

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA

JULIANA GUERHART DA COSTA

**APERFEIÇOAMENTO DA DISTRIBUIÇÃO DE HIDROGÊNIO EM
REATORES DO TIPO COLUNA DE LAMA BORBULHANTE APLICADO
AO HIDROCRAQUEAMENTO DAS FRAÇÕES PESADAS DO
PETRÓLEO ATRAVÉS DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

PONTA GROSSA
2014

JULIANA GUERHART DA COSTA

**APERFEIÇOAMENTO DA DISTRIBUIÇÃO DE HIDROGÊNIO EM
REATORES DO TIPO COLUNA DE LAMA BORBULHANTE APLICADO
AO HIDROCRAQUEAMENTO DAS FRAÇÕES PESADAS DO
PETRÓLEO ATRAVÉS DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

Trabalho de Conclusão de Curso de graduação, apresentado à disciplina de Trabalho de Diplomação, do Curso Superior de Engenharia Química do Departamento acadêmico de engenharia química – DAEQ – da Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR, como requisito parcial para obtenção do título de bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Everton Moraes Matos

PONTA GROSSA

2014



TERMO DE APROVAÇÃO

APERFEIÇOAMENTO DA DISTRIBUIÇÃO DE HIDROGÊNIO EM REATORES DO TIPO COLUNA DE LAMA BORBULHANTE APLICADO AO HIDROCRAQUEAMENTO DAS FRAÇÕES PESADAS DO PETRÓLEO ATRAVÉS DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.

por

JULIANA GUERHART DA COSTA

Monografia apresentada no dia 21 de novembro de 2014 ao Curso de Engenharia Química da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Câmpus Ponta Grossa. O candidato foi arguido pela Banca Examinadora composta pelos professores abaixo assinados. Após deliberação, a Banca Examinadora considerou o trabalho aprovado.

Prof^a. Dr^a. Maria Regina Parise (Membro Titular)

Prof^a. Dr^a. Juliana Martins Teixeira de Abreu Pietrobelli (Membro Titular)

Prof. Dr. Everton Moraes Matos (Orientador)

Prof^a. Dr^a. Juliana Martins Teixeira de Abreu Pietrobelli
Responsável pelo TCC do Curso de Engenharia Química

A cópia original encontra-se assinada na coordenação de Engenharia Química

Dedico este trabalho à minha família, por me apoiar em todos os momentos de alegria e tristeza e ao meu noivo Alberto, por estar ao meu lado aconselhando e suportando comigo as adversidades em todos os momentos.

AGRADECIMENTOS

À Deus, por ter me abençoado em mais uma grande etapa da minha vida e ser a luz que me guia.

À minha família pelo imenso carinho, amor e companheirismo me apoiando em todos os momentos da minha vida.

Ao meu orientador Prof. Dr. Everton Moraes Matos pelos incontáveis conhecimentos transmitidos e apoio em cada etapa do trabalho.

RESUMO

COSTA, Juliana Guerhart. Aperfeiçoamento da distribuição de hidrogênio em reatores do tipo coluna de lama borbulhante aplicado ao hidrocraqueamento das frações pesadas do petróleo através da fluidodinâmica computacional. 2014. 75 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química). Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Ponta Grossa, 2014.

O escoamento gás-líquido-sólido em reatores de coluna de lama borbulhante são usualmente encontrados na indústria. Apesar de ser um equipamento simples, uma grande dificuldade é encontrado em seu estudo fluidodinâmico em virtude dos complexos padrões de escoamento causado pelas zonas de recirculação de líquido e a ascendência das bolhas. Esta pesquisa tem como objetivo melhorar o processo de hidroconversão de frações pesadas do petróleo, aperfeiçoando a distribuição do hidrogênio injetado, que será feito nas laterais do reator, com intuito de reduzir a área pobre em hidrogênio no escoamento gás-líquido, empregando a Fluidodinâmica Computacional (CFD). A aplicação de Fluidodinâmica Computacional em operações industriais vem aumentando consideravelmente por auxiliar no projeto de novos equipamentos, bem como a otimização dos já existentes, que é o caso desta pesquisa. Para isto estudou-se a fluidodinâmica do reator sem entradas e com injeção de gás pelas laterais para comparação dos resultados. O reator tem dimensões 4m x 0,3m (Altura (H) x Diâmetro (D)). O modelo final testado, com entradas laterais, predisse satisfatoriamente o objetivo de melhorar a distribuição de gás em regiões onde este se encontrava faltante.

Palavras-Chave: Reator de lama borbulhante. Escoamento multifásico. Fluidodinâmica Computacional (CFD). Hidroconversão.

ABSTRACT

COSTA, Juliana Guerhart. Hydrogen distribution improvement in slurry bubbling column applied to the hydrocracking of heavy fractions of oil through computational fluid dynamics. 2014. 75 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química). Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Ponta Grossa, 2014.

The gas-liquid-solid flow reactors in slurry bubbling column are usually encountered in industry. Despite the fact of being a simple machine, a large difficulty is found in their study of complex fluid dynamics, due the flow patterns, caused by the liquid recirculation zones and the ascendancy the bubbles. The objective this research is to improve the process of hydroconversion of heavy petroleum fractions, improving the distribution of the injected hydrogen, which will be done on the sides of the reactor, in order to reduce the hydrogen-poor area, using Computational Fluid Dynamics (CFD). The application of Computational Fluid Dynamics in industrial operations has been increasing significantly for assisting in the design of new equipment, as well as the optimization of existing ones, which is the case in this research. For this, were studied the fluid dynamics of the reactor with no entries and with gas injection by side, to compare results. The reactor has dimensions 4m x 0.3m (height (H) x diameter (D)). The final model tested, with lateral inlets, satisfactorily predicted the goal of improving the distribution of gas in regions where it was missing.

Keywords: Slurry bubbling column. Multiphase flow. Computational fluid dynamics (CFD). Hydroconversion.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Reator de lama borbulhante.....	17
Figura 2 – Passos para a reação no reator de lama borbulhante.....	17
Figura 3 – Mapa dos regime de escoamento para reatores de lama borbulhante.	20
Figura 4 – Regimes comuns de escoamento em colunas de bolhas.	20
Figura 5 – Distribuição radial do holdup do gás.	23
Figura 6 – Holdup do gás em função da sua velocidade superficial.....	24
Figura 7 – Estrutura do escoamento da condição de vórtice em espiral	27
Figura 8 – Perfil da velocidade do líquido em diferentes posições axiais.....	28
Figura 9 – Etapas para a obtenção da solução numérica	34
Figura 10 – Representação das tensões em um volume de controle em coordenadas cilíndricas	36
Figura 11 – As figuras (a), (b), (c) e (d) representam respectivamente o reator com aproximadamente 37, 77, 125 e 164 mil volumes de controle	54
Figura 12 – Reator sem entradas laterais	57
Figura 13 – Resíduo das equações de massa e momento (Reator comum)	57
Figura 14 – Resíduo das equações de turbulência (Reator comum)	58
Figura 15 – Fração volumétrica de ar no reator (Reator sem entradas).....	58
Figura 16 – Geometria do reator com entradas laterais	59
Figura 17 – Resíduo das equações de massa e momento (Reator com entradas).....	62
Figura 18 – Resíduo das equações de turbulência (Reator com entradas)	62
Figura 19 – Fração volumétrica de ar no reator (Reator com entradas).....	63
Figura 20 – Fração volumétrica de ar nos reatores (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais.....	64
Figura 21 – Velocidade do ar nos reatores (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais.....	64
Figura 22 – Fração Volumétrica de ar em $Z = 0,6$ m (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais.....	66
Figura 23 – Fração Volumétrica de ar em $Z = 2,0$ m (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais.....	67
Figura 24 – Fração Volumétrica de ar em $Z = 3,0$ m (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais.....	67

Figura 25 – Velocidade do líquido no reator com entradas	69
Figura 26 – Velocidade do líquido no reator comum	70

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1– Fração volumétrica de ar versus diâmetro do reator para os diferentes volumes de controle em $Z = 1.5\text{m}$	55
Gráfico 2 – Fração volumétrica de ar versus diâmetro do reator para os diferentes volumes de controle em $Z = 3.2\text{ m}$	56
Gráfico 3 – Fração volumétrica de ar versus diâmetro do reator em $Z = 0,5$ metros (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais.....	65
Gráfico 4 – Fração volumétrica de ar versus diâmetro do reator em $Z = 1,2$ metros (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais.....	65
Gráfico 5 – Fração volumétrica de ar versus diâmetro do reator em $Z = 1,8$ metros (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais.....	66

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Condições empregadas na simulação.....	51
Tabela 2 – Detalhes numéricos.....	52

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	13
1.1. APRESENTAÇÃO DO TEMA	13
1.2. PROBLEMA	14
1.3. OBJETIVO GERAL	14
1.4. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	14
1.5. JUSTIFICATIVA	14
2. REFERÊNCIAL TEÓRICO	16
2.1. REATOR TRIFÁSICO TIPO COLUNA DE LAMA BORBULHANTE	16
2.2. CARACTERIZAÇÃO DOS REGIMES DE ESCOAMENTO NO REATOR DE LAMA BORBULHANTE	19
2.3. INFLUÊNCIA DAS FASES NO REATOR	22
2.3.1. A Influência da Fase Gasosa	22
2.3.2. A Influência da Fase Sólida	25
2.3.3. A Influência da Fase Líquida	26
2.4. O HIDROCRAQUEAMENTO	29
2.4.1. Aplicação do Leito de Lama no Hidrocraqueamento	30
2.5. AUXÍLIO DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL	31
2.5.1. Etapas do CFD	32
2.6. A MODELAGEM MATEMÁTICA FLUIDODINÂMICA	35
3. METODOLOGIA	50
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	54
4.1. TESTE DE MALHAS	54
4.2. REATOR COMUM	56
4.3. REATOR COM INJEÇÃO DE GÁS NAS LATERAIS	59
4.4. COMPARAÇÃO DAS SIMULAÇÕES	63
5. CONCLUSÃO	71
6. REFERÊNCIAS	72

1. INTRODUÇÃO

Neste item apresenta-se o tema objeto de estudo, ressaltando os aspectos que determinaram a sua escolha e os objetivos que pretendem ser alcançados.

1.1. APRESENTAÇÃO DO TEMA

Os reatores catalíticos trifásicos com catalisador sólido são empregados em processos industriais químicos, como hidrogenação, oxidação, cloração, alquilação, polimerização, na fabricação de combustíveis sintéticos, em processos bioquímicos, tais como fermentação e tratamento biológico de águas residuais.

Esses reatores têm a vantagem das altas taxas de transferência de massa, pois partículas menores podem ser usadas, de difusão intrapartícula, resultando em maior eficiência de utilização do catalisador, e altas taxas transferência de calor, caracterizando na maior facilidade de controle de temperatura no reator.

Tendo em vista que as interações que ocorrem entre as fases gás, líquido e sólido apresentam grandes complexidades, o experimento físico despende de tempo e custo. Assim, a aplicação da Fluidodinâmica Computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*) na predição das características fluidodinâmicas em colunas de bolhas é vantajosa. Nos últimos anos, estas técnicas têm sido facilitadas devido ao avanço do desenvolvimento tecnológico computacional, que possibilita tantos testes quanto for necessário para melhor entendimento dos fenômenos envolvidos.

A técnica CFD é baseada na solução de equações de balanço de massa locais e de quantidade de movimento. De acordo com a teoria, essa fornece meios de descrever todo o fenômeno físico local que prediz os padrões de escoamento nas colunas de bolhas que será apresentado neste trabalho.

Deve-se levar em consideração as fontes de erro que podem ser ocasionadas no uso da técnica. Os erros relacionados às hipóteses simplificadoras empregadas na formulação do modelo matemático restringem sua legitimidade, e acabam não representando com fidelidade os fenômenos envolvidos. Já os erros numéricos são resultados da solução aproximada das equações diferenciais pelos métodos numéricos de aproximação (MALISKA, 2012).

1.2. PROBLEMA

A distribuição do hidrogênio nas laterais do reator conduz para uma melhora na conversão de frações pesadas do petróleo?

1.3. OBJETIVO GERAL

Este trabalho tem como objetivo analisar a distribuição do hidrogênio injetado nas laterais do reator com intuito de reduzir a área pobre em hidrogênio nesse tipo de reator, e com isto aumentar a eficiência do processo.

1.4. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Elaborar computacionalmente a geometria do reator, em coordenadas cilíndricas, com entradas de gás hidrogênio na lateral, aplicando a técnica da fluidodinâmica computacional através do *software ansys-CFX* e verificando a homogeneização da concentração de hidrogênio no reator.

1.5. JUSTIFICATIVA

Considerando-se a atual conjuntura mundial no consumo de energia, e o petróleo, ainda ser a principal fonte em vários países, torna-se necessário o seu aproveitamento com o máximo de rendimento.

Essa perspectiva levou à busca de rotas alternativas para o refino e, mais especificamente, para o processamento de óleos pesados e resíduos, sendo a hidroconversão de resíduos uma das rotas consideradas promissoras.

O processo de hidroconversão promove a quebra das cadeias de hidrocarbonetos com elevada massa molecular em condições de alta temperatura e pressão de hidrogênio, garantindo a hidrogenação dos produtos formados. Simultaneamente a essas, ocorrem reações que retiram os contaminantes da carga (metais, nitrogênio e enxofre), que formam compostos potencialmente poluidores na queima posterior do óleo em motores de veículos, caldeiras e queimadores em geral. O produto obtido é mais leve, de maior qualidade e de interesse comercial.

Portanto, este trabalho contribui para a menor geração de resíduos de frações pesadas do petróleo e maior eficiência no processo de hidroconversão.

2. REFERÊNCIAL TEÓRICO

Neste capítulo desenvolvem-se aspectos considerados relevantes para o embasamento do estudo e o alcance dos objetivos propostos.

2.1. REATOR TRIFÁSICO TIPO COLUNA DE LAMA BORBULHANTE

Os reatores trifásicos tipo leito de lama borbulhante caracterizam-se pelo uso de um catalisador disperso no líquido e o gás é borbulhado na base do reator. Nesse processo, a reação entre o líquido e o gás acontece através de um catalisador sólido.

Ao analisar a utilização dos reatores de leito de lama borbulhante, Fogler (2009) apontou que os mesmos podem ser utilizados, na oxidação do dióxido de enxofre em água inerte na superfície de um catalisador de carbono ativado para produção de ácido sulfúrico. Também são usados na hidroformação de monóxido de carbono com olefinas de alta massa molar sobre complexo de cobalto ou retênio ligado a polímeros, no tratamento de águas residuais, na hidrogenação de insaturados gordura, entre outros.

Como vantagens têm-se: o controle de temperatura que é facilmente alcançado, pois uma mistura bem agitada pode ser mantida a uma temperatura uniforme eliminando pontos "quentes" que têm efeitos adversos sobre a seletividade do catalisador, o maior contato entre o fluido e o catalisador, aumentando a taxa de reação e conseqüentemente ocasionando excelente transferência de massa.

Warsito, Kawata e Uchida (1999) enunciam vantagens em relação a construção que é relativamente simples e o custo operacional baixo.

HILL (1977) enumera que a elevada capacidade calorífica associada a grande massa de líquido facilitam o controle térmico do reator e proporcionam um fator de segurança para reações exotérmicas, que podem levar a explosões térmicas. As finas partículas utilizadas nos reatores de lama podem tornar possível a obtenção de elevada taxas de reação por unidade de peso de catalisador.

Em um modelo de um reator de lama assume-se a idealidade, de que, a partícula do catalisador é bem distribuída e a fase líquida é bem misturada (FOGLER, 2009). Altos graus de mistura são ocasionados pela passagem das bolhas de gás através da fase líquida contínua, fator que gera a turbulência, favorecendo a

transferência de massa e auxiliando no processo de homogeneização da mistura reativa (SWAPNIL *et al.*, 2014).

A reação é feita em fase líquida em um reator de leito de lama, de modo que o catalisador encontra-se em suspensão no líquido e o fluxo de hidrogênio em fase gasosa mantém as partículas em suspensão. A reação acontece entre as fases gás, líquido e sólido e ocorrem as seguintes etapas (SCHMAL, 2010).

- 1- Difusão do gás reagente do interior da bolha até a sua superfície da bolha;
- 2- Difusão do gás até o seio do líquido;
- 3- Difusão do gás no seio do líquido até a superfície externa do catalisador sólido;
- 4- Difusão interna nos poros do catalisador;
- 5- Reação no poro do catalisador.

A Figura 1 indica o esquema de um reator de lama borbulhante, enquanto que a Figura 2 ilustra as etapas seguidas para a reação.

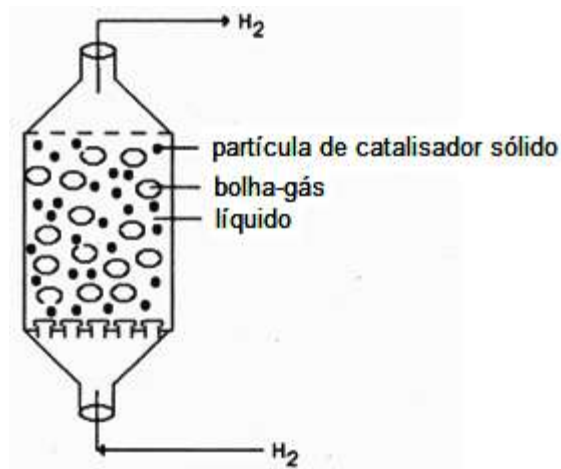


Figura 1 – Reator de lama borbulhante
Fonte: FOGLER (2009, p. 689)

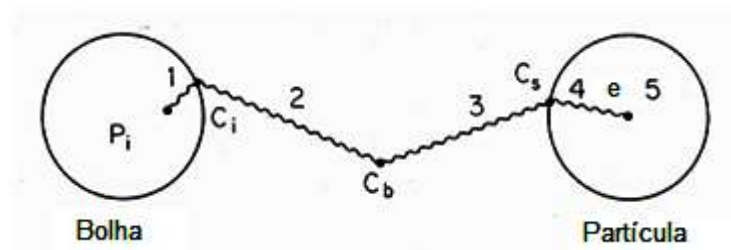


Figura 2 – Passos para a reação no reator de lama borbulhante
Fonte: FOGLER (2009, p. 689)

As bolhas do gás são uma fonte de moléculas reagentes, e o sítio do catalisador, o sumidouro destas moléculas reagentes pela reação gás-líquido nos poros do catalisador. Esse fenômeno acarreta em um gradiente de concentração que é a força motriz do processo de difusão. As resistências de interface gás-líquido e líquido-sólido, somadas com as resistências difusionais dentro da bolha, dentro do líquido e dentro da partícula de catalisador, podem implicar expressivamente nas taxas de conversão por dificultarem o acesso das moléculas aos sítios do catalisador.

O pequeno tamanho das partículas de catalisador no leito faz com que seus gradientes internos de temperatura e concentração sejam desprezíveis. Esse tipo de reator tem um comportamento que depende das taxas de difusão das espécies químicas nas fases, das resistências de interface à difusão entre fases, da fração de gás entre as fases, conhecida como *holdup*, das características da bolha, do regime de fluxo para cada fase, dos perfis de velocidade e dispersão do sólido (MATOS, 2001).

2.2. CARACTERIZAÇÃO DOS REGIMES DE ESCOAMENTO NO REATOR DE LAMA BORBULHANTE

Existem três tipos de regime de fluxo gasoso comumente observados em coluna de bolhas: os regimes homogêneo, heterogêneo e *slugging*. Os regimes dependem principalmente da velocidade superficial do gás e da uniformidade de distribuição do mesmo (JULIÁ *et al.*, 2007).

O regime homogêneo é obtido em baixas velocidades superficiais de gás. Esse regime de escoamento é caracterizado por bolhas relativamente uniformes e de pequenas dimensões. A uniformidade da distribuição das bolhas e sua mistura relativamente suave é observada ao longo de toda a área da seção transversal da coluna. Praticamente não há coalescência ou quebra das bolhas, assim, o tamanho delas nesse regime é quase totalmente ditada pelo projeto do espalhador e as propriedades físicas do sistema. Todas as bolhas sobem praticamente na vertical com mínimas oscilações transversais e axiais (THORAT e JOSHI, 2004).

O regime heterogêneo é mantido a velocidades superficiais do gás mais elevadas. Esse regime é caracterizado por uma perturbação em relação ao sistema homogêneo, devido ao aumento do movimento de turbulência das bolhas de gás e de recirculação do líquido, fenômeno chamado de vórtices. Como resultado, os padrões de fluxo instável e grandes bolhas com pequenos tempos de residência são formadas por coalescência (KANTARCI *et al.*, 2005). Existe uma ampla distribuição de tamanho de bolha principalmente na região central da coluna. O tamanho médio da bolha nessa região é regulada pela coalescência e a dispersão, que por sua vez são controlados pela taxa de dissipação de energia na massa. Tal circulação altamente turbulenta resulta em altos valores de coeficientes de difusão de massa, calor e momento (THORAT e JOSHI, 2004).

O regime pistonado ou *slugging* foi observado apenas em pequenos diâmetros de colunas geralmente utilizadas em laboratório e com altas taxas de fluxo de gás. Este regime leva esse nome, a partir da formação de *slugging*, devido as bolhas maiores serem estabilizadas pela parede da coluna.

A Figura 3 mostra os tipos de regime de escoamento mostrando a sua dependência em relação a velocidade superficial do gás e o diâmetro da coluna para fase líquida com baixa viscosidade.

As regiões sombreadas na Figura 3 indicam as regiões de transição entre os vários regimes de escoamento. No entanto, os limites exatos associados com as regiões de transição dependeriam de cada sistema estudado (KANTARCI *et al.*, 2005).

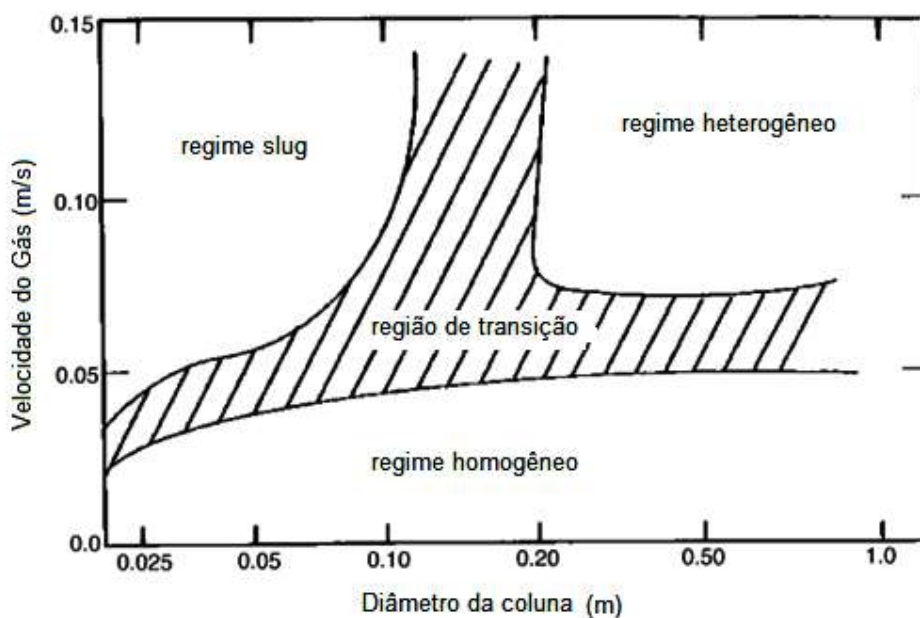


Figura 3 – Mapa dos regime de escoamento para reatores de lama borbulhante.
Fonte: adaptado de DECKWER (1980)

A Figura 4 ilustra o escoamento das bolhas nos diferentes regimes.

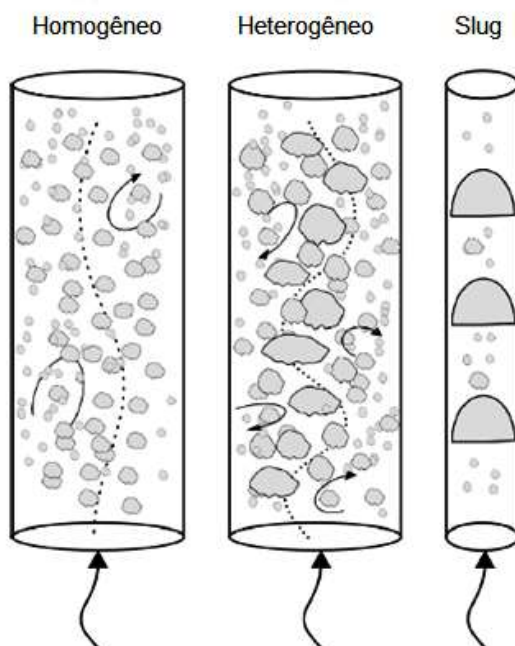


Figura 4 – Regimes comuns de escoamento em colunas de bolhas.
Fonte: SOCCOL (2011)

A velocidade do gás, em que ocorre a transição de regimes, depende do diâmetro da coluna, da *aspect ratio*, das propriedades físicas do sistema e da configuração do pulverizador (THORAT e JOSHI, 2004).

Como resultado, as taxas de transferência de calor e massa e a mistura são bastante diferentes em regimes homogêneo e heterogêneo. Por conseguinte, é importante conhecer as propriedades físicas e os parâmetros de operação do regime que prevalece. À medida que começa a transição de homogêneo para regime heterogêneo, há um aumento de circulação de líquido que é para cima na região central e para baixo nas regiões perto da parede da coluna. Assim, mais gás entra na região central, já que este caminho é o da menor resistência.

2.3. INFLUÊNCIA DAS FASES NO REATOR

Este capítulo aborda a influencia das fases gasosa, líquida e sólida no reator, bem como elas interagem em si fluidodinamicamente.

2.3.1. A Influência da Fase Gasosa

No reator de leito de lama borbulhante, a velocidade de ascensão da bolha é função de seu tamanho e, por conseguinte, dos fatores que possam afetar essa variável. Para bolhas pequenas, a velocidade depende da tensão superficial e da viscosidade do líquido. Já para bolhas grandes, é indiferente às propriedades do líquido.

Durante o movimento de ascensão das bolhas, elas podem coalescerem, ou seja, fundirem-se gerando uma bolha maior com maior velocidade axial, ou dividirem-se em bolhas menores aumentando a área de interface. Isto ocorre devido à interação das bolhas com as partículas sólidas do sistema, devido à presença de outras bolhas e à fluidodinâmica do sistema.

O fenômeno da coalescência ocorre devido a uma região de baixa pressão ser criada em virtude do movimento das bolhas para cima e isso faz com que a bolha de trás tenha ascendência, e assim, por esta aceleração, as bolhas acabam por colidir e formam uma nova bolha maior que as originais. As grandes bolhas formadas em leitos trifásicos são muito fáceis de se romperem em virtude dos fenômenos turbulentos presentes na fase densa, da interação com as partículas sólidas e devido aos vórtices (MATOS, 2001).

Nos reatores em que a coalescência e a quebra de bolhas ocorrem fortemente, o projeto do distribuidor não tem tanta importância em virtude de não influir significativamente no regime de borbulhamento, pois a rápida deformação das bolhas faz diminuir a influência do tamanho inicial da bolha no processo fluidodinâmico. Quando a coalescência é inibida, por exemplo, na adição de surfactantes, torna-se importante a ação do distribuidor, uma vez que, com a diminuição da coalescência, o tamanho inicial da bolha irá afetar todo o regime de fluxo (MATOS, 2001).

Outro fator importante no estudo da fase gasosa no reator é o “holdup” do gás, definido como a fração do volume reacional ocupada pelas bolhas de gás. Ele é um

parâmetro adimensional para fins de projeto, que caracteriza os fenômenos de transporte do sistema de coluna de bolhas. A variação espacial do *holdup* do gás é um fator importante que dá origem a variação de pressão e, assim, a recirculação do líquido. Ele depende do tamanho das bolhas, de sua velocidade de ascensão, da vazão mássica do gás e da área interfacial entre as fases.

Kantarci *et al.* (2005) relataram que o *holdup* do gás cresce com o aumento da velocidade superficial. Encontrou-se que este aumento foi proporcional para o regime homogêneo e que, para regime heterogêneo, a proporcionalidade foi menos pronunciada.

Yong e Sang (1991) mostraram que para circunstâncias em que as bolhas se apresentam sob regime homogêneo, o perfil radial do *holdup* do gás é quase plano, enquanto que para regimes heterogêneos, o *holdup* local do gás diminui com a direção radial, como pode ser visto na Figura 5. Ele tem um valor máximo no centro da coluna, pois as bolhas coalescidas tendem a subir ao longo do centro da coluna, devido ao efeito de parede, sendo acompanhada por numerosas pequenas bolhas. A Figura 5 ilustra o comportamento do *holdup* (ϵ_g) em diferentes velocidades do gás (u_g) pela coordenada x normalizada.

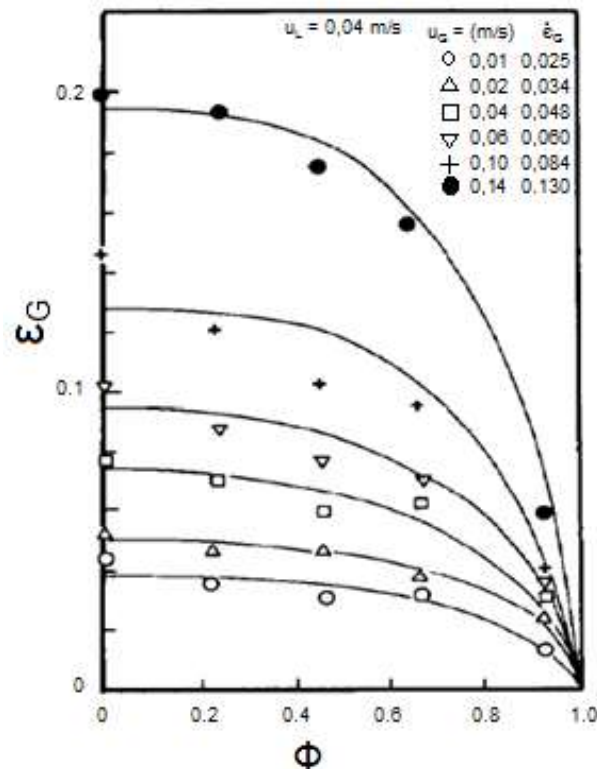


Figura 5 – Distribuição radial do holdup do gás.
Fonte: YU e KIM (1991)

A Figura 6 ilustra os regimes de escoamento a partir do *holdup* e da velocidade superficial do gás.

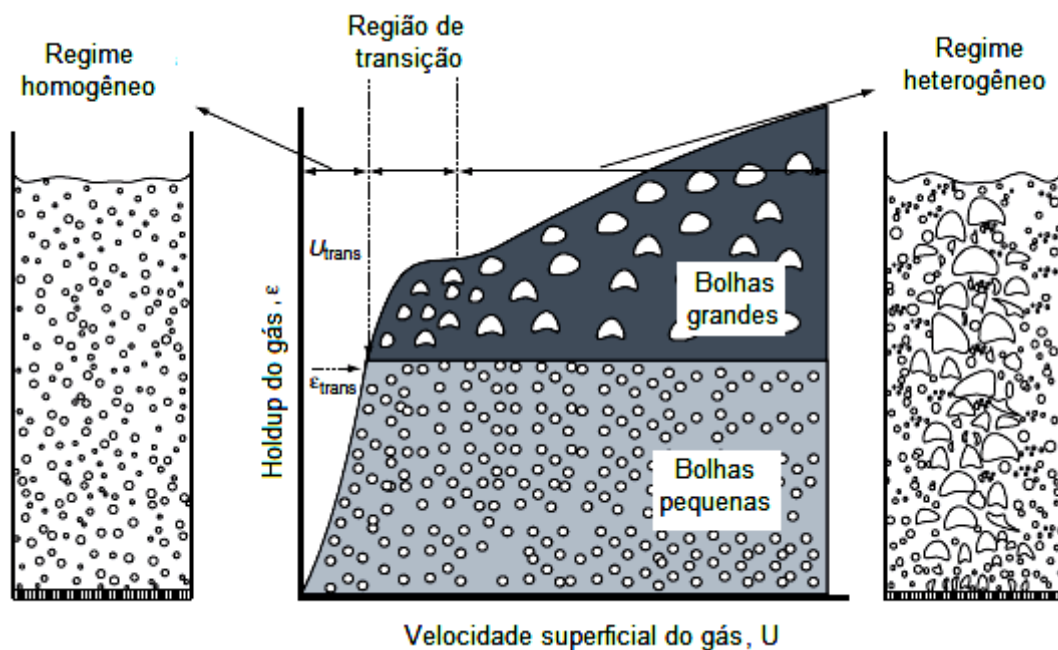


Figura 6 – Holdup do gás em função da sua velocidade superficial
Fonte: adaptado de KRISHNA (2000)

As propriedades da fase líquida tem um impacto na formação da bolha e tendências de coalescência, por isso é um fator importante que afeta o *holdup* do gás. Um aumento na viscosidade do líquido resulta em grandes bolhas e, portanto, maior velocidades ascendentes e menor *holdup* do gás. Também é relatado que a adição de uma pequena quantidade de agente surfactante na fase líquida resulta em valores significativamente mais altos do *holdup* do gás, pois a tensão superficial da bolha diminui, gerando bolhas menores. Qualquer fato que contribua para uma diminuição da coalescência contribui para um aumento da área interfacial e consequentemente do *holdup* do gás.

Veera *et al.* (2004) investigaram *holdups* de gás na presença de líquidos formadores de espuma e concluíram que o efeito da concentração de agente formador de espuma no perfil de *holdup* dependia do *design* do borrifador, da razão de aspecto coluna e velocidade superficial do gás.

Além disso, a presença de eletrólito ou impurezas também aumenta o *holdup* do gás. Kantarci *et al.* (2005) na sua revisão enunciam que se estudou o *holdup* do gás em vários líquidos orgânicos e mostrou-se que, em várias misturas os *holdups* de

gás foram maiores em relação ao líquido puro com as mesmas propriedades (tensão superficial, densidade e viscosidade). Também se concluiu que o *holdup* do gás foi superior com gases de alta densidade.

O efeito da concentração de sólidos e de tamanho de partícula no *holdup* do gás foi investigado por vários estudiosos. Kantarci *et al.* (2005) citam que um aumento na concentração dos sólidos geralmente reduz o *holdup* do gás. Esse fenômeno torna a fase densa mais espessa, aumentando sua viscosidade.

A velocidade do gás é um fator importante no reator de lama borbulhante para manter as partículas sólidas em suspensão, em uma dada concentração de sólidos. Quando somente o fluxo de líquido não é suficiente para manutenção do sólido em suspensão, existe uma velocidade mínima da corrente de gás que junto com a vazão ascendente de líquido, conseguem manter a fluidização. Essa velocidade, chamada de velocidade crítica do gás, acresce com o aumento da concentração dos sólidos, com o aumento do diâmetro da coluna, e também, é influenciada pelo tamanho da coluna e pelo projeto do distribuidor (MATOS, 2001).

2.3.2. A Influência da Fase Sólida

A fase sólida, agindo como catalisador, juntamente com a fase líquida formam uma fase densa chamada de lama. As características dessa fase influenciam a hidrodinâmica do sistema e as taxas de conversão química que ocorrem.

O conhecimento do coeficiente de dispersão de sólidos e das velocidades relativas das três fases é necessário para avaliar o tempo de permanência e a distribuição do tempo de residência dos sólidos no reator.

A acumulação de sólidos na coluna de bolhas pode ter várias influências sobre o desempenho do reator. Se os sólidos são catalíticos, altas concentrações de sólidos irão diminuir o tempo de residência de líquido e aumentar a área superficial do catalisador, o que acarreta no aumento da taxa de reação. A mistura de sólidos irá determinar a distribuição do tempo de residência das partículas, o que pode influenciar o grau de seletividade e de distribuição de produtos no leito em sistema em que existe rápida desativação catalítica (SMITH e RWETHER, 1985).

Os campos de velocidade turbulentos, que são gerados devido à passagem de gás através da fase densa, causam um movimento complexo de partículas no leito.

Geralmente, no centro da coluna tem-se vazão ascendente e sentido descendente perto das paredes.

O estudo de Smith e Rwether (1985) mostrou o efeito da velocidade do gás na distribuição axial de sólidos. Para as velocidades de gás 0,031, 0,09, 0,15 e 0,2 m/s que foram usadas no estudo, observou-se que com o aumento da velocidade do gás reduziu-se suavemente a variação axial da concentração de sólidos. O aumento da velocidade de lama teve um efeito menor sobre a distribuição de sólidos axial do que uma alteração na velocidade do gás.

O aumento do tamanho, densidade das partículas e o regime de fluxo desempenham grande influência no perfil global da concentração de axial sólidos. O teor de sólidos também influencia no coeficiente de transferência de calor que aumenta com o mesmo (SHIN *et al.*, 2010). De acordo com Matos (2001), as propriedades do líquido como densidade, viscosidade e tensão superficial afetam mais a distribuição de sólidos que variações de regime de borbulhamento como bolhas dispersas ou coalescentes.

Durante o processo no reator, em determinadas condições especiais, o tamanho das partículas pode variar. Uma diminuição do tamanho das partículas pode ser observada em função dos efeitos como fratura térmica, impacto e atrito, efeitos de abrasão entre partículas e destas com a parede. Um aumento do tamanho das partículas pode ser causado pela deposição de materiais produzidos durante a reação sobre o sólido, que além de obstruir os poros do catalisador, leva a má distribuição de partículas de diferentes massas ao longo do leito. Isto proporciona ao processo uma perda de eficiência, fazendo-o operar em uma situação para o qual não estava especificado (MATOS, 2001).

2.3.3. A Influência da Fase Líquida

A fase líquida, em reatores trifásicos, comumente contém um dos reagentes envolvidos na conversão química. A facilidade com que as moléculas cruzam esta fase para adentrar nos poros do catalisador é de essencial influência para as taxas de reação química que ocorrem no sistema.

Segundo Matos (2001), algumas das propriedades desta fase como viscosidade, tensão superficial e densidade, comprometem o tamanho das bolhas

formadas no distribuidor de gás, bem como sua facilidade de ascensão, influenciando os campos de velocidade do sistema.

A Figura 7 ilustra em 3D o escoamento em regime heterogêneo dentro do reator. A região da pluma central é composta por uma grande quantidade de bolhas que apresentam um movimento tortuoso e relativamente lento através da coluna de líquido. Já a região de escoamento rápido das bolhas é caracterizada pela presença de grandes bolhas formadas pela coalescência e que se movimentam de maneira oscilatória.

A região de escoamento descendente é caracterizada pela recirculação do líquido, o qual arrasta consigo pequenas bolhas em regiões próximas a parede. A região de formação de vórtices é distinguida pelo surgimento de escoamento helicoidal na direção axial ao longo da parede.

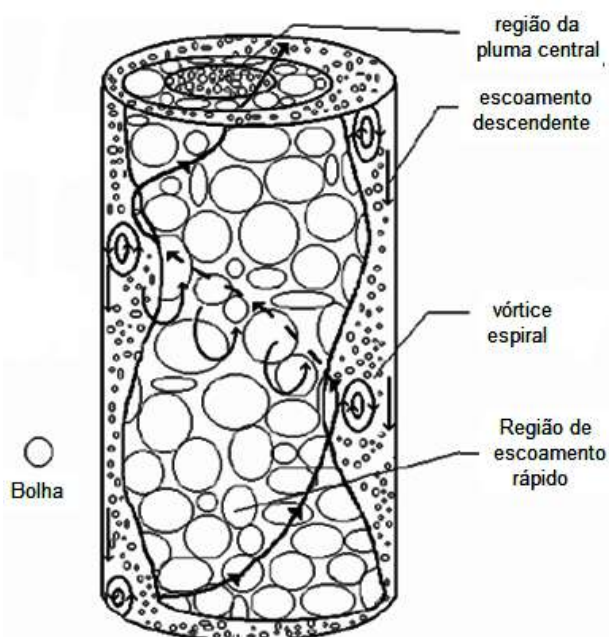


Figura 7 – Estrutura do escoamento da condição de vórtice em espiral
Fonte: Adaptado de CUI (2005)

Cui (2005) estudou em coluna de bolhas os perfis de velocidade do líquido que foram medidos em diferentes posições axiais e em elevada pressão (1,5 MPa). As posições axiais para as medições foram 40, 120, 220, 280 e 420 milímetros acima do distribuidor. A altura do líquido no reator era de 650 mm. O resultado obtido está ilustrado na Figura 8, na região de entrada, 40 mm acima do distribuidor de gás, a velocidade axial de líquido foi baixa e o perfil achatado, ou seja, o líquido não foi

totalmente acelerado pelas bolhas de subida que é pequena e a distribuição do tamanho desta foi uniforme na região.

Aumentando a altura axial, pequenas bolhas coalesceram para formar bolhas maiores, e a aceleração de líquido por ascensão das bolhas foi pronunciado. Neste desenvolvimento da região, 120 mm acima do distribuidor os perfis de velocidade de líquidos foram mais acentuados e observou-se a circulação interna do líquido. Quando a estrutura de escoamento ficou desenvolvida, em torno de 220 mm acima do distribuidor, os processos de coalescência e quebra atingiram um estado de equilíbrio e o perfil de velocidade líquidos estabilizou-se nesta região.

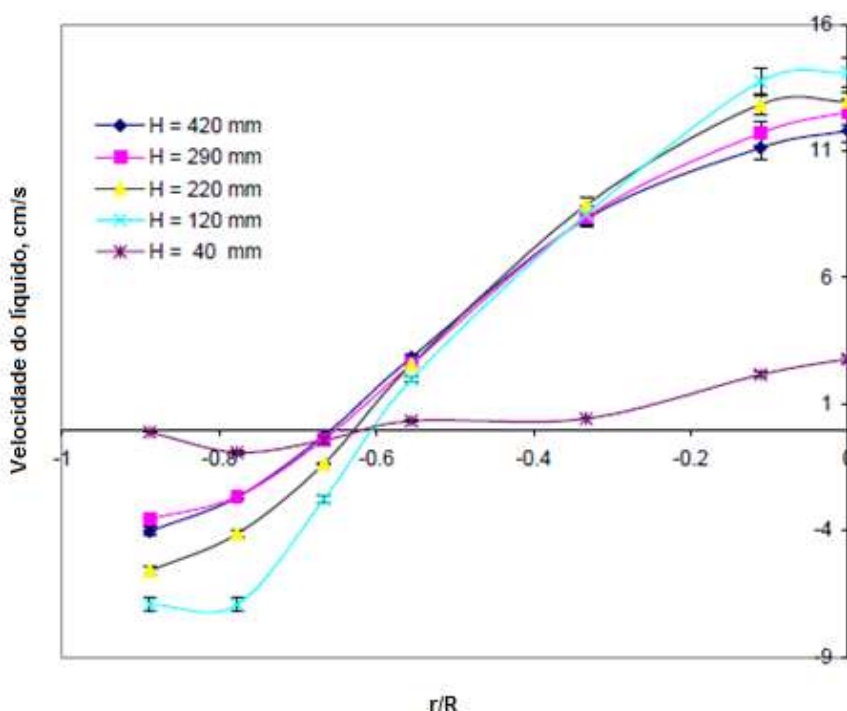


Figura 8 – Perfil da velocidade do líquido em diferentes posições axiais
Fonte: Adaptado de CUI (2005)

Pôde-se concluir que a vazão de bolhas em ascensão através da fase densa acarreta uma complexa circulação de fluidos, que se mostra descendente perto das paredes e ascendente na região central.

2.4. O HIDROCRAQUEAMENTO

O hidrocraqueamento é um processo no qual o resíduo da destilação à vácuo de petróleo (frações pesadas de petróleo) é colocado em presença de catalisador, em condições de elevada temperatura e alta pressão de hidrogênio, para promover reações de quebra das cadeias de hidrocarbonetos (craqueamento) e de hidrogenação com a remoção de heteroátomos.

Segundo Carbonell (2003), as temperaturas utilizadas são entre 410 e 480 °C e a pressão de hidrogênio entre 100 e 250 bar.

O hidrocraqueamento é uma reação caracterizada por seus produtos serem de massa molar significativamente mais baixo do que a alimentação (GRUIA, 2006).

O resíduo a destilação de petróleo a vácuo, chamado de resíduo de vácuo, é a fração mais pesada da destilação do petróleo, obtida no fundo da destilação a vácuo. Esse resíduo é composto por longas cadeias de hidrocarbonetos, com estruturas aromáticas, grupos multifuncionais e elevados teores de heteroátomos. Essa fração representa em geral de 10 a 30 % dos petróleos, sendo que pode chegar a 40 % ou mais dos petróleos pesados (CARBONELL, 2003).

O objetivo da hidroconversão é aumentar a relação molar H/C (hidrogênio/carbono), produzir destilados médios (faixa do diesel) e também diminuir os teores de heteroátomos para o nível aceitável. A elevada relação H/C é uma propriedade desejável no diesel e no querosene de aviação, pois melhora a ignição e reduz a emissão de fumaça desses motores (GRAY, 1994).

Complexas reações catalíticas e térmicas ocorrem no reator de hidroconversão promovendo craqueamento, hidrodessulfurização, hidrodesnitrogenação, hidrodesmetalização, hidrodesoxigenação, hidrogenação e formação de coque. Nas reações de hidrodessulfurização, hidrodesnitrogenação, hidrodesmetalização e hidrodesoxigenação ocorre a retirada do heteroátomo pela hidrogenação das reações químicas. Como consequência destas reações diminui-se a formação de emissões de poluentes na queima do óleo, como NO_x e SO_x.

Os compostos de enxofre, nitrogênio e oxigênio são removidos do óleo como produtos gasosos (H₂S, NH₃ e H₂O), em contrapartida a eliminação de níquel e vanádio resulta na deposição, na forma de sulfeto metálico, sobre o catalisador. Assim sendo, pode ocorrer desativação do catalisador pela diminuição da atividade do

mesmo em virtude do depósito de matérias sobre os sítios ativos e ocorrer o entupimento dos poros (ABREU, 1995).

Em geral, moléculas dentro de uma razoável faixa de massa molar são comercialmente mais valiosas que moléculas excessivamente grandes ou que contenham heteroátomos. A presença de heteroátomos como o oxigênio, nitrogênio, enxofre e metais diminuem a qualidade dos produtos do petróleo, pois lhe atribuem características não desejáveis como corrosibilidade, formação de precipitados, toxicidade e baixo poder de queima (MATOS, 2001).

Gray (1994) propõe as reações nas seguintes etapas: inicialmente ocorre o craqueamento térmico das cadeias laterais do hidrocarboneto resultando em um núcleo aromático. Essa etapa representa entre 56 e 67 % da conversão do resíduo. Em presença de hidrogênio ocorrem reações de quebra das ligações C-heteroátomos e de hidrogenação levando à formação de destilados e gases. Na ausência de hidrogênio predominam reações de condensação com formação de coque.

Embora este processo necessite da implantação de equipamentos caros e de grande porte devido às drásticas condições do processo e deposição metálica no catalisador, a crescente demanda por destilados de menor massa molar e maior valor agregado, evitando perdas e poluição, faz com que esse processo se torne economicamente vantajoso. Esta tecnologia tem sido aplicada para produzir gasolina de alta qualidade, combustível para aviação, gásóleo e lubrificantes.

2.4.1. Aplicação do Leito de Lama no Hidrocraqueamento

No leito de lama borbulhante, o escoamento do fluido promove intensa mistura entre as fases, possuindo algumas vantagens:

- Grandes taxas de transferência de calor, o que evita pontos quentes no reator e facilita o controle de temperatura, que é um fator muito importante, pois as reações de hidrogenação são fortemente exotérmicas (GRAY, 1994);
- Facilidade de reposição do catalisador durante a operação, que é de extrema importância em função do processo apresentar desativação catalítica.

2.5. AUXÍLIO DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

A dificuldade para se encontrar soluções analíticas para os modelos matemáticos que predizem as características fluidodinâmicas da coluna de bolhas é o fato de elas serem equações diferenciais parciais (EDPs) não lineares e a conjuntura matemática dessa classe de equações ainda não está suficientemente desenvolvida para determinar soluções analíticas.

Por este motivo, muitos estudos se fazem a partir de análise experimental com testes e reprodução física do estudo. Entretanto, esta metodologia tem limitações relacionadas ao custo, tempo despendido e ao equipamento, tendo como desvantagem, o fato de as medidas serem realizadas em apenas alguns pontos da região em que ocorrem os fenômenos de interesse (FORTUNA, 2000).

Uma segunda alternativa é a utilização de sistemas computacionais, que por métodos numéricos obtêm uma solução tão aproximada quanto o usuário queira para estes problemas. Essa aproximação numérica utiliza um procedimento matemático denominado de discretização, que transforma as equações diferenciais no domínio contínuo em equações algébricas no domínio discreto. Com isso, o domínio em estudo é subdividido em diversos subdomínios, ou pequenos sistemas, nos quais as leis físicas de conservação são válidas e expressas na forma de sistemas de equações algébricas. Como consequência disso, deve-se criar a malha numérica ou *grid* (discretização do problema) (SOCCOL, 2001).

As técnicas numéricas destacam-se cada vez mais, devido ao avanço no desenvolvimento de computadores, na resolução de problemas de engenharia. A área da computação científica que estuda métodos computacionais para a simulação que abrange fluidos em movimento, com ou sem troca de calor de situações complexas, é chamada fluidodinâmica computacional (*CFD-computacional fluido dynamics*).

A técnica CFD é baseada na solução de equações de balanço locais de massa e de quantidade de movimento sendo, teoricamente, capaz de fornecer meios de descrever todo o fenômeno físico local que induz aos padrões de escoamento nas colunas de bolhas (SANYAL et al., 2005).

Com o aumento do poder computacional, houve uma otimização no tempo e no custo envolvido nas simulações. Outra vantagem da técnica é a sua capacidade de visualizar os resultados, como por exemplo os campos de velocidade, que possibilita um melhor entendimento dos fenômenos envolvidos (SILVA JUNIOR, 2011).

As vantagens desta técnica em relação aos métodos experimentais, para o projeto de sistemas fluidos, compreendem na redução substancial do tempo e dos custos de novos projetos, na capacidade de estudar sistemas onde experimentos controlados são muito difíceis, senão impossíveis, e na obtenção de resultados com detalhamento quase ilimitado, de forma não intrusiva (ROSA, 2008).

No entanto, deve-se atentar que, embora os métodos computacionais ofereçam diversas vantagens, o uso de técnicas experimentais é de extrema importância na análise de problemas. Isto porque, mesmo que um caso simulado resulte em dados coerentes do ponto de vista numérico, pode-se facilmente tratar-se de um resultado inconsistente com a realidade. Além disso, mesmo que fisicamente correto, o resultado pode apresentar alguma divergência percebida apenas quando comparado com dados reais.

Para a simulação de um equipamento através da CFD, é necessária a elaboração de uma geometria que corresponda aquela que se deseja simular, para então determinar as condições operacionais presentes no equipamento e calcular o problema (ROSA, 2008).

A resolução de métodos numéricos não exclui a utilização dos outros métodos para realizar o estudo, as técnicas na verdade se complementam. A simulação pode orientar o projetista na escolha do equipamento e o teste numérico pode ser comparado com o experimental para a verificação do mesmo.

Portanto, o desenvolvimento de modelos matemáticos por meio da integração entre experimentações físicas e numéricas é de grande interesse e essencial para se prever corretamente o comportamento fluidodinâmico de escoamentos monofásicos e multifásicos (SOCCOL, 2011).

2.5.1. Etapas do CFD

De modo geral, a CFD é dividida em três etapas principais: (I) Definição do domínio computacional e Pré-processamento; (II) Processamento dos dados (*Solver*); (III) Pós-processamento.

Na etapa de pré-processamento, define-se o domínio computacional com geometria da região de interesse, gerando-se subdivisões do domínio em um número finito de volumes de controle chamado de malhas numéricas.

Também são estabelecidos nesta etapa, as condições de início, as condições delimitadoras do problema, condições de contorno, as propriedades físicas dos fluidos, os modelos matemáticos, as equações de fechamento, os detalhes numéricos, gerando assim, um arquivo inicial para o *solver*, para que o *software* possa resolver o conjunto de equações algébricas.

O caso definido na etapa anterior será agora resolvido a partir de um "solver" que suporta um conjunto de equações algébricas. O *solver* numérico opera de forma a minimizar os erros de aproximação numérica para cada equação algébrica, em cada ponto discreto, até que seja alcançado um critério de parada (tolerância), geralmente com valores muito próximo a zero.

O problema será solucionado por meio do seguinte algoritmo: (I) – Integração das equações de transporte sobre todos os (finitos) volumes de controle do domínio da solução; (II) – Discretização das equações de transporte, em que as equações diferenciais a serem solucionadas são substituídas por expressões algébricas aproximadas, escritas em termos dos valores nodais das variáveis dependentes; (III) – Solução das equações algébricas por métodos iterativos (SILVA, 2011).

Na medida em que se aumentam os números de pontos discretos em uma malha numérica, chega-se mais próximo da solução exata. Porém, se refinar a malha numérica, mais pontos estão presentes e maior é o número de equações algébricas. Como consequência, é necessário um maior poder computacional. O *solver* ou o processador, produz a solução numérica das equações de conservação para cada ponto discreto da malha. No entanto, independentemente da quantidade de pontos é necessário o tratamento da informação com um procedimento chamado de pós-processamento (SOCCOL, 2001).

Na etapa de pós processamento, o *software* interpreta os arquivos de solução originados do processamento com os valores das propriedades conserváveis para cada posição da malha computacional, interpolando os resultados em locais onde não há haviam pontos discretos, garantindo uma total visualização do domínio espacial na forma de campos escalares conserváveis, propriedades calculadas, linhas de fluxo da velocidade e até animações complexas (SOCCOL, 2001).

Neste sentido, Fortuna (2000) mostrou em um diagrama as etapas apresentadas e descritas de maneira simplificada, conforme a Figura 9.



Figura 9 – Etapas para a obtenção da solução numérica
Fonte: adaptado de FORTUNA (2000)

Neste Trabalho utilizou-se o *software* SALOME na criação da geometria e malha numérica e o pacote ANSYS CFX 12.0 nas predições dos cálculos fluidodinâmicos.

2.6. A MODELAGEM MATEMÁTICA FLUIDODINÂMICA

Neste capítulo mostrar-se-á e discutir-se-á a modelagem matemática para a análise em CFD de sistemas multifásicos gás-líquido-sólido em coluna de lama borbulhante.

As forças que atuam em um volume de controle são chamadas de forças gravitacionais e forças de superfície. As forças de gravitacionais agem em toda parte do volume de controle e são as forças da gravidade, elétrica e magnética, já as de superfície agem sobre as superfícies de controle e são as forças de pressão e viscosas e as forças de reação nos pontos de contato (ÇENGEL, 2007).

Da segunda lei de Newton, que afirma que “a aceleração de um corpo é proporcional à força resultante que atua sobre ele e inversamente proporcional a sua massa”, tem-se a equação do momento linear Equação (1) e (3).

$$\sum \vec{F} = m\vec{a} = \sum \vec{F}_{campo} + \sum \vec{F}_{superfície} \quad (1)$$

Em que,

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (2)$$

M = massa do corpo que sofre a força

t = espaço de tempo

\vec{v} = vetor velocidade

\vec{F} = vetor força

Reescrevendo o primeiro membro da Equação (1) obtem-se:

$$\sum \vec{F} = \frac{d(m\vec{v})}{dt} \quad (3)$$

Das forças gravitacionais a única que atua neste estudo é a gravidade, que exerce uma força para baixo em cada elemento do volume de controle. Sendo assim a primeira parte do segundo membro da Equação (1) fica:

$$\sum \vec{F}_{campo} = d\vec{F}_{gravitacional} = \rho \vec{g} dV \quad (4)$$

Em que:

ρ = densidade média do elemento

\vec{g} = vetor gravitacional

As forças de superfície, porém, não são tão simples de analisar pois elas são tensões e assim se divide em componentes. Sabe-se da Mecânica dos Fluidos que a tensão é definida como força por unidade de área a qual ela atua. As componentes da tensão são a normal e de cisalhamento. A tensão normal é a componente da força que atua sobre a superfície por unidade de área, e a tensão tangencial (cisalhamento) é a componente da força que atua sobre uma superfície. Se o fluido está em repouso, a tensão normal é chamada de pressão (ÇENGEL, 2007).

A Figura 10 representa as tensões em coordenadas cilíndricas.

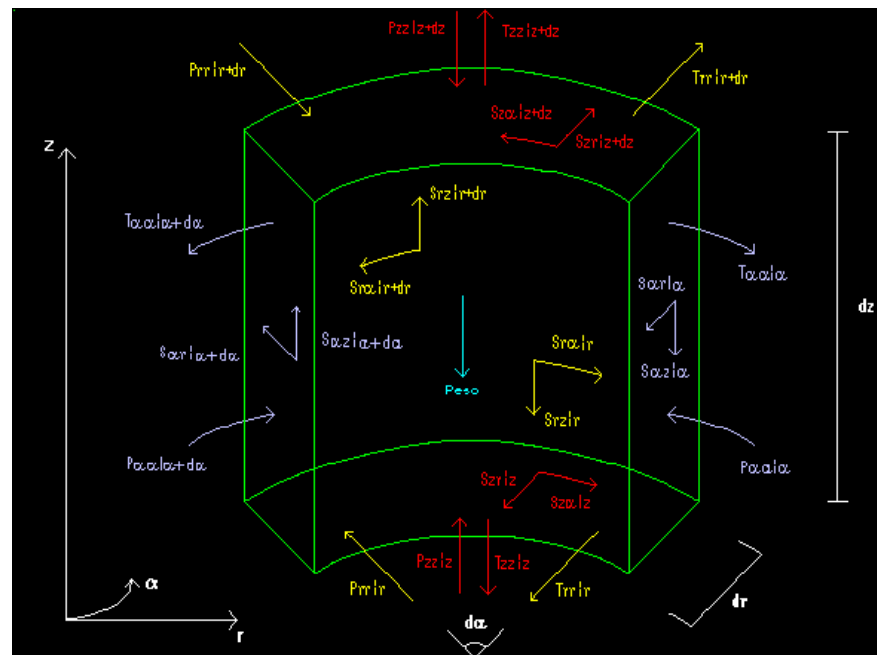


Figura 10 – Representação das tensões em um volume de controle em coordenadas cilíndricas
Fonte: adaptado de MATOS (2001)

A segunda parte da Equação (1) é escrita na forma de:

$$\sum \vec{F}_{superficie} = \sum \vec{\tau}_T A \quad (5)$$

Sendo

$\vec{\tau}_T$ = tensão total que atua na área A

Substituindo a Equação (5) e a Equação (4) na Equação (1), tem-se:

$$\sum \vec{F} = \frac{d(m\vec{v})}{dt} = \rho \vec{g} dV + \sum \vec{\tau}_T A \quad (6)$$

Dividindo a Equação (6) por dV obtem-se:

$$\frac{1}{dV} \frac{d(m\vec{v})}{dt} = \frac{1}{dV} \rho \vec{g} dV + \frac{1}{dV} \sum \vec{\tau}_T A \quad (7)$$

Aplicando o limite de dV tendendo a zero em ambos os lados encontra-se:

$$\lim_{dV \rightarrow 0} \frac{1}{dV} \frac{d(m\vec{v})}{dt} = \lim_{dV \rightarrow 0} \frac{1}{dV} \rho \vec{g} dV + \lim_{dV \rightarrow 0} \frac{1}{dV} \sum \vec{\tau}_T A \quad (8)$$

Segundo Prieve (2000) o $\lim_{dV \rightarrow 0} \frac{1}{dV} \sum \vec{\tau}_T A$ da equação (8) é definido como:

$$\nabla \tilde{\tau}_T = \lim_{dV \rightarrow 0} \frac{1}{dV} \int_A (\tau_T \vec{n}) dA \quad (9)$$

Em que o somatório foi substituído por uma integral e o vetor \vec{n} ortogonal à área e aponta para fora do volume de controle.

Um tensor é definido, segundo Prieve (2000), para coordenadas cartesianas como:

$$\tilde{\tau} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \tau_{ij} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_j \quad (10)$$

Em que:

$$\vec{e}_i \otimes \vec{e}_j = \vec{e}_i \vec{e}_j^T$$

Desenvolvendo o tensor tem-se:

$$\tilde{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{11} \vec{e}_1 \otimes \vec{e}_1 & \tau_{12} \vec{e}_1 \otimes \vec{e}_2 & \tau_{13} \vec{e}_1 \otimes \vec{e}_3 \\ \tau_{21} \vec{e}_2 \otimes \vec{e}_1 & \tau_{22} \vec{e}_2 \otimes \vec{e}_2 & \tau_{23} \vec{e}_2 \otimes \vec{e}_3 \\ \tau_{31} \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_1 & \tau_{32} \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_2 & \tau_{33} \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_3 \end{bmatrix}$$

Com:

$$\begin{aligned} \vec{e}_1 \otimes \vec{e}_1 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \vec{e}_1 \otimes \vec{e}_2 &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \vec{e}_1 \otimes \vec{e}_3 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \vec{e}_2 \otimes \vec{e}_1 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \vec{e}_2 \otimes \vec{e}_2 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \vec{e}_2 \otimes \vec{e}_3 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_1 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_2 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} & \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_3 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Lembrando que:

$$\vec{e}_2 \otimes \vec{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} [0 \quad 0 \quad 1] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Substituindo da matriz tem-se:

$$\tilde{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix}$$

Contudo, em coordenadas cilíndricas, r (raio), α (ângulo), e z (altura). Então, o tensor fica:

$$\tilde{\tau} = \begin{bmatrix} T_{zz} & S_{zr} & S_{z\alpha} \\ S_{rz} & T_{rr} & S_{r\alpha} \\ S_{\alpha z} & S_{\alpha r} & T_{\alpha\alpha} \end{bmatrix} \quad (11)$$

Este tensor é o tensor de deformação em que são chamados as tensões normais de T e as tensões tangenciais de S. Então, o tensor total $\tilde{\tau}_T$ é dado como a soma do tensor de deformação e do tensor referente às pressões.

$$\tilde{\tau}_T = -P\tilde{I} + \mu\tilde{D} = \tilde{\tau}_a + \tilde{\tau}_b \quad (12)$$

Então, como o primeiro termo da equação (12) é referente ao fluido em repouso, no seu tensor as tensões tangenciais são nulas e se contrapõem as pressões em suas direções, ou seja:

$$\tilde{\tau}_a = \begin{bmatrix} -P & 0 & 0 \\ 0 & -P & 0 \\ 0 & 0 & -P \end{bmatrix}$$

Que pode ser escrito como: $\tilde{\tau}_a = -P\tilde{I}$

Em que,

$$\tilde{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Representado pela definição de tensor como:

$$\tilde{\tau}_{P\tilde{I}} = -P\vec{e}_z \otimes \vec{e}_z - P\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r - P\vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha \quad (13)$$

Calculando o divergente do tensor $-P\tilde{I}$, tem-se:

$$\tilde{\tau}_{P\tilde{I}} = -P\vec{e}_z \otimes \vec{e}_z - P\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r - P\vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha \quad (14)$$

Em que:

$$\vec{e}_z \otimes \vec{e}_z = \vec{e}_z \vec{e}_z^T = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r &= \vec{e}_r \vec{e}_r^T = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) \\ \text{sen}(\alpha) \\ 0 \end{bmatrix} [\cos(\alpha) \quad \text{sen}(\alpha) \quad 0] \\
&= \begin{bmatrix} \cos^2(\alpha) & \cos(\alpha)\text{sen}(\alpha) & 0 \\ \cos(\alpha)\text{sen}(\alpha) & \text{sen}^2(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
\vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha &= \vec{e}_\alpha \vec{e}_\alpha^T = \begin{bmatrix} -\text{sen}(\alpha) \\ \cos(\alpha) \\ 0 \end{bmatrix} [-\text{sen}(\alpha) \quad \cos(\alpha) \quad 0] \\
&= \begin{bmatrix} \text{sen}^2(\alpha) & -\cos(\alpha)\text{sen}(\alpha) & 0 \\ -\cos(\alpha)\text{sen}(\alpha) & \cos^2(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Logo pela definição de gradiente:

$$\nabla \tilde{\tau}_{PI} = \lim_{dV \rightarrow 0} \frac{1}{dV} \int_A (\tau_{PI} \vec{n}) dA \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
\nabla \tilde{\tau}_{PI} &= \frac{1}{rd\alpha dr dz} \sum_{\text{todas as áreas}} \vec{n} [-P\vec{e}_z \otimes \vec{e}_z - P\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r - P\vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha] dA \\
\nabla \tilde{\tau}_{PI} &= \frac{1}{rd\alpha dr dz} [-P\vec{e}_z \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z r. d\alpha. dr|_{z+dz} - P\vec{e}_z \vec{e}_r \otimes \vec{e}_r r. d\alpha. dr|_{z+dz} \\
&\quad - P\vec{e}_z \vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha r. d\alpha. dr|_{z+dz} - P\vec{e}_r \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z r. d\alpha. dz|_{r+dr} \\
&\quad - P\vec{e}_r \vec{e}_r \otimes \vec{e}_r r. d\alpha. dz|_{r+dr} - P\vec{e}_r \vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha r. d\alpha. dz|_{r+dr} \\
&\quad - P\vec{e}_\alpha \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z dr. dz|_{\alpha+d\alpha} - P\vec{e}_\alpha \vec{e}_r \otimes \vec{e}_r dr. dz|_{\alpha+d\alpha} - P\vec{e}_\alpha \vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha dr. dz|_{\alpha+d\alpha}] \\
&\quad + P\vec{e}_z \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z r. d\alpha. dr|_z + P\vec{e}_z \vec{e}_r \otimes \vec{e}_r r. d\alpha. dr|_z + P\vec{e}_z \vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha r. d\alpha. dr|_z \\
&\quad + P\vec{e}_r \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z r. d\alpha. dz|_r + P\vec{e}_r \vec{e}_r \otimes \vec{e}_r r. d\alpha. dz|_r + P\vec{e}_r \vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha r. d\alpha. dz|_r \\
&\quad + P\vec{e}_\alpha \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z dr. dz|_\alpha + P\vec{e}_\alpha \vec{e}_r \otimes \vec{e}_r dr. dz|_\alpha + P\vec{e}_\alpha \vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha dr. dz|_\alpha
\end{aligned}$$

Efetando agora as operações matriciais tem-se:

$$\begin{aligned}
\vec{e}_z \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z &= \vec{e}_z \\
\vec{e}_z \vec{e}_r \otimes \vec{e}_r &= 0 \\
\vec{e}_z \vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha &= 0 \\
\vec{e}_r \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z &= 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{e}_r \vec{e}_r \otimes \vec{e}_r &= [\cos^3(\alpha) + \cos(\alpha) \operatorname{sen}^2(\alpha), \cos^2(\alpha) \operatorname{sen}(\alpha) + \operatorname{sen}^3(\alpha), 0] \\
&= [\cos(\alpha) (\cos^2(\alpha) + \operatorname{sen}^2(\alpha)), \operatorname{sen}(\alpha) (\operatorname{sen}^2(\alpha) + \cos^2(\alpha)), 0] \\
&= [\cos(\alpha), \operatorname{sen}(\alpha), 0] = \vec{e}_r \\
\vec{e}_r \vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha &= [\operatorname{sen}^2(\alpha) \cos(\alpha) - \operatorname{sen}^2(\alpha) \cos(\alpha), 0, 0] = [0, 0, 0] \\
\vec{e}_\alpha \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z &= 0 \\
\vec{e}_\alpha \vec{e}_r \otimes \vec{e}_r &= [-\operatorname{sen}(\alpha) \cos^2(\alpha) + \operatorname{sen}(\alpha) \cos^2(\alpha), -\operatorname{sen}^2(\alpha) \cos(\alpha) + \operatorname{sen}^2(\alpha) \cos(\alpha), 0] \\
&= [0] \\
\vec{e}_\alpha \vec{e}_\alpha \otimes \vec{e}_\alpha &= [-\operatorname{sen}^3(\alpha) - \cos^2(\alpha) \operatorname{sen}(\alpha), \cos(\alpha) \operatorname{sen}^2(\alpha) + \cos^3, 0] \\
&= [-\operatorname{sen}(\alpha) (\operatorname{sen}^2(\alpha) + \cos^2(\alpha)), \cos(\alpha) (\operatorname{sen}^2(\alpha) + \cos^2(\alpha))] \\
&= [-\operatorname{sen}(\alpha), \cos(\alpha), 0] = \vec{e}_\alpha
\end{aligned}$$

Então:

$$\begin{aligned}
\nabla \tilde{\tau}_{P\bar{I}} &= \frac{1}{r d\alpha dr dz} [(-P \cdot r \cdot d\alpha \cdot dr \cdot \vec{e}_z|_{z+dz} + P \cdot r \cdot d\alpha \cdot dr \vec{e}_z|_z) \\
&\quad + (-P \cdot r \cdot d\alpha \cdot dz \cdot \vec{e}_r|_{r+dr} + P \cdot r \cdot d\alpha \cdot dz \cdot \vec{e}_r|_r) + (-P \cdot dr \cdot dz \cdot \vec{e}_r|_{\alpha+d\alpha} \\
&\quad + P \cdot dr \cdot dz \cdot \vec{e}_r|_\alpha)]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\nabla \tilde{\tau}_{P\bar{I}} &= -\frac{\partial(P\vec{e}_z)}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial(rP\vec{e}_r)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial(P\vec{e}_\alpha)}{\partial \alpha} \\
\nabla \tilde{\tau}_{P\bar{I}} &= -\frac{\partial(P)}{\partial z} \vec{e}_z - \frac{1}{r} \frac{\partial(rP)}{\partial r} \vec{e}_r - \frac{1}{r} \left[\frac{\partial(P)}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha + P \vec{e}_r \right]
\end{aligned}$$

Desenvolvendo tem-se:

$$\nabla \tilde{\tau}_{P\bar{I}} = -\frac{\partial(P)}{\partial z} \vec{e}_z - \frac{1}{r} \left[P + r \frac{\partial(P)}{\partial r} \right] \vec{e}_r - \frac{1}{r} \left[\frac{\partial(P)}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha + P \vec{e}_r \right]$$

$$\nabla \tilde{\tau}_{P\bar{I}} = -\frac{\partial(P)}{\partial z} \vec{e}_z - \frac{\partial(P)}{\partial r} \vec{e}_r - \frac{1}{r} \frac{\partial(P)}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha \quad (16)$$

Ou seja:

$$\nabla \tilde{\tau}_{P\bar{I}} = -\text{gradiente de pressão}$$

O segundo termo da Equação (12) é devido ao caso de o fluido estar em movimento, em que haverá uma deformação do elemento de volume fluido devido a existência das tensões tangenciais. Para fluidos newtonianos é observada uma relação linear entre o tensor tensão e o tensor deformação ($\tau = \mu(dv/dx)$).

Desenvolvendo a seguir o segundo termo da equação $\tilde{\tau}_b = \mu\tilde{D}$ da equação (12), tem-se, segundo Canedo (2010), que o tensor deformação \tilde{D} é:

$$\tilde{D} = \nabla\tilde{v} + \nabla\tilde{v}^T \quad (17)$$

Em que $\nabla\tilde{v}$ é o gradiente de velocidade e $\nabla\tilde{v}^T$ o gradiente de velocidade transposto.

Pela definição tensorial tem-se que:

$$\nabla\tilde{v} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \vec{e}_i \sum_{j=1}^3 v_j \vec{e}_j \quad (18)$$

Efetuada a operação fica:

$$\nabla\tilde{v} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_j \quad (19)$$

- O vetor gradiente em coordenadas cilíndricas

Sabe-se que em um gradiente as suas derivadas são em relação a um comprimento físico, por isso, nas coordenadas cilíndricas não se deriva em relação a α mas em relação dS , pois S é o comprimento físico na direção de α , onde $dS = r \alpha$. Portanto, em coordenadas cartesianas o gradiente é:

$$\nabla(x) = \frac{\partial(x)}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial(x)}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha + \frac{\partial(x)}{\partial z} \vec{e}_z$$

Sendo

$$\frac{\partial(x)}{\partial S} = \frac{1}{r} \frac{\partial(x)}{\partial \alpha}$$

$$v = u$$

$$\nabla(\tilde{u}) = \left(\frac{\partial}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_z \right) (u_r \vec{e}_r + u_\alpha \vec{e}_\alpha + u_z \vec{e}_z) \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \nabla(\tilde{u}) &= \frac{\partial u_r}{\partial r} \vec{e}_r \vec{e}_r + \frac{\partial e_r}{\partial r} \vec{e}_r u_r + \frac{\partial u_\alpha}{\partial r} \vec{e}_r e_\alpha + \frac{\partial e_\alpha}{\partial r} \vec{e}_r u_\alpha + \frac{\partial u_z}{\partial r} \vec{e}_r e_z + \frac{\partial e_z}{\partial r} \vec{e}_r u_z \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial e_r}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha u_r + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\alpha}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha e_\alpha + \frac{1}{r} \frac{\partial e_\alpha}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha u_\alpha + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha \vec{e}_z \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial e_z}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha e_z + \frac{\partial u_r}{\partial z} \vec{e}_r \vec{e}_r + \frac{\partial e_r}{\partial z} \vec{e}_r u_r + \frac{\partial u_\alpha}{\partial z} \vec{e}_r e_\alpha + \frac{\partial e_\alpha}{\partial z} \vec{e}_r u_\alpha \\ &+ \frac{\partial u_z}{\partial z} \vec{e}_r \vec{e}_z + \frac{\partial e_z}{\partial z} \vec{e}_r u_z \end{aligned}$$

Segundo Papanastasiou (2000) sabe-se que:

$$\frac{\partial e_r}{\partial r} = \frac{\partial e_\alpha}{\partial r} = \frac{\partial e_z}{\partial r} = \frac{\partial e_z}{\partial \alpha} = \frac{\partial e_r}{\partial z} = \frac{\partial e_\alpha}{\partial z} = \frac{\partial e_z}{\partial z} = 0$$

E,

$$\frac{\partial e_r}{\partial \alpha} = e_\alpha$$

$$\frac{\partial e_\alpha}{\partial \alpha} = -e_r$$

Tem-se:

$$\begin{aligned} \nabla(\tilde{u}) &= \frac{\partial u_r}{\partial r} \vec{e}_r \vec{e}_r + \frac{\partial u_\alpha}{\partial r} \vec{e}_r e_\alpha + \frac{\partial u_z}{\partial r} \vec{e}_r e_z + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha \vec{e}_r + \frac{1}{r} e_\alpha \vec{e}_\alpha u_r + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\alpha}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha e_\alpha \\ &- \frac{1}{r} e_r \vec{e}_\alpha u_\alpha + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha \vec{e}_z + \frac{\partial u_r}{\partial z} \vec{e}_r \vec{e}_r + \frac{\partial u_\alpha}{\partial z} \vec{e}_r e_\alpha + \frac{\partial u_z}{\partial z} \vec{e}_r \vec{e}_z \end{aligned}$$

Reorganizando fica:

$$\begin{aligned} \nabla(\tilde{u}) &= \frac{\partial u_r}{\partial r} \vec{e}_r \vec{e}_r + \frac{\partial u_\alpha}{\partial r} \vec{e}_r e_\alpha + \frac{\partial u_z}{\partial r} \vec{e}_r e_z + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_r}{\partial \alpha} - u_\alpha \right) \vec{e}_\alpha \vec{e}_r + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial \alpha} + u_r \right) e_\alpha \vec{e}_\alpha \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha \vec{e}_z + \frac{\partial u_r}{\partial z} \vec{e}_r \vec{e}_r + \frac{\partial u_\alpha}{\partial z} \vec{e}_r e_\alpha + \frac{\partial u_z}{\partial z} \vec{e}_r \vec{e}_z \end{aligned}$$

$$\nabla \tilde{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_z}{\partial z} & \frac{\partial u_r}{\partial z} & \frac{\partial u_\alpha}{\partial z} \\ \frac{\partial u_z}{\partial r} & \frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{\partial u_\alpha}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \alpha} & \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_r}{\partial \alpha} - u_\alpha \right) & \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial \alpha} + u_r \right) \end{bmatrix}$$

$$\nabla \tilde{u}^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_z}{\partial z} & \frac{\partial u_z}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} & \frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_r}{\partial \alpha} - u_\alpha \right) \\ \frac{\partial u_\alpha}{\partial z} & \frac{\partial u_\alpha}{\partial r} & \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial \alpha} + u_r \right) \end{bmatrix}$$

Logo,

$$\nabla \tilde{u} + \nabla \tilde{u}^T = \begin{bmatrix} 2 \frac{\partial u_z}{\partial z} & \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial z} \\ \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} & 2 \frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_r}{\partial \alpha} - u_\alpha \right) + \frac{\partial u_\alpha}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial z} & \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_r}{\partial \alpha} - u_\alpha \right) + \frac{\partial u_\alpha}{\partial r} & 2 \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial \alpha} + u_r \right) \end{bmatrix}$$

Em que, o tensor tensão é dado por:

$$\nabla \tilde{\tau}_b = \mu (\nabla \tilde{u} + \nabla \tilde{u}^T) \quad (21)$$

Assim, o tensor demonstrado anteriormente no tensor (11) fica:

$$\tilde{\tau} = \begin{bmatrix} 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z} & \mu \left[\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right] & \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial z} \right] \\ \mu \left[\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right] & 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r} & \mu \left[\frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_r}{\partial \alpha} - u_\alpha \right) + \frac{\partial u_\alpha}{\partial r} \right] \\ \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial z} \right] & \mu \left[\frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_r}{\partial \alpha} - u_\alpha \right) + \frac{\partial u_\alpha}{\partial r} \right] & 2\mu \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial \alpha} + u_r \right) \end{bmatrix}$$

As tensões em função da velocidade já estão calculadas. Faz-se em seguida, a operação do tensor tensão à partir da definição. Da Equação (9) sabe-se que:

$$\nabla \tilde{\tau}_T = \lim_{dV \rightarrow 0} \frac{1}{dV} \int_A (\tau_T \vec{n}) dA$$

Onde $\nabla \tilde{\tau}_T$ é o divergente do tensor tensão total. Então aplica-se o divergente do tensor total tem-se:

$$\nabla(\tilde{\tau}_T) = \left(\frac{\partial}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_z \right) \left(\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \tau_{ij} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_j \right) \quad (22)$$

Fazendo a operação, temos segundo Viscous (1999):

$$\nabla \tilde{\tau}_T = \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rr}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha r}}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{zr}}{\partial z} - \frac{\tau_{\alpha\alpha}}{r} \right] \vec{e}_r + \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\alpha}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha\alpha}}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{z\alpha}}{\partial z} - \frac{\tau_{\alpha r} - \tau_{r\alpha}}{r} \right] \vec{e}_\alpha + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rz}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha z}}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right] \vec{e}_z \quad (23)$$

Voltando agora na Equação (7), depois de encontrado todos os termos do segundo membro da mesma equação parte-se para a definição do primeiro membro. O primeiro membro da Equação (8) significa a variação do momento em um intervalo dt:

$$\frac{d(m\vec{v})}{dt} = \frac{1}{dt} (\text{massa que sai, faces saída}) \vec{v}_s - (\text{massa que entra, faces entrada}) \vec{v}_e$$

$$\frac{d(m\vec{v})}{dt} = [\rho \cdot v_z|_{z+dz} r \cdot d\alpha \cdot dr \cdot dt \cdot \vec{v}|_{z+dz} + \rho \cdot v_r|_{r+dr} r \cdot d\alpha \cdot dz \cdot dt \cdot \vec{v}|_{r+dr} + \rho \cdot v_\alpha|_{\alpha+d\alpha} dr \cdot dz \cdot dt \cdot \vec{v}|_{\alpha+d\alpha}] - \rho \cdot v_z|_z r \cdot d\alpha \cdot dr \cdot dt \cdot \vec{v}|_z - v_r|_r r \cdot d\alpha \cdot dz \cdot dt \cdot \vec{v}|_r - \rho \cdot v_\alpha|_\alpha dr \cdot dz \cdot dt \cdot \vec{v}|_\alpha \quad (24)$$

Assim:

$$\frac{1}{dV} \frac{d(m\vec{v})}{dt} = \rho \left[\frac{\partial v_z \vec{v}}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial r v_r \vec{v}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\alpha \vec{v}}{\partial \alpha} \right] \quad (25)$$

Que expandindo fica:

$$\frac{1}{dV} \frac{d(m\vec{v})}{dt} = \left[\frac{\partial \rho v_z}{\partial z} \vec{v} + \rho v_z \frac{\partial \vec{v}}{\partial z} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial \rho r v_r}{\partial r} \vec{v} + \rho r v_r \frac{\partial \vec{v}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial \rho v_\alpha}{\partial \alpha} \vec{v} + \rho v_\alpha \frac{\partial \vec{v}}{\partial \alpha} \right) \right] \quad (26)$$

Sabendo-se que a equação da continuidade em coordenadas cilíndricas no estado estacionário e escoamento incompressível é:

$$\frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial r v_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\alpha}{\partial \alpha} = 0 \quad (27)$$

Pode-se substituir a Equação (27) na Equação (26), assim fica:

$$\frac{1}{dV} \frac{d(m\vec{v})}{dt} = \rho v_z \frac{\partial \vec{v}}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial \vec{v}}{\partial r} + \frac{\rho v_\alpha}{r} \frac{\partial \vec{v}}{\partial \alpha} \quad (28)$$

Sendo:

$$\vec{v} = (v_z, v_r, v_\alpha) = (v_z \vec{e}_z + v_r \vec{e}_r + v_\alpha \vec{e}_\alpha)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial z} = \frac{\partial v_z}{\partial z} \vec{e}_z + v_z \frac{\partial \vec{e}_z}{\partial z} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \vec{e}_r + v_r \frac{\partial \vec{e}_r}{\partial z} + \frac{\partial v_\alpha}{\partial z} \vec{e}_\alpha + v_\alpha \frac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial z} \quad (29)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial r} = \frac{\partial v_z}{\partial r} \vec{e}_z + v_z \frac{\partial \vec{e}_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial r} \vec{e}_r + v_r \frac{\partial \vec{e}_r}{\partial r} + \frac{\partial v_\alpha}{\partial r} \vec{e}_\alpha + v_\alpha \frac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial r} \quad (30)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial \alpha} = \frac{\partial v_z}{\partial \alpha} \vec{e}_z + v_z \frac{\partial \vec{e}_z}{\partial \alpha} + \frac{\partial v_r}{\partial \alpha} \vec{e}_r + v_r \frac{\partial \vec{e}_r}{\partial \alpha} + \frac{\partial v_\alpha}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha + v_\alpha \frac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial \alpha} \quad (31)$$

Sabe-se que geometricamente:

$$\frac{\partial \vec{e}_z}{\partial r} = \frac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial r} = \frac{\partial \vec{e}_r}{\partial r} = 0 \quad (32)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_z}{\partial z} = \frac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial z} = \frac{\partial \vec{e}_r}{\partial z} = 0 \quad (33)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_z}{\partial \alpha} = 0; \quad \frac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial \alpha} = -\vec{e}_r; \quad \frac{\partial \vec{e}_r}{\partial \alpha} = \vec{e}_\alpha \quad (34)$$

Substituindo na Equação (31) as Equações (34) tem-se:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial \alpha} = \frac{\partial v_z}{\partial \alpha} \vec{e}_z + \left[\frac{\partial v_r}{\partial \alpha} - v_\alpha \right] \vec{e}_r + \left[\frac{\partial v_\alpha}{\partial \alpha} - v_r \right] \vec{e}_\alpha \quad (35)$$

Então, a Equação (28) fica:

$$\begin{aligned} \frac{1}{dV} \frac{d(m\vec{v})}{dt} = & \rho v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \vec{e}_z + \rho v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \vec{e}_r + \rho v_z \frac{\partial v_\alpha}{\partial z} \vec{e}_\alpha + \rho v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} \vec{e}_z + \rho v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} \vec{e}_r + \rho v_r \frac{\partial v_\alpha}{\partial r} \vec{e}_\alpha \\ & + \rho \frac{v_\alpha}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \alpha} \vec{e}_z + \rho \frac{v_\alpha}{r} \left[\frac{\partial v_r}{\partial \alpha} - v_\alpha \right] \vec{e}_r + \rho \frac{v_\alpha}{r} \left[\frac{\partial v_\alpha}{\partial \alpha} - v_r \right] \vec{e}_\alpha \end{aligned}$$

Colocando os termos em comum em evidencia tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{dV} \frac{d(m\vec{v})}{dt} = & \left[\rho v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \alpha} \right] \vec{e}_z + \left[\rho v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \right. \\ & \left. \rho \frac{v_\alpha}{r} \left[\frac{\partial v_r}{\partial \alpha} - v_\alpha \right] \right] \vec{e}_r + \left[\rho v_z \frac{\partial v_\alpha}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_\alpha}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \left[\frac{\partial v_\alpha}{\partial \alpha} - v_r \right] \right] \vec{e}_\alpha \end{aligned} \quad (36)$$

Contudo, a equação do movimento deduzida até agora tratava-se do estado estacionário. Fazendo o balanço transiente obtêm-se:

$$m\vec{v}|_{t+dt} = m\vec{v}|_t + m\vec{v}|_{F1} + \sum(\vec{\tau}_T dA) dt + \rho \vec{g} dV - m\vec{v}|_{F2} \quad (37)$$

Dividindo tudo por $dv \cdot dt$, tem-se:

$$\frac{1}{dV} \frac{\partial(m\vec{v})}{\partial t} = -\frac{1}{dV} \frac{\partial(m\vec{v})}{\partial t} + \frac{\sum(\vec{\tau}_T dA)}{dV} + \frac{\rho \vec{g}}{dV} \quad (38)$$

Que fica:

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} = -\frac{1}{dV} \frac{\partial(m\vec{v})}{\partial t} + \frac{\sum(\vec{\tau}_T dA)}{dV} + \frac{\rho \vec{g}}{dV} \quad (39)$$

Sabendo que:

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} (\vec{v}) + \rho \frac{\partial(\vec{v})}{\partial t} = \rho \frac{\partial v_z}{\partial t} \vec{e}_z + \rho \frac{\partial v_r}{\partial t} \vec{e}_r + \rho \frac{\partial v_\alpha}{\partial t} \vec{e}_\alpha \quad (40)$$

A Equação (39) do movimento desenvolvida pelos passos acima fica:

$$\rho \frac{\partial v_r}{\partial t} + \left[\rho v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \left[\frac{\partial v_r}{\partial \alpha} - v_\alpha \right] \right] = \rho \vec{g}_r + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau_{rr}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{ar}}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{zr}}{\partial z} - \frac{\tau_{\alpha\alpha}}{r} \right] - \frac{\partial(P)}{\partial r} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial v_\alpha}{\partial t} + \left[\rho v_z \frac{\partial v_\alpha}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_\alpha}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \left[\frac{\partial v_\alpha}{\partial \alpha} - v_r \right] \right] = & \rho \vec{g}_\alpha + \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\alpha}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha\alpha}}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{z\alpha}}{\partial z} \right] - \\ & \frac{1}{r} \frac{\partial(P)}{\partial \alpha} \end{aligned} \quad (42)$$

$$\rho \frac{\partial v_z}{\partial t} + \left[\rho v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \alpha} \right] = \rho \vec{g}_z + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rz}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha z}}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right] - \frac{\partial(P)}{\partial z} \quad (43)$$

A equação desenvolvida acima é a equação de Navier Stokes para um sistema monofásico. Como explicitado no referencial teórico, este trabalho vai ser considerado bifásico, sendo a fase líquida a lama (catalisador mais líquido) e a fase gasosa, o gás hidrogênio. Dessa maneira, transforma-se a equação (43) bifásica colocando o *holdup* das fases e acrescentando no somatório de forças da equação (1) a força de atrito entre fases.

- Do *holdup* entre as fases:

Sabendo-se que o *holdup* do líquido ou gás, é a fração do volume de controle que é ocupada por uma fase ou outra tem-se:

$$\varepsilon_x = \frac{dV_x}{dV} \quad (44)$$

Para o líquido:

$$\varepsilon_L = \frac{dV_L}{dV} \quad (45)$$

Para o gás:

$$\varepsilon_G = \frac{dV_G}{dV} \quad (46)$$

Logo:

- Da força de atrito entre as fases (HILLMER *et al.*, 1994):

$$\frac{dF_{\text{fricção}}}{dV} = C_W \varepsilon_G \varepsilon_L (\mu_{(G)} - \mu_{(L)}) \quad (47)$$

Tendo em vista que a velocidade do líquido é bem menor que a velocidade do gás, supõe-se que o líquido recebe momentum do gás. Então, para a fase líquida e para a fase gás fica:

$$\frac{dF_{\text{fricção},G}}{dV} = -C_W \varepsilon_G \varepsilon_L (\mu_{(G)} - \mu_{(L)}) \quad (48)$$

$$\frac{dF_{fricção,L}}{dV} = C_W \varepsilon_G \varepsilon_L (\mu_{(G)} - \mu_{(L)}) \quad (49)$$

Substituindo as Equações de (45) a (47) nas Equações (41),(42) e (43) fica:

Para o líquido:

$$\rho \frac{\partial v_r \varepsilon_L}{\partial t} + \left[\rho v_z \frac{\partial v_r \varepsilon_L}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_r \varepsilon_L}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \left[\frac{\partial v_r \varepsilon_L}{\partial \alpha} - v_\alpha \right] \right] = \varepsilon_L \rho \vec{g}_r + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rr} \varepsilon_L) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha r} \varepsilon_L}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{zr} \varepsilon_L}{\partial z} - \frac{\tau_{\alpha \alpha} \varepsilon_L}{r} \right] - \frac{\partial(P) \varepsilon_L}{\partial r} + C_W \varepsilon_G \varepsilon_L (\mu_{(rG)} - \mu_{(rL)}) \quad (50)$$

$$\rho \frac{\partial v_\alpha \varepsilon_L}{\partial t} + \left[\rho v_z \frac{\partial v_\alpha \varepsilon_L}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_\alpha \varepsilon_L}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \left[\frac{\partial v_\alpha \varepsilon_L}{\partial \alpha} - v_r \right] \right] = \varepsilon_L \rho \vec{g}_\alpha + \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\alpha} \varepsilon_L) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha \alpha} \varepsilon_L}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{z\alpha} \varepsilon_L}{\partial z} \right] - \frac{1}{r} \frac{\partial(P) \varepsilon_L}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha + C_W \varepsilon_G \varepsilon_L (\mu_{(\alpha G)} - \mu_{(\alpha L)}) \quad (51)$$

$$\rho \frac{\partial v_z \varepsilon_L}{\partial t} + \left[\rho v_z \frac{\partial v_z \varepsilon_L}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_z \varepsilon_L}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \frac{\partial v_z \varepsilon_L}{\partial \alpha} \right] = \varepsilon_L \rho \vec{g}_z + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rz} \varepsilon_L) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha z} \varepsilon_L}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{zz} \varepsilon_L}{\partial z} \right] - \frac{\partial(P) \varepsilon_L}{\partial z} + C_W \varepsilon_G \varepsilon_L (\mu_{(zG)} - \mu_{(zL)}) \quad (52)$$

Para o gás:

$$\rho \frac{\partial v_r \varepsilon_G}{\partial t} + \left[\rho v_z \frac{\partial v_r \varepsilon_G}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_r \varepsilon_G}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \left[\frac{\partial v_r \varepsilon_G}{\partial \alpha} - v_\alpha \right] \right] = \varepsilon_G \rho \vec{g}_r + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rr} \varepsilon_G) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha r} \varepsilon_G}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{zr} \varepsilon_G}{\partial z} - \frac{\tau_{\alpha \alpha} \varepsilon_G}{r} \right] - \frac{\partial(P) \varepsilon_G}{\partial r} + C_W \varepsilon_G \varepsilon_L (\mu_{(rG)} - \mu_{(rL)}) \quad (53)$$

$$\rho \frac{\partial v_\alpha \varepsilon_G}{\partial t} + \left[\rho v_z \frac{\partial v_\alpha \varepsilon_G}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_\alpha \varepsilon_G}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \left[\frac{\partial v_\alpha \varepsilon_G}{\partial \alpha} - v_r \right] \right] = \varepsilon_G \rho \vec{g}_\alpha + \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\alpha} \varepsilon_G) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha \alpha} \varepsilon_G}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{z\alpha} \varepsilon_G}{\partial z} \right] - \frac{1}{r} \frac{\partial(P) \varepsilon_G}{\partial \alpha} \vec{e}_\alpha + C_W \varepsilon_G \varepsilon_L (\mu_{(\alpha G)} - \mu_{(\alpha L)}) \quad (54)$$

$$\rho \frac{\partial v_z \varepsilon_G}{\partial t} + \left[\rho v_z \frac{\partial v_z \varepsilon_G}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial v_z \varepsilon_G}{\partial r} + \rho \frac{v_\alpha}{r} \frac{\partial v_z \varepsilon_G}{\partial \alpha} \right] = \varepsilon_G \rho \vec{g}_z + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rz} \varepsilon_G) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\alpha z} \varepsilon_G}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tau_{zz} \varepsilon_G}{\partial z} \right] - \frac{\partial(P) \varepsilon_G}{\partial z} + C_W \varepsilon_G \varepsilon_L (\mu_{(zG)} - \mu_{(zL)}) \quad (55)$$

3. METODOLOGIA

A pesquisa realizada será aplicada ao processo de hidrocraqueamento em reatores de lama borbulhante com o objetivo de investigar o comportamento da distribuição de hidrogênio no reator, identificando os fatores que determinam ou contribuem para o aperfeiçoamento da distribuição do mesmo.

Para esta análise utilizar-se-á o *software* SALOME 7.3.0, que é um *software* de desenho com código aberto que fornece uma plataforma para pré e pós-processamento para a simulação numérica, com o intuito de delinear a geometria e a subdividir esta em malhas e o ansys-CFX, *software* baseado na técnica CFD prescrita da seção 6, para a simulação do caso.

A fim de facilitar a simulação, mantendo as características fluidodinâmicas do problema, a fase líquida foi simulada com água e a fase gás com ar a 25°C e a fase sólida negligenciada.

O regime característico do reator é heterogêneo em função da alta velocidade do gás na entrada e diâmetro da coluna.

As tabelas 1 e 2 trazem as condições de *set up* que foram empregadas na simulação.

Tabela 1 – Condições empregadas na simulação

Propriedades Físicas	
Diâmetro médio bolha (mm)	6
Tensão superficial (kg/s ²)	0.072
Fase	Densidade
Ar 25°C dispersa (kg/m ³)	$\rho_g = 1,185$
Água Contínua (kg/m ³)	$\rho_l = 997$
Condições de contorno	
Reator normal	
Parede	Superfície lisa, não deslizamento para as duas fases, gás e líquida
Entrada (m/s)	0,2
Saída (m/s)	<i>Outlet</i>
Reator com injeção de ar pelas laterais	
Parede	Superfície lisa, não deslizamento para as duas fases, gás e líquida
Entrada (inferior) (m/s)	0,192
Entrada lateral-1 (m/s)	0,041
Entrada lateral-2 (m/s)	0,016
Entrada lateral-3 (m/s)	0,0081
Entrada lateral-4 (m/s)	0,0081
Entrada lateral-5 (m/s)	0,0081
Saída	<i>Outlet</i>

Tabela 2 – Detalhes numéricos

Modelo de turbulência	<i>k-ε Padrão</i>
Termo Advectivo	<i>High Resolution</i>
Termo Transiente	<i>Second Order Backward Euler</i>
Turbulência	<i>First order</i>
Critério de convergência	RMS = $1 \cdot 10^{-4}$
Loops por interpolação	1-10
Passo de tempo	$5 \cdot 10^{-4}$ à $1 \cdot 10^{-2}$
Tempo total de simulação ¹	65s

¹ O passo de tempo foi variado durante a simulação, mantendo-se o resíduo abaixo do limite definido

A maior parte dos parâmetros utilizados no *set up* desta pesquisa foram parâmetros empregados no tutorial 18 do ANSYS CFX 14.0, o qual cita um exemplo de simulação gás-líquido em coluna de bolhas, no qual as bolhas (ar) são dispersas no líquido (água) com frações volumétricas de entrada análogas a desta pesquisa.

As simulações foram realizadas com reatores cilíndricos de 4 metros de altura e 15 centímetros de raio. A velocidade de entrada do reator normal (0,2 m/s) foi alcançada através de várias simulações tendo como base o parâmetro de velocidade do tutorial 18.

Neste trabalho foi empregada abordagem Euleriana-Euleriana na simulação do escoamento gás-líquido, utilizando o modelo de turbulência *k-ε* padrão (modelos de duas equações que consideram a teoria da viscosidade turbulenta).

Considerando-se uma variável genérica de transporte ϕ , a abordagem Euleriana apresenta o que ocorre com esta, em um domínio espacial fixo x , através do qual o fluido escoar, na forma $\phi(x; t)$. Já o modelo *k-ε* assume que a viscosidade turbulenta está relacionada a energia cinética turbulenta (k), e à sua dissipação (ϵ).

Os modelos de turbulência foram utilizados apenas para a fase contínua (líquida), no entanto, considerou-se também a turbulência induzida pela fase dispersa

(bolhas) por meio do modelo de transferência de turbulência de Sato e Sekoguchi (1975).

Em fluxos com uma fase dispersa, grandes partículas nesta fase tendem a aumentar a turbulência na fase contínua, devido à presença de “vácuos” por trás das partículas. Esse fenômeno é conhecido turbulência induzida pela partícula e o modelo de transferência turbulenta usado na simulação foi *Sato Enhanced Eddy Viscosity*, que modela este efeito. A força de empuxo foi considerada pela diferença de densidade das fases dispersa e contínua.

De acordo com o trabalho de Silva Junior (2011), que investigou várias correlações para a força de arraste em um sistema bifásico, observou-se uma boa concordância numérica entre os valores da fração volumétrica global do gás utilizando as correlações de Grace para a força de arraste, a qual considera a deformação das bolhas. Por conseguinte, neste trabalho utilizou-se esta correlação para a força de arraste. A transferência de massa entre estas foi negligenciada.

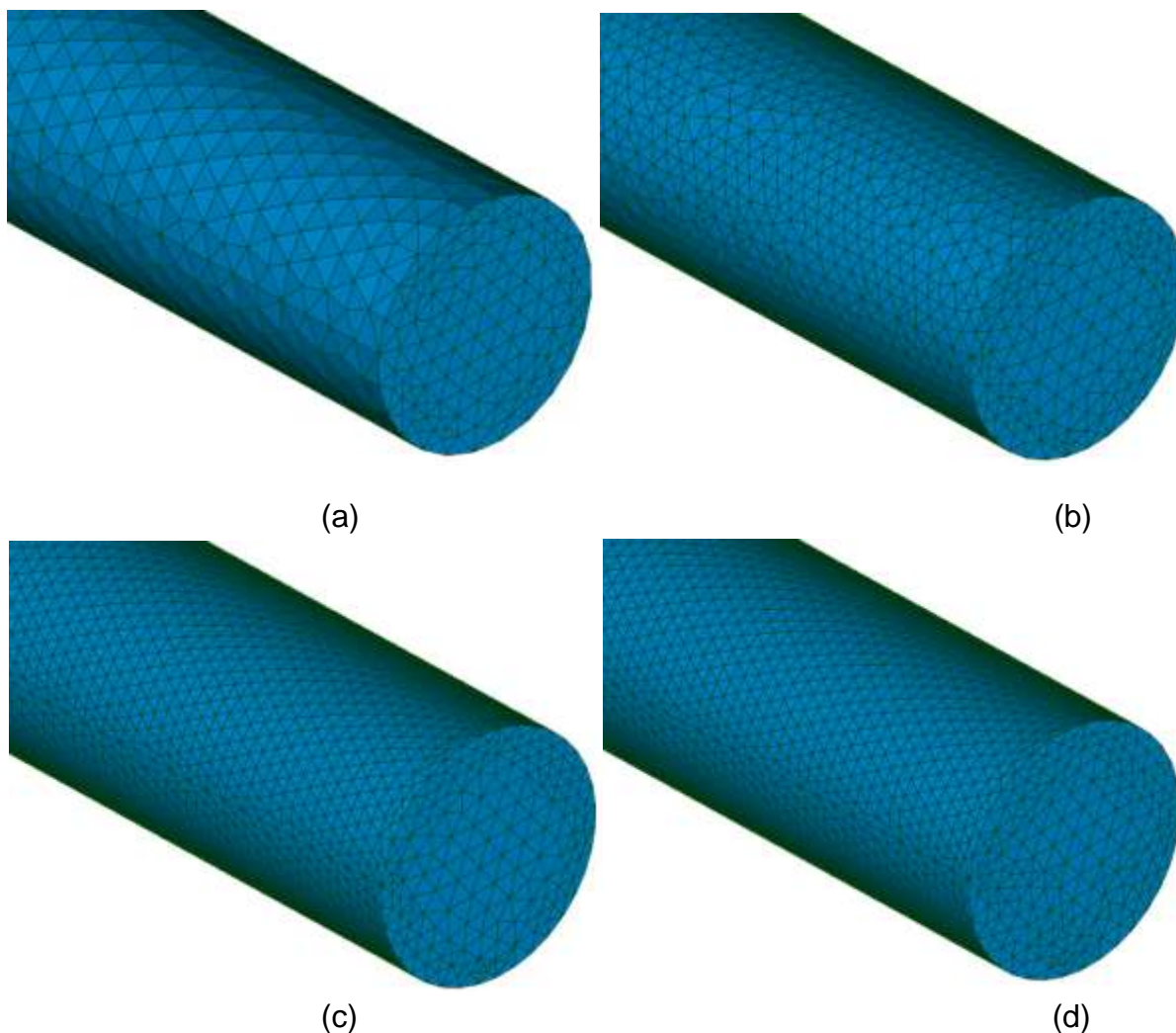
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo trata-se dos resultados da pesquisa, de acordo com o *set up* de dados prescritos na seção 8, bem como a discussão do mesmo.

4.1. TESTE DE MALHAS

Foram testadas 4 malhas com aproximadamente 37.000, 77.000, 125.000 e 164.000 volumes de controle tetraédricos.

A figura 11 ilustra as imagens tridimensionais do reator dividido em malhas de diferentes volumes de controle, das quais se obteve o teste de malhas.



**Figura 11 – As figuras (a), (b), (c) e (d) representam respectivamente o reator com aproximadamente 37, 77, 125 e 164 mil volumes de controle
Fonte: SALOME 7.3.0**

Para definição da malha ideal, analisou-se a fração volumétrica global do gás em função do número de volumes de controle da malha numérica.

Os perfis da fração volumétrica média da fase gás foram plotados na coordenada x (diâmetro da coluna) em função da altura $z = 1.5\text{m}$ e $z = 3.2\text{m}$.

Para a fração volumétrica global média de gás, observa-se, pelos gráficos 1 e 2, que a partir de 125.000 elementos, esta sofre pouca variação quando comparada o valor obtido na malha com maior número de volumes de controle.

Portanto, observa-se que a partir de aproximadamente 125.000 volumes de controle, existe uma independência desta grandeza em relação ao refino da malha numérica. Tendo em vista este fenômeno, as simulações realizadas neste trabalho são de aproximadamente 125 mil volumes de controle.

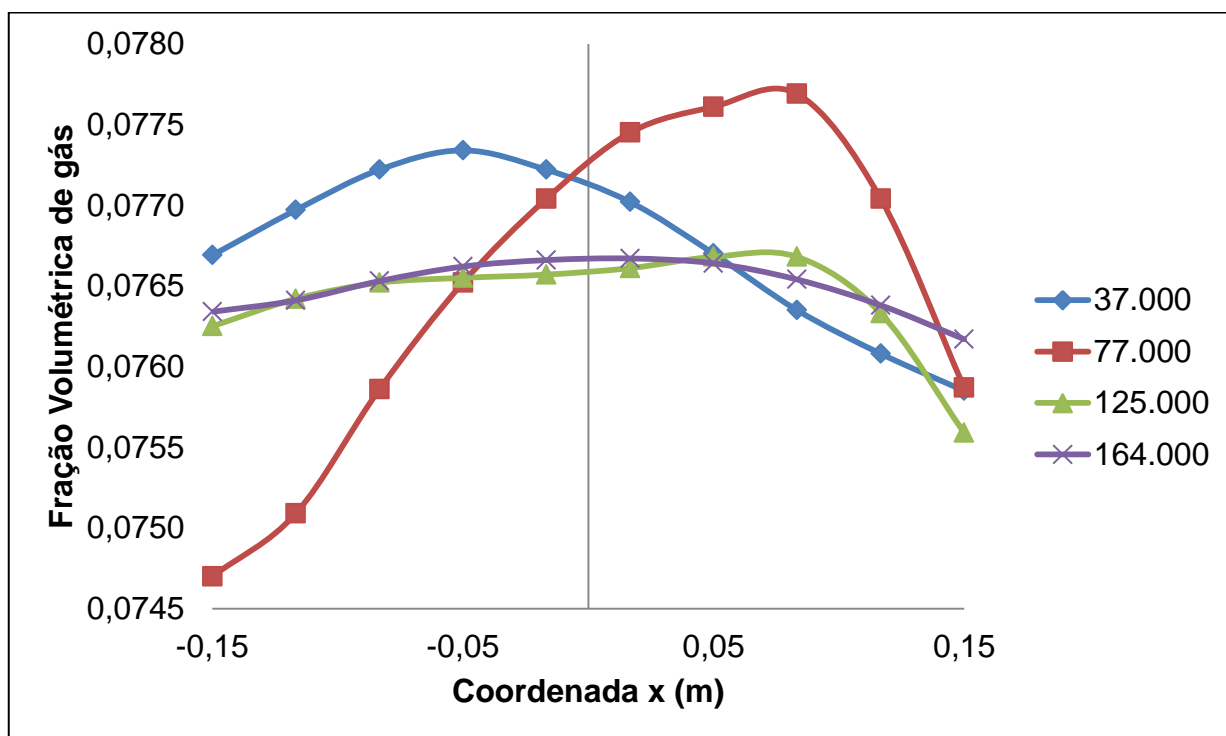


Gráfico 1– Fração volumétrica de ar versus diâmetro do reator para os diferentes volumes de controle em $Z = 1.5\text{m}$

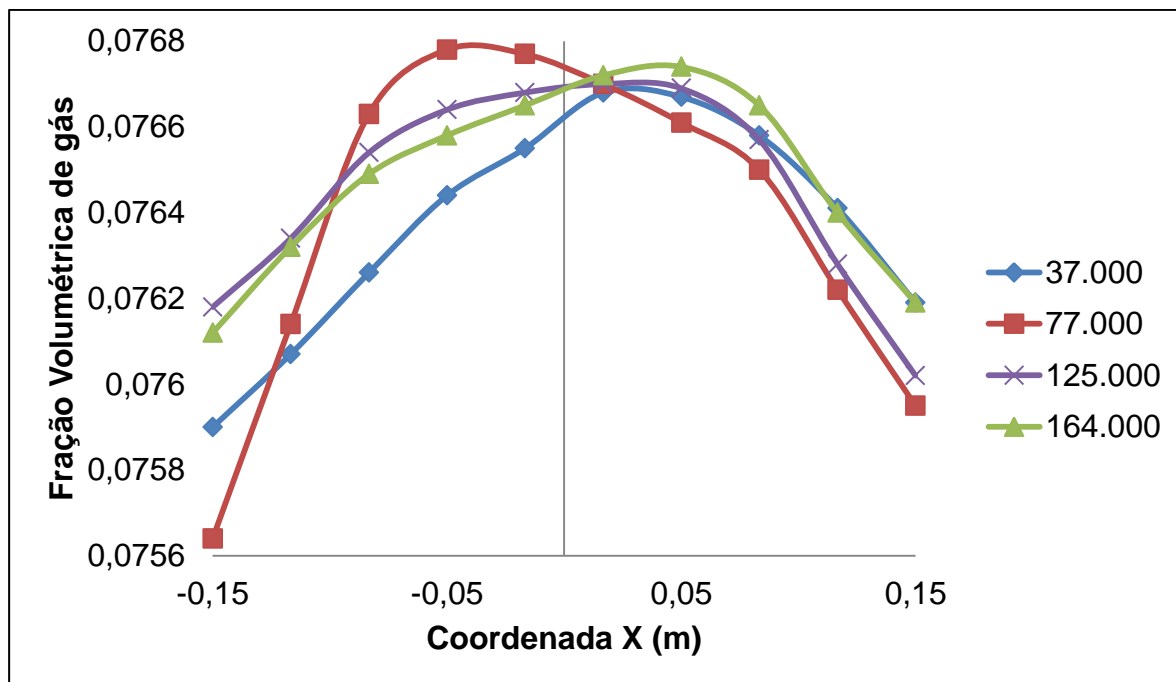


Gráfico 2 – Fração volumétrica de ar versus diâmetro do reator para os diferentes volumes de controle em Z = 3.2 m

O objetivo deste trabalho é melhorar a distribuição de hidrogênio no reator. Para isto simulou-se duas situações, reator sem e com entradas laterais.

Ao longo do início de cada simulação, adotou-se o procedimento de partir com um passo de tempo inicial de 0,005s, e, com o desenvolvimento dos cálculos, passar para 0,01s.

4.2. REATOR COMUM

A velocidade de entrada do gás no reator foi estipulada de acordo com as simulações feitas alterando esta variável, tendo o número de partida baseado no tutorial 18 do CFX, recomendado para o caso simulado. A Figura 12 ilustra o reator em três dimensões com a definição da entrada e da saída de fluido.

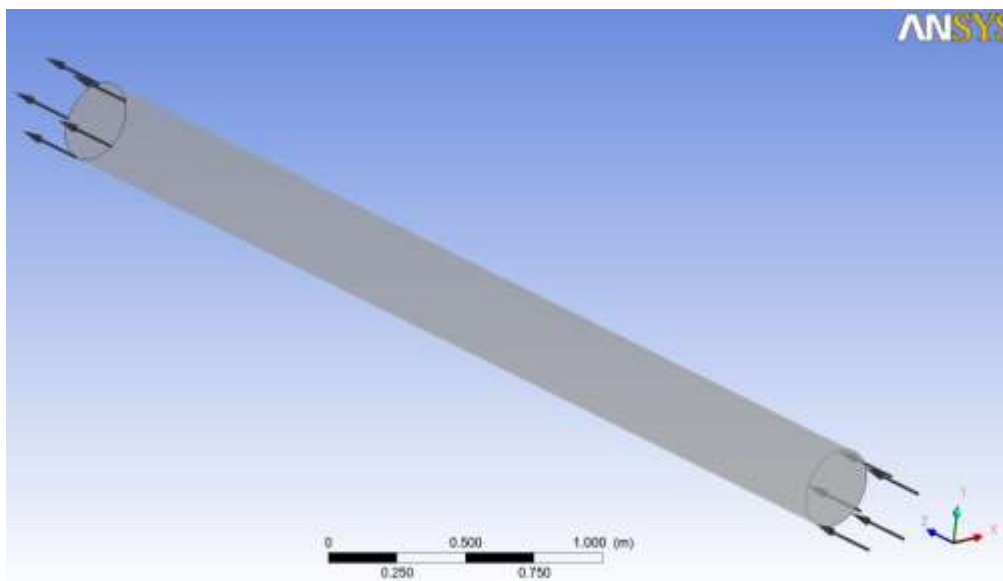


Figura 12 – Reator sem entradas laterais
Fonte: CFX 14.0

A Figura 13 ilustra o resíduo RMS de acordo com a evolução da simulação para as equações de momento e massa. O resíduo das células, que é a diferença dos cálculos de entrada e saída do volume de controle, é combinado estatisticamente (RMS - *Root Mean Square*) e indica o nível de convergência da simulação. Percebe-se que a simulação terminou em 65s conforme, com RMS menor de 10^{-4} conforme estipulado.

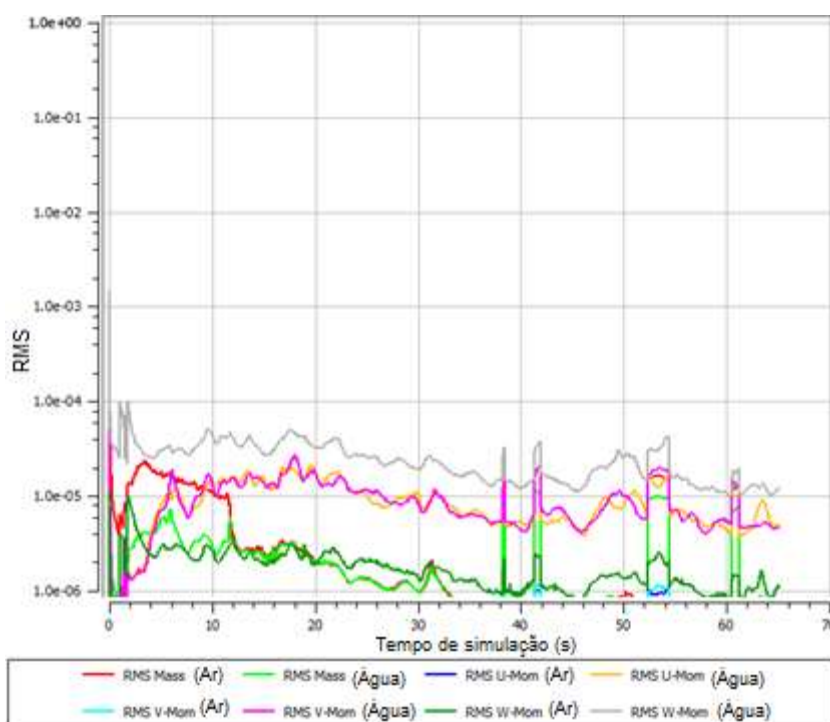


Figura 13 – Resíduo das equações de massa e momento (Reator comum)
Fonte: CFX 14.0

A Figura 13 ilustra o resíduo RMS das equações de turbulência.

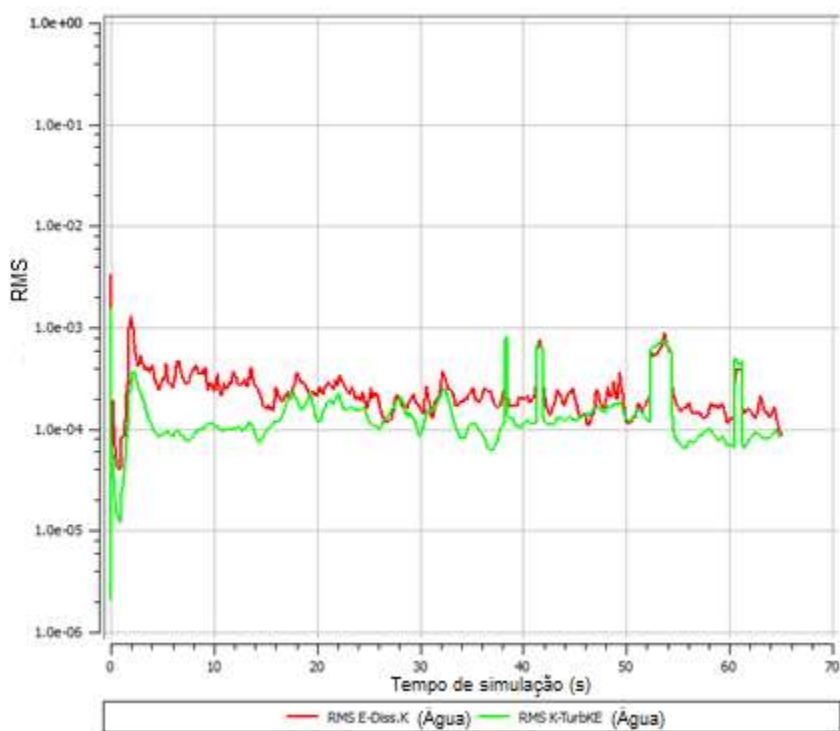
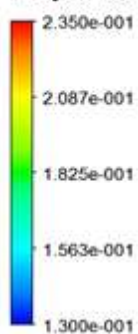


Figura 14 – Resíduo das equações de turbulência (Reator comum)
Fonte: CFX 14.0

A Figura 15 ilustra a fração volumétrica de gás ao longo do reator.

Fração volumétrica de ar



ANSYS



Figura 15 – Fração volumétrica de ar no reator (Reator sem entradas)
Fonte: CFX 14.0

Percebe-se uma menor fração volumétrica de gás nas laterais do reator devido à região central nesta configuração ser a de menor resistência e isso fazer com que as bolhas se concentrem nesta região central formando um caminho preferencial nítido.

4.3. REATOR COM INJEÇÃO DE GÁS NAS LATERAIS

Para o reator com entradas laterais foram simuladas diferentes áreas de entrada bem como a disposição das mesmas ao longo do reator. O desenho de maior eficiência dentre os simulados, para a variável em questão, foi com 7 entradas laterais em cinco diferentes alturas da coluna com área total de $0,034795 \text{ m}^2$. A Figura 16 ilustra a geometria em três dimensões desse reator.

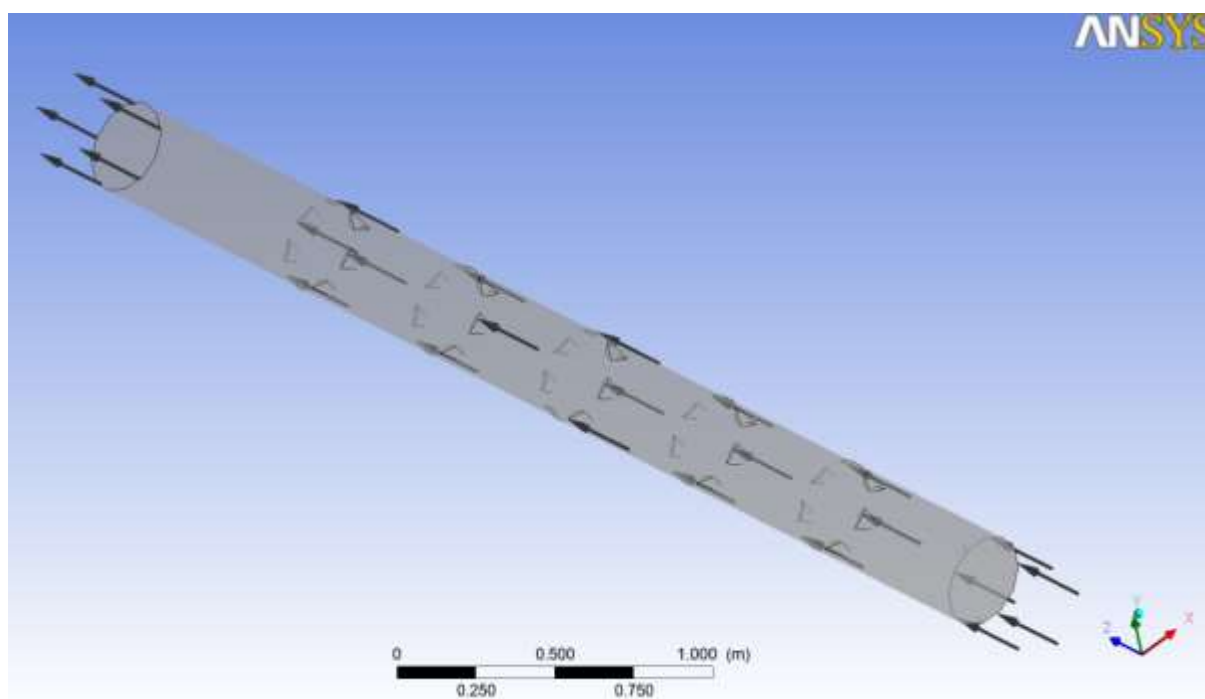


Figura 16 – Geometria do reator com entradas laterais
Fonte: CFX 14.0

A melhor simulação foi com as velocidades laterais diferentes ao longo da altura do reator e com a vazão da lateral sendo 0,04 da vazão inferior do reator comum. Sendo assim, esta vazão lateral é dividida diferentemente ao longo do reator como mostra as Equações (65), (66), (67), (68) e (69). A quantidade de gás utilizado na simulação foi a mesma, sendo que para o reator com entradas laterais foi dividido a quantidade entre a entrada inferior e as laterais e, no reator comum, todo o gás

entrou na entrada inferior. Os cálculos das vazões laterais são de acordo com as equações a seguir:

$$Vazão\ de\ ar_{Reator\ comum} = Área_{entrada\ inferior} \cdot velocidade_{ar\ entrada} \quad (56)$$

$$Vazão\ de\ ar_{Reator\ comum} = 0,070686\ m^2 \cdot 0,2\ \frac{m}{s} = 0,0141372\ \frac{m^3}{s} \quad (57)$$

$$Vazão\ de\ ar_{laterais} = 0,0141372\ \frac{m^3}{s} \cdot 0,04 = 5,6548 \cdot 10^{-4} \quad (58)$$

Por consequência a nova vazão da entrada inferior será de:

$$Vazão\ de\ ar_{entrada\ inferior\ (reator\ com\ entradas)} = Vazão\ de\ ar_{Reator\ comum} - Vazão\ de\ ar_{laterais} \quad (59)$$

$$Vazão\ de\ ar_{entrada\ inferior\ (reator\ com\ entradas)} = 0,0141372 - 5,6548 \cdot 10^{-4} \quad (60)$$

$$Vazão\ de\ ar_{entrada\ inferior\ (reator\ com\ entradas)} = 1,3571712 \cdot 10^{-2} \quad (61)$$

Então, as velocidades são:

$$velocidade_{ar\ entrada\ inferior\ (reator\ com\ entradas)} = \frac{Vazão\ de\ ar_{entrada\ inferior\ (reator\ com\ entradas)}}{Área_{entrada\ inferior}} \quad (62)$$

$$velocidade_{ar\ entrada\ inferior\ (reator\ com\ entradas)} = \frac{1,3571712 \cdot 10^{-2}}{0,070686} \quad (63)$$

$$velocidade_{ar\ entrada\ inferior\ (reator\ com\ entradas)} = 0,192\ m/s$$

$$velocidade_{ar\ laterais} = \frac{Vazão\ de\ ar_{laterais}}{Área\ lateral} \quad (64)$$

$$velocidade_{ar\ laterais} = \frac{5,6548 \cdot 10^{-4}}{0,034795}$$

$$velocidade_{ar\ lateral} = 0,0162 \frac{m}{s}$$

A seguir os cálculos das velocidades laterais em diferentes alturas da coluna.

$$Area_{lateral\ 1} = Area_{lateral\ 2} = Area_{lateral\ 3} = Area_{lateral\ 4} = Area_{lateral\ 5} = 0,006959$$

$$Vazão\ de\ ar_{lateral\ 1} = 5,65488 \cdot 10^{-4} * (0,5) = 2,82744 \cdot 10^{-4} \quad (65)$$

$$velocidade_{ar\ lateral\ 1} = \frac{2,82744 \cdot 10^{-4}}{0,006959} = 0,041$$

$$Vazão\ de\ ar_{lateral\ 2} = 5,65488 \cdot 10^{-4} * (0,2) = 1,130976 \cdot 10^{-4} \quad (66)$$

$$velocidade_{ar\ lateral\ 2} = \frac{1,130976 \cdot 10^{-4}}{0,006959} = 0,016$$

$$Vazão\ de\ ar_{lateral\ 3} = 5,65488 \cdot 10^{-4} * (0,1) = 5,65488 \cdot 10^{-5} \quad (67)$$

$$velocidade_{ar\ lateral\ 3} = \frac{5,65488 \cdot 10^{-5}}{0,006959} = 0,0081$$

$$Vazão\ de\ ar_{lateral\ 4} = 5,65488 \cdot 10^{-4} * (0,1) = 5,65488 \cdot 10^{-5} \quad (68)$$

$$velocidade_{ar\ lateral\ 4} = \frac{5,65488 \cdot 10^{-5}}{0,006959} = 0,0081$$

$$Vazão\ de\ ar_{lateral\ 5} = 5,65488 \cdot 10^{-4} * (0,1) = 5,65488 \cdot 10^{-5} \quad (69)$$

$$velocidade_{ar\ lateral\ 5} = \frac{5,65488 \cdot 10^{-5}}{0,006959} = 0,0081$$

A figura 17 ilustra o resíduo RMS de acordo com a evolução da simulação do reator com entradas laterais e percebe-se que a simulação terminou em 65s, com RMS menor que 10^{-4} conforme estipulado.

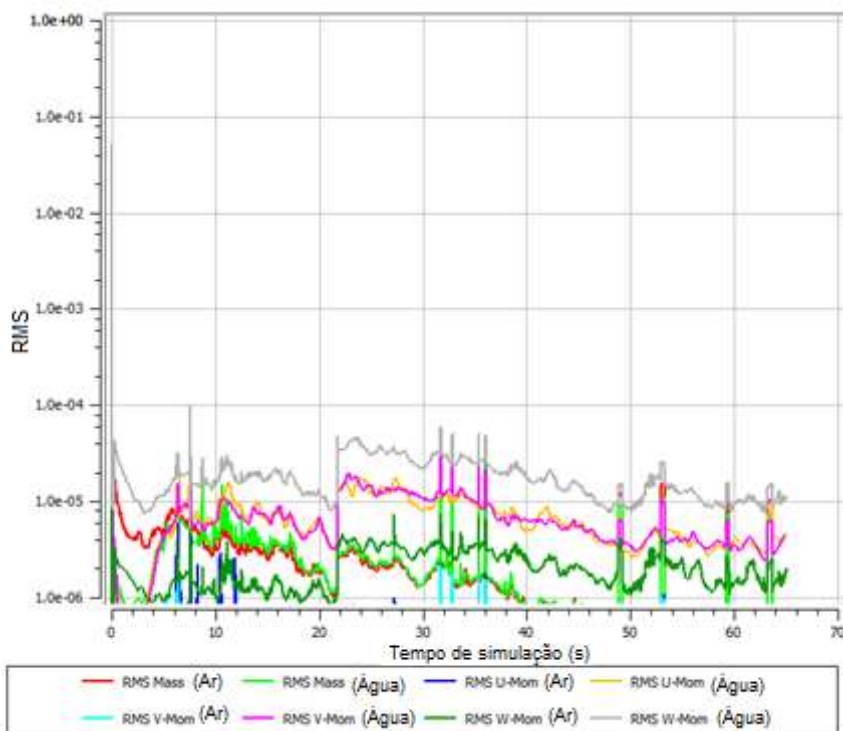


Figura 17 – Resíduo das equações de massa e momento (Reator com entradas)
Fonte: CFX 14.0

A figura 18 ilustra o resíduo RMS das equações de turbulência para o reator proposto e pode-se perceber que a simulação terminou em 65s com RMS que 10^{-4} conforme estipulado.

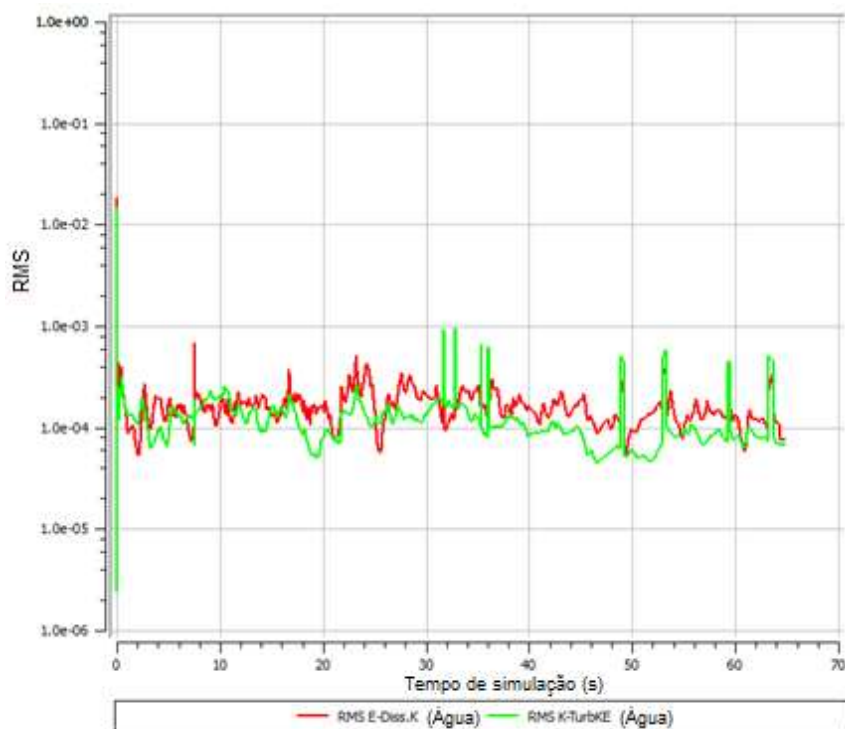


Figura 18 – Resíduo das equações de turbulência (Reator com entradas)
Fonte: CFX 14.0

A simulação ilustrada na Figura 19 mostra o reator proposto plotado na variável fração volumétrica de gás. A fração de gás nas paredes reduziu significativamente com as entradas obtendo-se um perfil de distribuição mais homogêneo.

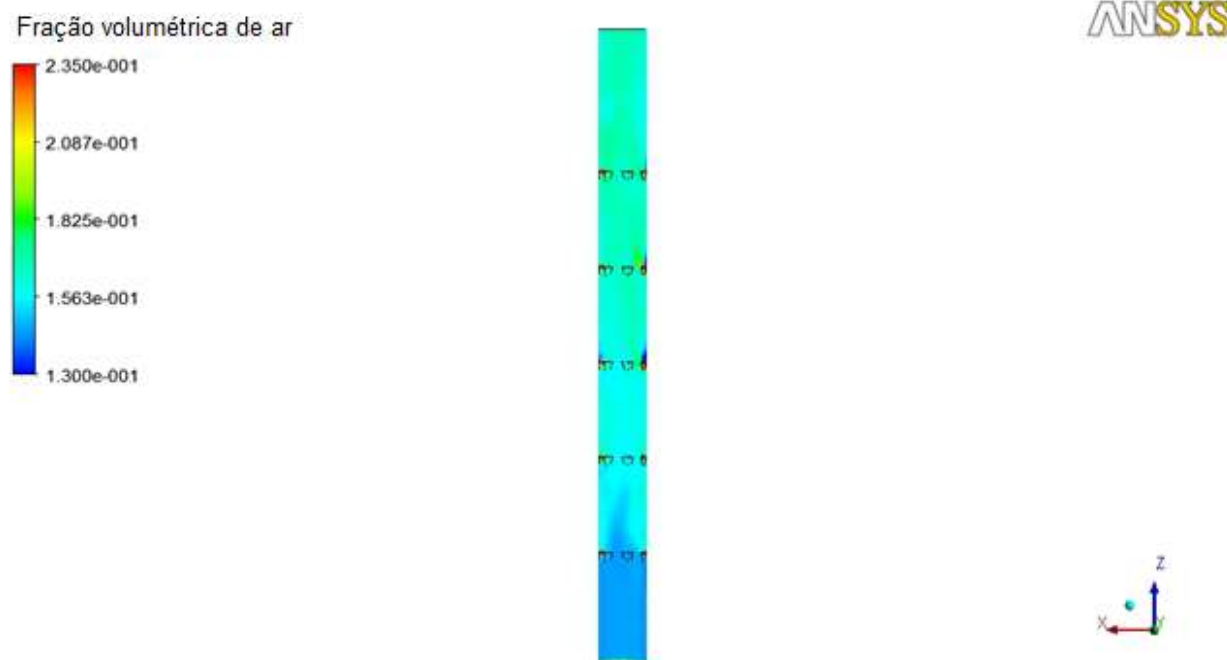


Figura 19 – Fração volumétrica de ar no reator (Reator com entradas)
Fonte: CFX 14.0

Para discussão dos resultados, a seção 9.4 representará a comparação da variável “*holdup*” em cada um dos reatores.

4.4. COMPARAÇÃO DAS SIMULAÇÕES

Na comparação do “*holdup*” nos reatores, utilizando a mesma escala de cores, percebe-se uma melhor distribuição no reator com injeção de gás lateralmente, que supriu, com a entrada de ar pela parede, ao longo da altura do reator, as porções pobres nesta fase.

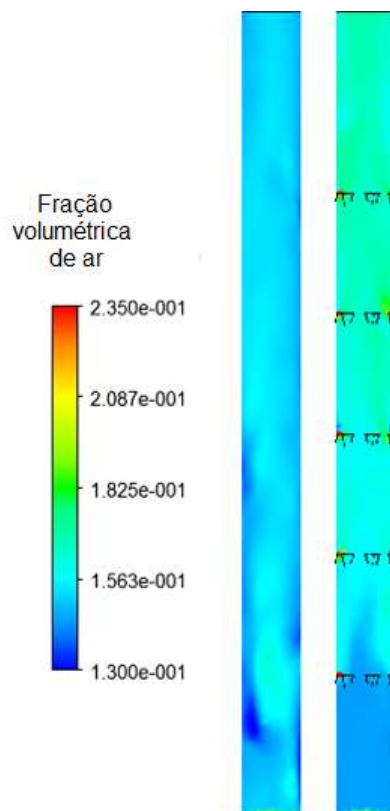


Figura 20 – Fração volumétrica de ar nos reatores (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais
Fonte: CFX 14.0

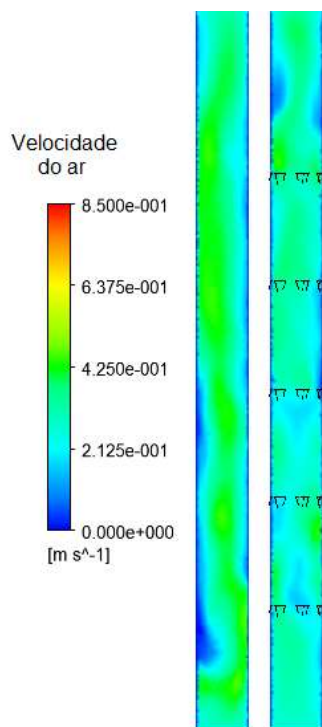


Figura 21 – Velocidade do ar nos reatores (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais
Fonte: CFX 14.0

Na Figura 21 pode-se perceber que a velocidade no reator sem entradas é mais pronunciada na região central formando um fluxo central ascendente maior e menor nas laterais. Já o reator com entradas laterais mostrou-se numa distribuição mais homogênea e melhor distribuída. Isto reflete no tempo de residência das bolhas no reator que aumenta no reator com injeção de gás lateral. Também ocorre no segundo reator, pela fluidodinâmica observada, uma menor coalescência das bolhas.

Os Gráficos 3, 4 e 5 demonstram os valores das frações volumétricas de gás em função da coordenada x na alturas 0,5, 1,2 e 1,8 metros.

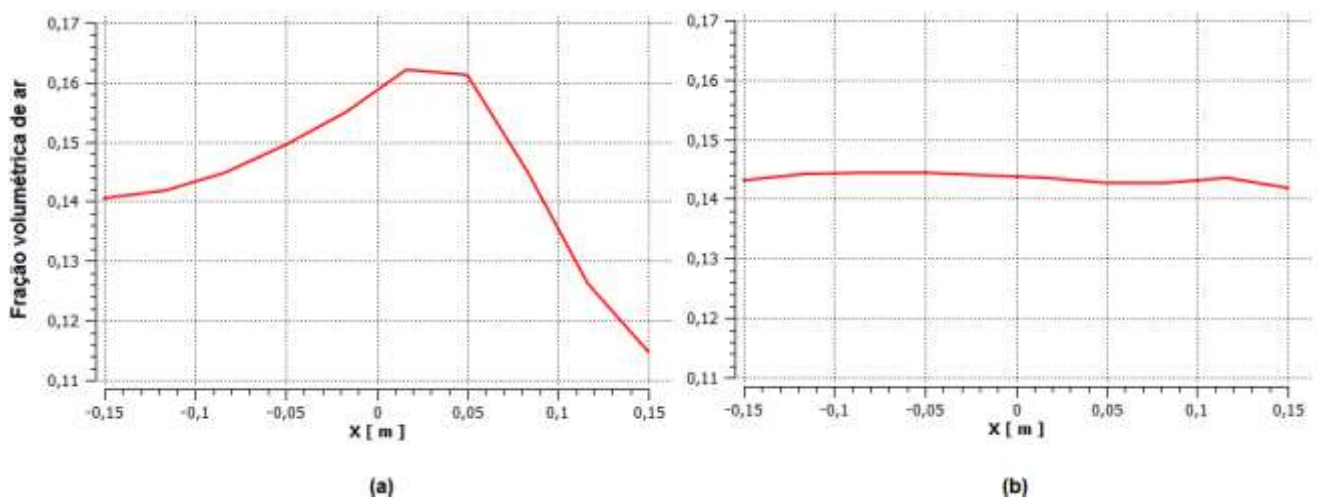


Gráfico 3 – Fração volumétrica de ar versus diâmetro do reator em Z = 0,5 metros (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais

Fonte: CFX 14.0

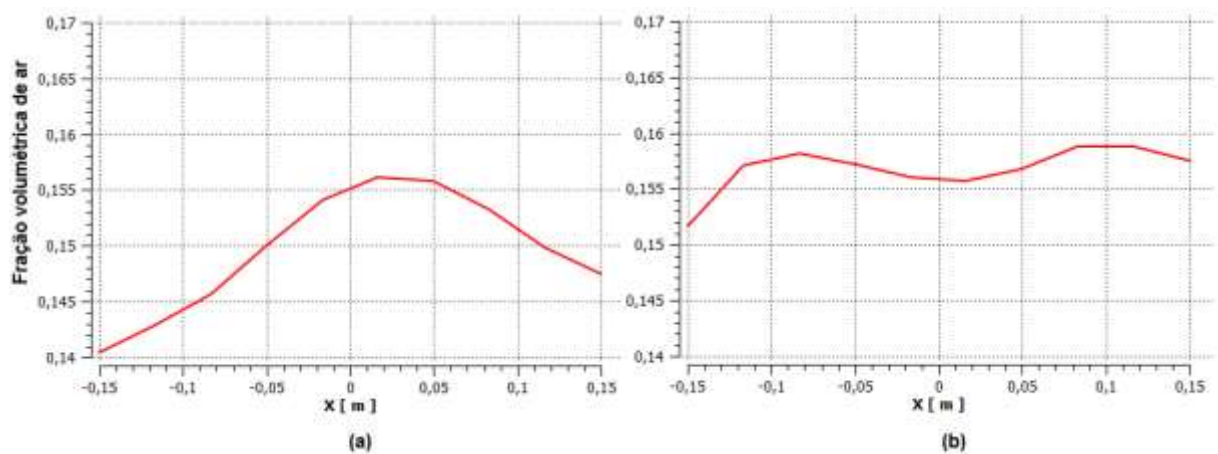
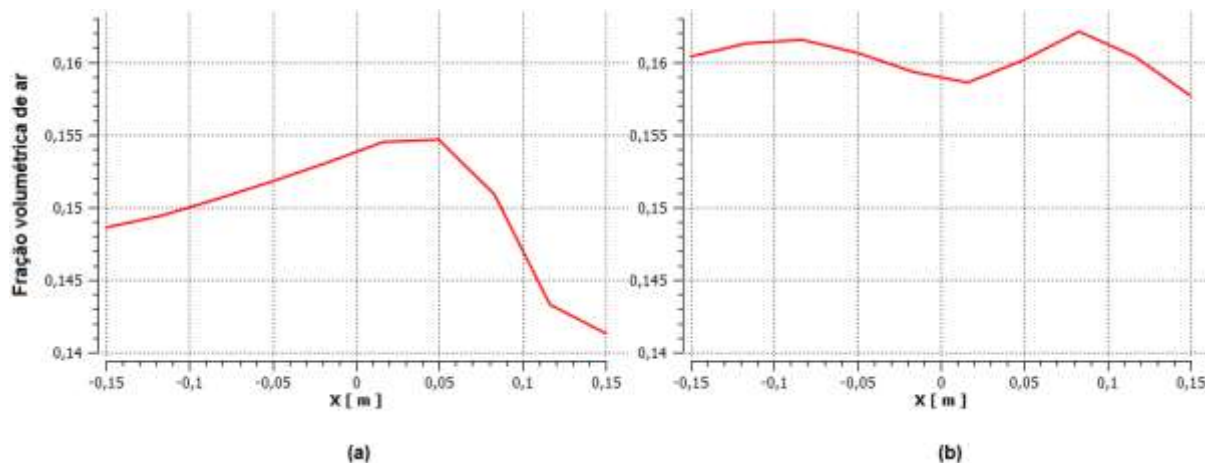


Gráfico 4 – Fração volumétrica de ar versus diâmetro do reator em Z = 1,2 metros (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais

Fonte: CFX 14.0



Os gráficos mostram a passagem de um perfil parabólico para um perfil de tendência linear com a mudança geométrica do reator que afetará consequentemente a eficiência da reação, pois, as laterais que antes eram carentes em gás, ficaram melhores distribuídas e com reagente suficiente para que a reação ocorra.

As Figuras 22, 23, e 24 explicam o perfil da fração volumétrica de ar em disco em diferentes alturas do reator. A Figura 22 retrata a fração de ar antes da primeira entrada lateral. Podemos perceber que na Figura (a) tem-se uma concentração de gás na região central e menor quantidade nas laterais, já a Figura (b) mostrou-se distribuição mais homogênea.

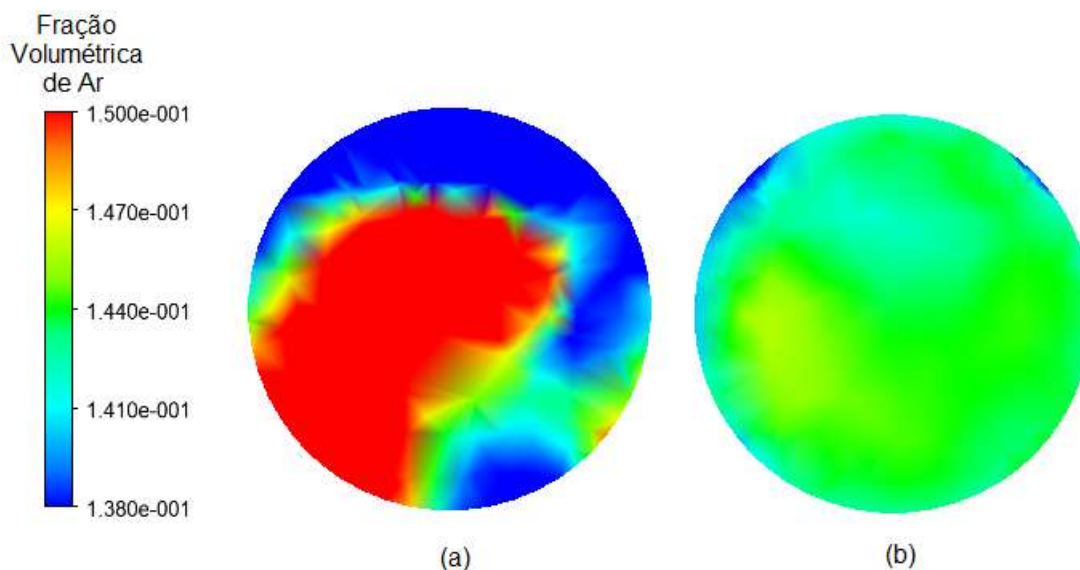


Figura 22 – Fração Volumétrica de ar em Z = 0,6 m (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais

Fonte: CFX 14.0

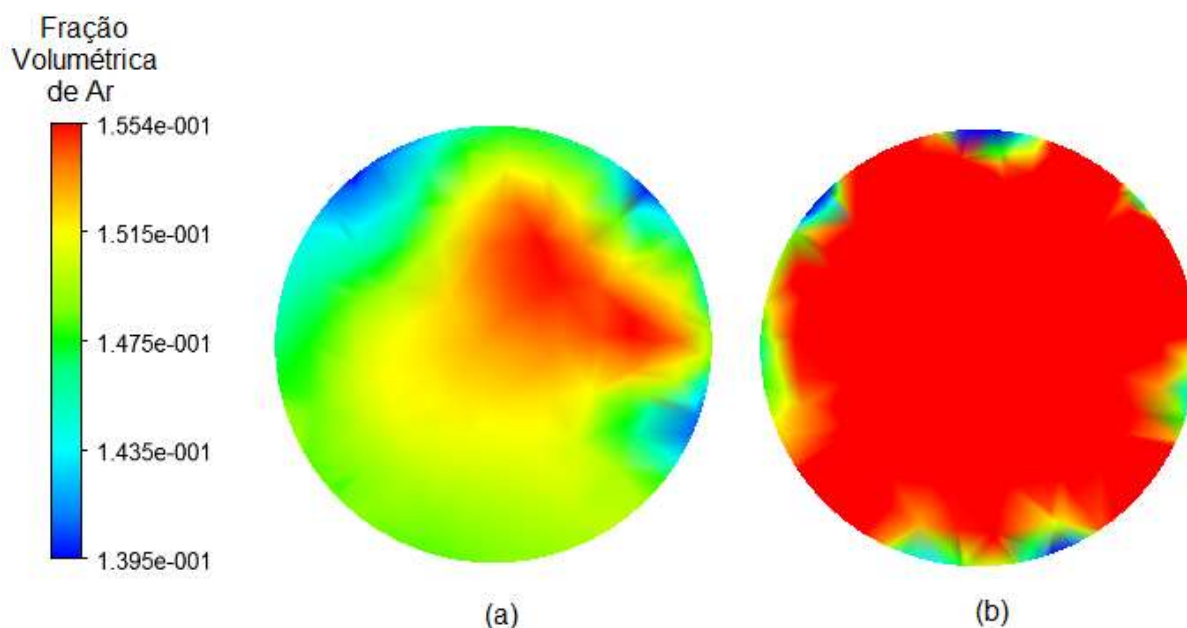


Figura 23 – Fração Volumétrica de ar em $Z = 2,0$ m (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais
 Fonte: CFX 14.0

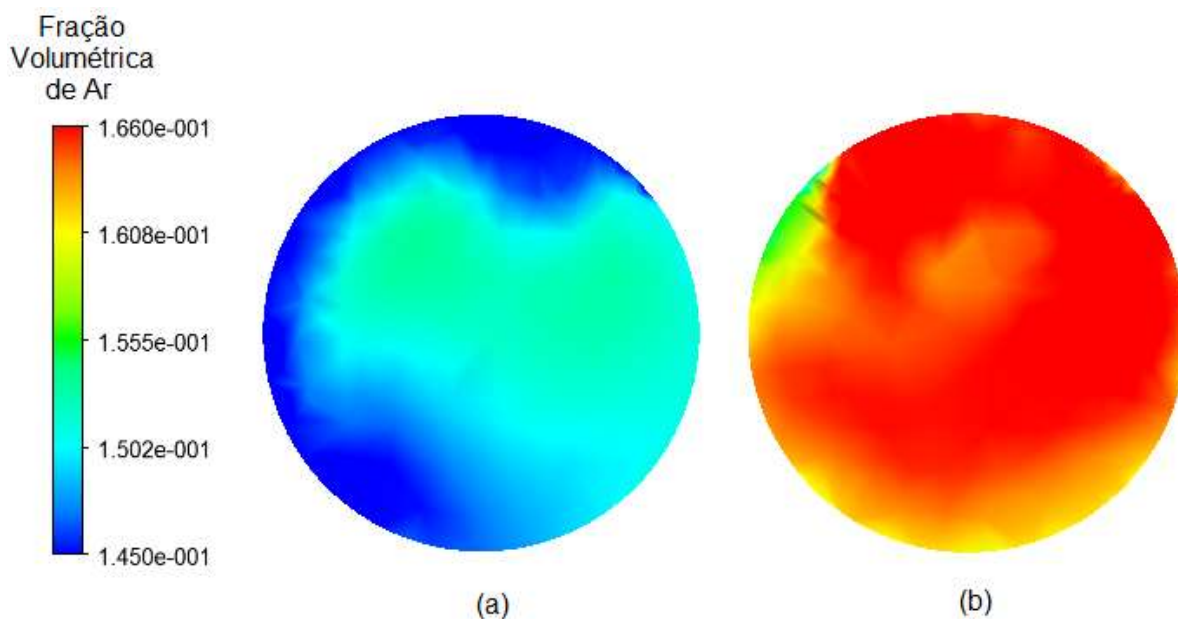


Figura 24 – Fração Volumétrica de ar em $Z = 3,0$ m (a) sem entradas laterais (b) com entradas laterais
 Fonte: CFX 14.0

A Figura 23 ilustra o que acontece logo acima da entrada laterais. Essa figura mostra que novamente a distribuição tem gradiente no reator sem entradas laterais e na presença das entradas este gradiente é menos pronunciado.

A Figura 24 (a) ilustra o decaimento da fração de ar ao se atingir alturas mais altas do reator, o que não acontece quando temos as entradas, Figura 24 (b).

As Figuras 25 e 26 ilustram um gráfico de vetores da velocidade do líquido dentro do reator. Podemos perceber, conforme a fluidodinâmica do sistema apresentada nos capítulos anteriores, que a tendência é ascensão pela região do centro e descendência nas laterais. A Figura 25, do reator com entradas laterais mostra um maior índice de vórtices formado pelas das entradas.

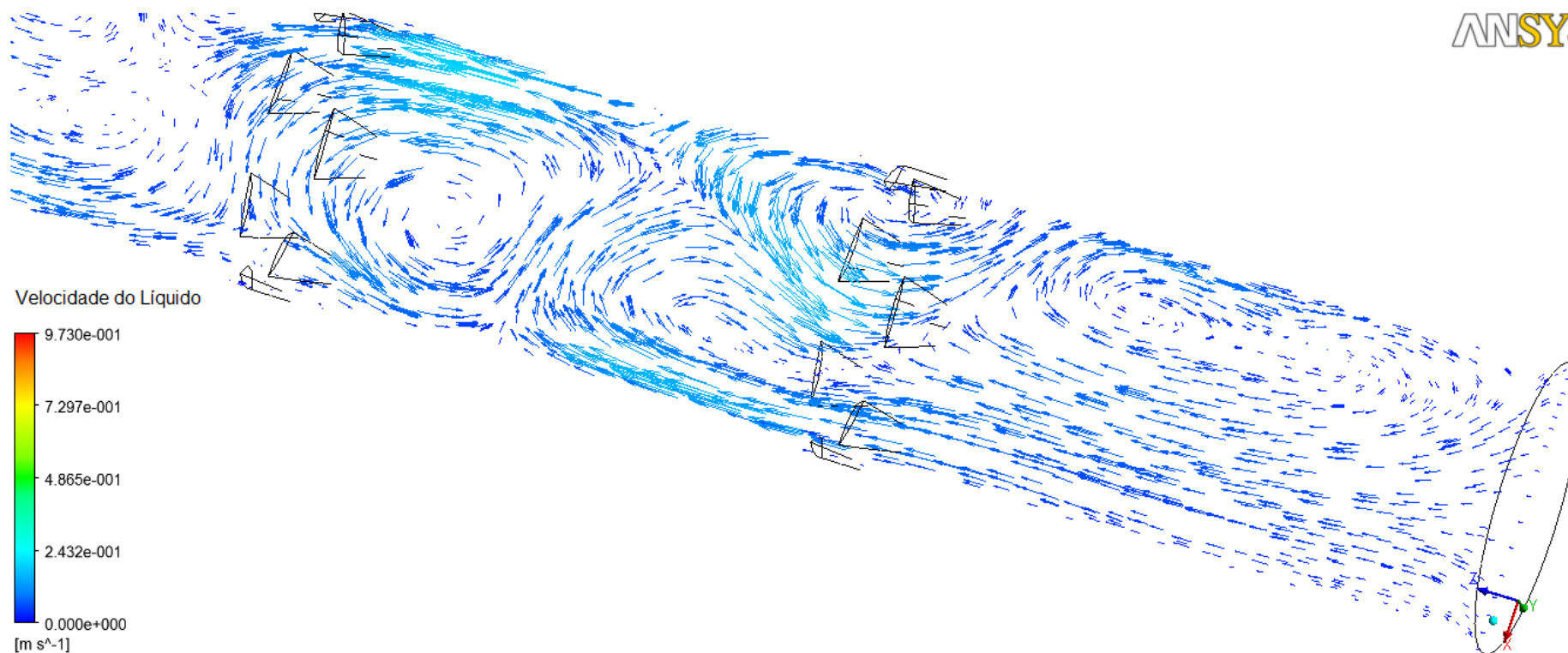


Figura 25 – Velocidade do líquido no reator com entradas
Fonte: CFX 14.0

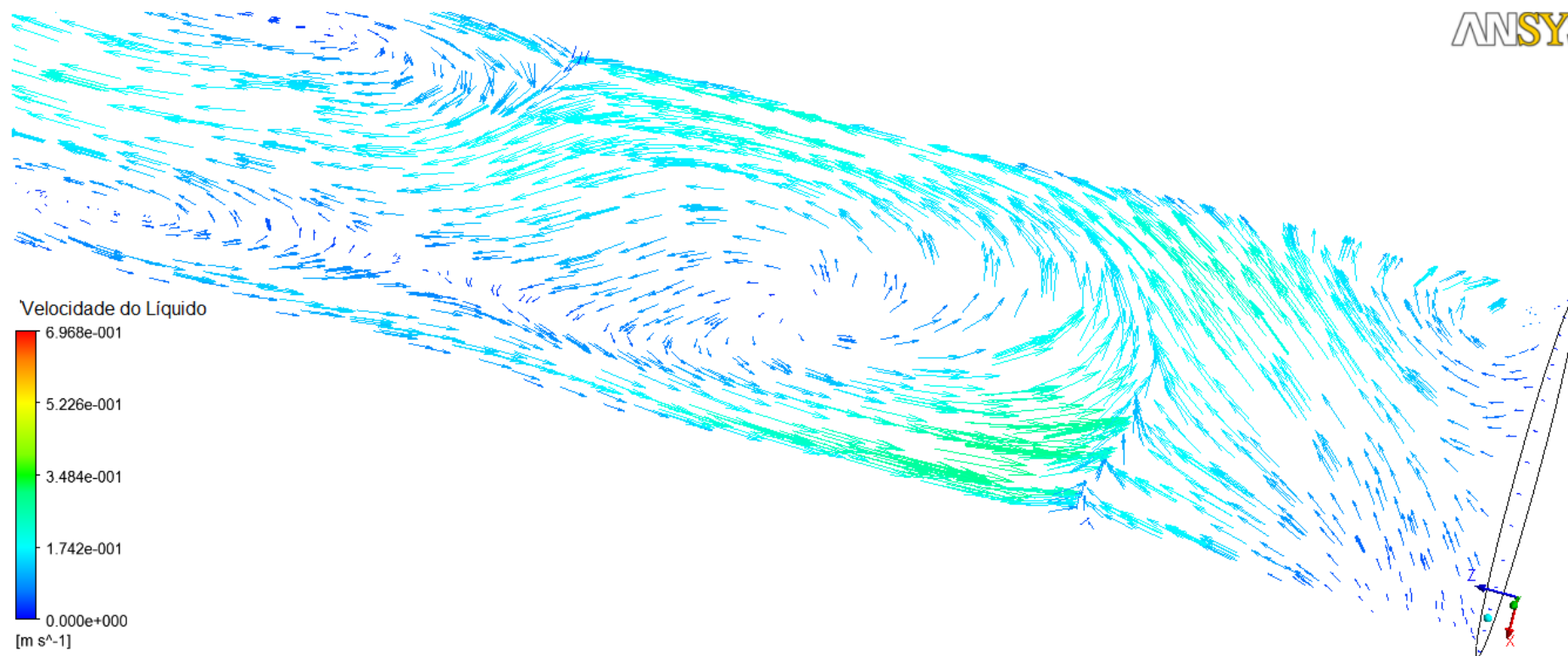


Figura 26 – Velocidade do líquido no reator comum
Fonte: CFX 14.0

5. CONCLUSÃO

A simulação do escoamento no reator de lama borbulhante pôde ser calculada no CFX. Simulou-se dois reatores com 4 metros de altura e 30 cm de diâmetro, sem entradas e com entradas em várias alturas do reator. No reator com entradas laterais destaca-se o reator com 7 entradas laterais ao decorrer de cinco alturas do reator. Além disso, ressalta-se a diferença de vazão em cada altura do reator para maximizar a distribuição de gás. Quanto aos resultados da simulação, pôde-se concluir que o objetivo de melhorar a distribuição de gás dentro do reator foi atingido com a simulação da injeção de gás pela lateral. Uma característica importante para atingir a homogeneização da concentração da fração volumétrica de ar foi a combinação das velocidades laterais, a quantidade e altura destas entradas no reator. A simulação tem condições de predizer a fluidodinâmica do reator com frações pesadas do petróleo e gás hidrogênio uma vez que existe a similaridade entre a interação da fase líquida simulada (água) com a fase gasosa (ar).

6. REFERÊNCIAS

ABREU, João C. N. de. **Modelagem e simulação de reator de leito expandido aplicado ao hidroprocessamento de óleos pesados e resíduos de destilação.** 1995. 130 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1995.

CANEDO, Eduardo. L. **Fenômenos de transporte.** Rio de Janeiro: LTC, 2010.

CARBONELL, Montserrat M. **Modelagem fluidodinâmica e reacional com avaliação ambiental do processo de hidroconversão de resíduos de petróleo.** 2003. 352 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2003.

ÇENGEL, Yunus A., CIMBALA, John M. **Mecânica dos fluidos: fundamentos e aplicações.** São Paulo: Mc Graw-Hill, 2007.

CUI, Zhe. **Hydrodynamics in a bubble column at elevated pressures and turbulence energy distribution in bubbling gas-liquid and gas-liquid-solid flow systems.** 2005. 187 f. Tese (Doutor em filosofia-PhD) – Departamento de Engenharia Química, The Ohio State University, Ohio, 2005.

DECKWER W.Dieter., LOUISI Youssef., ZAIDI Ahmed, RALEK Milos. **Hydrodynamic properties of the fischer-tropsch slurry process.** *Ind Eng Chem Process* Vol.19, p. 699–708, 1980.

FOGLER, H. Scott. **Elementos de engenharia das reações químicas.** 4. ed. Rio de Janeiro, RJ:LTC, 2009.

FORTUNA, Armando O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos fluidos: Conceitos Básicos e Aplicação.** São Paulo:Editora da Universidade de São Paulo, 2000.

GRACE, J.R.; WAIREGI, T.; NGUYEN, T.H. **Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids.** *Trans. Int. Chem. Eng.*, Vol. 54, p. 167-173, 1976.

GRAY, M. R. **Upgrading petroleum residues and heavy oils**. Estados Unidos: Marcel Dekker, 1994.

GRUIA, A. *Distillate hydrocracking*. In: JONES, David S. J. Stan; PUJADÓ, Peter R. **Handbook of petroleum processing**. Springer, The Netherlands, cap.7, p.287-320, 2006.

HILL, Chares G. **An introduction to chemical engineering kinetics & reactor design**. New York: John Wiley & Sons, 594 p., 1977.

HILLMER, G.; WEISMANTEL, L.; HOFMANN, H. **Investigations and modelling of slurry bubble columns**. *Chemical Engineering Science*, Vol. 49, p. 837-843, 1994.

JULIÁ, J.E.; HERNÁNDEZ, L.; CHIVA, S.; VELA, A. **Hydrodynamics characterization of a needle sparger rectangular bubble column: Homogeneous flow, static bubble plume and oscillating bubble plume**. *Chemical Engineering Science*, Vol. 62, p. 6361-6377, 2007.

KANTARCI, N.; BORAK, F.; ULGEN, K.O. **Bubble column reactors**. *Process Biochemistry*, Vol. 40, p. 2263-2283, 2005.

KRISHNA, R. **A Scale-up strategy for a commercial scale bubble column slurry reactor for fischer-tropsch synthesis**. *Oil & Gas Science and Technology*, Vol. 55, p. 359-393, 2000.

LEVENSPIEL, Octave. **Engenharia das reações químicas**. São Paulo: E. Blücher, 2000.

MALISKA, Clovis. R. **Transferência de calor e mecânica do fluidos computacional**. 2 ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2012

MATOS, Everton M. **Modelagem e simulação de um reator trifásico, fluidizado aplicado ao processamento das frações pesadas do petróleo**. 2001. 131 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2001.

PAPANASTASIOU, Tasos C., GEORGIU Georgios C., ALEXANDROU Andreas N. **Viscous fluid flow**. U.S. CRC press: LLC, 2000.

PRIEVE, Dennis. C. **A course in fluid mechanics with vector field theory.** Carnegie Mellon University, 2000.

ROSA, Leonardo.M. **Aplicação de técnicas CFD para o cálculo de escoamento em meio reativo em riser.** 2008. 93 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química. Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

SANYAL, Jay.; MARCHISIO, Daniele.L.; FOX, Rodney O.; DHANASEKHARAN, Kumar. **On the comparison between population balance models for CFD simulation of bubble columns.** *Industrial Engineering Chemistry Reserach.* Vol.44, p. 5063-5072, 2005.

SATO, Y.; SEKOGUCHI, K. **Liquid velocity distribution in two-phase bubble flow".** *Int. J.Multiphase Flow*, 2, p.79-95,1975.

SCHMAL, Martin. **Cinética e reatores aplicação na engenharia química: teoria e exercícios.** Rio de Janeiro: Synergia, 2010.

SHIN,I. S., SON, S. M., LIM, D. H., KANG, Y., JUNG, H., LEE, H. T. **Multiple effects of operating variables on heat transfer in three-phase slurry bubble columns.** *Korean Journal of Chemical Engineering*, Vol 27, p. 1015-1020, 2010.

SILVA JR J. L. **Investigação do escoamento bifásico gás-líquido em uma coluna de bolhas retangular por meio da técnica CFD.** 2011. 126 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2011.

SMITH, D. N., RUETHER. J. A. **Dispersed solid dynamics in a slurry bubble column.** *Chemical Engineering Science*, Vol 40, p. 741-754, 1985.

SOCCOL JR, Renato. **Modelagem e simulação do escoamento gás-líquido em leitos borbulhantes nos reatores de colunas de bolha.** 2001. 158 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Programa de pós graduação em engenharia química, Universidade Regional de Blumenau, Blumenau, 2011.

SWAPNIL, V.G.; MANISH, R.B.; NITIN, P.; JYESHTHARAJ, B. J.; GEOFFREY M. E. **Prediction of regime transition in three-phase sparged reactors using linear stability analysis.** *Chemical Engineering Journal*, Vol. 235, p. 307-330, 2014.

THORAT, B.N.; JOSHI, J.B. **Regime transition in bubble columns: experimental and predictions.** *Experimental Thermal and Fluid Science*, Vol. 28, p. 423-430, 2004.

VEERA U. P., KATARIA K.L., JOSHI J.B. **Effect of superficial gas velocity on gas hold-up profiles in foaming liquids in bubble column reactors.** *Chemical Engineering Journal*, Vol. 99, p. 53–58, 2004.

WARBITO; OHKAWA, M.; KAWATA, N.; UCHIDA, S. **Cross-sectional distributions of gas and solid holdups in slurry bubble column investigated by ultrasonic computed tomography.** *Chemical Engineering Science*, Vol. 54, p. 4711-4728, 1999.

YU, Y. H.; KIM S. D. **Bubble properties and local liquid velocity in the radial direction of cocurrent gas-liquid flow.** *Chemical Engineering Science*, Vol 46, p. 313-320, 1991.