmica da fase k (Pa.s)
$\mu_{k,eff}$	Viscosidade efetiva da fase k ( $kg\ m^{-1}s^{-1}$ )
$\mu_{s,cis}$	Viscosidade cisalhante da fase sólida ( $kg\ m^{-1}s^{-1}$ )
$\rho_k$	Massa específica da fase k ( $kg/m^3$ )
$\sigma_l$	Tensão interfacial ar-líquido ( $N/m$ )
$\tau_k$	Tensor de tensões da fase k

## **Subscritos**

g gás ou ar

l líquido

m mistura

s sólido particulado

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO.....</b>	<b>16</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....</b>	<b>18</b>
2.1	Reator de lama para a Síntese de Fischer-Tropsch.....	18
2.2	Regimes de escoamento para escoamentos multifásicos.....	19
2.3	Características das fases dispersas .....	23
2.4	Transferência de quantidade de movimento entre as fases .....	26
2.5	Turbulência .....	26
2.6	Estudos experimentais para reator de lama trifásico.....	27
2.7	Simulações computacionais para escoamento da coluna de bolhas trifásica .....	30
<b>3</b>	<b>MODELAGEM .....</b>	<b>34</b>
3.1	Modelagem Euler-Euler para escoamentos multifásicos - Modelo hidrodinâmico .....	34
3.2	Hipóteses da modelagem .....	35
3.3	Equacionamento.....	35
3.4	Modelagem da turbulência .....	40
3.5	Condições iniciais e de contorno .....	43
<b>4</b>	<b>ABORDAGEM NUMÉRICA .....</b>	<b>48</b>
4.1	Parâmetros numéricos .....	48

4.2	Algoritmos de discretização .....	49
5	DESCRIÇÃO DO CASO E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO .....	51
5.1	Aspectos analisados.....	52
5.2	Variáveis resposta.....	53
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	55
6.1	Levantamento do modelo .....	55
6.2	Estudo da fluidodinâmica.....	70
7	CONCLUSÕES.....	77
	Sugestões de pesquisas futuras.....	78
	REFERÊNCIAS.....	79

## 1 INTRODUÇÃO

Reatores de lama recentemente voltaram a ser objeto de estudo da comunidade acadêmica, particularmente no contexto da reação de Fischer-Tropsch (FT) para a conversão de gás natural em combustíveis líquidos. As principais razões para o interesse neste tipo de conversão são a crescente descoberta de campos produtores de gás em locais remotos, afastados do mercado consumidor, e também a crescente demanda por combustíveis para transporte, especialmente na Ásia e no Pacífico.

Devido à característica altamente exotérmica da síntese de FT, este processo é melhor conduzido em reatores de lama trifásicos, que possibilitam alcançar condições próximas à isothermicidade durante a operação (KRISHNA; SIE, 2000; MARETTO; KRISHNA, 2001). Por razões logísticas e econômicas, os processos de conversão de gás natural em líquido são melhor conduzidos em projetos de larga escala (KRISHNA; BATEN, VAN, 2003), e neste contexto, a capacidade de se conduzir pesquisas por simulação numérica é essencial para o projeto dessas unidades (FORRET *et al.*, 2006).

A simulação numérica através de *softwares* comerciais permite que sejam criadas novas configurações para o reator de lama sem o ônus associado à construção e operação de uma unidade experimental, obtendo resultados válidos e detalhados do desempenho dessas unidades.

O reator de lama tem sido estudado de forma experimental, em escala de bancada, produzindo dados de qualidade, mas não aplicáveis à escala industrial. Tais dados experimentais têm sido analisados e simulados por vários autores com o objetivo de validar os complexos modelos numéricos propostos, desenvolver reatores mais eficientes e determinar os valores ótimos para o projeto. A determinação de um projeto e operação adequados para reatores de lama passa pelo entendimento de cada um dos fatores que influenciam na conversão do gás de síntese. Considerando que é necessária a presença das três fases para que o processo aconteça, a eficiência do processo é função da dispersão de gás, líquido e catalisador dentro do reator (STERN *et al.*, 1985). Além disso, configurações que favoreçam maior

concentração de sólidos na parte superior do reator de lama aumentam a eficiência da reação (GAMWO *et al.*, 2003).

Para o estudo do reator de lama, o consideramos como uma coluna de bolhas bifásica (sem presença do catalisador sólido) ou trifásica (com catalisador sólido). Os fatores que influenciam significativamente o escoamento gás-líquido-sólido no interior da coluna, e portanto a dispersão das fases na coluna, são principalmente a força de arraste do gás sobre as demais fases e a ação da gravidade. A força de arraste exercida pelas bolhas de gás sobre as partículas de catalisador é diretamente influenciada pelo diâmetro do sólido, e a força resultante da ação da gravidade sobre a lama é dependente da relação entre as massas específicas da partícula e do fluido que a compõem.

Na literatura consultada (GAMWO *et al.*, 2005; MORI, E. *et al.*, 2011; PATEL, 2010; SILVA JÚNIOR, 2015) não há um consenso sobre o modelo de escoamento, conjunto de equações constitutivas e condições de contorno mais adequadas para descrever o escoamento multifásico em uma coluna de bolhas.

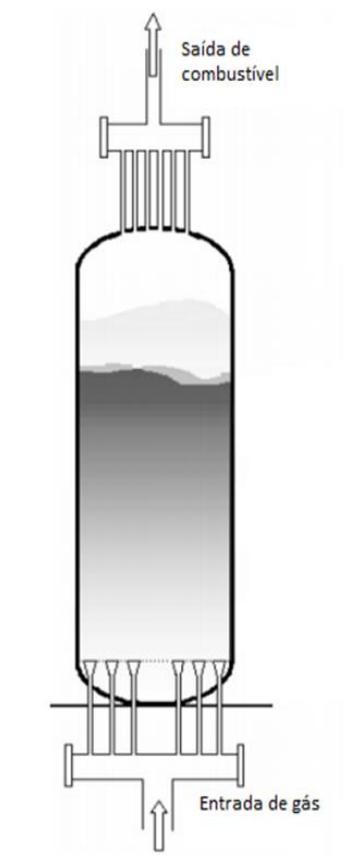
Para contribuir com esta temática, este trabalho tem como objetivo estudar o escoamento multifásico em uma coluna de bolhas. Neste contexto, esta pesquisa se divide em duas etapas. Na primeira, são realizados esforços para a modelagem da coluna de bolhas, testando modelos de escoamento, equações constitutivas, modelos de arraste entre as fases e abordagem multifásica da turbulência. Na segunda etapa, são realizados estudos sobre o efeito da massa específica dos sólidos e diâmetro dos sólidos sobre o campo de velocidades de ar e sobre a distribuição da fração volumétrica de sólidos na coluna.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 Reator de lama para a Síntese de Fischer-Tropsch

A síntese de Fischer-Tropsch é uma das muitas tecnologias para polimerizar componentes com carbono e o hidrogênio em moléculas de cadeia longa. O reator de lama para a Síntese de Fischer-Tropsch é um cilindro vertical parcialmente preenchido por uma fase líquida, na qual está disperso o catalisador, na forma de partículas sólidas. No cilindro há uma entrada de gás de síntese na base e a saída de produto ocorre pelo topo, conforme a Figura 1.

Figura 1 – Reator de lama. Adaptado de Gamwo *et al.* (2005).



O catalisador e as condições operacionais devem ser escolhidos de forma a favorecer a reação química necessária. Tais condições e parâmetros foram estudadas por diversos autores e serão levadas em consideração neste estudo.

### **2.1.1 O catalisador**

Os catalisadores para o reator de lama são preparados por precipitação e devido ao alto custo do material reagente é utilizada a quantidade mínima que não sacrifique a atividade na reação. Isto é obtido através da dispersão do cobalto em um suporte de alta área de contato, como  $\text{Al}_2\text{O}_3$  ou  $\text{SiO}_2$  (DRY, 2002). Desta forma, modificações no tamanho, formato e propriedades do elemento que suporta o catalisador não interferem em sua atividade catalítica.

Para os efeitos de dinâmica de fluidos o catalisador é considerado um sólido disperso dentro da fase líquida do reator, com massa específica constante, e cuja presença no leito é essencial para o bom funcionamento do reator. A dinâmica da distribuição desse sólido no sistema é governada pelas forças que incidem sobre a partícula, sendo as principais a força gravitacional e a troca de momento entre as fases (arraste líquido-sólido e colisões sólido-sólido).

## **2.2 Regimes de escoamento para escoamentos multifásicos**

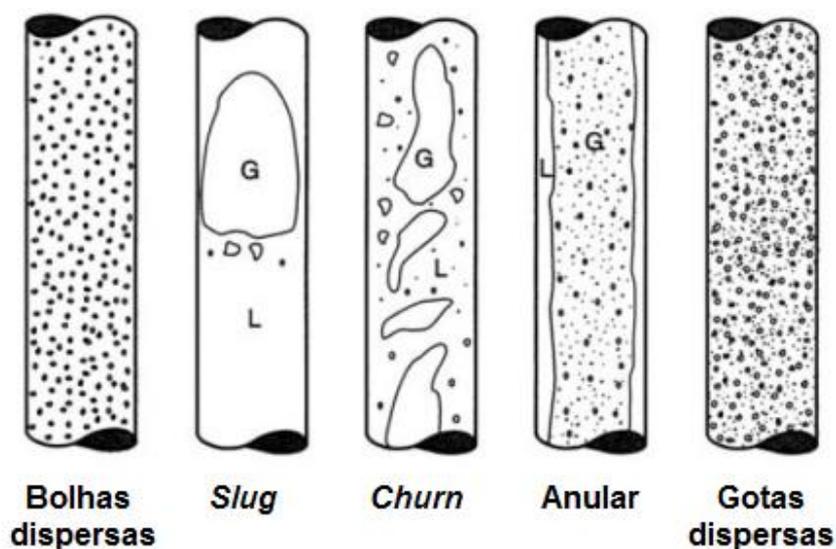
Um escoamento multifásico é o escoamento simultâneo de diferentes materiais. Uma forma comum de se estudar este fenômeno é a partir da descrição da distribuição geométrica das fases no escoamento ou regimes de escoamento. Regimes de escoamento multifásico podem ser agrupados em quatro categorias: escoamentos gás-líquido ou líquido-líquido, escoamentos gás-sólido, escoamentos líquido-sólido e escoamentos trifásicos, que são uma combinação dos escoamentos anteriores. Neste trabalho serão tratados dois tipos de escoamentos multifásicos: o escoamento gás-líquido e o escoamento gás-sólido-líquido em tubos verticais.

Ambos serão utilizados para representar a coluna de bolhas, e características destes escoamentos e dos possíveis regimes de escoamentos serão detalhadas à frente (PATEL, 2010).

### 2.2.1 Escoamento gás-líquido em tubos verticais

Diferentes regimes de escoamento podem ocorrer em diferentes vazões de gás e líquido e diferentes materiais. Quando o tubo é orientado verticalmente os regimes de escoamento possíveis são os representados na Figura 2. Os regimes de escoamento variam de escoamento de bolhas até escoamento disperso à medida em que aumenta a razão entre as vazões de gás e líquido no sistema.

Figura 2 – Padrões de escoamento gás-líquido em tubos verticais. (TAITEL *et al.*, 1980)



A uma baixa vazão de escoamento de gás ocorre o regime de escoamento de bolhas onde existe uma distribuição dispersa de bolhas dentro da fase contínua líquida. As bolhas podem variar de forma e tamanho, mas normalmente são

praticamente esféricas e muito menores que o diâmetro da coluna. Com o aumento da vazão de gás, há o aumento do tamanho das bolhas.

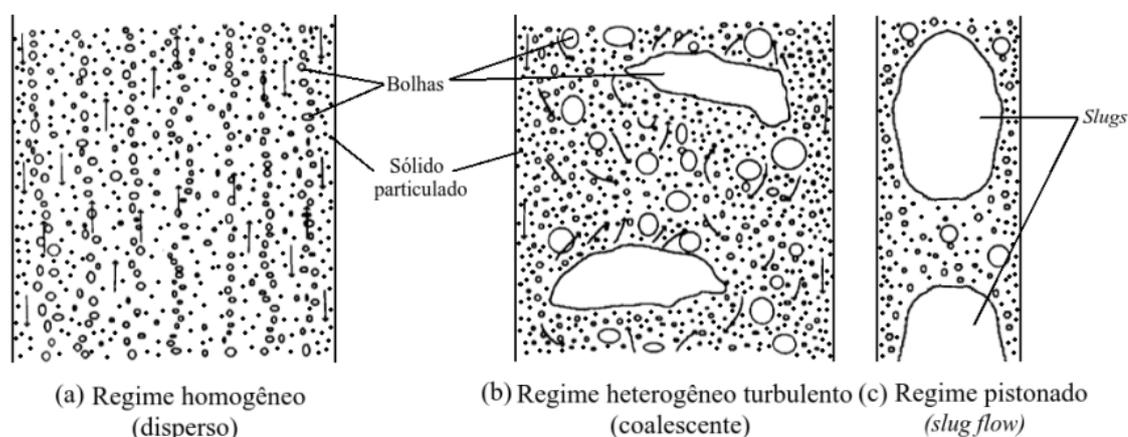
À medida em que a razão entre a vazão de gás e de líquido aumenta as bolhas de gás tendem a coalescer e formar bolhas maiores, formando o regime *slug* (pistonado), onde as bolhas têm o diâmetro aproximado do diâmetro da coluna. Aumentando a razão entre as vazões a estrutura do escoamento se torna instável e é formado o regime *churn*. Um maior aumento na razão torna a fase gás contínua no centro do tubo, formando um anel de líquido nas paredes do tubo, chamado regime de escoamento anular. O regime de escoamento com maior vazão de gás em relação à vazão de líquido é o escoamento disperso, com gotas de líquido dispersas em uma fase gás contínua.

### **2.2.2 Escoamento trifásico gás-sólido-líquido**

O escoamento de um sistema trifásico pode assumir vários tipos de fluidização. Neste trabalho o escoamento borbulhante com a fase líquida suportando os sólidos será investigado para sistemas onde o líquido e as partículas sólidas encontram-se inicialmente estagnados e a fase gás é alimentada no sistema pelo fundo do equipamento. Dentro deste modo de operação, três classificações podem ser atribuídas aos regimes, de forma similar à classificação do escoamento de colunas de bolhas em um sistema bifásico: escoamento de bolhas dispersas (homogêneo), escoamento de bolhas coalescentes (heterogêneo) e escoamento pistonado (*slug flow*). (RANADE, 2002)

Apesar da clara distinção entre esses regimes, apresentados na Figura 3, o ponto de transição entre eles ainda é de difícil determinação devido às complexidades inerentes às interações entre as fases que constituem o sistema. Fatores que interferem neste ponto de transição são as condições operacionais, a geometria do equipamento e as propriedades físicas das fases.

**Figura 3 – Regimes de operação encontrados em sistemas gás-líquido-sólido. (SILVA JÚNIOR, 2015)**



O escoamento homogêneo (Figura 3a) ocorre quando o sistema opera com uma velocidade superficial do gás abaixo de certo valor crítico, onde as bolhas apresentam tamanho quase uniforme e ascendem em trajetórias praticamente retilíneas. Neste regime os fenômenos de coalescência e quebra de bolhas praticamente não acontecem.

A medida em que a velocidade do gás ultrapassa certo valor as bolhas começam a interagir de forma mais frequente, de forma que começam a atuar fenômenos de quebra e coalescência de bolhas e turbulência, favorecendo o aparecimento de bolhas maiores. A partir deste valor crítico de velocidade passa a acontecer o regime heterogêneo (Figura 3b). O regime de operação pistonado ocorre quando há a formação de bolhas grandes, com diâmetro próximo ao diâmetro da coluna. É um regime que aparece em colunas de diâmetros pequenos, operando com alta velocidade de gás.

Alguns fatores que afetam o regime de operação foram listados por Silva Júnior (2015):

- Tamanho das partículas sólidas: para baixas velocidades da partícula, um aumento no tamanho da partícula aumenta a velocidade de transição do

líquido, enquanto que, para partículas com altas velocidades, o oposto tende a ocorrer.

- Efeito da pressão: o efeito da pressão na transição entre os regimes de escoamento é principalmente devido a variação nas características das bolhas, tais como, tamanho e distribuição do tamanho destas. Altas pressões atrasam a transição entre regimes.
- Concentração de sólidos: o aumento da concentração de sólidos provoca a diminuição da fração volumétrica de gás e retardam a transição.
- O comportamento da fração volumétrica de gás depende das velocidades do gás e do líquido, configuração do distribuidor do gás, geometria e dimensões do equipamento, propriedades físicas e reológicas do gás e do líquido, concentração de sólidos e propriedades físicas das partículas.

## **2.3 Características das fases dispersas**

### **2.3.1 Fase dispersa deformável – Gás**

A formação das bolhas em líquidos com a presença de partículas sólidas é diferente da formação em líquido puros, sendo influenciada por diversos fatores, tais como a geometria do distribuidor, propriedades físicas das fases, condições operacionais, entre outros. Uma maior concentração de sólidos geralmente leva a distribuições mais amplas do tamanho das bolhas e um aumento no tamanho do particulado leva a diminuição da bolha (WU, C. *et al.*, 2008).

Também foi verificado que o diâmetro das bolhas é praticamente independente da velocidade do gás para concentrações de sólidos acima de 5% e velocidades superficiais do gás acima de 0,1 m/s (WU, C. *et al.*, 2008).

Diversas correlações para estimativa do diâmetro médio das bolhas foram propostas para sistemas gás-líquido e gás-líquido-sólido. Dentre estas pode-se destacar a proposta por Akita e Yoshida (1974), a qual considera importantes fatores

relacionados aos padrões de escoamento de sistemas borbulhantes, tais como, diâmetro da coluna, velocidade superficial do gás e tensão superficial do líquido, conforme a equação:

$$d_B = 26D_C \left( \frac{D_C^2 \rho_l g}{\sigma} \right)^{-0,5} \left( \frac{D_C^3 \rho_l^2 g}{\mu_l^2} \right)^{0,12} \left( \frac{u_g}{\sqrt{g D_C}} \right)^{-0,12}$$

Onde  $d_B$  é o diâmetro da bolha,  $D_C$  é o diâmetro da coluna,  $\sigma$ ,  $\mu_l$  e  $\rho_l$  são a tensão superficial, a viscosidade dinâmica e a massa específica da fase líquida.

Considerando que além do tamanho das bolhas, o seu formato também influencia na dinâmica do escoamento trifásico, Clift (1978) propôs determinar as características morfológicas da bolha pela relação entre números adimensionais, classificando-as em três formatos principais: esférico, elipsoidal e touca, que influenciam diretamente na trajetória da bolha ao longo do escoamento.

Estudos posteriores a Clift (1978) mostraram que bolhas com diâmetro menor que 1mm, consideradas pequenas, têm aproximadamente a forma de uma esfera. Neste caso a tensão superficial é a força dominante, e as bolhas ascendem em trajetórias praticamente retilíneas. No caso de bolhas de tamanho médio, ambas as forças, de tensão superficial e de inércia são importantes, fazendo com que a trajetória seja geralmente elipsoidal. Concluiu-se que a viscosidade do líquido e a presença de contaminantes no meio líquido também influenciam a dinâmica das bolhas. A movimentação destas bolhas é extremamente complexa, exibindo características de movimentação secundária, tais como trajetórias em “zigzag” ou espiral, além de dilatações ou oscilações no formato. Para bolhas com diâmetro acima de 18mm, consideradas grandes, os efeitos inerciais do líquido predominam, e os efeitos da tensão superficial, viscosidade e contaminação do meio líquido podem ser desprezados. As bolhas grandes apresentam formato touca e usualmente seguem trajetórias praticamente retilíneas com algumas oscilações em suas bases (FAN *et al.*, 1989).

### 2.3.2 Fase dispersa rígida – Sólido particulado

A investigação das características do sólido particulado que compõe o sistema trifásico é de fundamental importância para o desenvolvimento, controle e otimização de equipamentos e reatores multifásicos. Quando um fluido, gás ou líquido escoar através dos vazios do leito estático a uma baixa velocidade, a estrutura deste permanece a mesma. Se esta velocidade de escoamento aumenta até uma velocidade mínima de fluidização, a força de arraste, juntamente com a força de empuxo, contrabalanceiam a força gravitacional, promovendo a movimentação das partículas sólidas, que passam a se comportar como fluido.

Um fator importante a ser investigado é a interação entre as partículas sólidas, a qual deve ser menos intensa em sistemas onde a fase líquida escoar como contínua, se comparada a sistemas onde a fase gás desempenha esse papel, desde que a viscosidade da fase líquida ofereça maior resistência ao particulado. Foi verificado que a injeção de gás na suspensão líquido-sólido aumenta a frequência das colisões entre partículas, porém acima de certa velocidade superficial do gás, a frequência de colisões diminui devido a expansão do leito e redução da fração volumétrica de sólidos. (DEL POZO *et al.*, 1993)

Além das colisões entre partículas, choques entre as partículas e a parede do equipamento também podem ocorrer. Estes dois tipos de choque influenciam as características fluidodinâmicas do sistema, através das propriedades de transporte (viscosidade colisional), contribuindo também para a dissipação de energia cinética. Além disso, o contato partícula-parede pode gerar consequências como erosão, sedimentação de resíduos ou deposição de filmes e espessamento de superfícies sólidas. (DEL POZO *et al.*, 1993)

## 2.4 Transferência de quantidade de movimento entre as fases

As forças interfaciais desempenham um papel fundamental nos escoamentos multifásicos, influenciando os padrões fluidodinâmicos. Em escoamentos borbulhantes se destacam as forças de empuxo e de arraste. Forças adicionais de interação, como as de sustentação, de dispersão turbulenta, de massa virtual ou de lubrificação da parede, podem ser consideradas na modelagem de tais sistemas, no entanto, geralmente representam influências secundárias, sendo a força de arraste a mais importante. (SOKOLICHIN *et al.*, 2004)

O arraste é atribuído a ação de uma força na mesma direção do escoamento, porém em sentido contrário, causada pelo atrito entre o corpo e o fluido, devido a velocidade relativa entre estes. Tratando uma partícula isolada, o atrito depende das suas características morfológicas e das características reológicas das fases envolvidas. Por este motivo o arraste entre as fases de um escoamento trifásico é sempre tratado em pares de fases, tornando possível equacioná-lo através de modelos de arraste desenvolvidos para escoamentos bifásicos.

A transferência de quantidade de movimento entre as fases gás-líquido e líquido-sólido será modelada somente pela força de arraste, através de modelos e correlações disponíveis na literatura. A transferência entre as fases gás e sólido não exerce grande influência sobre o escoamento (MORI, E. *et al.*, 2011) e será desconsiderada neste trabalho.

## 2.5 Turbulência

Especialmente em escoamentos multifásicos a turbulência apresenta um papel importante na transferência de massa, de calor e na dissipação das fases. Em sistemas gás-líquido e gás-líquido-sólido, as bolhas que ascendem pelo leito, induzem um aumento da turbulência na fase líquida. Sendo assim um estudo das propriedades turbulentas induzidas pela movimentação das bolhas, a formação de

rastró, e a presença de sólidos é fundamental na caracterização dos fenômenos de transportes em colunas de bolhas e sistemas fluidizados (CUI; FAN, 2004)

Cui e Fan (2004) ainda ressaltam que o estudo da turbulência em sistemas trifásicos é complicado, principalmente considerando a dificuldade na aquisição de dados desses sistemas, sendo assim, estuda-se prioritariamente a turbulência em escoamentos bifásicos gás-sólido (leito fluidizado) e gás-líquido (coluna de bolhas).

Especialmente quando se trata da comparação entre partículas sólidas com diferentes massas específicas, foi demonstrado que a diminuição desta propriedade provoca uma maior tendência a isotropia do sistema (KIARED *et al.*, 1989). Neste mesmo estudo foi constatado que o aumento da velocidade superficial do gás levou a um aumento da difusividade turbulenta.

Ainda observa-se que mesmo em sistemas onde a velocidade do gás é baixa (0,75 a 2,25 cm/s), a turbulência induzida pelas bolhas é significativa, e maior do que os fenômenos de turbulência induzidos pelo movimento do líquido, e que a presença de sólidos no leito, de uma forma geral, atenua a turbulência na fase líquida. Desta forma, a modelagem dos fenômenos de turbulência em sistemas trifásicos é essencial para representar o fenômeno, mesmo em sistemas com número de Reynolds baixo.

## **2.6 Estudos experimentais para reator de lama trifásico**

Durante uma década a Universidade de Amsterdã desenvolveu uma série de estudos experimentais com foco nos parâmetros de um reator de lama. Foram construídos uma variedade de modelos com diferentes equipamentos e condições operacionais, através dos quais foi possível entender melhor o funcionamento do reator de lama, bem como a influência de cada aspecto de um projeto.

Krishna e Sie (2000) sintetizaram em um único documento os resultados destes estudos, permitindo uma visão mais ampla e completa do trabalho desenvolvido. Concluiu-se que uma maior concentração de sólidos dentro do reator faz aumentar a

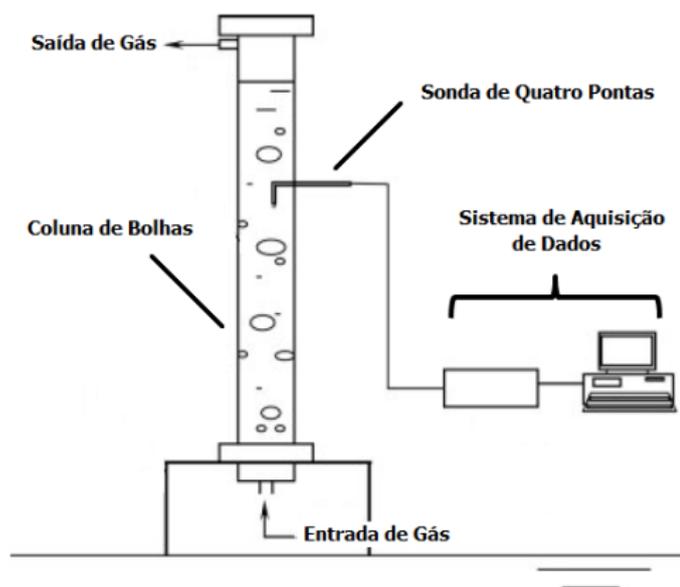
fração de gás retida na lama, e que partículas finas de catalisador (até 50  $\mu\text{m}$ ) se misturam bem com o líquido e a lama pode ser considerada pseudo-homogênea. Além disso, a concentrações de sólido maiores que 40% praticamente não há bolhas pequenas, prejudicando o contato entre as fases. Foi estudada a influência da pressão na fluidodinâmica do sistema, e pressões elevadas aumentaram a fração de gás retida na lama significativamente. Aspectos da recirculação que acontece dentro do reator foram enumerados, ressaltando a influência do diâmetro do reator na dinâmica dos fluidos.

Ainda na Universidade de Amsterdã, outras configurações para o reator de lama foram testadas. Maretto e Krishna (2001) construíram um reator de lama dividido em estágios e com tubos de resfriamentos, cujo objetivo era evitar a recirculação de fluido dentro do reator, promover a isotermicidade do sistema e manter o catalisador uniformemente distribuído na lama. Foi observado que, para alcançar taxas de conversão de até 95%, a velocidade superficial do gás deveria ser limitada a 0,3 m/s.

Com o objetivo de estudar o efeito da escala do projeto e desenvolver um método para modificar a escala, Forret *et al.* (2006), realizaram uma série de experimentos, com modelos de reatores de lama com diâmetros de 0,15, 0,40 e 1 metro de diâmetro, onde foram feitas medições de fração de gás, velocidade do líquido e grau de mistura da lama. Foi descrita a dinâmica de circulação de fluidos nos modelos de diferentes diâmetros e foi descoberto que a recirculação ocorre em grande e pequena escala, e também que a fração total de gás retido dentro da lama não é afetado pelo diâmetro da coluna, dentro do universo estudado.

A fim de estudar experimentalmente a fluidodinâmica de um reator de lama, Wu *et al.* (2008) construiu um modelo de bancada (modelo do reator de lama em escala reduzida). Foi construído um equipamento de 1,05 m de altura e 0,102 m de diâmetro, utilizando ar, água e alumina para representar as fases gás, líquida e sólida presentes no reator. O foco deste trabalho foi um estudo aprofundado das bolhas e de seu comportamento em diferentes vazões de gás e diferentes frações de sólido. As medições foram feitas em um único ponto ao longo da coluna, por uma sonda ótica de quatro pontos, conforme pode ser observado na Figura 4.

Figura 4 – Esquema do experimento realizado por Wu et al. (2008).



As medições puderam ser feitas ao longo do diâmetro da coluna, mas apesar disso, os dados experimentais não foram apresentados com seus respectivos erros e limitações. A grande variabilidade dos dados com a mudança da posição da sonda e a assimetria de alguns dados é incentivo para que novos experimentos sejam realizados.

Quanto às informações inferidas pelos pesquisadores, foi possível notar inconsistências quanto ao método para calcular a fração total de gás na coluna. Uma vez que é considerada uma altura final fixa para o leito, e uma altura inicial não determinada para cada experimento, não foi possível determinar o volume de líquido dentro da coluna, ou o volume de gás final.

Apesar das limitações deste estudo, Wu *et al.* (2008) chegou a conclusões importantes:

- a) Para o regime de bolhas dispersas, a baixas velocidades de gás, o tamanho de bolha permanece constante ao longo do raio.
- b) A baixas velocidades de gás, o perfil de velocidade das bolhas não varia significativamente com a fração de sólidos.

## 2.7 Simulações computacionais para escoamento da coluna de bolhas trifásica

Uma outra forma de estudar problemas que envolvem escoamento de fluidos, como o reator de lama em questão, é a utilização de fluidodinâmica computacional – CFD. Com o uso deste artifício é possível realizar um maior número de testes, com configurações variadas, poupando tempo e materiais de laboratório. Aliado a resultados experimentais e estudo aprofundado dos fenômenos que governam o escoamento, o CFD traz resultados muito próximos à realidade e permite testes mais ousados e com riqueza de detalhes. Por este motivo muitos dos dados gerados por experimentos foram incorporados às simulações computacionais e permitiram ampliar o conhecimento sobre o escoamento trifásico tratado.

O grupo de estudos da Universidade de Amsterdã (KRISHNA *et al.*, 2000) utilizou CFD para desenvolver uma estratégia de mudança de escala para o reator de lama operando em regime turbulento. Foram utilizados os dados experimentais de colunas com diâmetro de 0,1 a 0,63 m para validar os gerados por um software comercial. Foram comparadas simulações 2D simétricas ao eixo e 3D sem simetria, com colunas de diâmetros variados (0,14 a 6 m), diferentes velocidades superficiais de gás (0,019 a 0,35 m/s) e dois tipos de líquido (água e óleo de Tellus). Não foram testadas simulações 2D sem eixo de simetria. Para os valores de fração total de gás na lama e velocidade das fases no centro da coluna, a simulação 2D teve resultados satisfatórios. Entretanto, por este estudo concluiu-se que assumir um eixo de simetria no sistema leva a resultados errôneos e as simulações tridimensionais representaram o sistema com certa satisfação.

Posteriormente, em uma continuação deste estudo (BATEN, VAN; KRISHNA, 2004) foram feitas novas simulações 2D simétricas ao eixo e 3D utilizando o modelo euleriano para colunas de 0,38 a 10 metros de diâmetro. Os autores mostraram que as simulações 3D levaram até 65 dias para serem finalizadas, cada uma, e que os resultados das simulações 2D simétricas foram satisfatórios para fração total de gás e velocidades centrais.

Wu e Gidaspow (2000) modelaram e simularam matematicamente um reator de lama para a produção de metanol. Para este trabalho foi desenvolvido um simulador 2D de um reator de 8 m de altura e 0,57 m de diâmetro, que previu o movimento do catalisador, a taxa de produção de metanol, a troca de calor, a temperatura granular e a energia cinética turbulenta do sistema com eficiência. Para este trabalho foi dada maior importância a parâmetros e modelos da simulação numérica, uma vez que não haviam dados experimentais do mesmo grupo de trabalho para efeitos de validação do modelo.

Partindo do simulador desenvolvido por Wu e Gidaspow (2000) e dos parâmetros do reator estudados, Gamwo *et al.* (2005) estudaram a influência do tamanho do catalisador na fluidodinâmica do sistema e, conseqüentemente, na eficiência da reação. Mantendo o modelo 2D, concluiu-se que para o reator tratado (8 m de altura e 0,57 de diâmetro), o tamanho da partícula sólida deverá estar entre 60 e 70  $\mu\text{m}$ . Este valor está acima de 50  $\mu\text{m}$ , e, portanto não é pequeno suficiente para se distribuir homogeneamente pela lama sem influência do movimento do gás.

A partir dos dados experimentais e das conclusões obtidas por Wu *et al.* (2008) foi possível iniciar uma nova fase da simulação numérica de reatores de leito de lama. Embora já houvessem simulações numéricas de reatores de lama anteriormente (GAMWO *et al.*, 2005; GIDASPOW *et al.*, 2015; WU, Y.; GIDASPOW, 2000), com dados para comparação, passa a ser possível desenvolver modelos que se adequem melhor à realidade (SILVA JÚNIOR, 2015; MORI, E. *et al.*, 2011).

Mori *et al.* (2011) utilizou-se da técnica de Fluidodinâmica Computacional para conduzir simulações tridimensionais e transientes para descrever a hidrodinâmica de um sistema gás-líquido-sólido em uma coluna de bolhas e confrontou seus dados com os obtidos por Wu *et al.* (2008). Foi possível comprovar a capacidade da ferramenta computacional em descrever corretamente o sistema. Também foram explorados os modelos de arraste gás-líquido e líquido-sólido disponíveis no software comercial e os modelos de turbulência, para determinar os mais adequados. Outra contribuição deste trabalho foi a utilização de uma aproximação geométrica para a entrada de gás na coluna, tornando os cálculos desta região mais simples e adequadamente eficientes.

Posteriormente, Silva Júnior (2015) utilizou das conclusões e aproximações de Mori *et al.* (2011) para explorar, também tridimensionalmente, o papel do arraste gás-sólido, a turbulência induzida pelas bolhas e o balanço populacional de bolhas. Foram estudadas duas velocidades e dois valores de concentração inicial de sólidos, gerando quatro casos que foram analisados a partir das informações de fração volumétrica de gás local, fluxo mássico de gás local e perfil de fração volumétrica de sólidos no final do tempo de simulação. Neste estudo, a correlação para o coeficiente de arraste gás-líquido com melhor resultado para baixas vazões de gás foi a correlação de Grace (1976). Quanto à correlação para o coeficiente de arraste líquido-sólido foram utilizadas correlações que consideram o sólido como uma partícula esférica, produzindo bons resultados. Foi ressaltada a necessidade de se analisar a influência das propriedades das partículas sólidas no comportamento do leito de lama.

O trabalho de Rzehak *et al.* (2017) buscou realizar experimentos para colunas de bolhas que validassem as equações de fechamento do modelo matemático tridimensional proposto em suas simulações. Utilizando uma versão customizada do software comercial CFX foram incluídos na modelagem os fenômenos de força de sustentação (força *lift*), força de massa virtual, força de parede e dispersão da turbulência, obtendo resultados satisfatórios. Observou-se que nas simulações os valores de velocidade do líquido se apresentaram sistematicamente 20% abaixo dos resultados experimentais, e não foram encontradas razões para isto.

Já o trabalho de Bhusare *et al.* (2017), que também busca validar modelos numéricos com seus experimentos, utilizou o software OpenFOAM, e validou estes resultados com simulações no ANSYS *Fluent*. Foram testadas configurações do reator que incluem uma variedade de vazões de entrada de gás, com e sem tubos internos de resfriamento, obtendo resultados satisfatórios. Neste trabalho propôs-se utilizar uma entrada de gás não uniforme, através de toda a seção da base, conforme o trabalho de Vitankar e Joshi (2002).

Duas novas configurações para o reator de lama foram desenvolvidas utilizando somente ferramentas CFD:

Gamwo *et al.* (2003), ao modelar (2D) e simular um reator de lama em utilização descobriu uma concentração de sólidos no fundo do equipamento que é desfavorável a eficiência do reator. A partir desta informação desenvolveu um novo modelo de reator, rearranjando os trocadores de calor do equipamento, favorecendo uma maior concentração do catalisador no topo do equipamento, mantendo a eficiência da reação ao longo da coluna de bolhas.

Gidaspow *et al.* (2015) utilizou um modelo CFD 2D para projetar um novo tipo de reator de lama, sem tubos de resfriamento, a fim de reduzir o custo de produção. O novo reator é de escala industrial (30 m de altura e 7 m de diâmetro), capaz de produzir 50000 bbl/d. O projeto utiliza partículas de catalisador maiores (500  $\mu\text{m}$ ) para eliminar bolhas grandes e trabalha com entrada de gás através de jatos, para auxiliar a manutenção da turbulência e a uniformização da temperatura ao longo do reator.

### **3 MODELAGEM**

#### **3.1 Modelagem Euler-Euler para escoamentos multifásicos - Modelo hidrodinâmico**

Em escoamento multifásico envolvendo uma fase sólida, geralmente são feitas simplificações e aproximações para tratar a dinâmica de fluidos. Existem duas abordagens para o cálculo numérico de fluxo multifásico: abordagem Euler-Lagrange e abordagem Euler-Euler.

Na abordagem Euler-Lagrange, a fase fluida é tratada como contínua, sendo resolvida pela equação de Navier-Stokes, enquanto a fase sólida é tratada como discreta e possui sua trajetória computada individualmente, podendo trocar quantidade de movimento, massa e energia com a fase fluida. Esse modelo é geralmente aplicado para baixa fração de fase discreta, pois assume que a fase discreta não exerce influência na fase contínua (RANADE, 2002).

Na abordagem Euler-Euler as fases são tratadas como contínuos interpenetrantes, assim o volume de uma fase não pode ser ocupado pela outra. As frações volumétricas são assumidas como funções contínuas de espaço e tempo, e sua soma é igual a um. Assim, as equações de conservação são aplicadas para ambas as fases, e o fechamento destas é obtido por relações constitutivas e de informações empíricas (RANADE, 2002).

Existem três diferentes modelos sob a abordagem Euler-Euler que podem ser aplicados a escoamentos multifásicos: o modelo de volume de fluidos, o modelo de mistura e o modelo de Euler. Destes, o modelo de Euler é o mais adequado para suspensão de partículas e colunas borbulhantes (ANSYS, 2013), por resolver um conjunto de equações da continuidade e quantidade de movimento para cada fase, por ter acoplamento da quantidade de movimento através dos coeficientes de pressão e troca na interface, e por ter as propriedades para fluxos granulares obtidas pela aplicação da teoria cinética.

### 3.2 Hipóteses da modelagem

O sistema em estudo consiste no escoamento gás-sólido-líquido em um reator de lama. O gás entra por jatos na região inferior do reator, passa por uma fase líquida, na qual o catalisador da reação está suspenso na forma de grãos, a reação acontece e o gás segue para a parte superior do reator, livre de sólidos e líquidos, e sai do sistema. Este sistema foi representado na Figura 1.

Para o estabelecimento do modelo algumas hipóteses são adotadas. As principais são:

- a) Regime de escoamento transiente;
- b) Abordagem Euler-Euler multi-fluido (fases contínuas e interpenetrantes);
- c) As três fases presentes são incompressíveis;
- d) Regime de escoamento do tipo bolhas dispersas, homogêneo, devido à baixa velocidade de entrada de gás;
- e) Partículas sólidas consideradas esféricas e de diâmetro uniforme;
- f) Fase dispersa deformável (gás) considerada com diâmetro constante;
- g) Não há transferência de massa entre as fases;
- h) Não há transferência de calor entre as fases e o sistema é considerado isotérmico;
- i) Não há reações químicas;
- j) Não há troca de quantidade de movimento entre as bolhas de gás e as partículas de sólido.

### 3.3 Equacionamento

A abordagem Euler-Euler emprega as leis de conservação da massa e quantidade de movimento para cada fase levando-se em consideração o volume que cada uma ocupa no sistema. O modelo hidrodinâmico do escoamento gás-líquido-sólido é baseado nos princípios de conservação de massa e momento para cada fase.

Os parâmetros e modelos empregados nas simulações desta pesquisa foram selecionados de acordo com as características do reator de lama, dos materiais envolvidos e com base em estudos semelhantes (GAMWO *et al.*, 2003, 2005; GIDASPOW *et al.*, 2015; SILVA JÚNIOR, 2015; VAN WACHEM, 2000; WU, C. *et al.*, 2008; WU, Y.; GIDASPOW, 2000). A Tabela 1 apresenta as equações principais do modelo e as equações de fechamento.

**Tabela 1 – Equações principais e de fechamento do modelo matemático**

continua

---

**Balço de massa das fases**

$$\text{Gás} \quad \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g) = 0$$

$$\text{Líquido} \quad \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_l \rho_l) + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \mathbf{v}_l) = 0$$

$$\text{Sólido} \quad \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s) = 0$$

---

**Conservação das fases**

$$\varepsilon_g + \varepsilon_l + \varepsilon_s = 1$$

---

**Balço de quantidade de movimento**

Líquido

$$\frac{\partial(\varepsilon_l \rho_l \mathbf{v}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \mathbf{v}_l \mathbf{v}_l) = -\varepsilon_l \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_l + \varepsilon_l \rho_l \mathbf{g} + [K_{gl}(\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_l)] + [K_{sl}(\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_l)]$$

$$\bar{\tau}_l = \varepsilon_l \mu_s (\nabla \mathbf{v}_l + (\nabla \mathbf{v}_l)^T) + \varepsilon_l (\lambda_l - \frac{2}{3} \mu_l) \nabla \cdot \mathbf{v}_l \bar{\mathbf{I}}$$

Gás

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = -\varepsilon_g \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_g + \varepsilon_g \rho_g \mathbf{g} + [K_{lg}(\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_g)]$$

$$\bar{\tau}_g = \varepsilon_g \mu_g (\nabla \mathbf{v}_g + (\nabla \mathbf{v}_g)^T) + \varepsilon_g (\lambda_g - \frac{2}{3} \mu_g) \nabla \cdot \mathbf{v}_g \bar{\mathbf{I}}$$


---

---

Sólido

$$\frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = -\varepsilon_s \nabla P + \nabla P_s + \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_s + \varepsilon_s \rho_s \mathbf{g} + [K_{ls}(\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_s)]$$

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}_s = \varepsilon_s \mu_s (\nabla \mathbf{v}_s + (\nabla \mathbf{v}_s)^T) + \varepsilon_s (\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s) \nabla \cdot \mathbf{v}_s \bar{\mathbf{I}}$$

$$P_s = \varepsilon_s \rho_s \theta_s + 2 \rho_s \theta_s (1 + e_{ss}) \varepsilon_s^2 g_0$$


---

**Coeficiente de arraste entre as fases**

Líquido e gás

$$K_{gl} = \frac{\rho_g f}{6 \tau_g} d_g A_i, \tau_g = \frac{\rho_g d_g^2}{18 \mu_g}, A_i = \frac{6 \varepsilon_g (1 - \varepsilon_g)}{d_g}$$

Líquido e sólido

$$K_{sl} = \frac{\varepsilon_s \rho_s f}{\tau_s}, \tau_s = \frac{\rho_s d_s^2}{18 \mu_s}$$


---

Temperatura granular

$$\theta_s = \frac{1}{3} u_s'^2$$

onde  $u_s'$  é a flutuação da velocidade média dos sólidos

Viscosidade *bulk*

$$\lambda_s = \frac{8}{3} (1 + e_{ss}) \varepsilon_s^2 \rho_s d_s g_0 \sqrt{\frac{\theta}{\pi}}$$

Viscosidade cisalhante

$$\mu_{s,cis} = \frac{4}{5} (1 + e_{ss}) \varepsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 \sqrt{\frac{\theta}{\pi}}$$

Distribuição radial (LUN;  
SAVAGE, S. B., 1986)

$$g_0 = \left(1 - \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,max}}\right)^{-2,5 \varepsilon_{s,max}}$$


---

### 3.3.1 Arraste líquido-sólido

O arraste entre o meio contínuo líquido e as partículas sólidas dispersas neste representa uma parcela importante da transferência de quantidade de movimento entre as fases. As partículas sólidas são consideradas esferas perfeitas e a correlação de Schiller e Naumann (1935) foi utilizada para descrever esta interação.

A correlação de Schiller Naumann é a mais simples das interações entre fluidos, pois calcula o coeficiente de arraste  $C_D$  e o número de Reynolds considerando a fase dispersa uma esfera, conforme a Tabela 2.

**Tabela 2 – Correlação de Schiller e Naumann (1935) para o arraste líquido-sólido.**

$$f = \frac{C_D Re}{24}$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24(1 + 0,15Re^{0,687})}{Re} & \text{se } Re \leq 1000 \\ 0,44 & \text{se } Re > 1000 \end{cases}$$

$$Re = \frac{\rho_l |v_s - v_l| d_s}{\mu_l}$$

### 3.3.2 Arraste gás-líquido

Foram testadas três correlações para o arraste gás-líquido.

- A correlação de Grace (1976) considera a deformação das bolhas em três formatos: esférico, elipsoidal e touca. Para cada formato ela propõe um equacionamento diferente, conforme a Tabela 3.

Tabela 3 – Correlação de Grace (1935) para o arraste gás-líquido.

---


$$f = \frac{C_D Re}{24}$$

$$Re = \frac{\rho_l |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_l| d_g}{\mu_l}$$

$$C_d = \max(\min(C_{D_{elipsoidal}}, C_{D_{touca}}), C_{D_{esférico}})$$


---

Esférico	$C_{D_{esférico}} = \begin{cases} 24/Re & Re < 0,01 \\ 24(1 + 0,15Re^{0,687})/Re & Re \geq 0,01 \end{cases}$
Touca	$C_{D_{touca}} = \frac{8}{3}$
Elipsoidal	$C_{D_{elipsoidal}} = \frac{4}{3} \frac{g d_g (\rho_l - \rho_g)}{U_t^2 \rho_l}$

---

Onde

$$U_t = \frac{\mu_l}{\rho_l d_g} Mo^{-0,149} (J - 0,857), \quad Mo = \frac{\mu_l^4 g (\rho_l - \rho_g)}{\rho_l^2 \sigma^3}$$

$$J = \begin{cases} 0,94H^{0,757} & 2 < H \leq 59,3 \\ 3,42H^{0,441} & H > 59,3 \end{cases}, \quad H = \frac{4}{3} Eo Mo^{0,149} \left( \frac{\mu_l}{\mu_{ref}} \right)^{0,14}$$

$$Eo = \frac{g(\rho_l - \rho_g)d_g^2}{\sigma}, \quad \mu_{ref} = 0,0009 \frac{kg}{m.s}$$


---

- A correlação de Tamakasa e Tomiyama (1999) foi desenvolvida especialmente para escoamentos gás-líquido, onde as bolhas podem assumir várias formas e é mais simples que a correlação de Grace 1935. A Tabela 4 apresenta o cálculo do arraste para esta correlação.

Tabela 4 – Correlação de Tamakasa e Tomiyama (1999) para o arraste gás-líquido.

---


$$f = \frac{C_D Re}{24}, \text{ onde}$$


---

---


$$Re = \frac{\rho_l |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_l| d_B}{\mu_l}$$

$$C_D = \max \left( \min \left( \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,687}), \frac{72}{Re} \right), \frac{8}{3} \frac{Eo}{Eo + 4} \right)$$

$$Eo = \frac{g(\rho_l - \rho_g) d_B^2}{\sigma}$$


---

- Também foi testada uma correlação mais simples, que não considera a mudança no formato das bolhas, para esta interação de arraste, a fim de demonstrar a necessidade da inclusão desta consideração na modelagem da coluna de bolhas. Para isto foi utilizada a correlação de arraste de Schiller e Naumann (1935), apresentada anteriormente.

### 3.3.3 Arraste gás-sólido

O arraste gás-sólido foi tratado de duas maneiras diferentes:

- Foi considerado muito pequeno e excluído da modelagem. Considerou-se que a troca de momento entre estas duas fases é muito pequena e não influencia na dinâmica do escoamento, conforme feito por Mori *et al.* (2012).
- Modelou-se o arraste gás-sólido pela mesma correlação de arraste adotada para a interação sólido-líquido, a correlação de arraste de Schiller e Naumann (1935).

## 3.4 Modelagem da turbulência

Para modelar a turbulência é usado a técnica de RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*), no qual as equações de Navier-Stokes são decompostas em valores médios no tempo e sua flutuação. Para a velocidade temos:

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

O mesmo princípio é aplicado a pressão, energia e concentração das fases. Estas expressões são inseridas nas equações de transporte e surgem termos extras nestas equações devido às interações entre as várias flutuações promovidas pela turbulência. Esses termos podem ser modelados por diferentes tipos de modelos, desde simples modelos algébricos, passando por modelos que utilizam equações de transporte, até modelos de segunda ordem.

Aqui será empregado o modelo de duas equações  $\kappa - \epsilon$ . Este modelo apresenta robustez, economia e precisão razoável para uma ampla gama de fluxos turbulentos, justificando sua frequente utilização mesmo nas simulações da área industrial.

Para calcular as propriedades dos fluidos a serem utilizadas na modelagem da turbulência para o escoamento multifásico adotou-se o modelo de mistura. Este modelo utiliza valores médios das propriedades dos fluidos para equacionar a energia cinética turbulenta ( $\kappa$ ) e sua dissipação ( $\epsilon$ ), e pela revisão da literatura se mostrou adequado ao sistema tratado neste trabalho com base nas concentrações das fases dispersas no fluido. Foram testadas também outras duas abordagens para o tratamento multifásico da turbulência: o modelo disperso que considera apenas a turbulência da fase contínua, e o modelo por fase, que equaciona a turbulência de cada fase separadamente. O modelo disperso é adequado para concentrações muito baixas da fase dispersa e o modelo por fase é adequado para concentrações muito altas da fase dispersa, próximas a 50% em volume, sendo este último modelo o mais oneroso computacionalmente.

Duas equações de transporte são adicionadas ao sistema de equações, uma para a energia cinética da turbulência ( $\kappa$ ) e outra para sua dissipação ( $\epsilon$ ). A viscosidade da turbulência é dada em função da energia cinética  $\kappa$ , e sua dissipação,  $\epsilon$ , sendo as duas últimas obtidas diretamente das equações de transporte. Estas equações e as

demais necessárias para o fechamento do sistema de equações que descrevem a turbulência estão dispostas na Tabela 5.

**Tabela 5 – Equacionamento do modelo de turbulência RNG  $\kappa - \epsilon$ .**

continua

---

**Energia cinética da turbulência -  $\kappa$**

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \kappa) + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m \kappa) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu_m + \frac{\mu_{t,m}}{\sigma_\kappa} \right) \nabla \kappa \right] + G_{\kappa,m} - \rho_m \epsilon + \Pi_{\kappa,m}$$

Onde  $C_\mu$  e  $\sigma_\kappa$  são constantes e  $\Pi_{\kappa,m}$  representa possíveis fontes de energia cinética.

---

**Dissipação da energia cinética da turbulência –  $\epsilon$**

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \epsilon) + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m \epsilon) \\ = \nabla \cdot \left[ \left( \mu_m + \frac{\mu_{t,m}}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + \frac{\epsilon}{\kappa} (C_{1\epsilon} G_{\kappa,m} - C_{2\epsilon} \rho_m \epsilon) + \Pi_{\epsilon,m} \end{aligned}$$

Onde  $\sigma_\epsilon$ ,  $C_{1\epsilon}$  e  $C_{2\epsilon}$  são constantes,  $\Pi_{\epsilon,m}$  representa possíveis fontes de dissipação de  $\kappa$ .

---

Termo de produção de energia cinética da turbulência

$$G_{\kappa,m} = \mu_{t,m} (\nabla \mathbf{v}_m + (\nabla \mathbf{v}_m)^T) : \nabla \mathbf{v}_m$$

Viscosidade turbulenta da mistura

$$\mu_{t,m} = C_\mu \rho_m \frac{\kappa^2}{\epsilon}$$

Massa específica da mistura

$$\rho_m = \epsilon_l \rho_l + \epsilon_g \rho_g + \epsilon_s \rho_s$$

Viscosidade molecular da mistura

$$\mu_m = \epsilon_l \mu_l + \epsilon_g \mu_g + \epsilon_s \mu_s$$


---

Tabela 5 – Equacionamento do modelo de turbulência *RNG*  $\kappa - \epsilon$ .

conclusão

---

Velocidade da mistura	$v_m = \frac{\epsilon_l \rho_l v_l + \epsilon_g \rho_g v_g + \epsilon_s \rho_s v_s}{\epsilon_l \rho_l + \epsilon_g \rho_g + \epsilon_s \rho_s}$
-----------------------	---

Constantes utilizadas no modelo de turbulência  $\kappa - \epsilon$  **de mistura**

$$C_{\mu} = 0,09 \qquad \sigma_{\kappa} = 1,0$$

$$C_{1\epsilon} = 1,44 \qquad \sigma_{\epsilon} = 1,3$$

$$C_{2\epsilon} = 1,92$$


---

### 3.5 Condições iniciais e de contorno

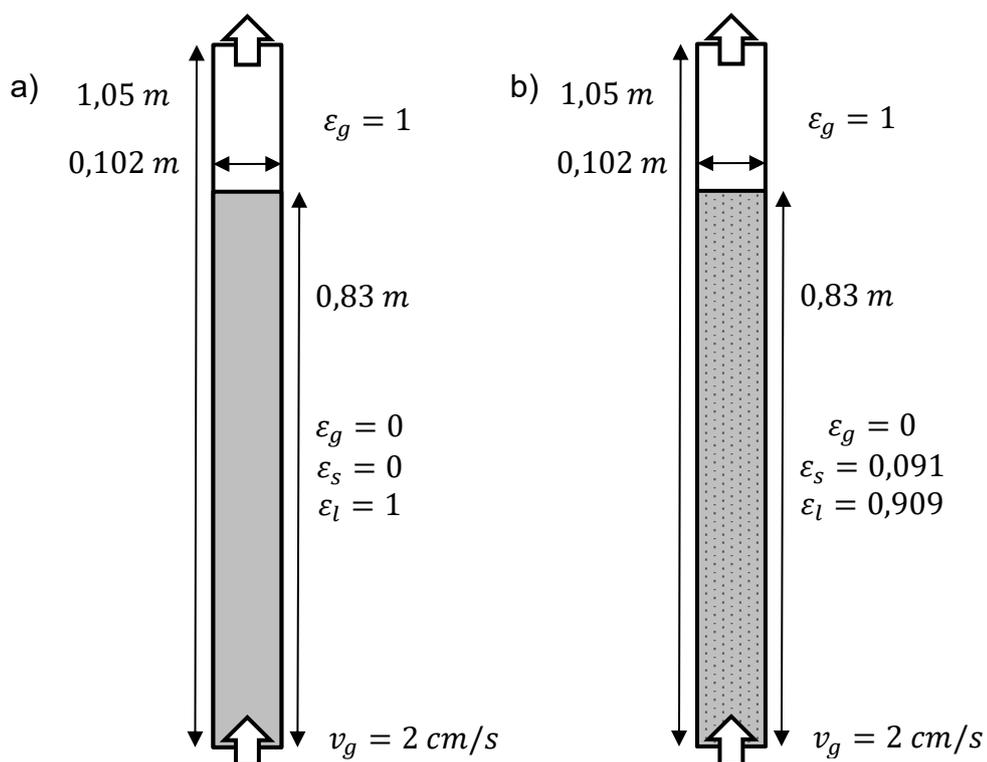
Para o início das simulações, assim como no início de um experimento, determina-se a condição inicial do equipamento. Para o caso tratado, a condição inicial é a configuração das fases no início do processo. A Tabela 6 apresenta as condições iniciais das fases e a Figura 5 apresenta a distribuição da fração volumétrica inicial das fases secundárias para os casos bifásicos (gás) e trifásicos (gás e sólido).

Tabela 6 – Condição inicial para os casos bifásicos e trifásicos.

	Altura inicial do leito	0,83m
	Fração de gás no leito	0
Casos bifásicos	Velocidade do gás no leito	0
	Velocidade do líquido	0
Casos trifásicos	Fração de gás no leito	0
	Velocidade do gás no leito	0
	Fração de sólido no leito	0,091

Velocidade do sólido	0
Velocidade do líquido	0

Figura 5 – Condições iniciais para fração volumétrica das fases: a) gás, para casos com duas e três fases. b) sólidos, para casos com três fases



As condições de contorno para a modelagem da coluna de bolhas são de três tipos: as que caracterizam a interação das fases com a parede, as que caracterizam o tipo de saída no topo do reator e a condição de contorno da entrada do reator, na base. As configurações para as paredes e a saída estão descritas na Tabela 7.

Tabela 7 – Condição de contorno para as paredes e a saída do reator.

Interação das fases com a parede	Gás	Sem escorregamento
	Líquido	Sem escorregamento
	Sólido	Coeficiente de especularidade: 0
Condição de contorno da saída	Fases: somente gás	Pressão: Aberto para atmosfera
Condição de contorno da entrada	Fases: somente gás	Velocidade superficial do gás: 0,02 m/s

A entrada do reator é normalmente uma malha perfurada ou uma sequência de jatos, que permitem somente a passagem do gás e mantém o leito dentro do reator. A modelagem desta condição em CFD é inviável, pois requer redução do tamanho do elemento de malha ao mesh da entrada (BHUSARE *et al.*, 2017). Por este motivo são utilizadas aproximações e simplificações para modelar esta entrada.

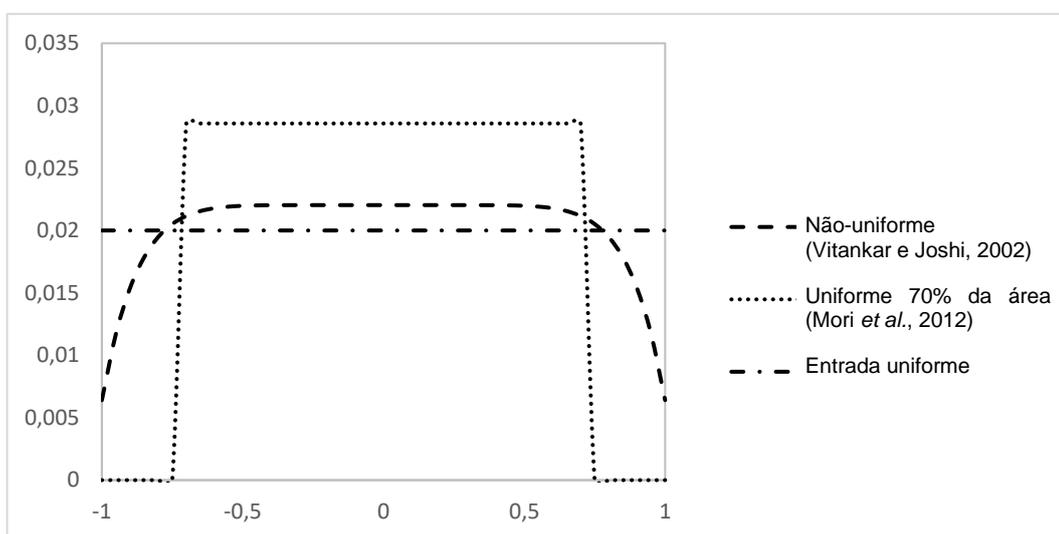
A entrada de gás será definida pela velocidade do gás na entrada e pelo tamanho da abertura em relação ao tamanho da base da coluna. Serão consideradas três tipos de entrada:

- Entrada Uniforme: Base do reator totalmente aberta para entrada de gás, com velocidade de entrada igual à velocidade superficial do gás.
- Entrada Uniforme em 70% da área: 70% da base do reator aberta para entrada de gás, com velocidade de entrada uniforme nesta região, mantendo a velocidade superficial do gás. Conforme Mori *et al.* (2012).
- Entrada Não-Uniforme: Base do reator totalmente aberta para a entrada de gás, com velocidade de entrada do gás obedecendo o perfil proposto por

Vitankar e Joshi (2002), mantendo-se a velocidade superficial do gás. Conforme utilizado por Bhusare *et al.*(2017).

A Figura 6 apresenta os perfis de velocidade propostos para a entrada de gás, parametrizados no raio, conforme a explicação.

**Figura 6 – Perfil da velocidade de entrada do ar na base da coluna de bolhas, conforme as propostas de Vitankar e Joshi (2002), Mori *et al.* (2012) e sem adaptação.**



### 3.5.1 Perfil de entrada proposto por Vitankar e Joshi (2002)

Vitankar e Joshi propuseram definir a condição de entrada de gás através de um perfil de entrada da fração volumétrica de gás, conforme apresentado na Tabela 8.

**Tabela 8 – Modelo de Vitankar e Joshi (2002) para entrada de gás no reator.**

$$\varepsilon_g = \frac{m + 2}{m} (\bar{\varepsilon}_g - \varepsilon_l)(1 - \eta^m) + \varepsilon_l$$

---

Distância radial adimensional

$$\eta = r/R$$

Parâmetro de inclinação

$$m = 2,188 \times 10^3 Re_g^{-0,598} Fr_g^{0,146} Mo_l^{-0,004}$$

$$Re_g = Dv_g(\rho_l - \rho_g)/\mu_l$$

$$Fr_g = v_g^2/gD$$

$$Mo_l = g\mu_l^4/(\rho_l - \rho_g)\sigma_l^3$$

---

Usando a relação entre este perfil de velocidade e a velocidade superficial de entrada de gás desejada, podemos traçar o perfil de velocidade de entrada no reator, conforme a Figura 6.

## 4 ABORDAGEM NUMÉRICA

A análise da dinâmica das fases dentro da coluna de bolhas é realizada numericamente com o auxílio da fluidodinâmica computacional (CFD), que consiste na utilização de técnicas numéricas em conjunto com recursos computacionais para estudar os fenômenos físicos que governam o escoamento de fluidos. De modo geral o CFD é a resolução das equações de conservação das propriedades transportadas sobre finitos volumes de controle através aplicação de métodos numéricos. Nesta pesquisa foi utilizado o pacote ANSYS Workbench 15.0, incluindo os pacotes *ANSYS Geometry*, *ANSYS Mesh*, *ANSYS Fluent* e *CFD-Post*.

As simulações foram resolvidas no Laboratório de Computação de Alto Desempenho da Universidade Federal do Espírito Santo, no Centro Universitário Norte do Espírito Santo (CEUNES/UFES). Os computadores utilizados foram dois Dell XPS 8900 com processador Intel Core i7, com 16GB de RAM instalada. As simulações bidimensionais levaram cerca de 7 dias cada e as tridimensionais levaram de 7 a 15 dias, dependendo da malha utilizada.

### 4.1 Parâmetros numéricos

A Tabela 9 apresenta os parâmetros do escoamento multifásico empregados em todos os casos analisados.

**Tabela 9 – Parâmetros e modelos numéricos para a fase sólida do escoamento multifásico.**

**Parâmetro**

**Modelo**

---

<b>Parâmetro</b>	<b>Modelo</b>
Fase sólida	Modelo granular
Modelo de temperatura granular	Propriedades das fases
Viscosidade granular	$10^{-5}$
Viscosidade granular <i>bulk</i>	0
Modelo de temperatura granular	Algébrico (SYAMLAL <i>et al.</i> , 1993)
Pressão de sólidos	Lun <i>et al.</i> (1984)
Distribuição Radial	Lun <i>et al.</i> (1984)
Módulo de elasticidade	Derived
Limite de empacotamento	0,63

Para os testes de turbulência foi utilizado o modelo *Realizable*  $\kappa - \epsilon$  utilizando o modelo multifásico de mistura. O tratamento da região próxima à parede foi o padrão do software. Empregou-se para os casos um critério de convergência de  $10^{-3}$  e o passo de tempo de  $10^{-3}$  s. O número máximo de iterações para cada passo de tempo foi de 50.

## 4.2 Algoritmos de discretização

O esquema de solução das equações escolhido foi o *pressure-based*, apropriado para escoamentos incompressíveis (ANSYS, 2013). Os demais algoritmos de discretização estão apresentados na Tabela 10.

Tabela 10 – Métodos de Solução utilizados nas simulações numéricas.

<b>Equação</b>	<b>Método de solução</b>
<b>Acoplamento pressão-velocidade</b>	<i>Phase Coupled SIMPLE</i>
<b>Discretização espacial</b>	
Gradiente	<i>Least Squares Cell Based</i>
Quantidade de movimento	<i>First Order Upwind</i>
Fração Volumétrica	<i>First Order Upwind</i>
Energia cinética da turbulência	<i>First Order Upwind</i>
Taxa de dissipação da turbulência	<i>First Order Upwind</i>
<b>Formulação Transiente</b>	<i>First Order Upwind</i>

## 5 DESCRIÇÃO DO CASO E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

O comportamento das fases dentro do reator de lama trifásico é modelado a partir de uma coluna de bolhas de 1,05 m de altura e 0,102 m de diâmetro, preenchida com o leito até aproximadamente 0,9 m de altura e com velocidade superficial de gás de 0,02 m/s. A geometria deste reator foi adaptada do trabalho Wu *et al.* (2008), do qual serão extraídos os dados experimentais para validar a modelagem. O gás utilizado é o ar, e o fluido que compõe o leito é a água. O catalisador é um sólido não especificado, dado que suas propriedades variam.

Neste trabalho, a geometria da coluna de bolhas será simulada em duas e três dimensões, com e sem a presença da fase sólida.

A dinâmica de funcionamento do reator está descrita no tópico 2.1 – Reator de lama para a Síntese de Fischer-Tropsch, e as condições iniciais e de contorno estão descritas no tópico 3.5 – Condições iniciais e de contorno. A fase líquida é considerada contínua e constituída por água. As fases gás e sólido são secundárias, constituídas por ar e um sólido não especificado, respectivamente. O sistema não está pressurizado.

A Tabela 11 resume as características do caso base e as variações feitas para estudar a fluidodinâmica da coluna de bolhas.

Tabela 11 – Características do caso base e dos demais casos.

Parâmetro	Caso Base	Variações
<b>Perfil de entrada de gás</b>	Vitankar e Joshi	Entrada total uniforme
		Entrada 70%
<b>Modelo de escoamento</b>	Turbulência modelo $\kappa - \epsilon$ de mistura	Laminar
<b>Massa específica do sólido</b>	2500 kg/m <sup>3</sup>	1500 kg/m <sup>3</sup>
		3100 kg/m <sup>3</sup>
<b>Diâmetro da partícula sólida</b>	65 $\mu\text{m}$	50 $\mu\text{m}$
		80 $\mu\text{m}$
		100 $\mu\text{m}$

## 5.1 Aspectos analisados

Para construir um modelo matemático no software que represente os dados experimentais foram realizados testes em aspectos que influenciam no comportamento das fases. Os testes realizados buscaram:

- Uma malha numérica que melhor represente os valores experimentais, com o menor gasto computacional possível;
- Fornecer dados sobre a dimensão necessária à malha, de modo a determinar se o ônus associado a uma simulação tridimensional traz bônus equivalente;
- Apresentar a influência da inclusão de modelos de turbulência na simulação numérica e apontar sua necessidade para descrever o escoamento de uma coluna de bolhas;

- d) Confrontar diferentes adaptações para o perfil de entrada de gás na coluna, visto que a forma de entrada real, do tipo aspersor, não é computacionalmente viável;
- e) Confrontar diferentes modelos de arraste para a interação gás-líquido;
- f) Analisar a influência da inclusão da modelagem do arraste gás-sólido na simulação;
- g) Mostrar a influência das diferentes abordagens multifásicas para o equacionamento da turbulência.

A partir do modelo criado é analisada a influência das características da partícula sólida na dinâmica da coluna de bolhas. As variáveis tratadas são a massa específica do sólido e o diâmetro do sólido. Também é avaliado o efeito da presença dessa fração de sólidos no caso estudado.

## **5.2 Variáveis resposta**

### **5.2.1 Quanto ao tempo**

Mediante os recursos de pós processamento do software de simulação e no intuito de produzir dados representativos as variáveis resposta apresentadas são sempre apresentadas como médias temporais, a não ser quando sinalizado que se tratam de resultados instantâneos.

A metodologia para obter os valores médio-temporais é a seguinte: As simulações foram rodadas até que se atingisse 30s de escoamento, garantindo que se atingisse um estado quase-estacionário, onde as propriedades variam dentro de uma média constante. A partir daí simula-se mais 100s de escoamento, dos quais se extrai os parâmetros para um resultado médio-temporal. Esta metodologia para a média temporal foi utilizada por Wu *et al.* (2008) em seu trabalho experimental e nos trabalhos de simulação numérica de Mori *et al.* (2011) e Silva Júnior (2015). Foi também verificado que os valores de altura do leito e fração de ar dentro do leito pouco variam a partir de 20 segundos.

A utilização de um tempo tão grande para calcular os valores médio-temporais justifica-se por proporcionar resultados representativos da média e que pouco variam a partir deste ponto.

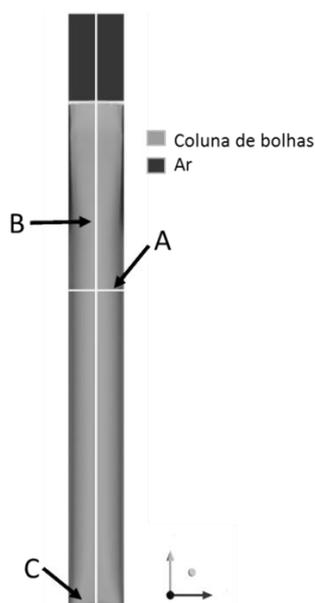
### 5.2.2 Quanto à localização

A fim de extrair dados comparáveis aos dados experimentais presentes na literatura, os dados de velocidade e fração volumétrica são representados pelos valores obtidos à altura de 0,56 m de altura da coluna, a partir da entrada (Linha A, Figura 7), assim como os resultados apresentados por outros estudos que utilizam esta geometria do reator. (MORI, E. *et al.*, 2011, 2012; SILVA JÚNIOR, 2015; WU, C. *et al.*, 2008)

Os dados de fração volumétrica de sólidos que avaliam sua distribuição ao longo da altura da coluna foram retirados ao longo de uma linha vertical no centro do reator que segue da entrada até o todo, a 1,05 m de altura. (Linha B, Figura 7)

Além destas há os perfis de entrada, inseridos na base da coluna, representada pela linha C, na Figura 7.

**Figura 7 – Geometria da coluna de bolhas com representação das linhas em que foram extraídos os resultados.**



## **6 RESULTADOS E DISCUSSÕES**

Este capítulo apresenta os resultados das simulações e cenários propostos. Será dividido em duas partes. A primeira parte consiste em uma sequência de testes que formarão o modelo matemático e numérico para as simulações, incluindo estudo de malha 2D e 3D, avaliação da dimensão do modelo, avaliação do modelo viscoso do escoamento e teste de diferentes condições para a entrada de gás na coluna. Na segunda parte será avaliada a influência de diferentes valores de massa específica dos sólidos e de diferentes valores de diâmetro de sólidos na fluidodinâmica do processo.

### **6.1 Levantamento do modelo**

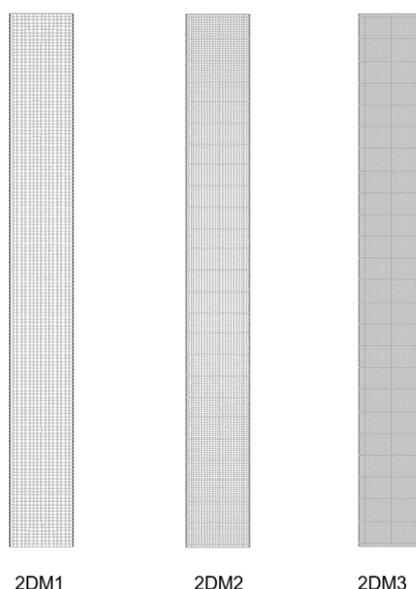
A princípio, o problema foi abordado sem a inclusão do sólido, em um modelo de dois fluidos, utilizando os dados experimentais de Wu *et al.* (2008) para validar as modelagens 2D e 3D abordadas.

#### **6.1.1 Teste de malha**

##### **Teste de malha 2D**

A Tabela 12 mostra as características das malhas 2D testadas, que se diferem pelo seu refinamento. A representação das malhas estudadas é exibida na Figura 8.

**Figura 8 – Malhas bidimensionais estudadas. Respectivamente malhas 2DM1, 2DM2 e 2DM3.**



**Tabela 12 – Parâmetros de qualidade das malhas bidimensionais.**

<b>2D</b>	<b>N° de nós</b>	<b>N° de elementos</b>	<b>Qualidade</b>	<b>Aspecto de raio</b>	<b>Tamanho aprox. do elemento</b>
<b>M1</b>	2805	2624	0,9999	1,0043	0,0064
<b>M2</b>	6200	5928	0,9994	1,0002	0,00425
<b>M3</b>	13727	13320	0,9995	1,0016	0,00284

A Figura 9 apresenta o perfil de distribuição radial da velocidade do ar experimental e simulado previsto com malhas bidimensionais. Nota-se que o refinamento da malha não apresenta efeito significativo sobre a estimativa dos dados de velocidade. Entretanto, para o perfil de distribuição radial dos valores de fração volumétrica do ar, observa-se na Figura 10 que a malha 2DM3 (malha mais refinada) apresenta melhor estimativa de dados. Portanto, para a coluna investigada, a malha 2DM3 pode ser utilizada para representar os perfis de velocidade e fração de ar.

Figura 9 – Perfil de distribuição médio-temporal radial da velocidade do ar experimental e simulados para diferentes malhas 2D, à altura de 0,56 m.

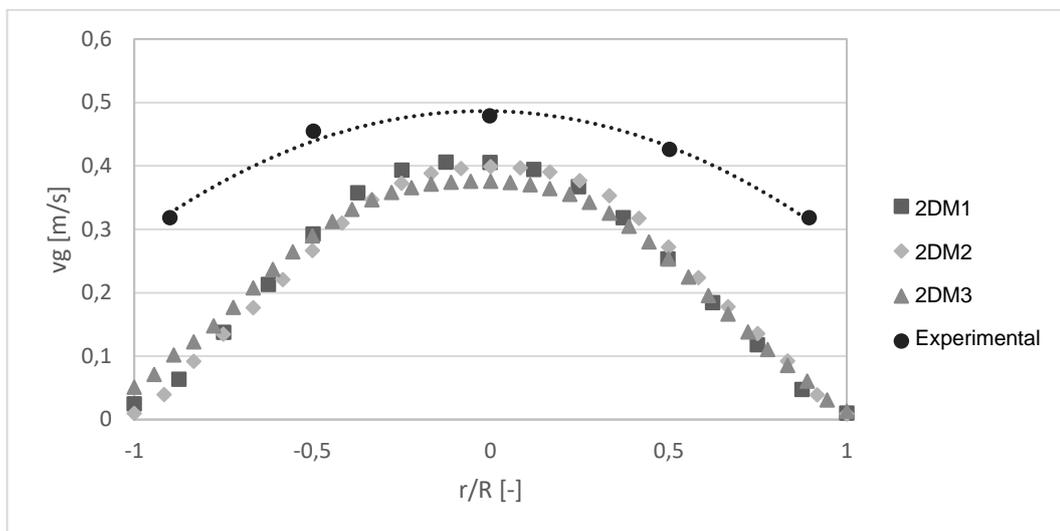
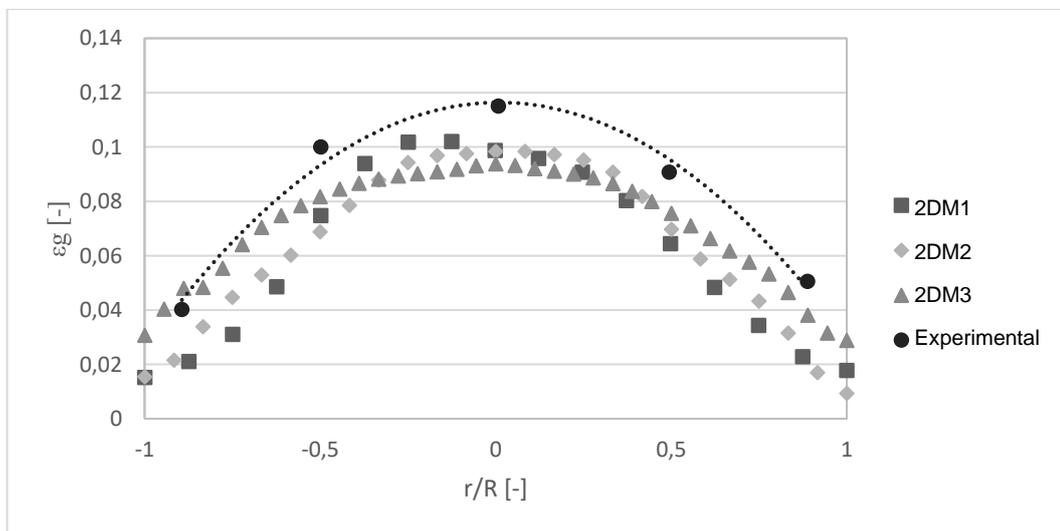


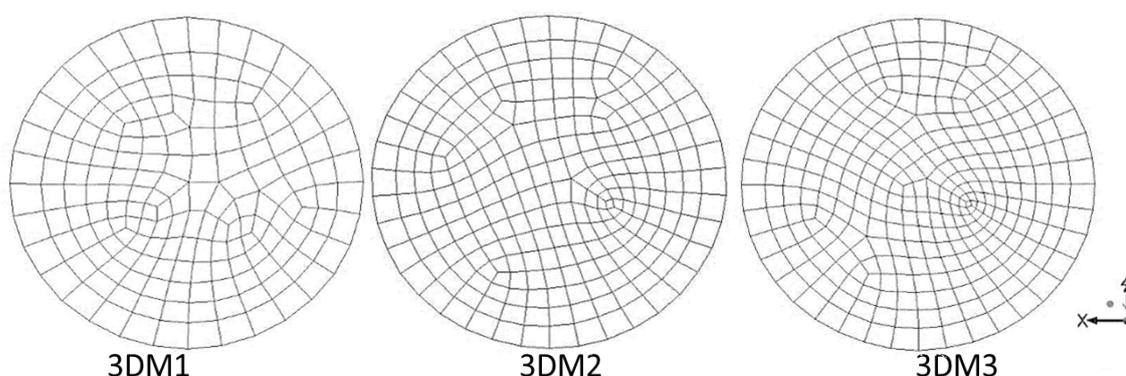
Figura 10 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental e simulados para diferentes malhas 2D, à altura de 0,56 m.



### Teste de malha 3D

Para a geometria tridimensional foram testadas três malhas, constituídas por elementos hexaédricos. A Figura 11 mostra a distribuição dos elementos na base das três malhas avaliadas e a Tabela 13 exibe as características das malhas tridimensionais.

**Figura 11 – Distribuição dos elementos na base das malhas tridimensionais estudadas. Respectivamente malhas 3DM1, 3DM2 e 3DM3.**



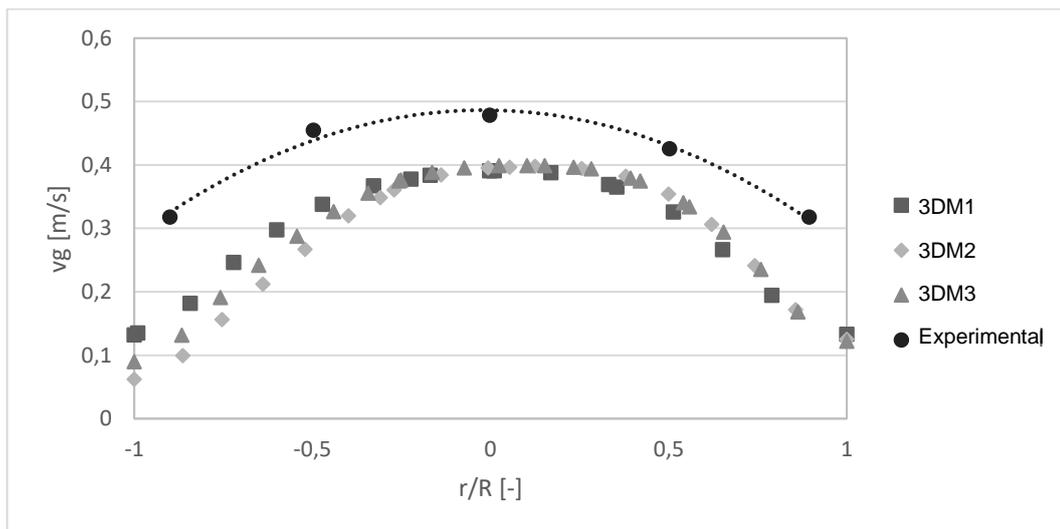
**Tabela 13 – Parâmetros de qualidade da malha tridimensionais.**

3D	Nº de nós	Nº de elementos	Qualidade	Aspecto de raio	Qualidade ortogonal	Tamanho aprox. do elemento
<b>M1</b>	19879	17952	0,8225	1,858	0,9739	0,0102
<b>M2</b>	33516	30750	0,8545	1,715	0,9821	0,0085
<b>M3</b>	42294	39204	0,8151	1,844	0,9709	0,008

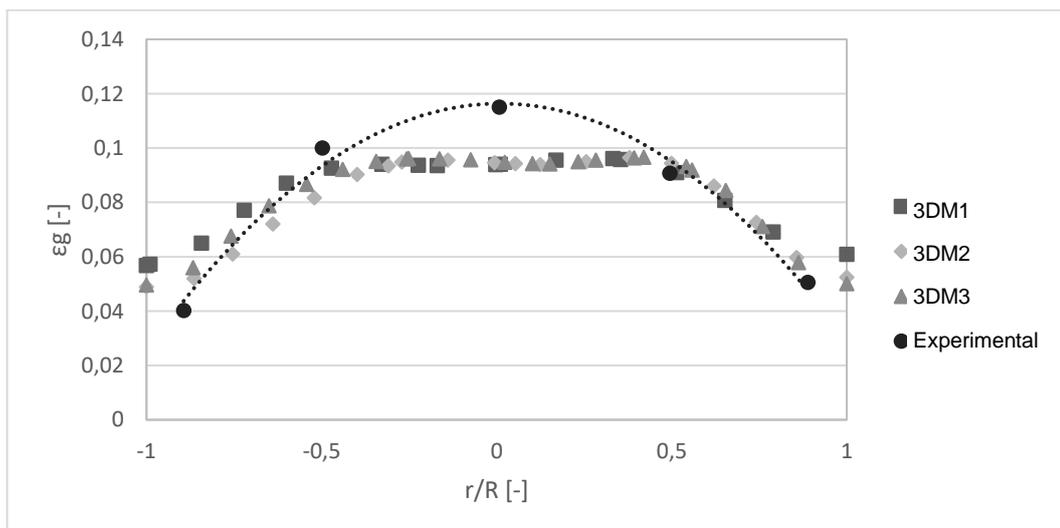
Para as diferentes malhas testadas a Figura 12 e a Figura 13 apresentam, respectivamente, os perfil radiais de velocidade e fração volumétrica do ar. A partir dos resultados é possível observar que não há efeito do refinamento sobre a

estimativa da velocidade e da fração do ar, podendo estes dados serem estimados com a malha menos refinada. (3DM1).

**Figura 12 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental e simulados para diferentes malhas 3D, à altura de 0,56 m.**



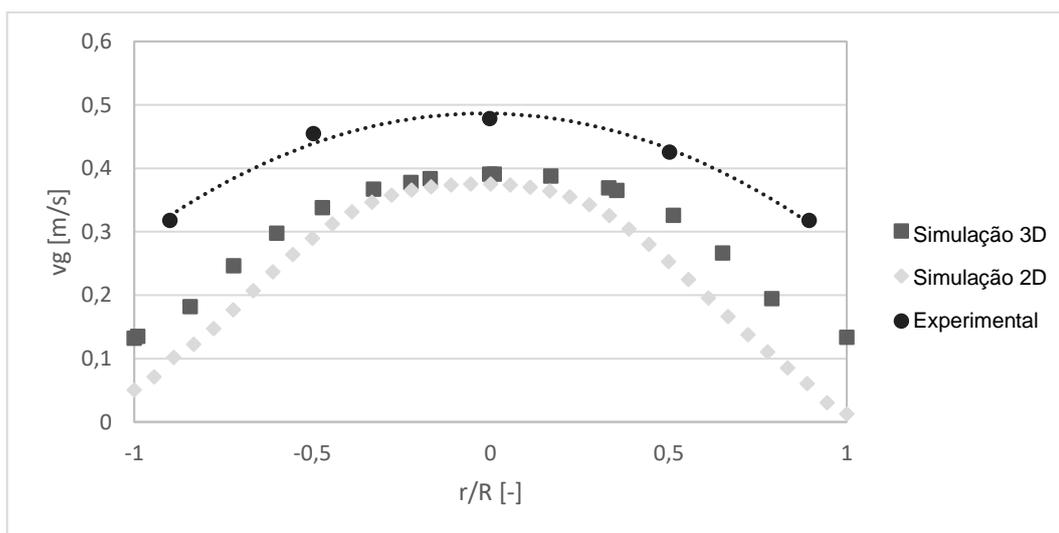
**Figura 13 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental e simulados para diferentes malhas 3D, à altura de 0,56 m.**



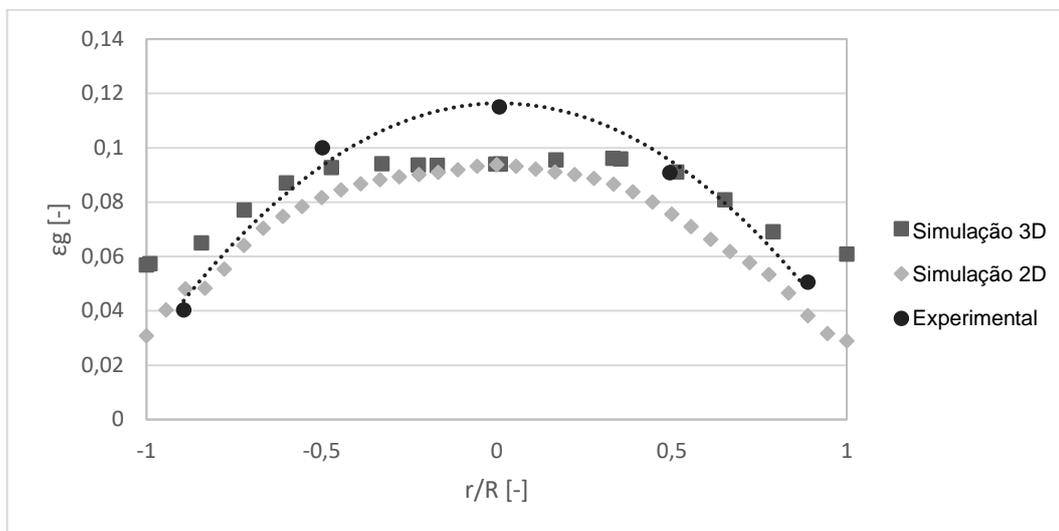
### 6.1.2 Teste de dimensão

A Figura 14 apresenta os valores de velocidade de ar para as simulações conduzidas em duas e três dimensões. Para previsão dos perfis radiais de velocidade do ar, a simulação tridimensional apresenta resultados ligeiramente mais próximos dos valores experimentais. Resultado semelhante é encontrado na Figura 15 para a estimativa da fração volumétrica de ar, onde o valores estão novamente próximos aos experimentais para as simulações 3D.

**Figura 14 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental e simulados para as malhas 2D e 3D, à altura de 0,56 m.**



**Figura 15 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica de ar experimental e simulados para as malhas 2D e 3D, à altura de 0,56 m.**

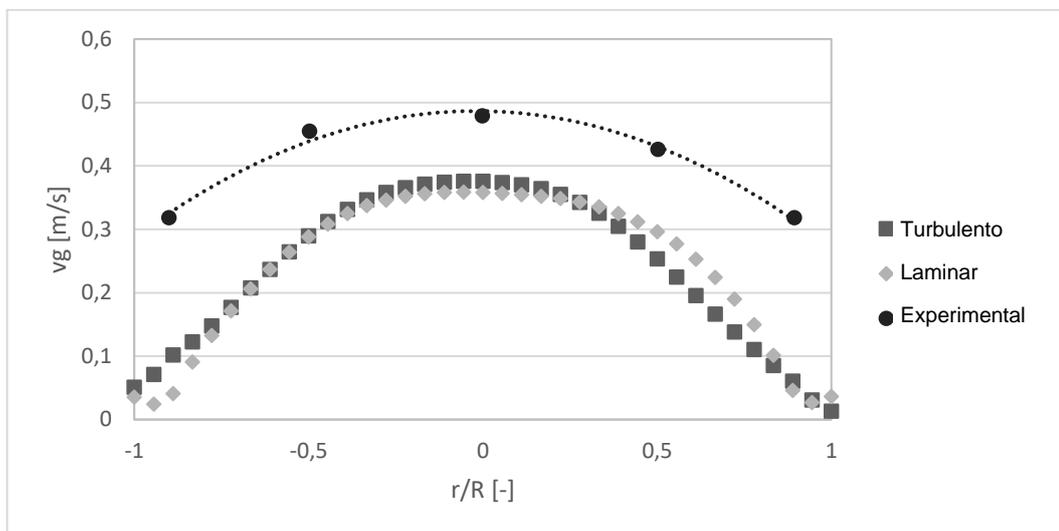


Ressalta-se, porém, que o tempo de simulação para a geometria 3D é duas vezes maior em relação ao tempo para a simulação 2D e que os resultados obtidos pelas simulações bidimensionais são suficientemente próximos dos resultados experimentais. Sendo assim, a abordagem bidimensional é adotada na modelagem da coluna de bolhas.

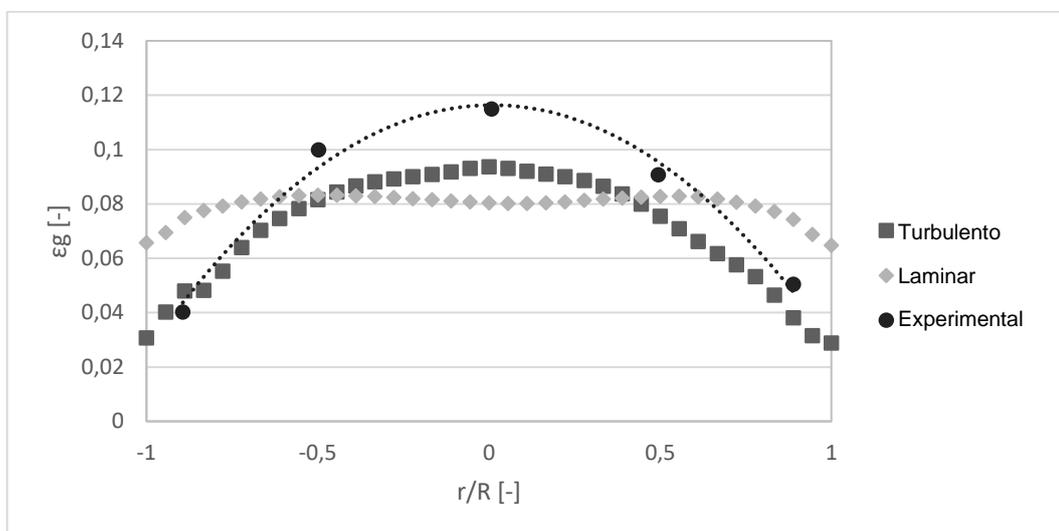
### 6.1.3 Teste modelo de escoamento

A Figura 16 e a Figura 17 apresentam a distribuição de velocidade e fração de ar simulados, com o modelo turbulento e com o modelo laminar, utilizando modelagem bidimensional.

**Figura 16 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental, simulados com o modelo de turbulência e simulados com modelo laminar, à altura de 0,56 m.**



**Figura 17 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental, simulados com o modelo de turbulência e simulados com modelo laminar, à altura de 0,56 m.**



Analisando-se os resultados é possível notar que os valores de velocidade de ar são muito próximos quando se muda o regime de escoamento de turbulento para laminar. No perfil de fração de ar, ambos os modelos apresentam valores próximos aos valores experimentais, mas o ajuste dos pontos da simulação com turbulência aos dados experimentais é mais adequado do que o modelo laminar, uma vez que

temos uma curva com comportamento aproximadamente parabólico para esta simulação.

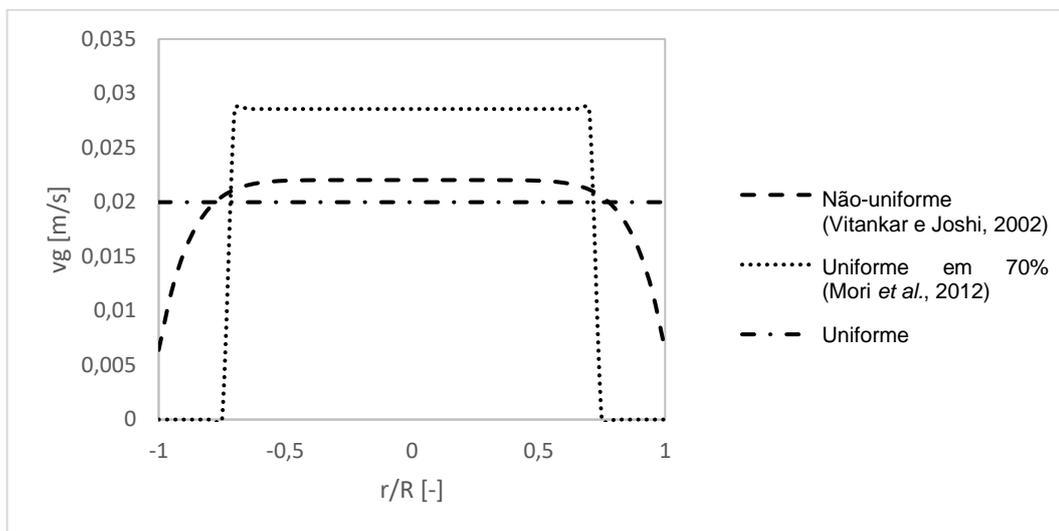
Conforme apontado por Cui e Fan (2004), mesmo em sistemas de colunas de bolha com baixa velocidade de ar, a turbulência exerce grande papel na dinâmica do escoamento. Como visto no item 2.7: Simulações computacionais para escoamento da coluna de bolhas trifásica, alguns autores conseguiram boa concordância entre os valores experimentais e simulados usando o modelo de escoamento turbulento para prever o escoamento multifásico em uma coluna de bolhas. Wu *et al.* (2008) apontam que a passagem das bolhas gera turbulência na fase líquida, modificando a dinâmica das fases envolvidas.

#### **6.1.4 Teste de condição de contorno de entrada**

Para a velocidade de entrada do ar na coluna são testados três tipos de condições de contorno na entrada: a) velocidade uniforme, b) velocidade uniforme em 70% da área da base, e c) velocidade não-uniforme. Nestas condições é mantida a mesma vazão mássica de ar inserida no sistema. A Figura 18 exhibe os perfis propostos de velocidade do ar na entrada da coluna.

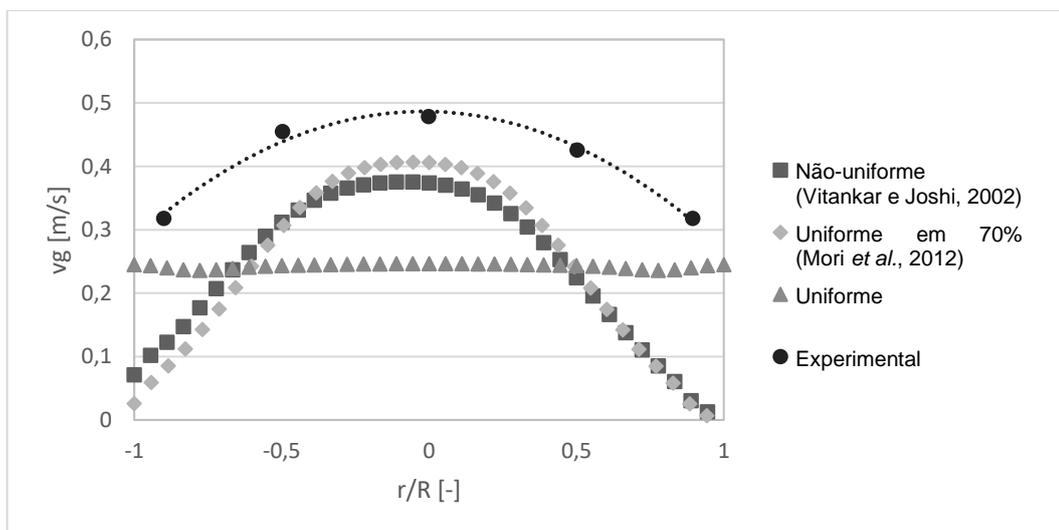
O tipo de entrada mais simples é o de entrada total de gás na base da coluna, com velocidade uniforme. Na condição de entrada proposta por Mori *et al.* (2012), o ar é alimentado com velocidade uniforme usando 70% da área da base da coluna. Na proposta de Vitankar e Joshi (2002), a entrada de ar obedece um perfil de velocidade não-uniforme.

**Figura 18 – Perfil da velocidade de entrada do ar na base da coluna de bolhas, conforme as propostas de Vitankar e Joshi (2002), Mori *et al.* (2012) e sem adaptação.**

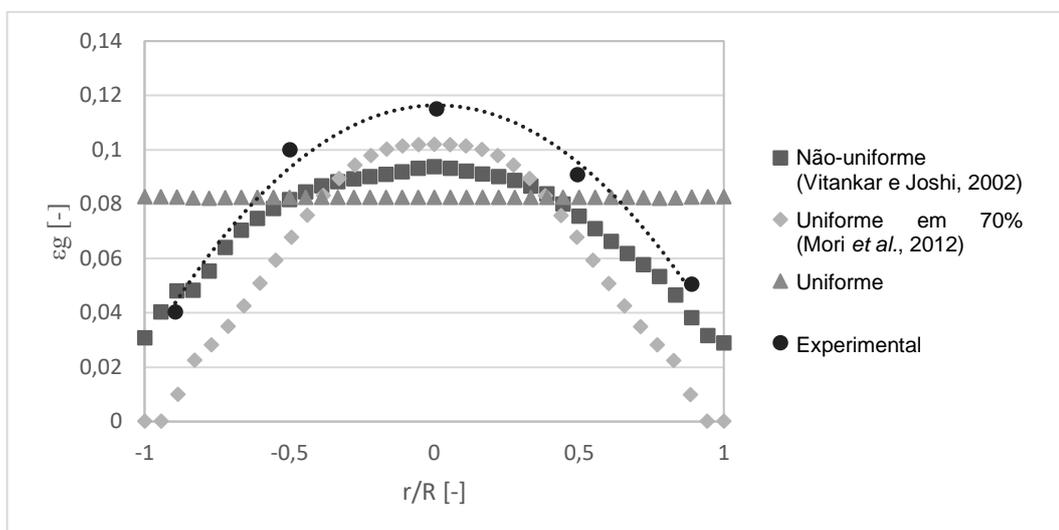


As Figura 19 e Figura 20 apresentam, respectivamente, os resultados de perfil de velocidade e fração volumétrica de ar dentro da coluna, considerando a) velocidade uniforme, b) velocidade uniforme em 70% da área da base, e c) velocidade não-uniforme.

**Figura 19 – Perfil de distribuição médio-temporal radial da velocidade do ar , obtidas por diferentes propostas de adaptação da entrada de ar , à altura de 0,56 m.**



**Figura 20 – Perfil de distribuição médio-temporal radial da fração volumétrica de ar, obtidas por diferentes propostas de adaptação da entrada de ar, à altura de 0,56 m.**

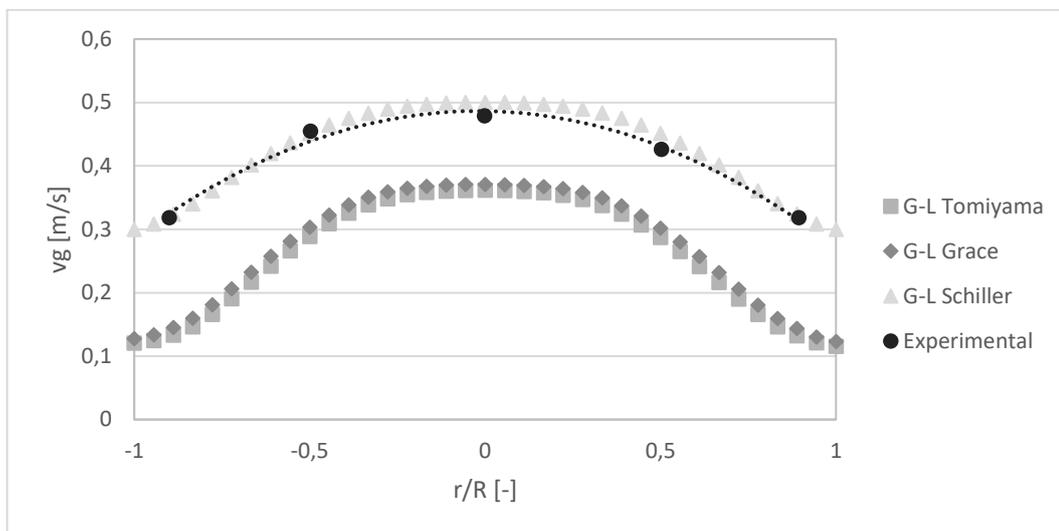


É possível notar que os resultados obtidos com o uso da condição de entrada proposta por Vitankar e Joshi (2002) apresentaram comportamento e valores mais próximos dos experimentais que as demais abordagens. Esta condição é também adotada por Bhusare *et al.* (2017), que obteve bons resultados em seu trabalho, considerando uma abordagem tridimensional com turbulência.

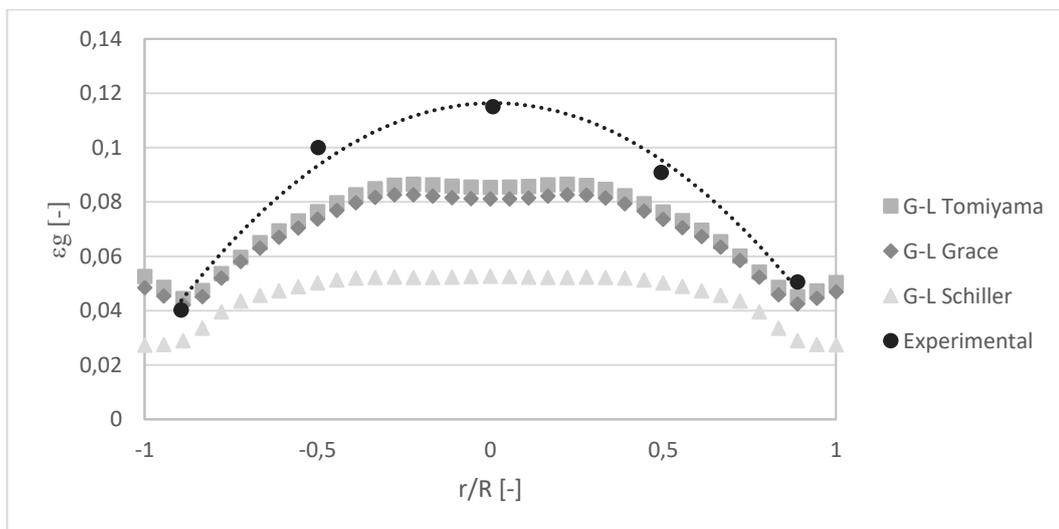
### 6.1.5 Modelos de arraste gás-líquido

A Figura 21 e a Figura 22 apresentam a distribuição da velocidade e da fração volumétrica de ar obtidas quando utilizando diferentes modelos propostos para a interação de arraste entre o gás e o líquido. Foram testados o Modelo de arraste de Tomiyama, Modelo de Grace e modelo de arraste de Schiller-Naumann.

**Figura 21 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental e simulados utilizando diferentes correlações para o arraste gás-líquido, à altura de 0,56 m.**



**Figura 22 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental e simulados utilizando diferentes correlações para o arraste gás-líquido, à altura de 0,56 m.**



Nota-se que o modelo de arraste de Schiller-Naumann prevê de forma eficiente o perfil de velocidade de ar, com pontos coincidentes ao perfil experimental, porém deixa a desejar na previsão do perfil de fração volumétrica de ar.

Os modelos de arraste de Tomiyama e Grace, apresentam resultados semelhantes para ambas as variáveis. Isto ocorre principalmente porque o modelo de Tomiyama é derivado, ou seja, trata-se de uma modificação do modelo apresentado por Grace.

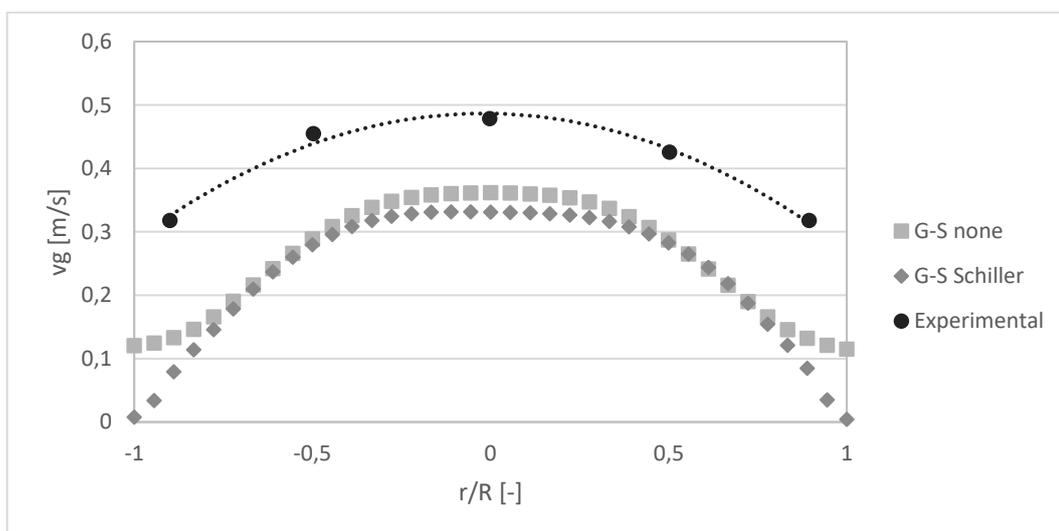
Desta forma, apesar de Tomiyama teoricamente ser um modelo mais preciso que Grace, para este caso de estudo, os dois são muito semelhantes.

Para o modelo deste trabalho adota-se o modelo de Tomiyama, porque ele foi desenvolvido para atender a uma maior gama de situações que o anterior.

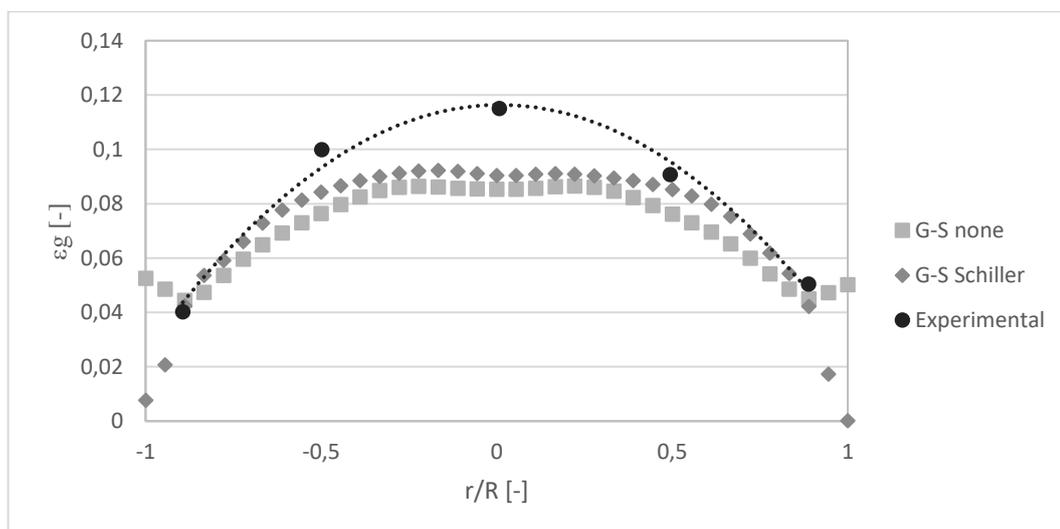
### 6.1.6 Modelagem do arraste gás-sólido

Utilizando o modelo trifásico para a coluna de bolhas, a Figura 23 e a Figura 24 apresentam, respectivamente, a distribuição da velocidade e da fração volumétrica de ar abordando o arraste gás-sólido de duas formas: considerando que não influencia significativamente no escoamento e adotando o modelo de arraste de Schiller-Naumann.

**Figura 23 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental e simulados utilizando diferentes abordagens para o arraste gás-sólido, à altura de 0,56 m.**



**Figura 24 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental e simulados utilizando diferentes abordagens para o arraste gás-sólido, à altura de 0,56 m.**

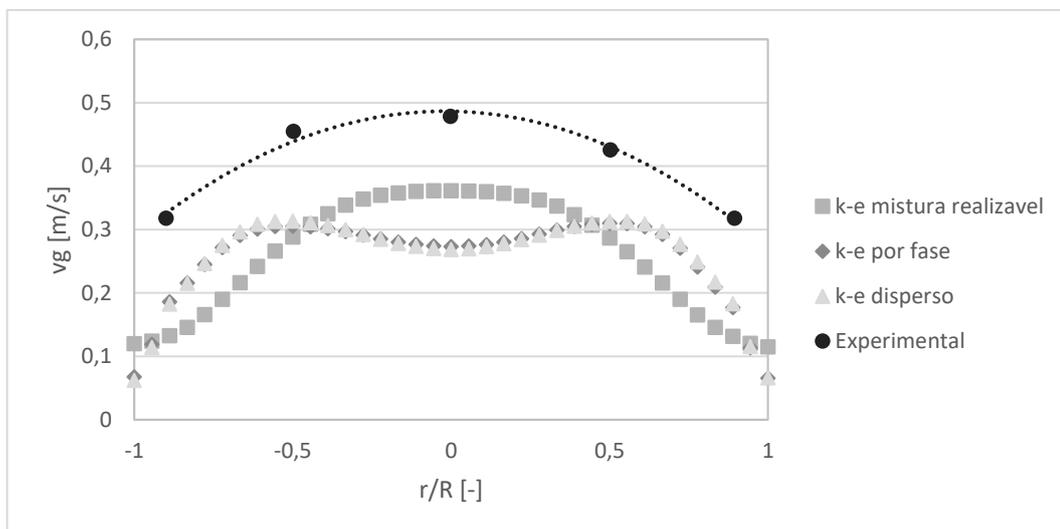


Focando a observação dos resultados na região central da coluna de bolhas, ambas abordagens apresentam resultados semelhantes. A influência da inclusão do arraste só aparece nos valores próximos à parede e de forma discreta. Considerando o aumento no esforço/tempo computacional decorrente da inclusão desta correlação e os benefícios obtidos por esta modificação, optou-se por não incluir a correlação de arraste gás-sólido no modelo definitivo.

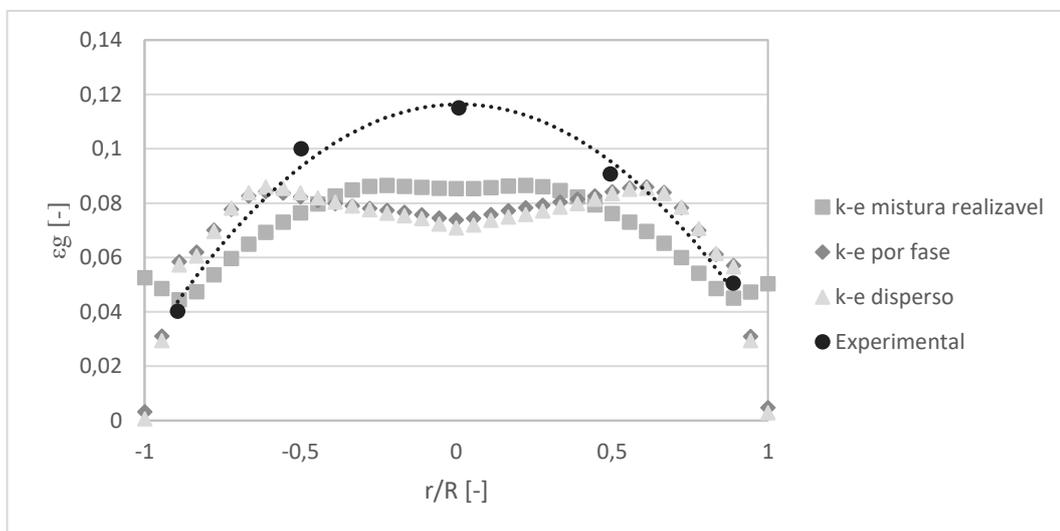
### 6.1.7 Variações do modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$

A Figura 25 e a Figura 26 apresentam, respectivamente, a distribuição da velocidade e da fração volumétrica de ar obtidas considerando diferentes abordagens para o modelo Euler-Euler multifásico turbulento  $\kappa - \epsilon$ : turbulência da mistura, turbulência por fase e turbulência considerando a fase secundária dispersa.

**Figura 25 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de velocidade do ar experimental e simulados utilizando diferentes abordagens multifásicas para o modelo de turbulência  $\kappa - \epsilon$ , à altura de 0,56 m.**



**Figura 26 – Perfil de distribuição médio-temporal radial de fração volumétrica do ar experimental e simulados utilizando diferentes abordagens multifásicas para o modelo de turbulência  $\kappa - \epsilon$ , à altura de 0,56 m.**



As abordagens da turbulência do tipo disperso e por fase, para ambos os resultados de velocidade e fração volumétrica de ar, apresentam resultados semelhantes. A característica destes resultados da presença de um vale no centro da coluna não é coerente com os resultados experimentais. A abordagem da turbulência do tipo

mistura descreve melhor a tendência dos perfis de velocidade e fração volumétrica de ar apresentados nas Figuras 25 e 26.

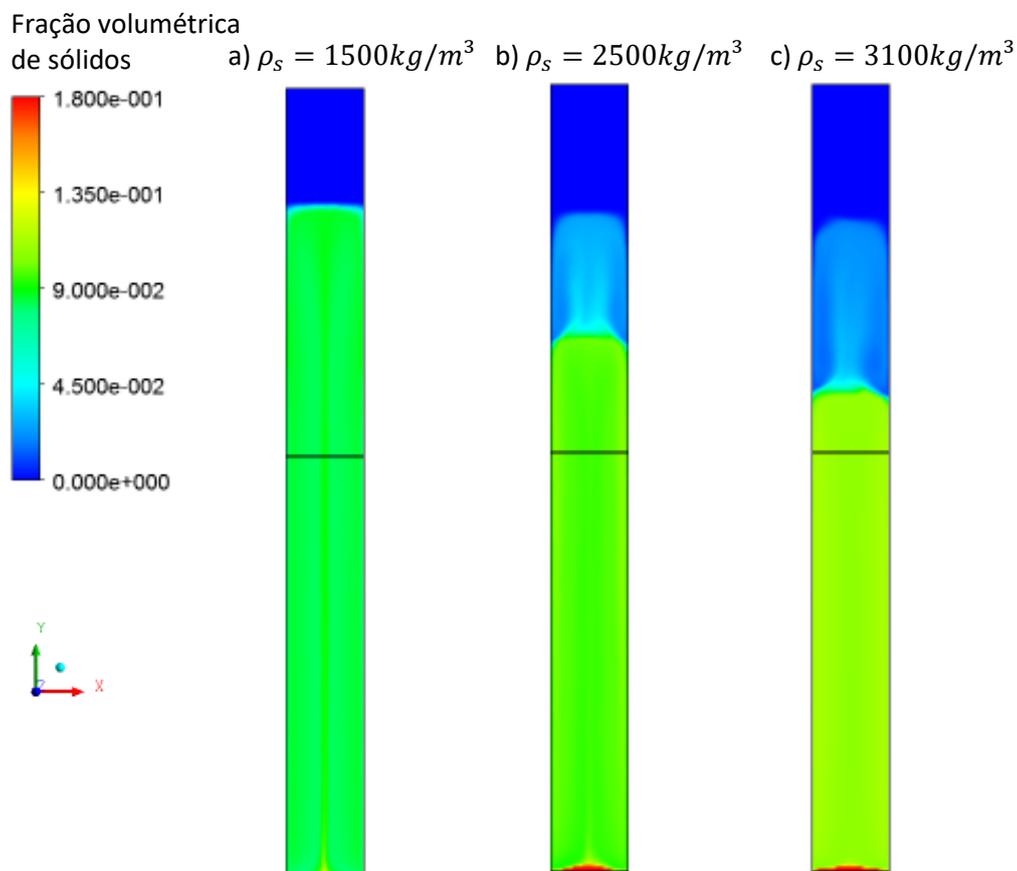
## 6.2 Estudo da fluidodinâmica

### 6.2.1 Sensibilidade à massa específica do sólido

A Figura 27 apresenta o perfil de distribuição da fração volumétrica de sólidos instantâneo para 100 s de simulação, para a massa específica do sólido de  $2500 \text{ kg/m}^3$ . Nota-se na Figura 27 que para o valor de massa específica de sólidos mais próxima da massa específica do fluido ( $\rho_s = 1,5\rho_l$ ) a distribuição de sólidos na coluna se torna mais homogênea. Por outro lado, é possível observar que leitos de lama com  $\rho_s > 1500 \text{ kg/m}^3$  promovem um acúmulo desta fase na base da coluna e uma região deficiente de sólidos na parte superior.

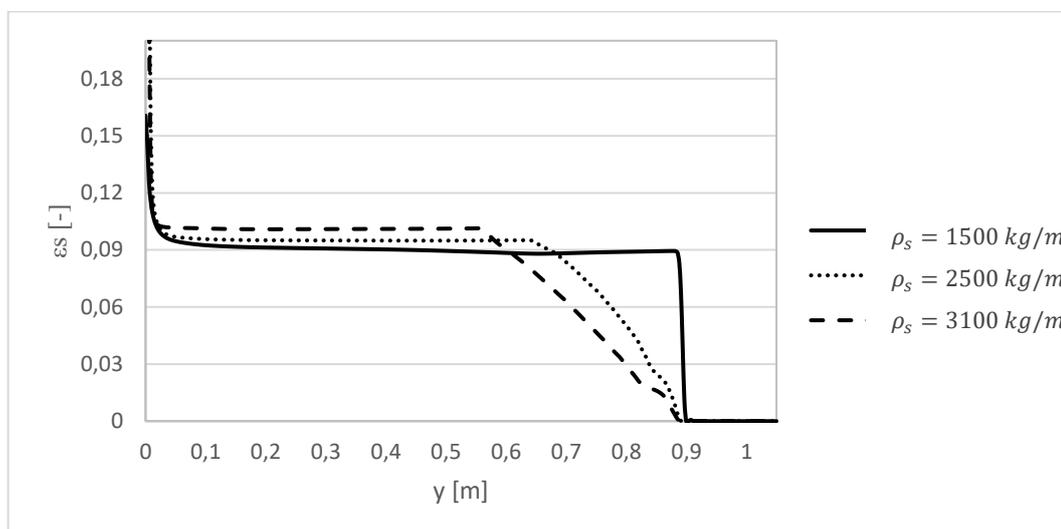
Para valores de  $\rho_s > 1500 \text{ kg/m}^3$ , o efeito da gravidade sobre as partículas supera a força de arraste e o empuxo, e isso causa a formação de regiões com diferentes concentrações de sólido no interior da coluna. Desta forma, embora as partículas estejam uniformemente distribuídas no início do escoamento, com o passar do tempo é gerada uma região com baixa concentração de sólido no topo do leito. No reator de lama, baixas concentrações de catalisador podem prejudicar a conversão das reações químicas na lama e, conseqüentemente, reduzir a produção.

**Figura 27 – Distribuição da fração volumétrica de sólidos na coluna, para diferentes valores de massa específica do sólidos, para o tempo de 100 s, considerando um diâmetro de sólidos de 65  $\mu\text{m}$ .**



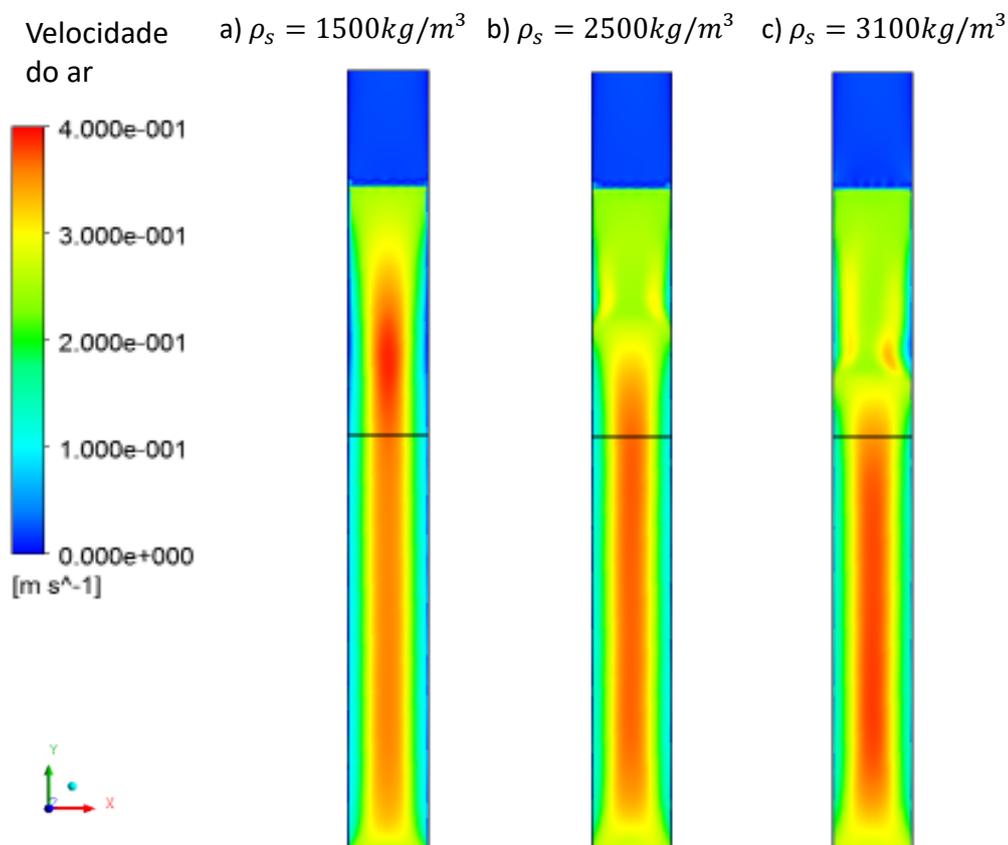
A Figura 28 apresenta a média temporal da distribuição da fração volumétrica de sólidos ao longo da linha central da coluna, para sólidos com diferentes massas específicas. Para a posição axial entre 0 e 0,6 m, observa-se que a massa específica de sólidos não causa efeito significativo sobre a fração de sólidos, sendo este efeito mais pronunciado acima da posição axial 0,6 m. Em contrapartida, quando a massa específica do sólido é próxima à massa específica do líquido ( $\rho_s = 1500\text{kg/m}^3$ ), há uma tendência à uniformização do leito de lama.

**Figura 28 – Distribuição médio-temporal da fração volumétrica de sólidos ao longo de uma linha vertical na coluna de bolhas para diferentes valores de massa específica do sólido, considerando partículas com 65  $\mu\text{m}$  de diâmetro.**



A Figura 29 apresenta a distribuição de velocidade do ar para diferentes valores de massa específica do sólido, para o tempo de 100 s. A linha preta paralela ao eixo x e localizada a 0,56m de altura da base, marca o ponto de medida da velocidade e da fração volumétrica de ar na coluna de bolhas. Nota-se que para a altura de 0,56 m os resultados de velocidade de ar são próximos. Entretanto, acima desta altura, devido a não uniformidade de fração volumétrica de sólido no leito o campo de da velocidade do ar é alterado. Isso acontece porque há deposição de sólidos na base da coluna. Tal fato torna-se evidente quando a massa específica do sólido é 2,5 ou 3,1 vezes o valor da massa específica do líquido. Isso gera uma região com baixa concentração de sólidos na parte superior do leito, na qual as bolhas de ar se movimentam de forma diferente.

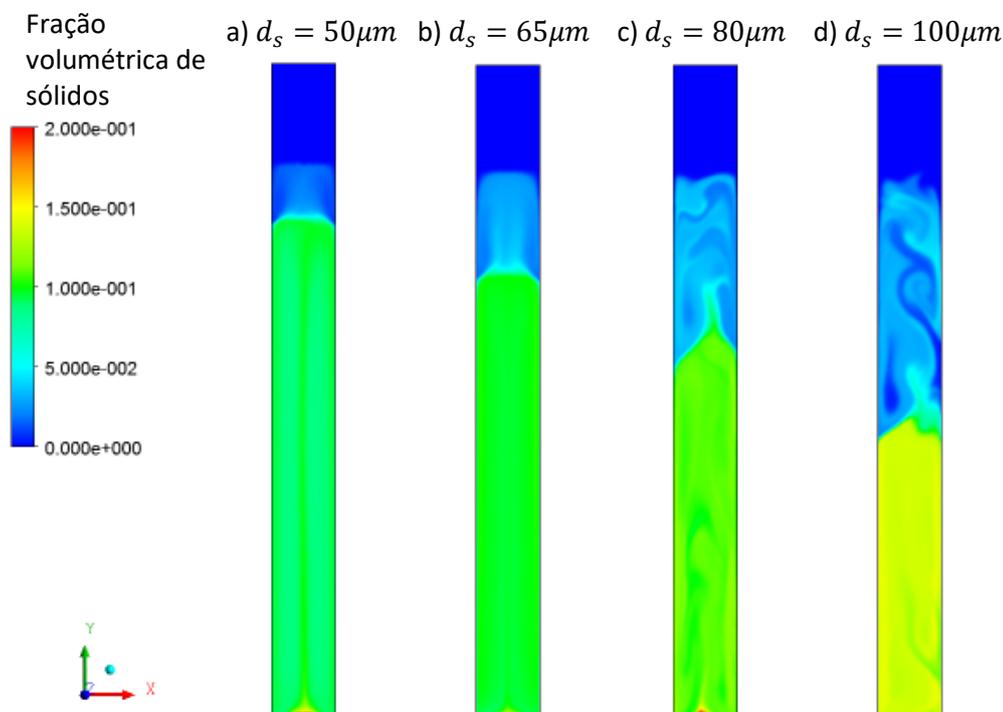
**Figura 29 – Perfil de distribuição da velocidade do ar na coluna para diferentes valores de massa específica do sólido, para o tempo de 100 s, considerando partículas com 65  $\mu\text{m}$  de diâmetro.**



### 6.2.2 Sensibilidade ao diâmetro do sólido

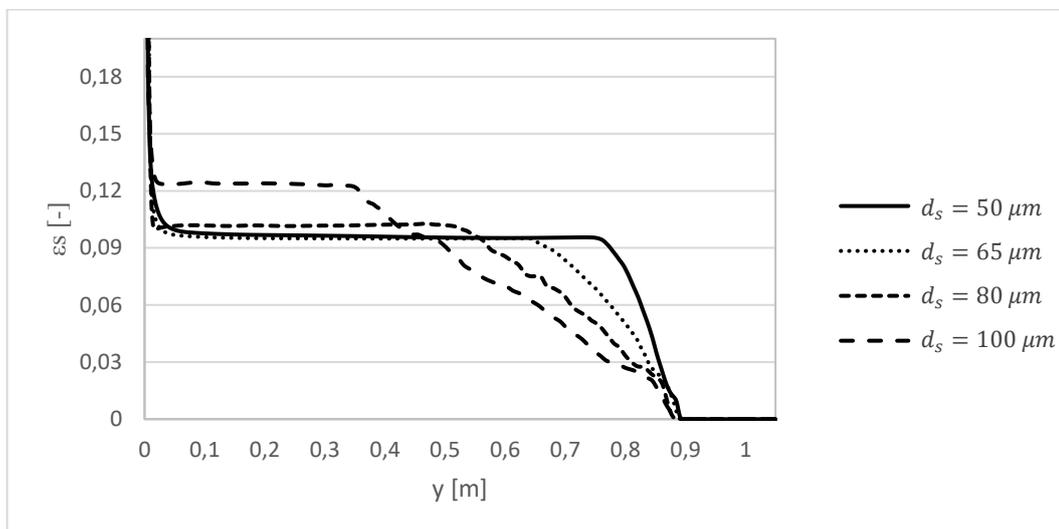
Para diferentes valores de diâmetro de sólido testados, a Figura 30 apresenta a distribuição da fração volumétrica de sólidos ( $\rho_s = 2500\text{kg/m}^3$ ) na coluna em um tempo de 100 s. Analisando os dados na Figura 30, nota-se o efeito do diâmetro da partícula sobre a distribuição de fração volumétrica de sólido, o que é atribuído à ação da gravidade sobre as partículas quando comparada à força de arraste e do empuxo.

**Figura 30 – Perfil de distribuição da fração volumétrica de sólidos na coluna para diferentes valores de diâmetro dos sólidos, para o tempo de 100 s, considerando partículas com massa específica de 2500 kg/m<sup>3</sup>.**



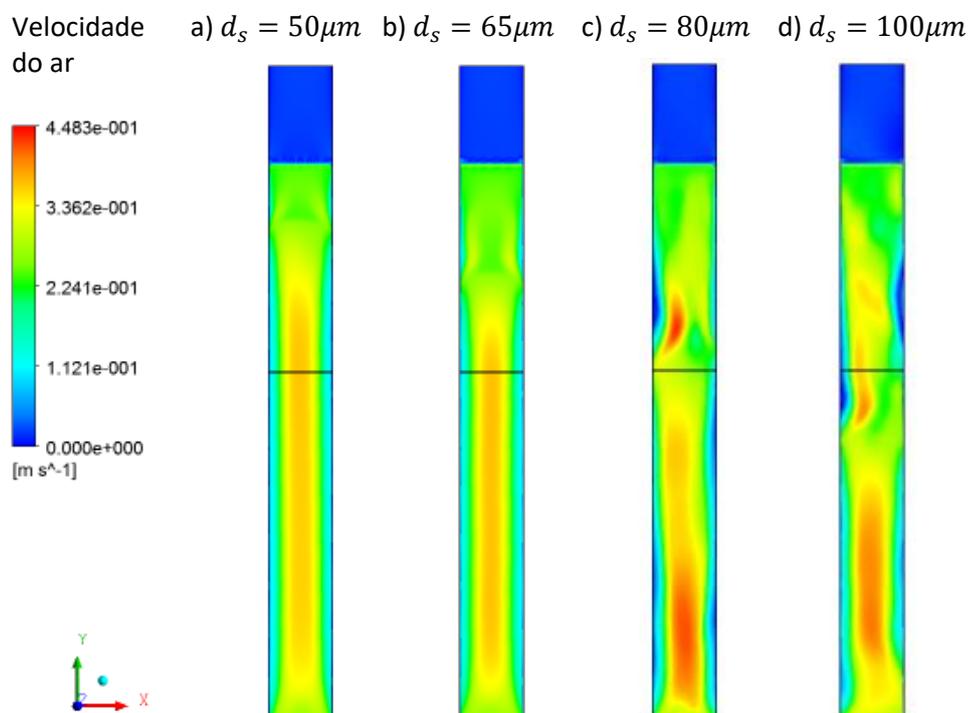
A Figura 31 apresenta a distribuição média-temporal da fração volumétrica de sólidos, para diferentes valores de diâmetro de sólidos em um tempo de simulação de 100 s. Para  $d_s = 50\mu m$ , observa-se que o leito de lama apresenta uma distribuição uniforme de fração volumétrica de sólidos. Para diâmetros de 60 e 80  $\mu m$  nota-se que há uma redução da fração volumétrica de sólidos no leito de lama a partir de uma altura de 0,6 e 0,7 m, respectivamente, mantendo-se a mesma fração de sólido na base da coluna. Entretanto, para  $d_s = 100\mu m$ , ocorre maior concentração de partículas na base do leito em comparação com os demais tamanhos de partícula empregados. Com base nestes dados pode-se inferir que o uso do diâmetro de catalisador de 50  $\mu m$  é mais adequado para o reator de lama que opera com velocidade superficial de gás de 0,02 m/s.

**Figura 31 – Distribuição médio-temporal da fração volumétrica de sólidos ao longo de uma linha vertical na coluna de bolhas para diferentes valores de diâmetro de sólidos, considerando partículas com massa específica de 2500 kg/m<sup>3</sup>.**



A Figura 32 apresenta o comportamento da velocidade do ar dentro do reator, considerando diferentes diâmetros de sólido, para o tempo de 100 s. A linha preta paralela ao eixo x e localizada a 0,56m de altura da base, marca o ponto de medida de fração volumétrica de ar na coluna de bolhas. Nota-se que, dentro da faixa de valores testados, a partícula de diâmetro menor tornou o campo de velocidades do ar mais uniforme. Partículas maiores geraram áreas de instabilidade na velocidade do ar, gerando um campo de velocidades instantâneo não simétrico. Isso acontece porque, na região superior do leito é gerada uma área com baixa concentração de sólidos, que resulta em uma viscosidade da mistura mais baixa, que oferece menor resistência à passagem da bolha de ar.

**Figura 32 – Perfil de distribuição da velocidade do ar na coluna para diferentes valores de diâmetro do sólido, para o tempo de 100 s, considerando partículas com massa específica de  $2500 \text{ kg/m}^3$ .**



Na região inferior da coluna, para os diâmetros de sólido de 80 e 100  $\mu\text{m}$ , a velocidade do ar assume valores maiores no centro e menores próximo à parede, em comparação com diâmetros menores. Para esses valores de diâmetro de sólido (80 e 100  $\mu\text{m}$ ), o ar forma um caminho preferencial no meio da coluna, indicando uma possível mudança de regime de escoamento.

## 7 CONCLUSÕES

Com base nas condições operacionais e análise dos resultados obtidos nesta pesquisa, podem ser apresentadas as seguintes conclusões:

- O modelo bidimensional Euler-Euler turbulento  $\kappa - \epsilon$  de mistura e entrada de ar não-uniforme proposta por Vitankar e Joshi (2002) foi capaz de prever melhor os perfis radiais de velocidade e fração volumétrica de ar em uma coluna de bolhas;
- A modelagem fluidodinâmica computacional utilizada pode prever o regime de bolhas, verificado experimentalmente por Wu et al. (2008);
- Para a faixa de valores de massa específica de sólidos investigada ( $1500 < \rho_s < 3100 \text{ kg/m}^3$ ), observa-se que apenas para valores de  $\rho_s = 1500 \text{ kg/m}^3$  o leito de lama apresenta distribuição de sólidos uniforme;
- Para a faixa de valores de diâmetro de sólidos investigada ( $50 < d_s < 100 \mu\text{m}$ ) nota-se que, apenas para  $d_s = 50 \mu\text{m}$ , o leito de lama apresenta uma distribuição axial de fração de sólidos uniforme ao longo da linha central da coluna;
- Para os valores de diâmetro do sólido de 80 e 100  $\mu\text{m}$  há uma redução na fluidização da região inferior da coluna de bolhas, verificada através do campo de velocidade do ar dentro da coluna, indicando uma possível mudança de regime de escoamento.

## **Sugestões de pesquisas futuras**

Para trabalhos futuros sugere-se a inclusão de outros fenômenos físicos na modelagem numérica do problema. Dentre eles:

- a) inclusão dos fenômenos de quebra e coalescência de bolhas, a fim de poder abranger reatores com maior vazão de entrada de gás;
- b) tratamento da fase gás como um fluido compressível, a fim de poder estender o modelo a colunas de maior altura;
- c) estudo da atividade catalítica do sólido frente a essas regiões de deficiência do material, incluindo a reação química de Fischer-Tropsch no sistema, de forma a quantificar a influência das características físicas do sólido na eficiência do sistema.

## REFERÊNCIAS

AKITA, K.; YOSHIDA, F. Bubble size, interfacial area, and liquid-phase mass transfer coefficient in bubble columns. **Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development**, 1974. v. 13, n. 1, p. 84–91.

ANSYS. **ANSYS FLUENT THEORY GUIDE**. [S.l.]: ANSYS, 2013.

BATEN, J. M. VAN; KRISHNA, R. Eulerian Simulation Strategy for Scaling up a Bubble Column Slurry Reactor for Fischer–Tropsch Synthesis. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, ago. 2004. v. 43, n. 16, p. 4483–4493.

BHUSARE, V. H.; DHIMAN, M. K.; KALAGA, D. V.; ROY, S.; JOSHI, J. B. CFD simulations of a bubble column with and without internals by using Open FOAM. **Chemical Engineering Journal**, jun. 2017. v. 317, p. 157–174.

CLIFT, G. **Weber. Bubbles, Drops**. [S.l.]: and Particles. Technical report, Academic Press, 1978.

CUI, Z.; FAN, L. S. Turbulence energy distributions in bubbling gas–liquid and gas–liquid–solid flow systems. **Chemical Engineering Science**, 2004. v. 59, p. 1755–1766.

DEL POZO, M.; BRIENS, C. L.; WILD, G. Particle-particle collisions in liquid-solid and gas-liquid-solid fluidized beds. **Chemical engineering science**, 1993. v. 48, n. 18, p. 3313–3319.

DRY, M. E. High quality diesel via the Fischer-Tropsch process - a review. **Journal of Chemical Technology & Biotechnology**, Jan. 2002. v. 77, n. 1, p. 43–50.

FAN, L. S.; KREISCHER, B. E.; TSUCHIYA, K. Advances in gas-liquid-solid fluidization: Fundamentals and applications. 1989.

FORRET, A.; SCHWEITZER, J. M.; GAUTHIER, T.; KRISHNA, R.; SCHWEICH, D. Scale up of slurry bubble reactors. **Oil & Gas Science and Technology-Revue de l'IFP**, 2006. v. 61, n. 3, p. 443–458.

GAMWO, I. K.; GIDASPOW, D.; JUNG, J. Optimum Catalyst Size for Slurry Bubble Column Reactors. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, ago. 2005. v. 44, n. 16, p. 6393–6402.

GAMWO, I. K.; HALOW, J. S.; GIDASPOW, D.; MOSTOFI, R. CFD models for methanol synthesis three-phase reactors: reactor optimization. **Chemical Engineering Journal**, 2003. v. 93, n. 2, p. 103–112.

GIDASPOW, D.; HE, Y.; CHANDRA, V. A new slurry bubble column reactor for diesel fuel. **Chemical Engineering Science**, set. 2015. v. 134, p. 784–799.

GRACE, J. R. Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids. **Chem. Eng. Res. Des.**, 1976. v. 54, p. 167–173.

KIARED, K.; LARACHI, F.; CHAOUKI, J.; GUY, C. Mean & Turbulent Particle Velocity in the Fully Developed Region of a Three-Phase Fluidized Bed. **Chemical Engineering Technology**, 1989. v. 22, n. 8, p. 683–689.

KRISHNA, R.; BATEN, J. M. VAN. A strategy for scaling up the Fischer–Tropsch bubble column slurry reactor. **Topics in Catalysis**, 2003. v. 26, n. 1, p. 21–28.

KRISHNA, R.; SIE, S. T. Design and scale-up of the Fischer–Tropsch bubble column slurry reactor. **Fuel Processing Technology**, 2000. v. 64, n. 1, p. 73–105.

KRISHNA, R.; VAN BATEN, J. M.; URSEANU, M. I. Three-phase Eulerian simulations of bubble column reactors operating in the churn-turbulent regime: a scale up strategy. **Chemical Engineering Science**, 2000. v. 55, n. 16, p. 3275–3286.

LUN, C. K. K.; SAVAGE, S. B. The effects of an impact velocity dependent coefficient of restitution on stresses developed by sheared granular materials. **Acta Mechanica**, 1986. v. 63, n. 1–4, p. 15–44.

LUN, C. K. K.; SAVAGE, S. Br; JEFFREY, D. J.; CHEPURNIY, N. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. **Journal of fluid mechanics**, 1984. v. 140, p. 223–256.

MARETTO, C.; KRISHNA, R. Design and optimisation of a multi-stage bubble column slurry reactor for Fischer-Tropsch synthesis. **Catalysis Today**, 2001. v. 66, p. 241–248.

MORI, E.; MORI, M.; ÁVILA, M. A. D'. CFD simulation of three-phase flow in slurry bubble column. **MFIP12 Ischia – Conference on Multiphase Flow in Industrial Plants**, 2011.

\_\_\_\_\_. **Simulação de coluna de bolhas em leito de lama por técnicas da fluidodinâmica computacional**. Campinas, São Paulo: Unicamp, 2012. Dissertação de Mestrado.

PATEL, G. N. **CFD simulation of two-phase and three-phase flows in internal-loop airlift reactors**. Lappeenranta: Lappeenranta University of Technology, 2010. Disponível em: <<https://doria32-kk.lib.helsinki.fi/handle/10024/63855>>. Acesso em: 17 maio. 2017.

RANADE, V. V. **Computational Flow Modeling for chemical reactor engineering**. Índia: Academic press, 2002. V. 5.

RZEHAK, R.; KRAUß, M.; KOVÁTS, P.; ZÄHRINGER, K. Fluid dynamics in a bubble column: New experiments and simulations. **International Journal of Multiphase Flow**, mar. 2017. v. 89, p. 299–312.

SCHILLER, L.; NAUMANN, A. A drag coefficient correlation. **Vdi Zeitung**, 1935. v. 77, p. 318–320.

SILVA JÚNIOR, J. L. **Modelagem e simulação fluidodinâmica de sistemas gás-líquido-sólido em leitos de lama usando CFD: síntese de metanol**. Campinas, São Paulo: Unicamp, 2015. Tese de Doutorado. Disponível em: <<http://reposip.unicamp.br/handle/REPOSIP/266016>>. Acesso em: 15 jul. 2017.

SOKOLICHIN, A.; EIGENBERGER, G.; LAPIN, A. Simulation of buoyancy driven bubbly flow: established simplifications and open questions. **AIChE Journal**, 2004. v. 50, n. 1, p. 24–45.

STERN, D.; BELL, A. T.; HEINEMANN, H. A theoretical model for the performance of bubble column reactors used for Fischer-Tropsch synthesis. **Chemical Engineering Science**, 1985. v. 40, p. 1665–1677.

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T. J. **MFIX Documentation Theory Guide**. Morgantown, West Virginia: [s.n.], 1993.

TAITEL, Y.; BORNEA, D.; DUKLER, A. E. Modelling flow pattern transitions for steady upward gas-liquid flow in vertical tubes. **AIChE Journal**, maio. 1980. v. 26, n. 3, p. 345–354.

TAKAMASA, T.; TOMIYAMA, A. Three-dimensional gas–liquid two-phase bubbly flow in a C-shaped tube. *In*: INTH INTERNATIONAL TOPICAL MEETING ON NUCLEAR REACTOR THERMAL HYDRAULICS (NURETH-9), 1999, , [S.I.] . **Anais...** [S.I.]: [s.n.], 1999. p. 1–17.

VAN WACHEM, B. **Derivation, Implementation, and Validation of Computer Simulaion Models for Gas-Solid Fluidized Beds**. [S.I.]: Delft University of Technology, 2000.

VITANKAR, V. S.; JOSHI, J. B. A comprehensive one-dimensional model for prediction of flow pattern in bubble columns. **Chemical Engineering Research and Design**, 2002. v. 80, n. 5, p. 499–512.

WU, C.; SUDDARD, K.; AL-DAHMAN, M. H. Bubble dynamics investigation in a slurry bubble column. **AIChE Journal**, maio. 2008. v. 54, n. 5, p. 1203–1212.

WU, Y.; GIDASPOW, D. Hydrodynamic simulation of methanol synthesis in gas–liquid slurry bubble column reactors. **Chemical Engineering Science**, 2000. v. 55, n. 3, p. 573–587.