



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GECIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE ENERGIA NUCLEAR
COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR
CENTRO REGIONAL DE CIÊNCIAS NUCLEARES DO NORDESTE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

VICTOR HUGO FARIAS FERREIRA DA SILVA

**INTEGRAÇÃO DE SIMULAÇÕES TOMOGRÁFICAS MCNPX ATRAVÉS DE
IMPORTAÇÃO DA GEOMETRIA CFD DE FLUXO GÁS-SÓLIDO EM RISER A
FRIO**

Recife

2019

VICTOR HUGO FARIAS FERREIRA DA SILVA

**INTEGRAÇÃO DE SIMULAÇÕES TOMOGRÁFICAS MCNPX ATRAVÉS DE
IMPORTAÇÃO DA GEOMETRIA CFD DE FLUXO GÁS-SÓLIDO EM RISER A
FRIO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Aplicações de Radioisótopos na Indústria e Medicina.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Costa Dantas

Recife

2019

Catálogo na fonte
Bibliotecário Carlos Moura, CRB-4 / 1502

S586i Silva, Victor Hugo Farias Ferreira da.
Integração de simulações tomográficas MCNPX através de importação da geometria CFD de fluxo gás-sólido em riser a frio. / Victor Hugo Farias Ferreira da Silva. - Recife, 2019.
126 f. : il.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Costa Dantas.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares, 2019.
Inclui referências e apêndices.

1. Engenharia nuclear. 2. Escoamento bifásico. 3. Importação de simulações. 4. MCNPX. 5. Parâmetros fluidodinâmicos. 6. Vetor de integração. I. Dantas, Carlos Costa, orientador. II. Título.

VICTOR HUGO FARIAS FERREIRA DA SILVA

**INTEGRAÇÃO DE SIMULAÇÕES TOMOGRÁFICAS MCNPX ATRAVÉS DE
IMPORTAÇÃO DA GEOMETRIA CFD DE FLUXO GÁS-SÓLIDO EM RISER A
FRIO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Aprovado em: 27/08/2019.

BANCA EXAMINADORA

Prof.º Dr. Fernando Roberto de Andrade Lima (Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof.º Dr. José Wilson Viera (Examinador Externo)
Instituto Federal de Pernambuco e Universidade de Pernambuco

Prof.º Dr. Silvio de Barros Melo (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco

AGRADECIMENTO

A Deus – Grande Arquiteto do Universo (GAU) – Sentimos que nossa fé e nossa esperança se renovam quando recebemos tão carinhoso acolhimento do Vosso Infinito Amor, para que possamos vencer com coragem e determinação os desafios naturais da nossa existência. Obrigado, Senhor.

A todos os meus familiares, dos quais sempre recebi carinho, apoio e compreensão. Especialmente agradeço aos meus pais – Pedro Silva (*in memoriam*) e Cecília Farias – pela amizade, união, amor e confiança dispensados em todas as fases da minha vida.

Aos amigos-irmãos – Jorge Lins, Pablo Queiroz e Woody Allen – amigos que a vida me deu e que sempre estiveram torcendo por mim. E também aguentando os meus estresses de cada dia.

Aos colegas do Departamento de Energia Nuclear da UPFE – Klebson Oliveira e Tennyson Resende – pela colaboração e contribuições importantes para o trabalho.

A Julieta Figueirôa, Marcela Marques e Pamalla Oliveira, pela amizade, apoio, brincadeiras, risos e por terem um dia transformado um lugar opaco e monocromático num ambiente iluminado e colorido.

Aos amigos construídos no Grupo de Pesquisa, em especial Sr. Antônio Otávio, Bruno Andrade, Eudes Vieira, Leandro Claudino e Milton Viana, por todo apoio, principalmente nas situações mais difíceis e pelos momentos de distração.

Ao funcionário Zacarias (Zaca) por cuidar do ambiente do nosso laboratório, deixando sempre limpo. Também pela sinceridade, carisma e pelo cafezinho do dia a dia.

Ao Prof. Dr. Carlos Costa Dantas pela orientação e incentivo para o desenvolvimento desse trabalho, principalmente pelo apoio, nada paternalista, necessário na formação de mestres.

Aos membros das bancas examinadoras: Dr. Fernando de Andrade Lima, Dr. José Wilson Vieira, Dr. Mario Augusto Bezerra da Silva e Dr. Silvio de Barros Melo, por todas as contribuições dadas ao longo dessa jornada.

Aos professores e funcionários do DEN/UFPE.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro através de concessão de bolsa de estudo de mestrado.

RESUMO

O craqueamento catalítico fluido é um processo utilizado na indústria petroquímica para converter frações do petróleo pesadas em frações mais leves, como a gasolina e o GLP, por exemplo. A conversão ocorre devido à introdução de partículas sólidas denominadas catalisadores (pó de Geldart de classe A) no interior de *risers* industriais de FCC. Geralmente, são construídas unidades piloto a frio para estudo dos fenômenos fluidodinâmicos envolvendo escoamentos do tipo gás-sólido em *risers*. Nestas unidades são aplicadas diferentes técnicas de avaliação do fluxo bifásico, destacando-se a investigação não intrusiva usando tomografia por transmissão gama, que têm sido o caminho bem estabelecido na literatura para definir parâmetros fluidodinâmicos. Os dados determinados por escaneamento gama de seções radiais do *riser* contribuem para validação de simulações numéricas da fluidodinâmica computacional. Contudo, é necessário um critério quantitativo para avaliar a fluidodinâmica do leito fluidizado circulante da UPF, pois existem incertezas gerais no sistema. Para tanto, a simulação da tomografia computadorizada gama com um código Monte Carlo pode ser utilizada como vetor de integração entre diferentes modelos. Por se tratar de um estimador verossímil, o MC possui grandes vantagens de utilização quando comparado a métodos determinísticos. Este método também se destaca pela adequação a quaisquer materiais de geometrias complexas, pela rapidez e baixo custo. Nesse trabalho, foram realizadas simulações com o código computacional MCNPX da tomografia gama do escoamento bifásico da UPF tipo FCC por meio da importação de simulações realizadas em CFD e utilização de imagens geradas em códigos e na planta piloto virtual 3D no ambiente CAD com validação de dados experimentais integrando os métodos computacionais. Assim, foram determinados, a partir da TCG simulada, os dados referentes ao perfil radial da fração volumétrica de sólidos e gás, concentração de sólidos e velocidade *slip* nas várias alturas do *riser*. Isto possibilitou uma comparação otimizada com dados da literatura e maior compreensão dos parâmetros mensurados experimentalmente. Por fim, a utilização da técnica de reconstrução algébrica de correção multiplicativa, mostrou ser adequada para apresentação de resultados qualitativos do processo com distribuição radial de sólidos.

Palavras-chave: Escoamento bifásico. Importação de simulações. MCNPX. Parâmetros fluidodinâmicos. Vetor de integração.

ABSTRACT

Fluid catalytic cracking is a process used in petrochemical industries to convert heavy oil fractions into lighter fractions, such as gasoline and LPG, for example. The conversion occurs due to the introduction of solid particles called catalysts (Geldart's class A powder) inside industrial FCC risers. Generally, cold flow pilot units are built for the study of fluid dynamics phenomena involving gas-solid flows in risers. In these units, different techniques of biphasic flow evaluation are applied, especially non-intrusive investigation using gamma-ray tomography, which have been the well-established path in the literature to define fluidodynamic parameters. The data determined by gamma scanning of radial sections of the riser contribute to the validation of numerical simulations of computational fluid dynamics. However, a quantitative criterion is needed to evaluate CFPU flow of circulating fluidized bed, as there are general uncertainties in the system. In order to do so, the gamma-ray computed tomography simulation in Monte Carlo can be used as an integration vector between different models and it has great advantages when compared to deterministic methods, its facility to fit any materials of complex geometries and its speed and low cost. In this paper, simulations were performed using the MCNPX computational code of the FCC-type CFPU biphasic gamma tomography through the import of CFD simulations and the use of code-generated images and 3D virtual pilot plant in the CAD environment with validation of experimental data integrating computational methods. Thus, the data concerning the radial profile of the solids and gas volumetric fraction, solids concentration and slip velocity at the various riser heights were determined from the simulated GCT. Making possible an optimized comparison with literature data and a better understanding of the parameters measured experimentally. Finally, using the algebraic reconstruction technique multiplicative correction, proved to be suitable for qualitative results for process with radial solids distribution.

Keywords: Biphasic flow. Fluidodynamic parameters. Import simulations. Integration vector. MCNPX.

LISTA DE FIGURAS

| | | |
|-------------|--|----|
| Figura 1 – | Esquema da UPF do processo de craqueamento catalítico fluidizado (FCC)..... | 23 |
| Figura 2 – | Esquema da secção transversal do riser no cálculo do comprimento da corda ao longo da varredura por transmissão gama..... | 25 |
| Figura 3 – | Fração volumétrica de sólido no riser da UPF na altura de 0,650m..... | 29 |
| Figura 4 – | Esboço representativo de geometria para cálculo do coeficiente de atenuação..... | 31 |
| Figura 5 – | Diagrama de fluxo das diferentes etapas realizadas no código MCNPX para a simulação de transporte de fóton..... | 32 |
| Figura 6 – | Vista superior (xy) em corte transversal do tubo com duas esferas de ar e uma de alumínio no MCNPX..... | 36 |
| Figura 7 – | Imagem reconstruída do semicilindro através de dados simulados..... | 37 |
| Figura 8 – | Reconstrução de solda com três esferas, sendo uma de alumínio e duas de ar..... | 38 |
| Figura 9 – | Distribuição radial da fração volumétrica em 3 secções do riser da UPFV..... | 39 |
| Figura 10 – | Esquema Data Flow in System na integração da UPF..... | 41 |
| Figura 11 – | Perfil radial de atenuação gama relativa gama, obtido nas simulações tomográficas MCNPX, experimento e dados analíticos para um tubo de aço com uma semicilindro de alumínio (esquerda) e perfil gerado na tomografia experimental e MCNPX para região da solda de um tubo de ferro vazia (direita)..... | 42 |
| Figura 12 – | Esboço da vista superior (xy) de fatia radial em 2D representando a geometria com distribuição de ar-catalisador e arranjo tomográfico no MCNPX..... | 43 |
| Figura 13 – | Representação da metodologia utilizada por meio de fluxograma..... | 45 |
| Figura 14 – | Fração volumétrica de catalisador no plano xy nas posições radiais: 0,650m, 1,384m e 3,424m..... | 47 |

| | | |
|-------------|--|----|
| Figura 15 – | Fração volumétrica de catalisador no plano xy nas posições radiais: 0,77m, 1,52m, 3,52m e 5,52m..... | 48 |
| Figura 16 – | Fração volumétrica de sólidos no plano xy nas posições radiais: 0,96m, 1,06m e 1,16m..... | 48 |
| Figura 17 – | Representação em CAD da injeção de gás-sólido no riser da UPF..... | 49 |
| Figura 18 – | Mensagem de erro devido a extensão do arquivo..... | 51 |
| Figura 19 – | Fluxograma com os procedimentos de importação..... | 51 |
| Figura 20 – | Linha do arquivo INP com símbolo mnemônico em destaque..... | 54 |
| Figura 21 – | Vista superior em corte transversal do sistema a ser simulado..... | 54 |
| Figura 22 – | Conversão convencional de arquivos CFD para imagem com escala de tons de cinza..... | 55 |
| Figura 23 – | Conversão por meio de software de arquivos CFD para imagem com escala de tons de cinza | 56 |
| Figura 24 – | Interface do software MCNP_Tomogama_Grid_CFD..... | 57 |
| Figura 25 – | Esquema de importação através do software..... | 58 |
| Figura 26 – | Gráfico representativo de erros X histórias..... | 63 |
| Figura 27 – | Fluxograma com os principais procedimentos das simulações MCNPX | 65 |
| Figura 28 – | Recipiente retangular sem e com catalisador visto no vised.exe do MCNPX..... | 66 |
| Figura 29 – | Geometria do sistema com camadas de catalisador de FCC no MCNPX | 67 |
| Figura 30 – | Arranjo experimental com camadas de catalisador de FCC no tomógrafo gama..... | 68 |
| Figura 31 – | Exemplo da reconstrução MART da distribuição de catalisador no interior do riser..... | 74 |
| Figura 32 – | Comparação da atenuação do catalisador ativado utilizando fontes de Am-241 e Cs-137..... | 77 |
| Figura 33 – | Perfil radial de intensidade gama relativa para o riser vazio do MCNPX..... | 78 |
| Figura 34 – | Comparação entre dados experimentais e MCNPX para a tomografia gama do riser com ar..... | 79 |

| | |
|--|----|
| Figura 35 – Perfil radial da intensidade da radiação gama nas condições com e sem fluxo de catalisador para o riser com ar e arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4..... | 80 |
| Figura 36 – Perfil radial da intensidade da radiação gama nas condições com e sem fluxo de catalisador para o riser com ar e arquivos CFD5, CFD6 e CFD7..... | 81 |
| Figura 37 – Perfil radial da intensidade da radiação gama nas condições com e sem fluxo de catalisador para o riser com ar e arquivos CFD8, CFD9 e CFD10..... | 82 |
| Figura 38 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado através da TCG – V1Â MCNPX..... | 84 |
| Figura 39 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado através da TCG – V12Â MCNPX..... | 84 |
| Figura 40 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado através da TCG – V1Â MCNPX.... | 86 |
| Figura 41 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado através da TCG – V12Â MCNPX.. | 86 |
| Figura 42 – Comparação de informações das tomografias MCNPX com dados do Ansys Fluent e experimentais para o perfil radial da fração volumétrica de sólidos do arquivo CFD5..... | 87 |
| Figura 43 – Comparação de informações das tomografias MCNPX com dados do Ansys Fluent e experimentais para o perfil radial da fração volumétrica de sólidos do arquivo CFD6..... | 88 |
| Figura 44 – Comparação de informações das tomografias MCNPX com dados do Ansys Fluent e experimentais para o perfil radial da fração volumétrica de sólidos do arquivo CFD7..... | 88 |
| Figura 45 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado através da TCG – V1Â MCNPX..... | 90 |
| Figura 46 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado através da TCG – V12Â MCNPX.. | 90 |

| | |
|---|----|
| Figura 47 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado através da TCG – V1Â MCNPX..... | 91 |
| Figura 48 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado através da TCG – V12Â MCNPX..... | 91 |
| Figura 49 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, determinado através da TCG – V1Â MCNPX..... | 92 |
| Figura 50 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, determinado através da TCG – V12Â MCNPX..... | 92 |
| Figura 51 – Comparação entre as informações obtidas no MCNPX com dados do SolidWorks e experimental para o perfil radial da fração volumétrica de sólidos referente ao arquivo CFD9..... | 94 |
| Figura 52 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10 determinado através da TCG – V1Â MCNPX..... | 95 |
| Figura 53 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10 determinado através da TCG – V12Â MCNPX..... | 95 |
| Figura 54 – Perfil radial da velocidade da fase sólida, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX..... | 96 |
| Figura 55 – Perfil radial da velocidade da fase sólida, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX..... | 97 |
| Figura 56 – Perfil radial da velocidade da fase sólida, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX..... | 97 |
| Figura 57 – Perfil radial da velocidade da fase gasosa, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX..... | 98 |

| | |
|---|-----|
| Figura 58 – Perfil radial da velocidade da fase gasosa, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX..... | 98 |
| Figura 59 – Perfil radial da velocidade da fase gasosa, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX..... | 99 |
| Figura 60 – Perfil radial da velocidade de slip para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4..... | 100 |
| Figura 61 – Perfil radial da velocidade de slip para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7..... | 100 |
| Figura 62 – Perfil radial da velocidade de slip para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10..... | 100 |
| Figura 63 – Perfil radial da concentração de sólidos, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX..... | 101 |
| Figura 64 – Comparação entre os perfis axiais de concentração de sólidos, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, obtidos com dados da TCG – V1Â e TCG – V12Â MCNPX..... | 103 |
| Figura 65 – Comparação entre os perfis axiais de concentração de sólidos, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, obtidos com dados da TCG – V1Â e TCG – V12Â MCNPX..... | 103 |
| Figura 66 – Comparação entre os perfis axiais de concentração de sólidos, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, obtidos com dados da TCG – V1Â e TCG – V12Â MCNPX..... | 103 |
| Figura 67 – Reconstrução de secção radial do riser vazio obtida com dados da simulação..... | 104 |
| Figura 68 – Reconstrução de secção radial do riser em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD1..... | 105 |
| Figura 69 – Reconstrução de secção radial do riser em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD2..... | 105 |
| Figura 70 – Reconstrução de secção radial do riser em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD3..... | 105 |

| | | |
|-------------|---|-----|
| Figura 71 – | Reconstrução de secção radial do riser em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD4..... | 105 |
| Figura 72 – | Reconstrução de secção radial do riser em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD5..... | 106 |
| Figura 73 – | Reconstrução de secção radial do riser em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD6..... | 106 |
| Figura 74 – | Reconstrução de secção radial do riser em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD7..... | 106 |
| Figura 75 – | Reconstrução de secção radial do riser em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD8..... | 107 |
| Figura 76 – | Reconstrução de secção radial do riser em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD9..... | 107 |
| Figura 77 – | Reconstrução de secção radial do riser em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD10..... | 107 |

LISTA DE TABELAS

| | | |
|-------------|--|----|
| Tabela 1 – | Propriedade físicas e parâmetros obtidos através da unidade experimental..... | 28 |
| Tabela 2 – | Composição química e fração de massa dos materiais presentes na simulação..... | 53 |
| Tabela 3 – | Parâmetros experimentais utilizados para obtenção dos arquivos CFD..... | 60 |
| Tabela 4 – | Parâmetros utilizados na tomografia MCNPX de secções radiais do riser.. | 61 |
| Tabela 5 – | Avaliação da qualidade da simulação de acordo com R..... | 63 |
| Tabela 6 – | Comparação dos valores do coeficiente de atenuação linear, utilizando fonte de Am-241 e Cs-137, para o catalisador ativado..... | 76 |
| Tabela 7 – | Comparação dos valores do coeficiente de atenuação mássico, utilizando fonte de Am-241 e Cs-137, para o catalisador ativado..... | 78 |
| Tabela 8 – | Médias da fração volumétrica de sólidos, para as imagens referentes às alturas do riser de 0,77m; 1,52m; 3,52m e 5,52m, determinadas na TCG – V1Â e TCG –V12Â MCNPX..... | 85 |
| Tabela 9 – | Médias da fração volumétrica de sólidos, para as imagens referentes às alturas do riser de 0,650m; 1,384m e 3,424m, determinadas na TCG – V1Â e TCG –V12Â MCNPX..... | 90 |
| Tabela 10 – | Médias da fração volumétrica de sólidos, para as imagens referentes às alturas do riser de 0,96m; 1,06m e 1,16m, determinadas na TCG – V1Â e TCG –V12Â MCNPX..... | 93 |

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

| | |
|------------------|--|
| AIE | Agência Internacional de Energia |
| ART | Algebraic Reconstruction Technique |
| CAD | Computer Aided Design |
| CFD | Computational Fluid Dynamics |
| DFS | Data Flow in System |
| FCC | Fluid Catalytic Cracking |
| GLP | Gás Liquefeito do Petróleo |
| INP | Input |
| INP _F | Arquivo de entrada MCNPX para o riser em condição de fluxo |
| INP _V | Arquivo de entrada MCNPX para o riser com gás |
| KTGF | Kinetic Theory of Granular Flow |
| LFC | Leito Fluidizado Circulante |
| MART | Multiplicative Algebraic Reconstruction Technique |
| MC | Monte Carlo |
| MCNPX | Monte Carlo N-Particle eXtended |
| MMC | Método Monte Carlo |
| MQL | Mínimos Quadrados Linear |
| NIST | National Institute of Standards and Technology |
| PMMA | PoliMetilMetAcrilato |
| PVC | PolyVinyl Chloride |
| R | Erro Relativo |
| RGB | Red, Green e Blue |
| RSICC | Radiation Safely Information Computacional Center |
| SAT | ACIS Text Standard |
| STEP | STandard for the Exchange of Product |
| SW | SolidWorks |
| TTB | Thick Target Bremsstrahlung |
| TXT | Texto |
| UPF | Unidade Piloto a Frio |
| UPFV | Unidade Piloto a Frio Virtual |
| Vised | Visual Editor |

SUMÁRIO

| | | |
|--------------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO..... | 18 |
| 1.1 | OBJETIVOS..... | 19 |
| 1.1.1 | Objetivo Geral..... | 19 |
| 1.1.2 | Objetivos Específicos..... | 20 |
| 1.2 | SUBDIVISÕES DA DISSERTAÇÃO..... | 20 |
| 2 | REVISÃO DE LITERATURA..... | 21 |
| 2.1 | UNIDADE PILOTO A FRIO DO TIPO FCC..... | 21 |
| 2.1.1 | Situação Atual da UPF Experimental..... | 24 |
| 2.2 | FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL..... | 28 |
| 2.2.1 | Simulações da Fluidodinâmica no Riser da UPF..... | 29 |
| 2.3 | MÉTODO MONTE CARLO..... | 30 |
| 2.3.1 | O Código Computacional MCNPX..... | 30 |
| 2.3.2 | Interações de Fótons Com a Matéria Consideradas Pelo MCNPX..... | 32 |
| 2.3.2.1 | Tratamento físico detalhado..... | 33 |
| 2.3.3 | Importação de Geometrias Para o MCNPX..... | 35 |
| 2.4 | RECONSTRUÇÃO ALGÉBRICA DE IMAGENS TOMOGRÁFICAS..... | 37 |
| 2.5 | UNIDADE PILOTO A FRIO VIRTUAL..... | 38 |
| 2.6 | INTEGRAÇÃO DO SISTEMA DE MEDIDAS EXPERIMENTAIS DA UPF COM DIFERENTES PLATAFORMAS DE SIMULAÇÕES..... | 39 |
| 2.6.1 | Integração..... | 40 |
| 2.6.2 | Método de Integração Com Simulações MCNPX da Fluidodinâmica do Riser..... | 41 |
| 3 | MATERIAL E MÉTODOS..... | 43 |
| 3.1 | MATERIAL..... | 44 |
| 3.2 | ESQUEMA METODOLÓGICO..... | 45 |
| 3.3 | CARACTERIZAÇÃO DO ESTUDO..... | 45 |
| 3.4 | SELEÇÃO DE IMAGENS CFD..... | 46 |
| 3.4.1 | Dados CFD da Distribuição Radial de Sólidos..... | 47 |
| 3.5 | INSERÇÃO DE ARQUIVOS NO MCNPX..... | 49 |
| 3.5.1 | Otimização da Importação..... | 50 |
| 3.5.2 | Importação Através de Softwares..... | 51 |

| | | |
|--------------|--|-----------|
| 3.5.2.1 | Criação de arquivos base MCNPX..... | 52 |
| 3.5.2.2 | Riser vazio e em condição de fluxo..... | 54 |
| 3.5.2.3 | Conversão de imagens..... | 55 |
| 3.5.2.4 | Softwares de importação..... | 56 |
| 3.6 | SIMULAÇÃO DA TOMOGRAFIA GAMA DE FEIXE ÚNICO..... | 59 |
| 3.6.1 | Classificação das Imagens Importadas Para MCNPX..... | 59 |
| 3.6.2 | Parâmetros Utilizados nas Simulações da Tomografia Gama do Riser..... | 60 |
| 3.7 | SIMULAÇÃO NO MCNPX..... | 61 |
| 3.7.1 | Análise de Resultados do MCNPX..... | 62 |
| 3.7.1.1 | Erro relativo..... | 62 |
| 3.7.2 | Arquivos de Saída das Simulações..... | 64 |
| 3.7.3 | Mineração de Dados..... | 64 |
| 3.8 | DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS EXPERIMENTAIS E SIMULADOS COM O MCNPX..... | 65 |
| 3.8.1 | Coefficiente de Atenuação Linear do Catalisador..... | 65 |
| 3.8.2 | Coefficiente de Atenuação Mássico do Catalisador..... | 69 |
| 3.8.3 | Perfil da Atenuação Gama de Secções Radiais do riser..... | 70 |
| 3.8.4 | Fração Volumétrica de Sólidos e Gás em Secções Radiais do Riser..... | 71 |
| 3.8.5 | Perfil Radial da Velocidade Slip..... | 72 |
| 3.8.6 | Densidade ou Concentração de Sólidos ao Longo do Riser..... | 73 |
| 3.9 | RECONSTRUÇÃO DAS IMAGENS..... | 73 |
| 3.9.1 | Comparação de Secções Radiais do Riser Reconstruídas Com Imagens CFD..... | 74 |
| 4 | RESULTADOS E DISCUSSÃO..... | 75 |
| 4.1 | DADOS DETERMINADOS ATRAVÉS DA SIMULAÇÃO DA TRANSMISSÃO GAMA NO MCNPX..... | 75 |
| 4.1.1 | Coefficiente de Atenuação Linear do Catalisador..... | 75 |
| 4.1.2 | Coefficiente de Atenuação Mássico do Catalisador..... | 77 |
| 4.1.3 | Perfil da Atenuação Gama em Secções Radiais do Riser..... | 78 |
| 4.2 | OBTENÇÃO DE PARÂMETROS FLUIDODINÂMICOS..... | 83 |
| 4.2.1 | Fração Volumétrica de Sólidos e Gás em Secções Radiais do Riser..... | 83 |
| 4.2.2 | Perfil Radial da Velocidade Slip..... | 96 |

| | | |
|--------------|---|------------|
| 4.2.3 | Densidade ou Concentração de Sólidos ao Longo do Riser..... | 101 |
| 4.3 | RECONSTRUÇÃO DAS IMAGENS..... | 104 |
| 5 | CONCLUSÕES..... | 108 |
| 6 | SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS..... | 109 |
| | REFERÊNCIAS..... | 110 |
| | APÊNDICE A - CONSTRUÇÃO DO ARQUIVO DE ENTRADA DAS GEOMETRIAS NO MCNPX..... | 116 |
| | APÊNDICE B - FUNCIONAMENTO DOS PROGRAMAS DE IMPORTAÇÃO E AUTOMAÇÃO DA TOMOGRAFIA GAMA DO RISER NO MCNPX..... | 124 |
| | APÊNDICE C - EXEMPLO DE CARTÃO DE ENTRADA DO MCNPX: RISER COM FLUXO BIFÁSICO DE SÓLIDOS E GÁS..... | 126 |

1 INTRODUÇÃO

Atualmente são encontrados na literatura diferentes modelos matemáticos utilizados para determinar a distribuição multifásica ao longo de *risers* industriais. Contudo, ainda não existe um modelo teórico padrão que traduza de forma convincente e homogênea a distribuição de substâncias sólidas, líquidas e gasosas no interior do *riser*. Simulações com fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics* – CFD) têm contribuído significativamente para avaliar o escoamento multifásico por meio de métodos numéricos aplicados a modelos fluidodinâmicos. No entanto, a complexidade do processo de craqueamento de petróleo requer validação dos dados simulados com medidas experimentais realizadas em Unidades Piloto a Frio (UPF). Nesse caso se colocam dois problemas adicionais: o primeiro está ligado a representatividade dos dados experimentais em função da similaridade geométrica e funcional da planta piloto. O último ao processo de mudança de escala (*scale-up*) para a indústria que pode requerer a simulação do efeito da inovação obtida em combinação com a simulação da cinética do craqueamento catalítico fluido (*Fluid Catalytic Cracking* – FCC).

Cada grupo de pesquisa constrói seu modelo físico a frio em escala de laboratório ou piloto para estudar a fluidodinâmica do processo e desenvolve sua estratégia de investigação. A aproximação ao fluxo multifásico por meio do escoamento bifásico ar-catalisador de FCC é o caminho estabelecido na literatura para medir parâmetros fluidodinâmicos. Equações semi-empíricas permitem testar os valores dos parâmetros medidos e por comparação com trabalhos similares pode-se caracterizar qualitativamente o fluxo bifásico em estudo. Simulações são utilizadas para solucionar as equações dos modelos fluidodinâmicos com os parâmetros medidos experimentalmente por sensores de gradiente de pressão, por exemplo, é quantificada a distribuição e velocidade das fases. Aliado a isso, os parâmetros medidos com transmissão das radiações gama e X têm contribuído significativamente para definir a estrutura do fluxo gás-sólidos; a precisão nas velocidades das fases também pode ser mensurada com a utilização da emissão de sinais radioativos com traçadores da fase sólida.

No entanto, existem limitações experimentais para medidas de pressão dadas por perturbação no fluxo provocadas por sensores intrusivos. Nas medidas por tomografia gama o arranjo fonte-detector para medir transmissão da radiação tem as limitações de posicionamento devido a interferência na detecção do espalhamento, baixa resolução temporal e resolução espacial. De modo geral, as medidas não devem incluir região de fluxo perturbado pela dificuldade de modelos teóricos para a perturbação, os arranjos de medidas ‘scanners’ requerem

mecânica de precisão para o projeto e a instalação e, finalmente, o custo dos equipamentos e da manutenção.

Portanto, o estudo do sistema bifásico circulante na UPF, na fase atual, requer simulações Monte Carlo (MC) da tomografia gama por meio da introdução de uma função que represente a distribuição radial de sólidos e a distribuição axial como interpolação das imagens da distribuição radial ao longo do *riser* precisa ser implementada na geometria do código MCNPX (*Monte Carlo N-Particle eXtended*). As opções são criar a distribuição no próprio código que tem recursos de geometria ainda pouco explorados no Grupo de Fluidodinâmica e Tomografia Gama, e vasta literatura que interage geometrias geradas por softwares de desenho assistido por computador (Computer Aided Design – CAD), como *SolidWorks* (SW), com MCNPX, conforme CARTER (1999); SCHWARZ (2005); ZHOU *et al.* (2015). A integração de medidas obtidas nas simulações da tomografia gama e CFD com dados experimentais, pode considerar a UPF como um sistema de fluxo de dados (*Data Flow in System – DFS*), de acordo com BARKMEYER *et al.* (2013).

Por ser usado para simular um processo estatístico, tal como a interação da radiação com a matéria, o código MCNPX foi escolhido por ser muito útil em problemas mais complexos que não podem ser realizados por métodos determinísticos, não precisa resolver a equação de transporte de Boltzmann, as simulações podem ser executadas para quaisquer materiais de geometrias complexas, pela rapidez e baixo custo (MCNP6, 2017). Trabalho recente otimizou a simulação da tomografia gama com o MCNPX (GUEDES, 2016). E a importação de geometria gerada em outro programa foi inserida no código (OLIVEIRA, 2017). Além disso, as limitações técnicas da tomografia gama experimental estão ausentes na tomografia executada pelo código. Nessa rota, é proposto, nesse trabalho, importar as imagens geradas em softwares CFD simulando a distribuição radial do catalisador no *riser* da UPF para o MCNPX e a determinação de parâmetros físicos e fluidodinâmicos por tomografia gama simulada.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo Geral

Simular com MCNPX a tomografia gama do escoamento bifásico da UPF tipo FCC por meio da importação de arquivos CFD presentes na literatura, e validar com dados experimentais, integrando os métodos computacionais.

1.1.2 Objetivos Específicos

1. Estudar o processo da importação de imagem da simulação de experimento realizado em CFD para a geometria do MCNPX e simulações da tomografia gama;
2. Implementar algoritmos computacionais para fazer a importação do experimento da distribuição de sólidos no *riser* da UPF realizada em CFD para o código MCNPX;
3. Executar a simulação em MCNPX do experimento da distribuição de sólidos na UPF comparando parâmetros simulados e medidas experimentais da tomografia gama;
4. Avaliar perfis de parâmetros do escoamento axial e da distribuição radial de sólidos simulados em CFD e no MCNPX para validar com dados experimentais;
5. Simular a varredura em ângulos na tomografia radial, e interpolar secções transversais das alturas das secções de testes para descrever a distribuição axial de sólidos;
6. Apresentar a distribuição de sólidos no escoamento bifásico da UPF com imagem da reconstrução tomográfica.

1.2 SUBDIVISÕES DA DISSERTAÇÃO

Esta dissertação está dividida em seis capítulos: o primeiro é a Introdução, que traz uma revisão resumida dos principais pontos tratados na pesquisa; o segundo é a Revisão de Literatura, que é multidisciplinar, fazendo paralelo entre os trabalhos experimentais e da fluidodinâmica computacional com simulações no código MCNPX; o terceiro é a metodologia onde é descrito, de forma detalhada, o passo a passo da execução dos objetivos apresentados no item 1.1 e Subsecções 1.1.1 e 1.1.2; o quarto são os Resultados e Discussão, que apresenta dados das simulações MCNPX e os compara com informações teóricas, de CFD e experimentais da literatura; as conclusões são o quinto capítulo e aborda os pontos mais importantes atingidos com a pesquisa e também fala da importância da integração dos métodos de medidas; no sexto capítulo, com base na dissertação, são feitas algumas sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO DE LITERATURA

Este capítulo está dividido em seis partes que apresentam as referências relevantes para o desenvolvimento deste trabalho. A primeira tem por tema a Unidade Piloto a Frio do Tipo FCC, as características do projeto e o conhecimento da fluidodinâmica do processo descrito nos resultados experimentais da UPF. A segunda avalia os métodos de simulação em CFD do fluxo de sólidos ascendente no *riser* e sua comparação com os experimentos. A terceira estuda a simulação em MCNPX da tomografia gama do fluxo de sólidos que circula na UPF, que envolve a simulação de sistema dinâmico na geometria do código Monte Carlo com importação de geometrias geradas em outro software. A quarta analisa a possibilidade de apresentar a imagem tomográfica por meio de algoritmos de reconstrução. A quinta estuda a possibilidade de importar a imagem simulada na unidade piloto a frio virtual (UPFV). As simulações geram informações sobre os parâmetros fluidodinâmicos do fluxo bifásico circulante. Ao final considera-se ser preciso integrar os métodos computacionais em estudo com os dados experimentais para ter valores representativos dos parâmetros fluidodinâmicos.

2.1 UNIDADE PILOTO A FRIO DO TIPO FCC

O Craqueamento Catalítico Fluidizado (*Fluid Catalytic Cracking* – FCC) é um processo utilizado na indústria petroquímica para converter algumas frações do petróleo que são mais pesadas (isto é, constituídas por compostos de massa molar elevada) em frações mais leves, como a gasolina e o gás liquefeito de petróleo (GLP), por exemplo. Ou seja, uma técnica que se caracteriza por ser altamente econômica, pelo fato de aproveitar resíduos da refinaria de baixo valor comercial e convertê-los em uma faixa de hidrocarbonetos de elevado valor comercial. Nesse processo, algumas ligações químicas nas moléculas de grande massa molecular são rompidas, sendo geradas moléculas menores.

A Agência Internacional de Energia (AIE), projeta o crescimento de 1,3 % por ano em média durante os próximos anos na demanda de petróleo no mundo, de 85,6 milhões de barris por dia (bpd) em 2007 e 85,2 bpd em 2008 para 88,4 bpd em 2015 e 105,2 bpd em 2030. Segundo estimativas da Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), a produção de petróleo no Brasil vai atingir 5,5 milhões de barris por dia em 2027. Devido ao aumento gradual do volume de produção, justifica-se o grande investimento aplicado em novas tecnologias e ferramentas de controle na finalidade de melhorar o processo ou promover um adequado ajuste operacional. Aumento de eficiência, aliado a uma maior produção diária, pode

ser convertido num ganho significativo no final de um período (ERTHAL, 2003). Fica evidente, portanto, a importância da pesquisa no desenvolvimento de equipamentos mais eficientes e da realização de mudanças técnicas nos existentes.

Desta forma, com intuito de manter o processo de FCC competitivo as pesquisas e o desenvolvimento tecnológico requeridos estão divididos em duas grandes linhas: a fluidodinâmica e a cinética das reações. Na primeira o objeto de estudo é o fluxo multifásico constituído de substâncias líquidas, sólidas e gasosas. Na segunda são estudadas as reações químicas de quebra dos hidrocarbonetos (MOURA, 2015).

A construção de uma Unidade Piloto a Frio (UPF) está intrinsecamente associada ao futuro das medidas experimentais e exportação de parâmetros fluidodinâmicos para indústria petrolífera, procedimento também chamado de *scale-up*. É caracterizado pela implementação no processo industrial das melhorias obtidas no processo piloto para transferir o conhecimento e a inovação que se propõe a estudar. A concepção do projeto piloto a frio objetiva avaliar a fluidodinâmica das partículas, também requer similaridade geométrica, na obtenção de um Leito Fluidizado Circulante (LFC). As dimensões devem obedecer aos dados de projeto (MATSEN, 1996), por exemplo, a relação comprimento/diâmetro do *riser* podem variar entre 50 e 70.

Em princípio, as relações geométricas e os parâmetros de operação, devem permitir um *scale-up* expresso em números adimensionais. O projeto da unidade piloto a frio, tem como objetivos (DEROUIN, 1997; MOURA, 2015):

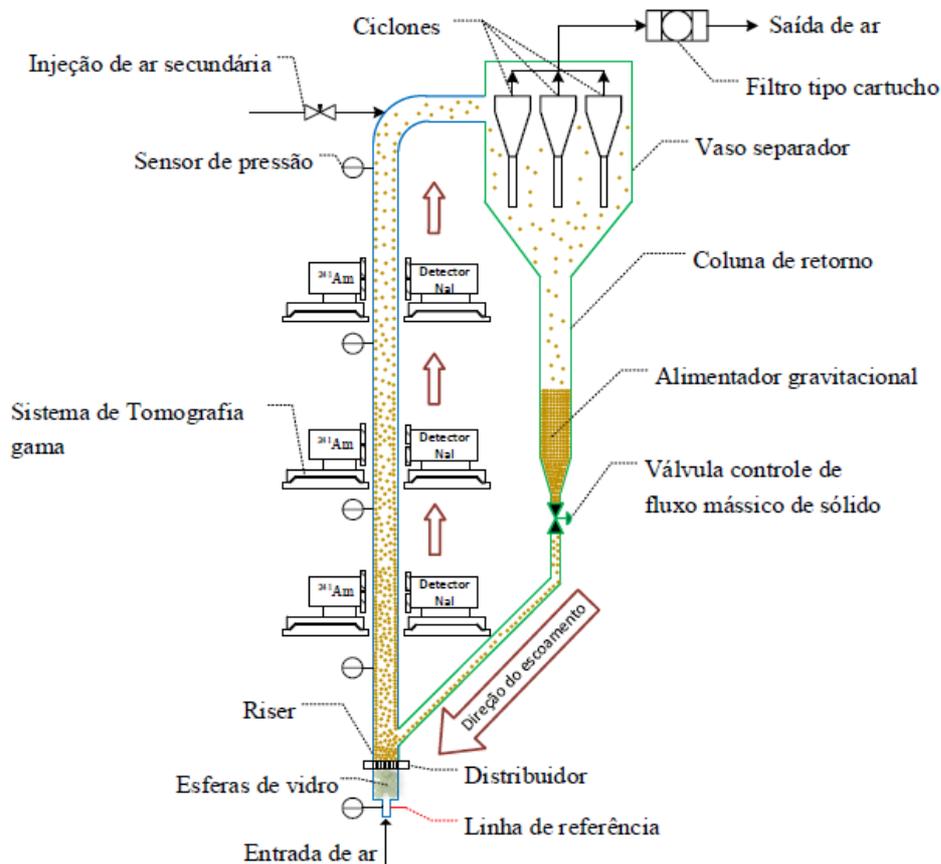
- (a) Determinar as características hidrodinâmicas relevantes para um *riser* FCC;
- (b) Combinar esses dados com os resultados de outras formas de investigação (CFD e MCNP);
- (c) Verificar os resultados do modelo com dados obtidos em um *riser* comercial.

Dentro desse contexto, foi instalada no Laboratório de Fluidodinâmica e Gamagrafia do Departamento de Energia Nuclear (DEN) do Centro de Tecnologia e Geociências (CTG) da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE) uma UPF de FCC, que foi projetada e construída para estudar a fluidodinâmica do leito fluidizado por meio da aplicação de técnicas nucleares e medidas por gradiente de pressão. O projeto obedeceu a requisitos de planta piloto e mudança de escala, vários trabalhos têm sido publicados, por exemplo, o estudo de DANTAS *et al.* (2006) e BRITO *et al.* (2013); tese de LIMA FILHO (2014), dissertações de BRITO (2014); MOURA (2015) e OLIVEIRA (2018).

A UPF construída é composta por um tubo vertical, denominado *riser*, feito em polimetilmetacrilato (PMMA), também conhecido como acrílico. O tubo-*riser* possui 6,37m de

altura, diâmetro interno e externo com respectivamente 92 mm e 100 mm por onde escoam uma mistura bifásica. O ar comprimido e catalisador de craqueamento entram em contato na base do reator. A mistura ascende através do *riser* em regime de transporte denso, aceleração e diluído de sólidos e no topo deste segrega-se pelo sistema de separação, ao passar para uma câmara de diâmetro da ordem de 15 vezes maior. Grande parte do catalisador retorna para a parte baixa da UPF, enquanto as partículas de menores diâmetros são induzidas pelo fluxo de ar comprimido a passarem por uma bateria de 3 ciclones, ainda no interior da referida câmara de separação. As partículas de catalisador que não são retidas pelos ciclones são coletadas com auxílio de um filtro do tipo cartucho; semelhante ao utilizado para purificação de ar admitido por motores do tipo *Diesel*. Na base desse filtro existe um conduto em policloreto de vinila (PolyVinyl Chloride – PVC) com a função de direcionar as partículas mais finas, coletadas por outro filtro. As partículas coletadas que saem pela base da câmara de separação (*flash*) descem por uma coluna de retorno para um sistema de realimentação de catalisador para a base do *riser*. O referido sistema contém tubos, válvulas e mangueiras, conectados para a alimentação e realimentação de catalisador no *riser*, caracterizando a UPF como um leito fluidizado circulante (SANTOS, 2013). A Figura 1 apresenta o esquema de funcionamento da UPF.

Figura 1 – Esquema da UPF do processo de craqueamento catalítico fluidizado (FCC).



Fonte: OLIVEIRA (2018).

Conforme observado na Figura 1, as medidas experimentais na UPF são executadas através de três mesas tomográficas e por cinco sensores de pressão. As três secções de teste tomográficas estão distribuídas ao longo do *riser* e posicionadas a 1,274m, 2,500m e 4,566m, tendo como referência o solo. Já os cinco sensores de pressão estão dispostos no *riser* a 0,240m, 0,804m, 2,137m, 4,192m e 6,044m tendo também como referência o solo.

2.1.1 Situação Atual da UPF Experimental

A fração volumétrica dos sólidos, parâmetro fluidodinâmico básico, é obtida por meio da diferença de pressão, ΔP , entre dois sensores separados por uma distância ΔZ , sendo assim uma medida indireta. A fração volumétrica axial dos sólidos é calculada pela Equação 1.

$$\varepsilon_s = \frac{1}{(\rho_p - \rho_f)g} \frac{\Delta P}{\Delta Z} \quad (1)$$

onde, ε_s corresponde a $(1 - \varepsilon)$, onde ε é a fração de vazios de um leito gás-sólido, ρ densidade [kg/m^3] e os sub-índices p e f são para partícula e fluido, respectivamente, g aceleração da gravidade [m/s^2] entre os pontos ΔP e ΔZ [m]. Como o sensor dos medidores de pressão estão dentro do *riser*, ou seja, em contato com o fluxo, esta é uma técnica intrusiva, passível de perturbação no fluxo.

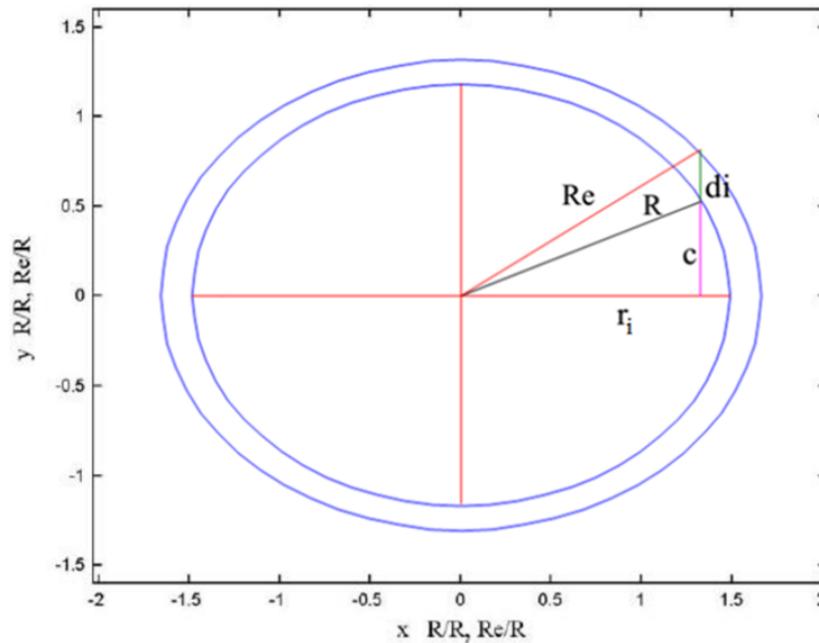
Técnicas não intrusivas com o uso da radiação são adequadas para o estudo detalhado do comportamento fluidodinâmico no *riser*, permitindo a obtenção dos perfis radiais de distribuição da fração volumétrica de sólidos, como mostrado em trabalhos realizados por DANTAS *et al.* (2006). Segundo DUDUKOVIC (2003) e MOURA (2015), a medida do sinal emitido por uma fonte radioativa é a técnica mais competitiva para caracterização do escoamento multifásico em um reator opaco. Esta técnica consiste na medição da atenuação de raios gama após serem emitidos pela fonte e passarem através de um escoamento bifásico gás-sólido no interior do *riser* da UPF. Com isso, pode ser calculada através de medidas de radiação gama, a fração volumétrica radial dos sólidos, através de uma adaptação da equação de Beer-Lambert, expressa na Equação 2.

$$\varepsilon_{sr} = \frac{1}{\rho_s \left(\frac{\mu}{\rho_s} \right) C} \ln \left(\frac{I_V}{I_F} \right) \quad (2)$$

onde a fração volumétrica radial (ε_{sr}) é obtida pelo coeficiente da atenuação mássico [m^2/kg] dado pelo linear (μ) dividido pela densidade do catalisador (ρ_s), I_F e I_V [W/m^2] a intensidade

da radiação ao interagir no *riser* com e sem condição de fluxo, respectivamente, e representada por C [m] as cordas internas do tubo-*riser* (Figura 2). O escaneamento gama da secção transversal do *riser* permite a obtenção de uma matriz de dados com a intensidade relativa da radiação (simulações MCNPX) ou número de contagens (medidas experimentais) e, conseqüente, a determinação, de forma direta, da fração volumétrica de sólidos em um ponto específico do *riser*.

Figura 2 – Esquema da secção transversal do *riser* no cálculo do comprimento da corda ao longo da varredura por transmissão gama.



Fonte: DANTAS *et al.* (2006).

Na Figura 2, tem-se que R e R_e são os raios interno e externo do *riser* [m], respectivamente, C a corda interna do *riser* [m] e r o deslocamento [m] correspondente ao escaneamento do tubo (ou intervalo de escaneamento) e d a espessura da parede do tubo-*riser* [m]. Desta forma, a espessura da parede do *riser*, d , ao longo da trajetória gama, pode ser determinada segundo DANTAS *et al.*, (2006) como sendo:

$$d = \sqrt{R_e^2 - r^2} - \sqrt{R^2 - r^2} \quad (3)$$

em que d , é obtido a partir das seguintes expressões:

$$R^2 = c^2 + r^2 \quad (4)$$

$$R_e^2 = (c + d)^2 + r^2 \quad (5)$$

Observa-se, de acordo com a Figura 2, que a origem do sistema de coordenadas cartesiana coincide com o centro geométrico da secção transversal do reator *riser*, então $C = 2C$ e $d = 2d$. Determinando assim a corda interna do *riser*, $2C$, e a espessura da parede do *riser* atravessada pela radiação gama, $2d$ (DANTAS et al., 2006; BRITO, 2014; GUEDES, 2016; OLIVEIRA, 2017; OLIVEIRA, 2018).

A concentração de sólidos, C_S , dada em $[\text{kg}/\text{m}^3]$, é determinada como uma função de ΔP (LUCKOS; HOED, 2005), e também pode ser obtida a partir da fração volumétrica dos sólidos, como mostrado na Equação 6.

$$C_S = \frac{\Delta P}{\Delta z g} = (\rho_p - \rho_f) \varepsilon_s \quad (6)$$

Através de medidas dos perfis de pressão mensurados ao longo do *riser*, é possível calcular a distribuição da concentração ao longo do *riser*, com a Equação 3. Modelos discretos permitem comparar os perfis medidos com ε_s e com ε_{sr} e por meio de algoritmos instalados ou funções implementadas no toolbox para MATLAB se calcula a precisão de tais medidas.

Como os sólidos ocupam uma fração volumétrica de $(1 - \varepsilon)$ da secção transversal do *riser* (DAVIDSON, 2000), a velocidade dos sólidos, u_s , em m/s, é dada pela equação 7.

$$u_s = \frac{\dot{m}}{\rho_s A (1 - \varepsilon)} \quad (7)$$

sendo \dot{m} a vazão mássica, ou seja, taxa de massa de sólidos no *riser* $[\text{kg}/\text{s}]$, ρ_s densidade do sólido $[\text{kg}/\text{m}^3]$, A área da secção do *riser* $[\text{m}^2]$ e $(1 - \varepsilon)$ a fração volumétrica de sólidos. u_s , também, pode ser calculado a partir da diferença entre as velocidades do gás e sólidos (velocidade de *slip*), v_s , partindo de condições propostas por DAVIDSON (2000), onde através da Equação 8, tem-se:

$$v_s = \begin{cases} 0, & \text{se } u_s = u_g \\ 0 < v_s \leq 5, & \text{se } u_s \neq u_g \end{cases} \quad (8)$$

Como a velocidade superficial do gás é dada por $u_g = \frac{U}{\varepsilon}$, a velocidade de *slip*, que corresponde a diferença de escorregamento dos sólidos pela parede do *riser*, foi determinada por DAVIDSON (2000) através da Equação 9 como sendo:

$$v_s = u_g - u_s \quad (9)$$

A partir das condições propostas em (8) e (9) é possível obter o valor de u_s ao longo do *riser*. O valor de u_s está associado à injeção de sólidos, \dot{m} , tornando possível conectar a função de automação e controle (CRUZ *et al.*, 2016).

Outro parâmetro calculado por DAVIDSON (2000) foi a velocidade da fase gasosa, em m/s, conforme apresenta a Equação 10 abaixo.

$$u_g = \frac{\dot{m}_g}{\rho_g A \varepsilon_g} \quad (10)$$

onde \dot{m}_g é a vazão mássica da fase gasosa [kg/s], ρ_g é a massa específica da fase gasosa [kg/m³], ε_g é a fração volumétrica da fase gasosa e A é a área da secção transversal do *riser* [m²].

DANTAS e colaboradores (2006) obtiveram os perfis de concentração na secção transversal em *riser* experimental, através de transmissão gama, no intuito de definir as regiões núcleo-anular, através da determinação de um círculo de raio S [m], cujo centro é coincidente com o centro do *riser*, com coordenadas: x na direção radial e y na direção das cordas do tubo, determinando assim, a seguinte correlação:

$$\rho_{n\acute{u}cleo}(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{se } \sqrt{x^2 + y^2} < S \\ 0, & \text{se } \sqrt{x^2 + y^2} > S \end{cases} \quad (11a)$$

$$\rho_{anular}(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{se } \sqrt{x^2 + y^2} > S \\ m, & \text{se } \sqrt{x^2 + y^2} < S \end{cases} \quad (11b)$$

Como o modelo núcleo-anular do *riser* é a base teórica para modelar o escoamento, é possível identificar a região de núcleo e a região anular, conforme Equação 11. 0 e 1 são os intervalos de uma dada densidade, e $m = (c - y)$ com c e y o comprimento das cordas do *riser* e do círculo, respectivamente.

A Tabela 1 resume as propriedades físicas e os parâmetros de escoamento obtidos através da unidade experimental.

Tabela 1 - Propriedade físicas e parâmetros obtidos através da unidade experimental.

| Propriedades físicas | Parâmetros do escoamento |
|--|--|
| Diâmetro interno do <i>riser</i> (r) \rightarrow 0,092 | Velocidade da fase gasosa (u_g) \rightarrow 1,76 m/s |
| Altura do <i>riser</i> (h) \rightarrow 6,37 m | Velocidade do sólido (u_s) \rightarrow 0,47 m/s |
| Diâmetro médio da partícula (d_p) \rightarrow 80 μ m | Velocidade de <i>slip</i> (v_s) \rightarrow 1,29 m/s |
| Densidade da partícula (ρ_p) \rightarrow 1200 kg/m ³ | Fração Volumétrica ($1 - \epsilon$) \rightarrow 0,03 |
| Densidade aparente do sólido \rightarrow 850 kg/m ³ | Fluxo de sólidos (W) \rightarrow 28,77 kgm ⁻² s ⁻¹ |
| Sólido \rightarrow Catalisador de FCC | Fluxo de sólidos recirculação (W_r) \rightarrow 7,03 kgm ⁻² s ⁻¹ |

Fonte: AUTORIA DO GRUPO DE PESQUISA (2018)

A metodologia apresentada pelas Equações de (1) até (11) inclui medidas experimentais realizadas na UPF e parâmetros fluidodinâmicos calculados, cujos resultados estão publicados e representam o conhecimento atual da fluidodinâmica na UPF. Por exemplo, os trabalhos de BRITO *et al.* (2013), SANTOS (2013), SOUZA NETTO *et al.* (2013), LIMA FILHO (2014), MOURA (2015), CRUZ *et al.* (2016), BERTONY *et al.* (2017), CLAUDINO *et al.* (2018) e OLIVEIRA (2018).

2.2 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Para a solução CFD do escoamento gás-sólido, duas abordagens se destacam na literatura (VAN WACHEM, 2003). Ambas calculam o campo de velocidade da fase contínua usando sua equação de conservação de quantidade de movimento, enquanto que o escoamento da fase dispersa é calculado de modo Lagrangeano ou Euler-Lagrange, considerando entidades discretas (bolhas, gotas ou partículas), ou como uma fase contínua, onde todas as fases são vistas como meios interpenetrantes, na chamada abordagem Euleriana-Euleriana.

No desenvolvimento das simulações CFD, SOUZA NETTO *et al.* (2013), LIMA FILHO (2014) e CLAUDINO *et al.* (2018), utilizaram a abordagem Euleriano-Euleriano. Conforme descrito, nessa abordagem as diferentes fases são tratadas matematicamente como meios contínuos e interpenetrante, onde a fase sólida é definida através de propriedades como a densidade, o diâmetro da partícula e o coeficiente de restituição, segundo SHAH *et al.*, (2011). As equações empregadas são generalizações das Equações de Navier-Stokes. Para a fase dispersa a modelagem Euleriana tem a necessidade de adicionar equações de fechamento para descrever a reologia das partículas. Em modelagens recentes, equações constitutivas de acordo com a teoria cinética de fluxo granular (do inglês “*kinetic theory of granular flow - KTGF*”) foram incorporadas. A KTGF foi proposta para descrever o movimento da fase particulada, por

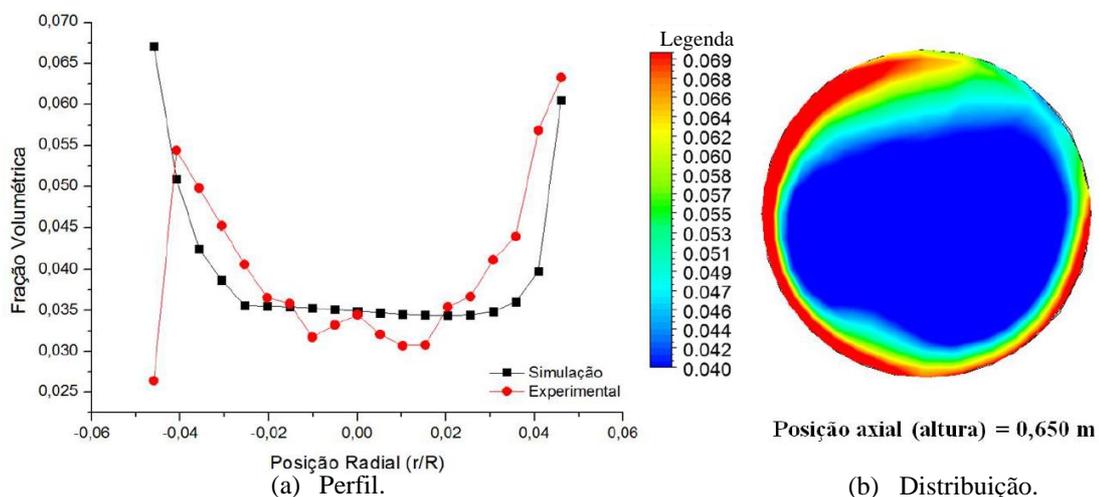
analogia entre o movimento aleatório e de colisões entre partículas e do movimento térmico das moléculas, conforme teoria cinética do fluxo de gases densos, que fornecem correlações de dissipação de energia por meio de coeficientes de restituição. Desta forma, foi introduzido a temperatura granular, em analogia à temperatura do gás, conforme energia cinética do movimento aleatório das partículas. Este modelo prevê a formação de bolhas e distribuição do tempo médio para a concentração de sólidos em leitos fluidizados borbulhantes.

2.2.1 Simulações da Fluidodinâmica no *Riser* da UPF

O Trabalho de LIMA FILHO (2014) foi baseado em simulações numéricas do escoamento bifásico gás-sólido no *riser* da unidade piloto a frio. As simulações numéricas utilizaram uma ferramenta de CFD, o código comercial *ANSYS Fluent*. O *ANSYS* é um software geral de modelagem de elementos finitos, pacote aplicável a uma ampla variedade de problemas, como, por exemplo, acústico, piezoelétrico, térmico, fluido e análise termoelétrica. Estes estudos contribuem para uma melhor compreensão de como um modelo reage a combinações comuns de fenômenos. Graças a seu conjunto de elementos lineares e não lineares *ANSYS* facilmente simula mesmo estruturas grandes e complexas que são separados em elementos disjuntos.

O perfil radial da fração volumétrica de sólido na secção transversal do *riser* da UPF obtido por SANTOS (2013), apresentou mesmo comportamento obtido por LIMA FILHO (2014), que validou experimentalmente simulações CFD de um leito fluidizado circulante tipo gás sólido, através da análise da distribuição radial de sólidos em uma secção transversal do *riser* a frio utilizando transmissão gama, como demonstrado na Figura 3.

Figura 3 – Fração volumétrica de sólido no *riser* da UPF na altura de 0,650m.



Fonte: LIMA FILHO *et al.*, (2014).

2.3 MÉTODO MONTE CARLO

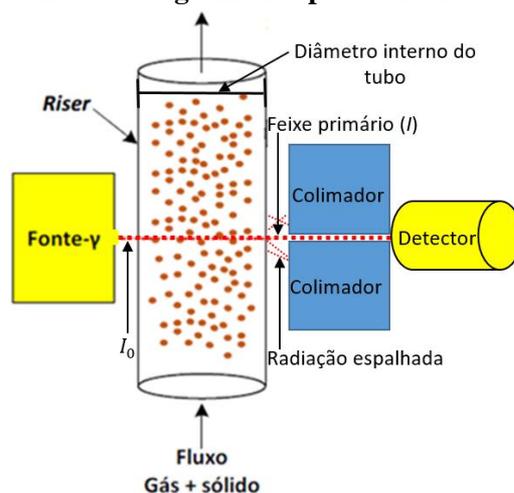
Método Monte Carlo (MMC) são estudos de simulação para obtenção de aproximações de variáveis de interesse, visando reproduzir, em um ambiente controlado, o que se passa no mundo real. São amplamente utilizados na Engenharia de Avaliações, notadamente na geração de cenários probabilísticos, na simulação de sistemas físicos complexos (incluindo tomografia por transmissão gama de *riser* com fluxo interno de sólidos), na validação de modelos probabilísticos, em projetos de reações nucleares, em radioterapia para tratamento de câncer, nos cálculos acoplados nêutrons-fótons para caracterizar a radiação ambiental, em um reator nuclear, nos cálculos de criticalidade em sistemas multiplicativos, em cálculos de fluência em vasos de pressão, em cálculos de eficiência de detectores de radiação, na simulação de sistemas biológicos para aplicações em medicina nuclear especificamente em dosimetria (CASSOLA, 2007; PEIXOTO, 2008; CORREIA, 2011; VIEIRA *et al.*, 2012; SANTOS, 2014; SANTOS, 2015; GUEDES, 2016; OLIVERIA, 2017; SALGADO, 2018).

2.3.1 O Código Computacional MCNPX

Para execução dos objetos desse estudo foi selecionado, como peça chave, o código *Monte Carlo N-Particle eXtended* (MCNPX), desenvolvido no Laboratório Nacional de Los Alamos, escrito em Fortran 90, é um código de propósito geral que se baseia no método estatístico de Monte Carlo. Na versão 2.5C, podem ser modelados os transportes individuais de partículas para ampla faixa de energia: fótons (1 keV – 100 GeV), elétrons (1 keV – 1 GeV) e nêutrons (10^{-11} MeV e 20 MeV). Ou podem ser transportados acoplados (nêutrons/fótons/elétrons) todos em geometria tridimensional e em sistema heterogêneo. Possui a capacidade de tratamento de geometrias complexas e a variedade de opções de dados de entrada faz desse código, uma ferramenta muito conveniente e poderosa no campo da física médica, proteção radiológica, modelagem de instalações nucleares, detectores e blindagem da radiação e, como utilizado aqui, em simulações de ensaios não destrutivos por meio da tomografia gama para avaliar o fluxo bifásico no *riser* da UPF.

O código fornece o valor de I/I_0 , que é utilizado no cálculo do coeficiente de atenuação, na equação de *Beer-Lambert*. É necessário fornecer a energia [MeV] e o tipo de fonte (de raios gama, para este caso) ao código, além de descrever o material absorvedor e superfície de detecção. A geometria apropriada para a medição destes coeficientes requer uma fonte monoenergética e um feixe monodirecional, conforme mostrado na Figura 4.

Figura 4 – Esboço representativo de geometria para cálculo do coeficiente de atenuação.



Fonte: Adaptado de MOURA (2015).

A escolha desse código foi motivada primeiramente por ser, atualmente, um dos códigos computacionais mais utilizados mundialmente na área de transporte de radiação envolvendo nêutrons, fótons, elétrons e partículas pesadas com carga, tais como prótons, deutérios, partículas alfa, fragmentos de fissão nuclear, etc. (BRIEMEISTER, 2000; SHULTIS, 2011; MUSARUDIN *et al*, 2012). E devido ao seu desempenho, o código MCNPX tem sido utilizado por crescente número de pesquisadores. Outro fator importante, é a experiência e trabalhos validados e publicados que o Grupo de Fluidodinâmica e Tomografia Gama da UFPE tem com esse código (GUEDES, 2016; OLIVEIRA, 2017).

Para o presente estudo, a importância do MCNPX na execução de simulações da tomografia por transmissão gama do *riser* da UPF está na sua maior flexibilidade, pois existem limitações experimentais na obtenção de dados relacionado ao fluxo de partículas no interior do reator, como, por exemplo, as medidas de pressão que são invasivas e as medidas de intensidade da radiação que estão situadas em 3 seções de testes fixas ao longo do *riser*. Além disso, a tomografia é de feixe único, a varredura é restrita a um único ângulo, (o conjunto fonte-detector não gira em torno do objeto irradiado) e tem limitações no número de trajetórias do feixe.

Portando, a tomografia simulada no código objetiva ampliar a capacidade da experimentação, incluindo ângulos de varredura para investigar a distribuição radial, maior número de trajetórias do feixe e interpolação ao longo do *riser* para estimar a distribuição radial de sólidos. Isso gerar intervalo de dados suficientes para realizar as reconstruções de imagens tomográfica (GUEDES, 2016; OLIVEIRA, 2017), que pode ser uma importante contribuição na visualização do escoamento das fases ao longo do *riser*. Consequentemente, é possível comparar as informações dadas na simulação MCNPX com dados obtidos experimentalmente

e dados do CFD, que permitem estimar a estrutura de erros experimentais e possibilitar uma melhor precisão no estudo da fluidodinâmica da UPF.

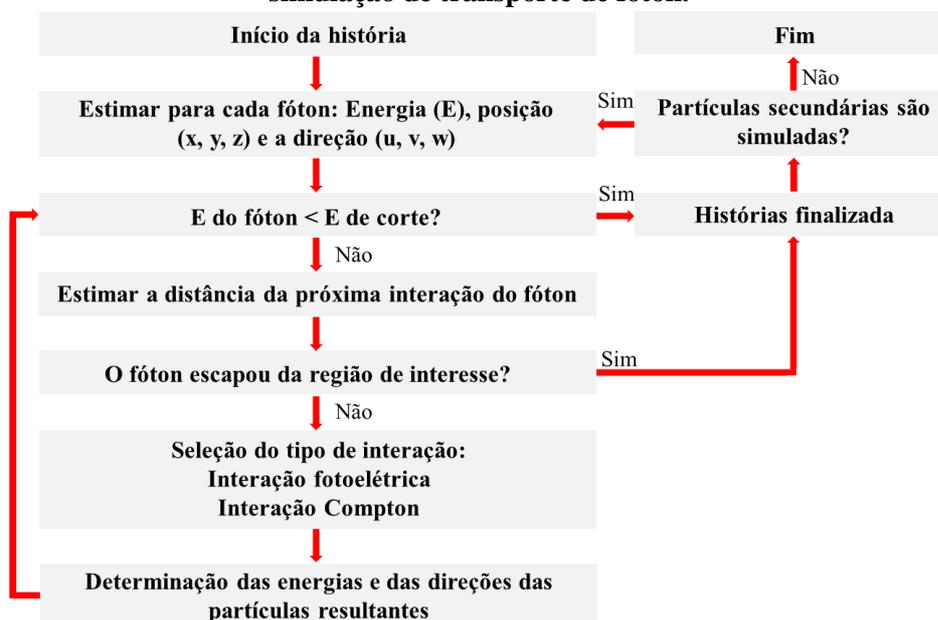
Os dados do MCNPX também podem ser comparados com os do XCOM, que é um código fornecido e disponibilizado *online* pelo NIST (*National Institute of Standards and Technology*). Com o XCOM, é possível gerar as secções de choque para elementos, compostos e misturas, na faixa de energia entre 1 eV e 100 GeV.

2.3.2 Interações de Fótons Com a Matéria Consideradas Pelo MCNPX

O MCNPX possui dois modelos de interações para fótons, um simples e outro detalhado. O tratamento simples ignora o espalhamento Thomson, que consiste no espalhamento do fóton incidente em diversas direções sem alterar o comprimento de onda da radiação incidente e os fótons fluorescentes que podem ser criados após absorção fotoelétrica, isto é, quando o átomo está ionizado este pode voltar ao seu estado fundamental de tal modo que a vacância eletrônica é ocupada por um elétron de um nível superior emitindo um fóton. No modelo detalhado, os dois fenômenos citados acima são considerados (MCNPX, 2005). O modelo detalhado é utilizado como *default* pelo código para energias menores do que 100 MeV.

A Figura 5, mostra esquematicamente as interpretações feitas pelo código MCNPX para o mecanismo de transporte de radiação. Ao iniciar a história da partícula, são determinados os vários parâmetros, tais como: energia, coordenadas espaciais, direção e tipo de interações.

Figura 5 – Diagrama de fluxo das diferentes etapas realizadas no código MCNPX para a simulação de transporte de fóton.



Fonte: Adaptado de SANTOS (2014).

Como o sistema de tomógrafo a ser simulado possui uma fonte de Amerício (Am-241), a qual emite radiação gama com fotopico de 0,060 MeV de energia, o modelo detalhado é utilizado automaticamente pelo código. Dessa forma, além dos fenômenos citados acima, o efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e Thomson são levados em consideração, em cada interação dos fótons com os átomos do material alvo. A seguir os aspectos físicos do tratamento detalhado serão explicados com ênfase.

2.3.2.1 Tratamento físico detalhado

O tratamento detalhado dos fótons inclui os seguintes processos:

(a) Espalhamento Incoerente (Compton):

Para simular o espalhamento Compton é necessário determinar o ângulo de espalhamento θ em relação à direção do fóton incidente, a nova energia E' do fóton espalhado, e a energia cinética residual do elétron $E - E'$. A secção de choque é dada pela conhecida fórmula de Klein-Nishina (Equação 12) corrigida por um fator $I(Z, \nu)$:

$$k(\alpha, \mu)d\mu = \pi r_0^2 \left(\frac{\alpha'}{\alpha}\right)^2 \left[\frac{\alpha'}{\alpha} + \frac{\alpha}{\alpha'} + \mu^2 - 1\right] d\mu \quad (12)$$

Na equação anterior $r_0 = 2,817938 \times 10^{-13}$ cm é o raio clássico do elétron, α e α' são as energias do fóton incidente e do fóton espalhado em unidades de $m_0c^2 = 0,511$ MeV, $\alpha = E/(m_0c^2)$, $\alpha' = \alpha/[1 + \alpha(1 - \mu)]$ e $\mu = \cos \theta$. A fórmula de Klein-Nishina é amostrada exatamente mediante o método de Kahn para energias menores que 1,5 MeV, e pelo método Koblinger para energias maiores (PELOWITZ, 2005). O fator $I(Z, \nu)$ diminui a secção de choque de Klein-Nishina (por elétron) na direção frontal. Para qualquer valor de Z , $I(Z, \nu)$ aumenta de $I(Z, \nu) = 0$ a $I(Z, \infty) = Z$, onde o parâmetro ν é expresso como:

$$\nu = \frac{\text{sen}(\theta)}{\lambda} = k\alpha\sqrt{1 - \mu} \quad (13)$$

onde $k' = 10^{-8}m_0c/(h\sqrt{2}) = 29,1445$ cm⁻¹. O valor máximo de ν é $\nu_{\text{max}} = k\alpha\sqrt{2} = 41,2166\alpha$ a $\mu = -1$.

(b) Espalhamento Coerente (Thomson):

Este tipo de espalhamento não envolve perdas de energia e por isto é o único processo de interação de fótons que não produz elétrons. Aqui só é computado o ângulo de espalhamento θ , e depois o transporte do fóton continua.

A secção de choque diferencial $\sigma_c(Z, \alpha, \mu)$ é dada pela multiplicação da secção de Thomson $T(\mu)$ por um fator $C(Z, \nu)$, que modifica $T(\mu)$ independentemente do valor da energia do fóton incidente, onde:

$$\sigma_c(Z, \alpha, \mu) d\mu = C^2(Z, \nu) / Z^2 T(\mu) d\mu, \text{ e } T(\mu) = \pi r_0^2 (1 + \mu)^2 \quad (14)$$

O termo $C^2(Z, \nu)/Z^2$ provoca uma redução na secção de choque de Thomson para direções contrárias à direção de incidência. Este efeito é oposto ao logrado com o termo $I(Z, \nu)$ no espalhamento incoerente.

Para um determinado valor de Z , $C(Z, \nu)$ decresce desde $C(Z, 0) = Z$ até $C(Z, \infty) = 0$ e a secção de choque coerente que é função rapidamente decrescente de μ (com μ que varia de +1 à -1), então será máxima na direção frontal. Por isto para altas energias do fóton incidente, o espalhamento coerente acontece frequentemente na direção de voo deste fóton, e o espalhamento pode ser ignorado nessas energias.

(c) Efeito Fotoelétrico:

Este efeito consiste na absorção do fóton incidente de energia E , e a expulsão (ou excitação) de um elétron orbital com energia de ligação $e < E$, e energia cinética $E - e$, com a subsequente emissão de vários fótons fluorescentes. O programa trata os fótons fluorescentes com energia menor que 1 keV como se depositassem sua energia no ponto de criação. Assim, na descrição a seguir, o termo "fótons fluorescentes" se aplica a fótons com mais de 1 keV. No processo podem ser emitidos zero, um ou dois fótons fluorescentes com energias maiores que 1 keV:

(1) Nos eventos nos quais não são emitidos fótons fluorescentes, a cascata de elétrons que completa a lacuna causada pela saída do fotoelétron, produz elétrons e fótons de baixas energias (Efeito Auger). Os elétrons podem ser transportados em problemas que usam o modo para simular fótons e elétrons, ou podem ser tratados usando a aproximação de *Thick Target Bremsstrahlung* (TTB), ou seja, assumindo-se que os elétrons gerados são freados próximo ao local, ou sua energia pode ser depositada localmente. Como neste caso, não são emitidos fótons fluorescentes então a trajetória do fóton termina com este evento.

(2) Nos eventos nos quais é emitido um fóton fluorescente, a energia E' deste fóton é a diferença entre a energia E do fóton incidente, e a soma das energias $(E - e)$ do fotoelétron, e a energia (e') de excitação residual, que é dissipada finalmente por processos Auger adicionais. Isto é:

$$E' = E - (E - e) - e' = e - e' \quad (15)$$

Estas transições primárias correspondem então aos fótons fluorescentes de todos os possíveis níveis superiores à energia de excitação residual, (e'). O fóton emitido corresponderá às linhas de raios X $K\alpha_1$ ($L_3 \rightarrow K$), $K\alpha_2$ ($L_2 \rightarrow K$), $K\beta_1$ ($M \rightarrow K$), e assim por diante.

(3) Os eventos nos quais são emitidos dois fótons fluorescentes podem acontecer quando a energia residual de excitação e' do caso (2) é maior que 1 keV. Um elétron de energia de ligação (e'') pode ocupar a órbita de energia de ligação (e'), emitindo um fóton fluorescente secundário de energia $E'' = e' - e''$.

A energia residual (e'') é dissipada por processos Auger adicionais e por produção de elétrons, e podem, como já se diz ser transportados no modo de simulação para elétrons e fótons, ou aproximados com o modelo TTB, ou depositar localmente a sua energia. Estas transições secundárias acontecem nas camadas superiores à camada L, de modo que as transições primárias devem ser $K\alpha_1$ ou $K\alpha_2$ para causar uma lacuna na camada L.

Na simulação supõem que os fótons fluorescentes são emitidos isotropicamente. Um evento fotoelétrico termina a “história MCNPX” do fóton original para elementos com $Z < 12$ porque a energia fluorescente é menor que 1 keV. Para elementos com $12 < Z < 31$ só acontece fluorescência simples (emissão de um fóton).

Para $Z \geq 31$, é possível fluorescência dupla com linhas primárias $K\alpha_1$, $K\alpha_2$ e $K\beta_1$, e adicionalmente para $Z \geq 37$ também é possível a emissão da linha $K\beta_2$.

2.3.3 Importação de Geometrias Para o MCNPX

Simulações ganham importância em aplicações físicas e técnicas. Embora os códigos de simulação MC abranjam muitas áreas diferentes de aplicação, eles têm um denominador comum: o pacote de geometria (ZIEGLER, 2003). O MCNPX possui um arquivo de entrada, o arquivo INP (*input*), que é caracterizado por complicadas formas, como, por exemplo, células e superfícies. Esse arquivo é propenso a erros ao descrever modelos geométricos complexos, ou seja, o código apresenta uma das dificuldades fundamentais que é a definição de geometria. No entanto, a Literatura apresenta alternativas que visam superar tal limitação.

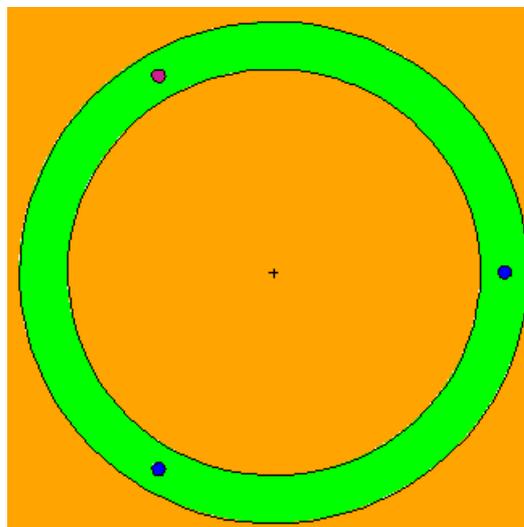
O próprio MCNPX possui recursos internos que facilitam e/ou simplificam a definição e inserção de geometrias. Um desses recursos foi explorado no trabalho de OLIVEIRA (2017), sendo bem descrito por SHULTIS (2011), o chamado “macrobody”, que consiste numa maneira alternativa de definir geometrias e podem ser misturados com as células e superfícies padrão. Uma outra ferramenta importante é o uso de “estrutura repetidas”, que tem sido usada, entre outras aplicações, para modelagem de fantasmas tomográficos e distribuição de varetas de

combustível para simular o transporte de nêutrons e outras radiações nos núcleos de reatores. Esta ferramenta torna possível descrever uma única vez células e superfícies de qualquer estrutura que apareça mais de uma vez em uma geometria (PEIXOTO, 2008).

Quando não é possível resolver o problema apenas através de recursos nativos do próprio código, a implementação de algoritmos de inserção de geometrias complexas se faz necessária, tendo mostrado resultados relevantes (SCHWARZ, 2005; GURECKY, 2015; SONG, 2017). Nesta rota, uma solução para esse problema é construir arquivos INP que correspondam ao modelo CAD (*Computer Aided Design*), já que o software CAD utiliza funções poderosas em modelagem geométrica, concluir a modelagem auxiliar MCNPX e, finalmente, converter o modelo CAD em arquivos INP. Esse modelo CAD pode ser construído por meio de softwares desenvolvidos pelo próprio usuário, bem como os produzidos por empresas de software 3D de terceiros, como *SolidWorks* (HOWARD e MUSTO, 2006), *CATIA* (SYSTEMS) e *UG* (Siemens). Os principais softwares assistidos para modelagem no MCNP amplamente utilizados, são o *Visual Editor* (SCHWARZ, 2008), *Moritz* (ANSYS, 2013), *DesignModeler* (ANSYS, 2012) e *MCAM* (LUO, 2005).

Recentemente, para testar sensibilidade de detecção do código e comparar dados da tomografia experimental com a simulação de defeitos de soldas na parede de tubos de aço, OLIVEIRA (2017), em parceria com o Centro de Informática da UFPE (CIN-UFPE), utilizou um software *in house* criado em linguagem *Delphi* para importar esferas de tamanho e quantidade variada, sendo constituídas de ar e alumínio, para o arquivo INP do código MCNPX. Um exemplo da distribuição dessas esferas pode ser visto na Figura 6.

Figura 6 – Vista superior (xy) em corte transversal do tubo com duas esferas de ar e uma de alumínio no MCNPX.



Fonte: OLIVEIRA (2017).

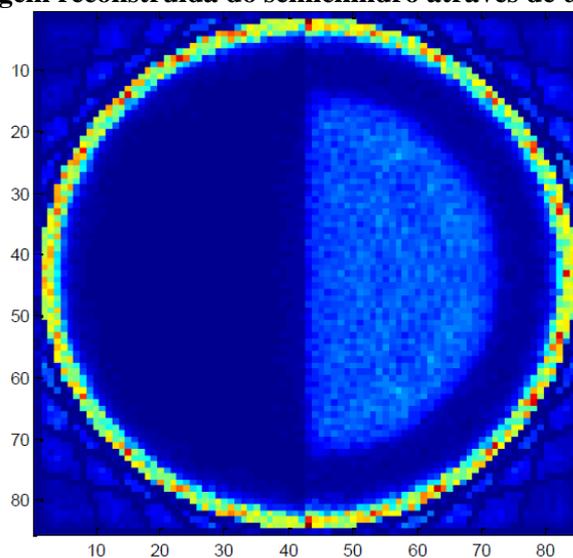
2.4 RECONSTRUÇÃO ALGÉBRICA DE IMAGENS TOMOGRÁFICAS

Os métodos algébricos empregam um modelo linear do processo de projeção, efetivamente resolvendo o sistema linear $W x = p$, onde a matriz W denota o operador de projeção, o vetor p denota os dados de projeção, e o vetor x corresponde à imagem a ser reconstruída. Métodos algébricos podem render reconstruções de imagens mais nítidas, por eliminar as "contaminações". Além disso, inclui uma família de algoritmos de reconstrução. Porém têm a desvantagem de necessitar de mais tempo de computação para realizar reconstruções em comparação com os métodos de retroprojeção (BATENBURG, PALENSTIJN e SIJBERS, 2013).

Com o advento do tomógrafo na década de 1970, técnicas baseadas no método de *Kaczmarz* foram desenvolvidas, entre elas: Técnicas de Reconstrução Algébrica de Correção Multiplicativa (*MART*) (OLIVEIRA *et al.*, 2011; GUEDES, 2016; OLIVEIRA, 2017). Esse método reconstrói a imagem via implementação da maximização da função de verossimilhança assumindo que as projeções são distribuídas segundo uma Poisson, tendo como médias os dados medidos p_j .

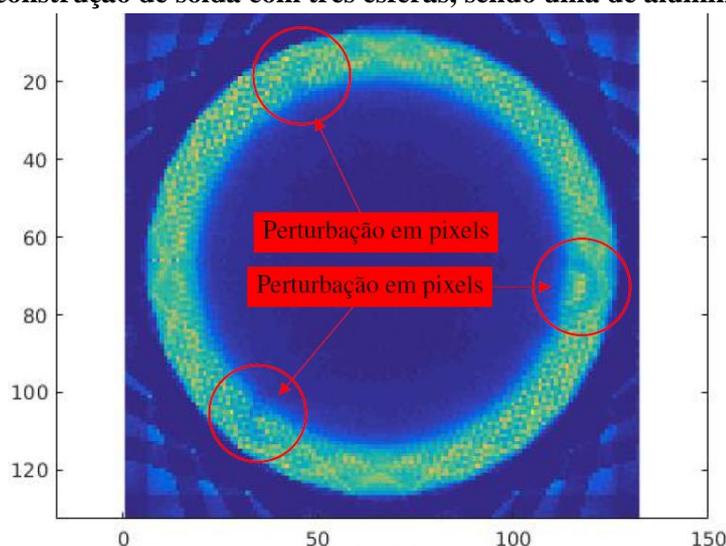
Nas Figuras 7 e 8, ilustram-se reconstruções de objetos estáticos, através do algoritmo *MART*, realizadas com dados das simulações da tomografia gama no MCNPX de dois objetos distintos. Na Figura 7, tem-se a imagem (85x85) de um tubo oco de ferro com um semicilindro de alumínio em seu interior. Já a Figura 8, vê-se a imagem (132x132) de um tubo oco de ferro com defeito de solda em partes da parede.

Figura 7 – Imagem reconstruída do semicilindro através de dados simulados.



Fonte: GUEDES, 2016.

Figura 8 – Reconstrução de solda com três esferas, sendo uma de alumínio e duas de ar.



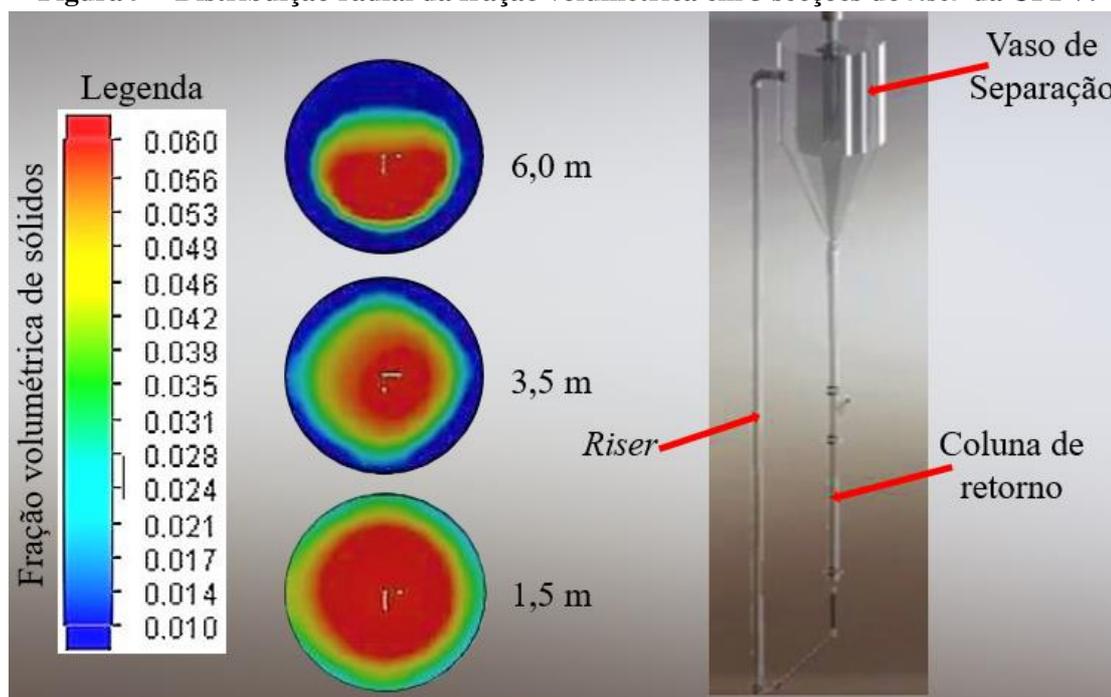
Fonte: OLIVEIRA, 2017.

2.5 UNIDADE PILOTO A FRIO VIRTUAL

Outra ferramenta que vem sendo explorada há alguns anos e tem ganhado destaque na obtenção de informações relevantes que estão relacionadas as simulações CFD da UPF, é o software *SolidWorks* (MOURA, 2015; BERTONY *et al.*, 2017 e CLAUDINO *et al.*, 2018). O *SolidWorks* (SW) é uma poderosa ferramenta computacional de projeto mecânico CAD utilizado para modelagem e simulação de equipamentos industriais. Diversas aplicações são encontradas na literatura utilizando esse software para modelar, simular e validar configurações geométricas e operacionais de equipamentos, como por exemplo apresentado nos trabalhos de LIANG *et al.* (2015), AMBEKAR *et al.* (2016), WANG *et al.* (2017) e DIXIT *et al.* (2018).

Esse programa foi utilizado para construção completa da planta experimental 3D da UPF em ambiente CAD, sendo denominada Unidade Piloto a Frio Virtual (UFPV). Essa possui as mesmas dimensões geométricas da planta experimental (BERTONY *et al.*, 2017). E mais recentemente na otimização das simulações do escoamento bifásico ar-sólido em *loop* fechado (CLAUDINO *et al.*, 2018). A inovação introduzida por CLAUDINO e colaboradores (2018) está no uso do SW para determinação de parâmetros fluidodinâmicos no *riser* por simulações CFD. Os resultados obtidos pelos autores, que tiveram como principais objetivos avaliar as mudanças no padrão de escoamento em toda a unidade, velocidades das fases e fração volumétrica de sólidos radial, podem ser vistos na Figura 9.

Figura 9 – Distribuição radial da fração volumétrica em 3 secções do riser da UPFV.



Fonte: CLAUDINO *et al.*, (2018).

Por meio das simulações CFD, foi possível determinar a fração de sólidos nas secções radiais do riser e executar a comparação entre as mesmas. A Figura 9, retrata os perfis radiais de 3 alturas, sendo elas de 1,5 m, 3,5 m e 6,0 m, onde as médias da fração volumétrica de sólidos, obtidas a partir dos perfis radiais da fração de sólidos, para as respectivas alturas foram 0,0549; 0,0181 e 0,0105.

2.6 INTEGRAÇÃO DO SISTEMA DE MEDIDAS EXPERIMENTAIS DA UPF COM DIFERENTES PLATAFORMAS DE SIMULAÇÕES

A metodologia de análise do sistema integrado como Fluxo de Dados (*Data Flow in System – DFS*) é apresentada por BARKMEYER *et al.* (2013). Nesta abordagem, a unidade piloto a frio pode ser vista como um sistema de escoamento de informações mensuradas. E fundamentadas através da integração por meio da comparação dos diversos parâmetros fluidodinâmicos medidos por diferentes plataformas, como, por exemplo, em simulações tomográficas no código MCNPX (GUEDES, 2016; OLIVEIRA, 2017), fluidodinâmica computacional (LIMA, 2014; CLAUDINO *et al.*, 2018), sistema de controle (CRUZ *et al.*, 2016), escaneamentos através da tomografia computadorizada gama e medidas do gradiente de pressão por sensores distribuindo ao longo riser (SANTOS, 2013; BRITO, 2014; MOURA, 2015; OLIVEIRA, 2018).

O fluxo constante de gás-sólidos, circulante, no interior do *riser* da UPF, é automatizado e o controle do processo mantém a operação como um sistema estacionário, que atende ao requisito da hipótese do modelo matemático fluidodinâmico. Assim, a integração dos métodos de simulação do fluxo bifásico tem por meta ampliar a capacidade de medir e obter melhor precisão dos parâmetros fluidodinâmico, como, por exemplo, pressão, velocidades *slip* das fases gás e sólidos, concentração e fração volumétrica de sólidos.

Nesta rota, as medidas experimentais são fundamentais na validação dos dados obtidos nas simulações (CFD e MCNPX), pois existe a necessidade de otimizar tais medidas. Dentro desse contexto, como já citado, entra o sistema de controle, que vem sendo aprimorado (CRUZ, 2019). Tendo como principal função controlar as variações da vazão de gás e sólidos no interior do *riser*, ou seja, estabilizar o fluxo.

Portanto, a integração das diferentes plataformas de aquisição de dados tem, também, o objetivo de buscar a simetria física de todo o sistema estudado. Essa ideia se baseia na obtenção de parâmetros independentemente do método utilizado para estudo da fluidodinâmica.

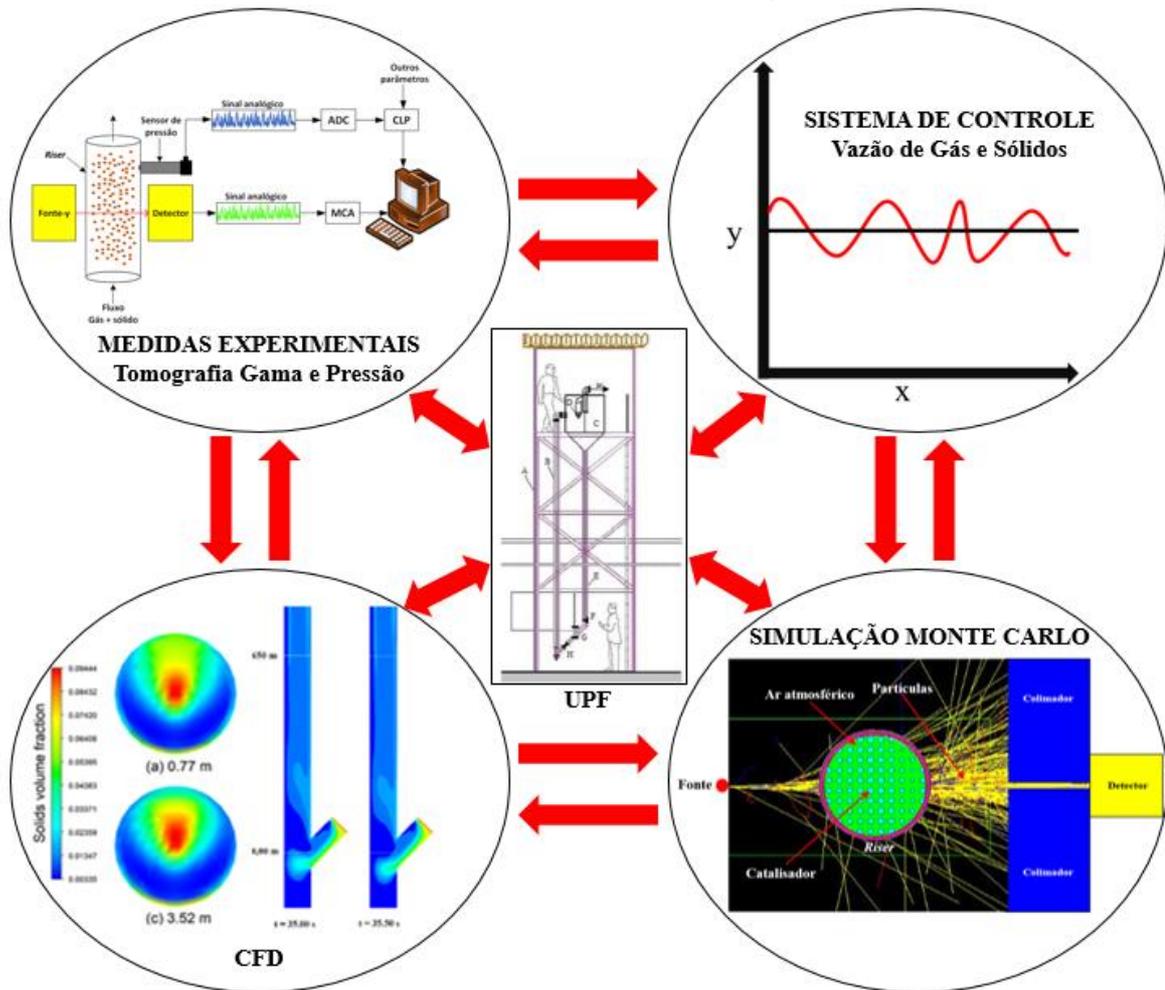
2.6.1 Integração

Há necessidade de criar uma função de integração que inicialmente poderá tomar uma fonte de dados, como, por exemplo, um modelo unidimensional para gerar os parâmetros fluidodinâmicos. Um banco de dados compartilhado é de extrema importância para armazenar as informações (arquivos de dados), possibilitando o acesso por qualquer computador do grupo pesquisa (GUEDES, 2016). Por fim, as evoluções dos métodos de integração devem ser implementadas de forma gradual. Validar com os dados experimentais os métodos individuais e desenvolver técnica de avaliação dos dados integrados (SANTOS, 2013 e LIMA FILHO, 2014).

Técnicas de geração de informação são previstas como *Machine Learning*, por exemplo, na aplicação de métodos de otimização que devem ser investigados com o objetivo de definir a função de integração do sistema. Desta forma, os parâmetros fluidodinâmicos medidos por diversos métodos é um critério estatístico para escolher os melhores resultados, é uma meta importante do trabalho de integração.

A ideia de integração de sistema a partir de várias plataformas de medidas é dada no trabalho de BARKMEYER *et al.* (2013). Na Figura 10, observa-se o esquema de integração adaptado para UPF com os métodos de medidas.

Figura 10 – Esquema *Data Flow in System* na integração das medidas na UPF.



Fonte: Próprio autor.

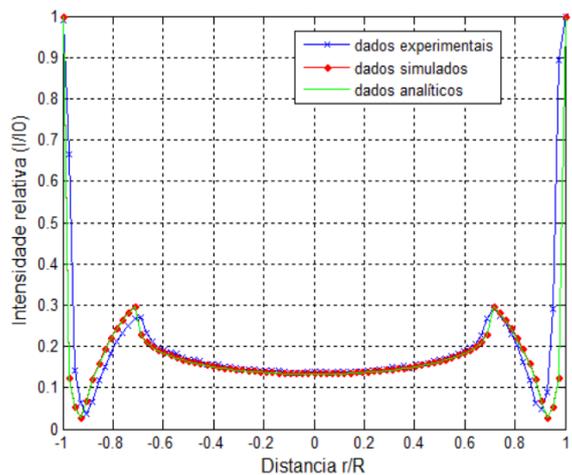
Na Figura 10, as setas representam o fluxo de informações que têm origem no modelo piloto a frio e são determinadas por meio das quatro plataformas de medidas adjacentes.

2.6.2 Método de Integração Com Simulações MCNPX da Fluidodinâmica do Riser

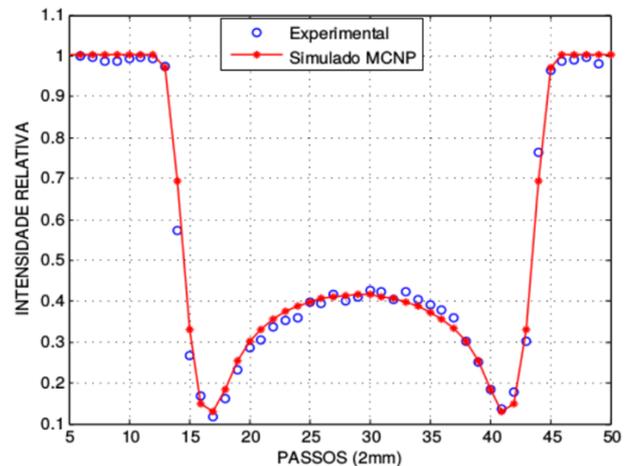
A integração de dados obtidos por comparação de medida experimental com MCNPX, já vem sendo explorada há algum tempo, tendo como exemplos iniciais os trabalhos de GUEDES (2016) e OLIVEIRA (2017), onde foi possível integrar as medidas experimentais obtidas por meio de ensaios não destrutivos envolvendo tomografia gama de geometria estática com as simulações MCNPX. Nos dois trabalhos foi possível analisar parâmetros medidos, como, coeficiente de atenuação mássico e curva de atenuação. Ambos os resultados mostraram ser promissores, pois permitiram uma melhor análise das medidas citadas e, conseqüentemente, a validação e otimização do método.

A Figura 11 (esquerda), traz o gráfico do perfil de atenuação gama relativa para um tubo de ferro com um semicilindro de alumínio no interior, sendo o raio interno e externo do tubo de 7,7 cm e 8,4 cm, respectivamente. Os dados foram obtidos por tomografia gama experimental, simulada no MCNPX e cálculos analíticos. Ainda na Figura 11 (direita), observa-se o gráfico com a comparação entre as medidas do perfil de atenuação gama experimental produzidas pela tomografia e a simulação da mesma no código MCNPX para região da solda de um tubo de ferro vazio com raio interno e externo de 2,2 cm e 3,2 cm, respectivamente.

Figura 11 – Perfil radial de atenuação gama relativa, obtido nas simulações tomográficas MCNPX, experimento e dados analíticos para um tubo de aço com um semicilindro de alumínio (esquerda) e perfil gerado na tomografia experimental e MCNPX para região da solda de um tubo de ferro vazio (direita).



Fonte: GUEDES, (2016).



Fonte: OLIVEIRA, (2017)

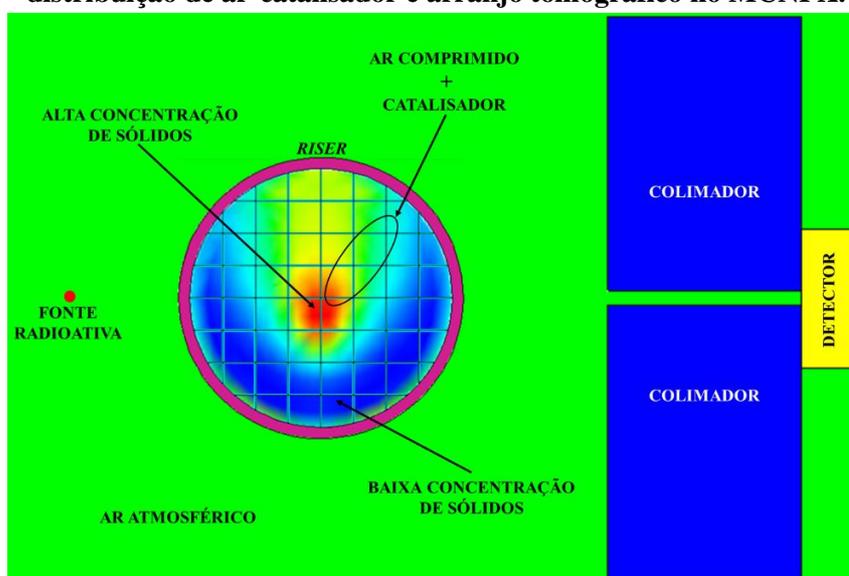
De acordo com a literatura, para as condições avaliadas no estudo atual, faz-se necessário o uso, primeiramente, de uma amostra de referência que esteja em conformidade com as medidas experimentais e simuladas, como, por exemplo, os arquivos CFD gerados por LIMA FILHO (2014). Isso poderá contribuir para retificação da importação de imagens CFD validadas que demostrem as condições do fluxo bifásico nas secções radiais do *riser* com a distribuição estacionária de gás-sólido para o código computacional MCNPX, tornando viável a integração de medidas experimentais da tomografia gama, pressão e simuladas em códigos. Desta forma, os parâmetros fluidodinâmicos podem ser comparados e integrados, desde que haja equivalência nos parâmetros de entrada, como a vazão de gás e sólidos.

3 MATERIAL E MÉTODOS

A integração do CFD com o código MCNPX e dados experimentais considera a UPF um sistema, e o fluxo de dados na planta deve ser estudado como *Data Flow in System* (DFS), de acordo com BARKMEYER *et. al.* (2013).

A função que representa a distribuição de sólidos radial e a distribuição axial como uma interpolação das imagens da distribuição radial ao longo do *riser* precisa ser implementada na geometria do código MCNPX. Na Figura 12, é ilustrada a distribuição radial de gás-sólido e o arranjo da tomografia a ser simulado nesse código.

Figura 12 – Esboço da vista superior (xy) de fatia radial em 2D representando a geometria com distribuição de ar-catalisador e arranjo tomográfico no MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

As opções são criar a distribuição no próprio MCNPX que tem recursos de geometria, ainda, pouco explorados no Grupo e/ou implementar método da literatura que interage o CAD e códigos MC (CONSTANTIN *et al.*, 2010; MOSOROV, 2011; MUSARUDIN *et al.*, 2012; ZHOU *et al.*, 2015). De início foi trabalhado com otimização da varredura no MCNPX para simular a tomografia de feixe único (GUEDES, 2016). Depois a importação de geometria esférica gerada em software e inserido no arquivo de entrada do MCNPX (OLIVEIRA, 2017).

A metodologia apresentada no item 3.2, mostra o passo a passo da importação de arquivo gerado no CFD que simula a distribuição radial do catalisador na UPF para o MCNPX.

Inicialmente, neste capítulo, apresenta-se a lista de materiais utilizado para realização do estudo, depois o esquema da metodologia utilizada. Em seguida cada um dos ramos, desse esquema, e suas inter-relações serão explicados e discutidos.

3.1 MATERIAL

A execução deste estudo esteve concentrada dentro de dois ambientes: o Departamento de Energia Nuclear (DEN) e o Centro de Informática (CIN), ambos localizados na Universidade Federal de Pernambuco (UFPE). No DEN, foram adquiridos os dados dos experimentos executados por OLIVEIRA (2018) no Laboratório de Fluidodinâmica e Ensaio não-Destrutivo Cornelius Keller; os dez arquivos de imagem CFD obtidos no banco de dados do Grupo de pesquisa, sendo o total de imagens subdivididos em três grupos: quatro extraídos de SOUZA NETTO e colaboradores (2013), três de LIMA FILHO (2014) e três de CLAUDINO *et al.* (2018) e no Laboratório de Física dos Sólidos foram executadas as simulações computacionais por meio do Método Monte Carlo (MMC) utilizando o código de transporte de radiação MCNPX.

No CIN, foram desenvolvidos três softwares em parceria com o prof. Dr. Silvio de Barros Melo, sendo um com a função de converter imagens coloridas para tons em escala de cinza (*Conversor.exe*), outro para executar a importação de imagens CFD (*MCNP_Tomogama_Grid_CFD.exe*) e o último voltado para importação de secções do *riser* com ar comprimido (*MCNP_Tomogama_Riser_Ar.exe*), os dois últimos têm a função de gerar arquivos para as simulações da tomografia por transmissão gama no código MCNPX.

No Centro de Informática da UFPE utilizou-se o seguinte material:

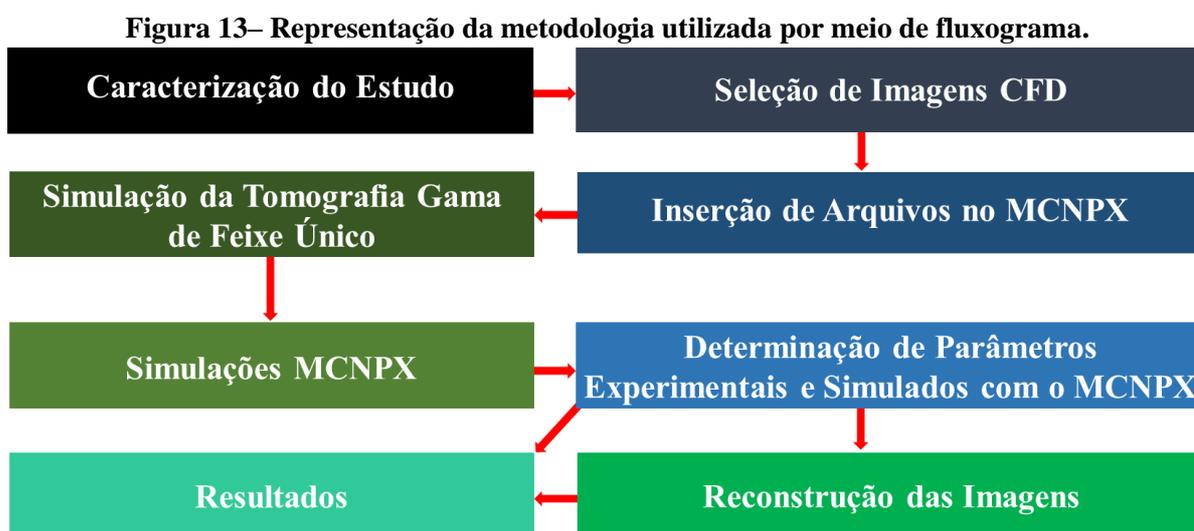
- Um notebook com as seguintes especificações: sistema operacional Windows 10 Home Single Language 64 bits, 12 GB de RAM e processador Intel (R) Core (TM) i3-3110M @2.40 GHz para criar os arquivos a serem simulados, processar os dados, criar os gráficos com os resultados e executar as reconstruções das imagens simuladas. Neste notebook foram instalados os seguintes programas: software Delphi 7 para criação dos três programas; algoritmo MART em MATLAB versão 2018a e pacote Microsoft Office 2016.

Além dos materiais já listados, no ambiente do DEN utilizou-se o seguinte material:

- Um conjunto de nove computadores, denominado SGI Rackable Cluster, sendo um *master* (*Racks* de 39Us) e oito “escravos” (*compute nodes* em 2 servidores SGI C2112-4G10), todos com as seguintes características: sistema operacional Windows Server 2012 R2 Standard 64 bits, 64 GB de RAM, o *master* com 4 TB de HD e os *nós* com 1 TB de HD cada e processador AMD Opteron (TM) 6364 para executar as simulações tomográficas MCNPX dos arquivos importados.

3.2 ESQUEMA METODOLÓGICO

Na Figura 13 é mostrado um fluxograma com o passo a passo utilizado no desenvolvimento deste trabalho. O fluxograma começa com caracterização do estudo (especificado na Secção 1 e 3) e termina com os resultados finais.



Fonte: Próprio autor.

A partir do problema abordado e dos objetivos pretendidos, foi realizada a pesquisa planejada executando simulações da tomografia gama no MCNPX de imagens CFD.

3.3 CARACTERIZAÇÃO DO ESTUDO

O estudo do fluxo bifásico por meio da tomografia gama no MCNPX utilizando simulações de experimentos realizadas na fluidodinâmica computacional com o software *ANSYS Fluent* ou similar, e com o módulo CFD do ambiente CAD *SolidWorks* segue duas rotas: ampliar a capacidade experimental instalada e integrar métodos computacionais, principalmente a simulação CFD na planta virtual, pois permite a comparação com a investigação experimental da fluidodinâmica na UPF.

O tomógrafo instalado na UPF é de primeira geração, caracterizado por possuir um feixe estreito (*pencil beam*) e utiliza fonte de radiação gama. Tem algumas limitações na realização da tomografia do *riser*, como, por exemplo, único ângulo de varredura (vista única); número de trajetórias do feixe limitadas; tamanho do passo igual ou maior do que 1mm, conferindo uma resolução espacial máxima de 1mm; três mesas em alturas fixas, que impossibilita a varredura axial. Porém, conforme demonstrado por SANTOS (2013) e LIMA

FILHO (2014), tais limitações não são um grande empecilho para validar os dados simulados em CFD com os dados do escaneamento experimental com fonte gama.

No entanto, a importação de arquivos CFD para código MCNPX e, conseqüente, simulação tomográfica das condições experimentais nessa plataforma poderá mostrar uma maior compreensão do comportamento do escoamento bifásico no interior do reator, ou seja, aumenta o entendimento experimental dos fenômenos ligados ao fluxo gás-sólidos no sistema, pois a tomografia realizada dentro do código MCNPX não possui as limitações inerentes à tomografia experimental. Desta forma, é possível realizar varreduras com vários ângulos e trajetórias do feixe, o tamanho do passo pode ser menor do que 1 mm e o escaneamento abrange qualquer altura do *riser*.

3.4 SELEÇÃO DE IMAGENS CFD

As imagens representando cortes radiais de secções do *riser*, sendo referentes as várias alturas e retratam diferentes condições de escoamento bifásico no interior do mesmo, foram geradas por meio de simulações numéricas do fluxo gás-sólido no reator da UPF e extraídas de SOUZA NETTO e colaboradores (2013), de LIMA FILHO (2014) e, mais recentemente, de CLAUDINO e colaboradores (2018). Os dois primeiros utilizaram o software comercial CFD (*Computational Fluid Dynamics*) *Fluent* 15.0 da ANSYS para obtenção dos dados referentes à fração volumétrica de sólidos nas secções transversais. O ANSYS *Fluent* é referência internacional em estudos de simulações fluidodinâmicas (ANSYS, 2013). CLAUDINO *et al.* (2018), utilizaram o software *SolidWorks* para simulações do escoamento em toda a UPF (*loop* fechado) e, também, obtiveram o mesmo parâmetro fluidodinâmico dos demais autores.

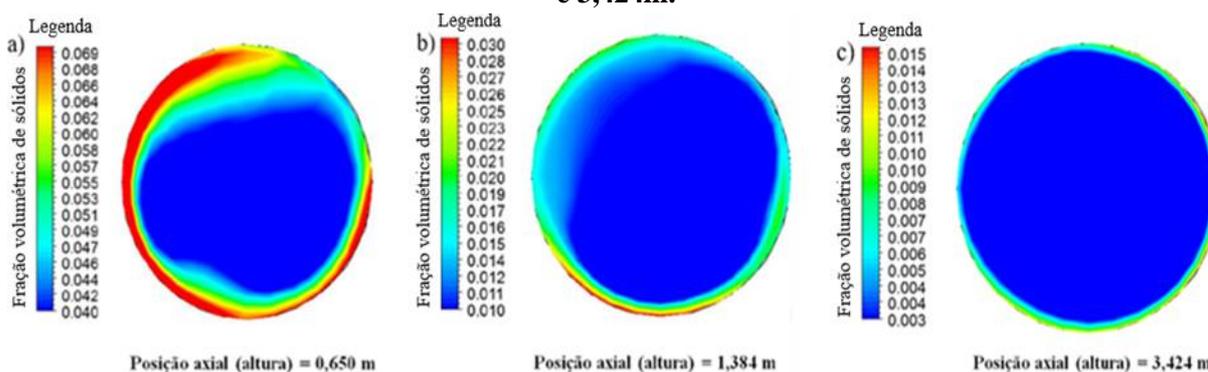
Os trabalhos de LIMA FILHO (2014) e CLAUDINO *et al.* (2018), foram validados por dados experimentais de SANTOS (2013) e OLIVEIRA (2018), respectivamente. Já as imagens geradas por SOUZA NETTO *et al.* (2013), terão os dados comparados com os dados de saída do MCNPX, pois os parâmetros de entrada utilizados pelo referido autor não podem ser reproduzidos na unidade experimental. Em todos os casos, foi através de softwares específicos, desenvolvidos em parceria com o Centro de Informática da Universidade Federal de Pernambuco (CIN-UFPE), que as informações ligadas à distribuição radial de catalisador em secções do *riser* foram exportadas de arquivos gerados por simulações numéricas da fluidodinâmica computacional para o código MCNPX, onde ocorreu a simulação MC da tomografia experimental por transmissão gama com fonte de Amerício-241 (energia de 0,060 MeV), que possibilitou a posterior determinação de parâmetros fluidodinâmicos.

3.4.1 Dados CFD da Distribuição Radial de Sólidos

Os arquivos CFD selecionados para inserção no código MCNPX são representados por cortes em fatias 2D, sendo cada fatia correspondente à determinada altura do *riser* da UPF e apresentam os parâmetros de entrada, como, por exemplo, vazão de gás e de sólidos variável de acordo com a origem na literatura das imagens. Além disso, estas possuem cores no padrão RGB, sistema de cores aditivas, do inglês: ‘Red, Green e Blue’, para indicar a quantidade de catalisador na secção radial estudada. De acordo com a escala CFD utilizada em softwares como o *ANSYS Fluent* e similares: o azul escuro presente nas imagens indica uma fração volumétrica de sólidos mínima, os tons de cores verde e amarelo indicam, nesta ordem, uma fração volumétrica de sólidos crescente até chegar ao tom vermelho escuro, indicativo da região com maior concentração de sólidos.

Os arquivos de LIMA FILHO (2014) representam a fração volumétrica de sólidos em três secções do tubo e simulam os seguintes parâmetros experimentais de entrada no tubo-*riser*: vazão de sólidos de 0,0620 kg/s, vazão de gás de 500 L/min (SI = 0,00834 m³/s) e saída da mistura de 0,0725 kg/s. Na Figura 14, essas imagens são vistas com a distribuição de catalisador para três diferentes alturas, sendo as alturas de 0,650m (a), 1,384m (b) e 3,424m (c) todas em relação a base do *riser*.

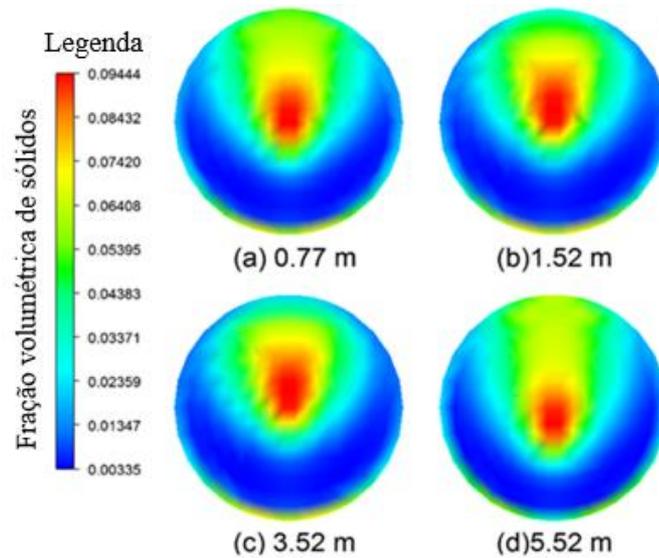
Figura 14 – Fração volumétrica de catalisador no plano xy nas posições radiais: 0,650m, 1,384m e 3,424m.



Fonte: LIMA FILHO, (2014).

SOUZA NETTO e colaboradores (2013), executaram simulações CFD para entrada volumétrica do gás de 1330,165 L/min (SI = 0,0222 m³/s) e vazão mássica de sólidos de 0,997 kg/s. Isto permitiu determinar as frações volumétricas de catalisador em quatro secções radiais do *riser* da UPF (Figura 15), que são representadas em cortes (xy) das seguintes alturas: 0,77m (a), 1,52m (b), 3,52m (c) e 5,52m (d).

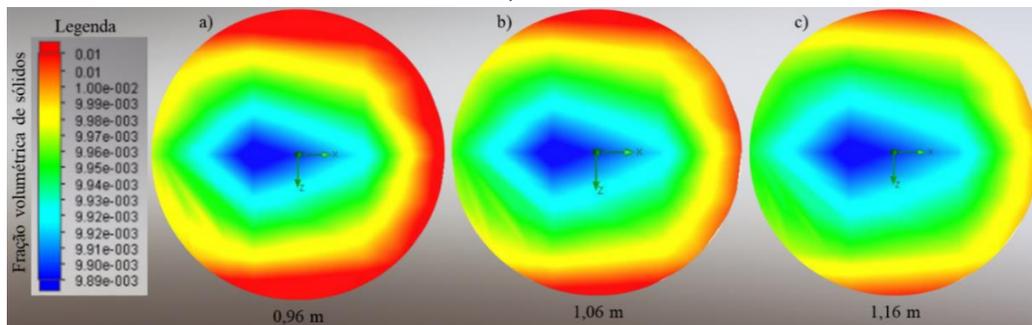
Figura 15 – Fração volumétrica de catalisador no plano xy nas posições radiais: 0,77m, 1,52m, 3,52m e 5,52m.



Fonte: SOUZA NETTO, (2013).

CLAUDINO e colaboradores (2018), realizaram simulações no programa CAD *SolidWorks*. Os autores objetivaram comparar os dados CFD com as informações experimentais de OLIVEIRA (2018). Para tanto, foram introduzidos os seguintes parâmetros de entrada na Unidade Piloto a Frio Virtual (UPFV): vazão de gás de 600 L/min ($SI = 0,010 \text{ m}^3/\text{s}$) e entrada de sólidos de 0,1 kg/s. Como nos demais casos, também, foi obtida a fração volumétrica de sólidos ao longo do *riser*, sendo as alturas estudadas: 0,96m (a), 1,06m (b) e 1,16m (c). A Figura 16 traz informações de três secções radiais do *riser*.

Figura 16 – Fração volumétrica de sólidos, vista no plano xy, nas posições radiais: 0,96m, 1,06m e 1,16m.



Fonte: CLAUDINO *et al.*, (2018).

A secção radial representada na imagem b, corresponde à altura da trajetória do feixe gama emitido pelo tomógrafo experimental. Isto permite que dados experimentais determinados em medidas de gradiente de pressão e pela tomografia por transmissão de raios

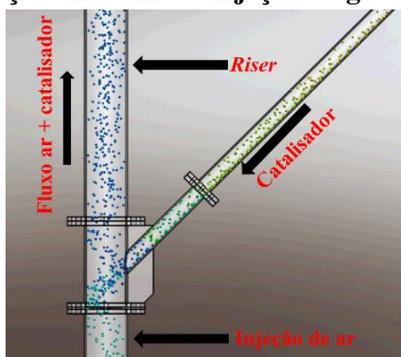
gama possam ser comparados com as informações de saída do MCNPX. Assim, a imagem b possui a vantagem de possibilitar a comparação dos parâmetros medidos através de três diferentes formas de avaliação e com os dados de saída das simulações CFD no software *SolidWorks*.

3.5 INSERÇÃO DE ARQUIVOS NO MCNPX

A literatura apresenta várias funções de acoplamento de geometrias em códigos computacionais MC, como, por exemplo, GEANT4 (CONSTANTIN *et al.*, 2010; MOSOROV, 2011), EGSnrc (VIEIRA *et al.*, 2012; CABRAL, 2015), MCNPX (PEIXOTO, 2008; ZHOU *et al.*, 2015), entre outros. Algumas delas já foram exploradas em trabalhos publicados anteriormente pelo Grupo de Fluidodinâmica e Ensaios não-Destrutivos (GUEDES, 2016; OLIVEIRA, 2017). No entanto, funções de inserção usadas nesses estudos não podem ser aplicadas de forma satisfatória para análise MCNPX de parâmetros fluidodinâmicos do escoamento gás-sólido dentro das secções do *riser*, pois trata-se de um sistema dinâmico contendo vários elementos (partículas) distribuídas de maneira aleatória. No entanto, para contornar esse obstáculo dois métodos diferentes de importação de arquivos para o código MCNPX foram executados, testados e comparados.

O primeiro consistiu na importação da geometria gás-sólidos por intermédio de um software *in house*, que tem como principal função extrair dados das imagens CFD e acoplar ao código MCNPX, criando diferentes distribuições de catalisador e ar, variável com a densidade [g/cm³], em secções radiais do tubo-*riser*. Já no segundo método, foi necessário converter os arquivos CFD para o formato em geometria CAD a ser lido pelo MCNPX através de algoritmo de conversão. Este último método pode ser chamado de importação direta, pois a função de inserção de dados no código é nativa do mesmo. Na Figura 17 observa-se uma imagem CAD que retrata a injeção de sólidos e ar na base do *riser*.

Figura 17 – Representação em CAD da injeção de gás-sólido no *riser* da UPFV.



Fonte: Adaptado de BERTONY *et al.* (2017).

3.5.1 Otimização da Importação

Para avaliar qual dos métodos de importação é mais eficiente, no início do estudo foi selecionada duas amostras de referência, ou seja, um arquivo CAD representando uma secção radial do *riser* com ar gerado no *SolidWorks*, sendo o diâmetro dessa amostra idêntico ao do *riser* experimental e altura de 10 cm. Vale ressaltar, poderia-se-ia utilizar a altura real do *riser* (6,37 m), mas como o feixe de raios gama é unidimensional, uma geometria mais extensa iria causar aumento no tempo de simulação computacional sem influenciar no resultado final. A segunda amostra foi uma imagem nos planos xy no formato CFD validada por método experimental.

O método direto consistiu na utilização do Visual Editor (*Vised*) como função de inserção. O *Vised* é um programa complementar ao MCNP, geralmente, vem junto com o código. Uma exceção é a versão de abril de 2018 do MCNP® 6.2 que não possui esse software incluído no pacote, porém este pode ser adquirido separadamente no RSICC (*Radiation Safely Information Computacional Center*). Através desse programa foi inserida a geometria com ar e catalisador no código. Para tanto, foi necessário converter os arquivos de referência gerados no *SolidWorks* para o arquivo de saída no formato SAT (*Standard ACIS Text*) na versão 03 para ser lido no *Vised.exe* versão 22 do MCNPX. De acordo com CANTER e SCHWARZ (2002), o formato SAT é utilizado porque é mais simples de ser interpretado do que o formato STEP (*STandard for the Exchange of Product*). Para importar um arquivo CAD 3D foi preciso selecionar no *Vised.exe* o botão “CAD Import” → “3D import” no menu principal. Isso traz o painel “CAD 3D Import”. Então, seleciona-se “Import” para o programa ler o arquivo CAD SAT. Em seguida foi determinada, de forma manual, as características químicas e físicas do sistema, como composição e densidade dos materiais.

O método indireto, consistiu na utilização de softwares específicos, que haviam sido desenvolvidos para extrair das imagens CFD os dados referentes a fração volumétrica de sólidos e inserir no interior da geometria do *riser* em forma de *grids* (pixels), onde cada pixel representa uma densidade diferente [g/cm^3]. Os pontos do arquivo CFD com maior fração de sólidos são lidos no MCNPX como partes com número de densidade elevada e vice e versa.

Após as simulações preliminares do tubo-*riser* com e sem sólidos, verificou-se que o método indireto (*software in house*) é mais eficiente quando comparado ao *Vised.exe*, pois este último, possui as seguintes limitações para o *riser* com partículas:

(1) Visualização de geometrias → Na atual versão do *Vised* é possível observar até 1000 superfícies. Sendo que uma fatia radial do *riser*, com poucos milímetros de espessura, possui a

distribuição de milhares de partículas no interior. Assim, acima de um certo limiar, o programa fecha (trava), impossibilitando garantir visualmente se o arranjo de catalisador estava de acordo com o visto na imagem CFD de referência.

(2) Tamanho do arquivo → Após a importação, o arquivo gerado era muito grande para ser simulado no MCNPX, ou seja, mesmo na hipótese do usuário negligenciar a visualização da geometria. No momento da execução dos comandos, o código iria apresentar a mensagem de erro, conseqüentemente, não concluiria a simulação (Figura 18).

Figura 18 – Mensagem de erro devido a extensão do arquivo.

```
fatal error. description of cell 321 uses 3500 words. 2000 is max.
warning. 630 surfaces were deleted for being the same as others.
```

Fonte: Próprio autor.

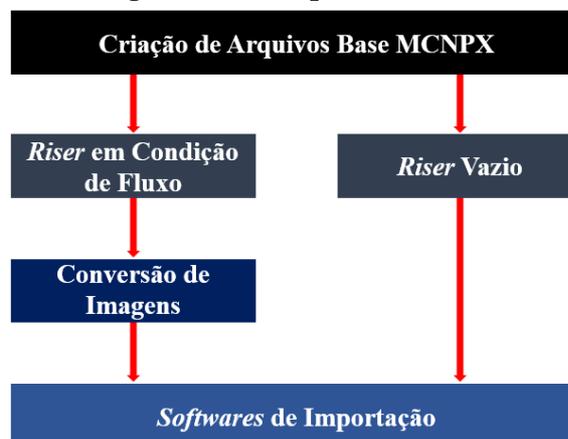
A mensagem acima diz que houve um erro antes do início da simulação devido o elevado número de células (geometrias) e para descrevê-las foram utilizadas 3500 palavras no arquivo, quando o limite máximo são 2000 palavras.

Portanto, todas as imagens CFD e a geometria do *riser* sem o fluxo de partículas sólidas foram inseridas no código MCNPX por meio do método indireto. A seguir, esse método é explicado com mais detalhes.

3.5.2 Importação Através de Softwares

A fim de efetivar a importação de seções radiais do *riser* com distribuição de sólidos e ar para o MCNPX, foram desenvolvidos softwares que viabilizaram a inserção de arquivos e simulações da tomografia para avaliar parâmetros. Fluxograma mostrado na Figura 19 resume a tarefa de importação.

Figura 19 – Fluxograma com os procedimentos de importação.



Fonte: Próprio autor.

3.5.2.1 Criação de arquivos base MCNPX

No arquivo base MCNPX, também chamado de arquivo de entrada ou *input* (INP), constam todas as informações referentes aos componentes do ambiente onde são executadas as simulações, como, por exemplo, energia da fonte, distância fonte-detector, diâmetro do orifício do colimador, dimensões geométricas, densidade e composição química de todos os objetos do sistema, entre outros. A importância do arquivo de entrada está intimamente ligada a validação das simulações tomográficas, pois a partir do INP os programas de importação criam os ângulos de varreduras e trajetórias do feixe da tomografia gama. Além disso, os dados ali presentes devem ser fidedignos em relação as condições experimentais para garantir a confiabilidade das simulações na obtenção dos parâmetros fluidodinâmicos necessários para comparação e integração aos dados experimentais. Mais detalhes sobre a criação deste arquivo podem ser vistos no Apêndice A.

Para elaboração do arquivo INP, foi necessário recorrer as informações referentes a UPF presentes em trabalhos experimentais. Entre elas, podem-se destacar a composição química, a fração de massa e a densidade de todos os materiais presentes no sistema (MOURA, 2015; GUEDES 2016; OLIVEIRA, 2017 e OLIVEIRA, 2018). Além disso, informações envolvendo simulações em fluidodinâmica computacional, também, foram necessárias (SOUZA NETTO *et al.*, 2013; LIMA FILHO, 2014; BERTONY *et al.*, 2017 e CLAUDINO *et al.*, 2018).

Os dados referentes à composição química do catalisador em estado ativado foram extraídos do estudo de OLIVEIRA (2018). As informações com a constituição química da parede do *riser* foram obtidas de BERTONY e colaboradores (2017), que foram responsáveis por moldar a UPFV no *SolidWorks*. E os dados para composição química do ar com pressão de 101,3 kPa e a 20°C, detector cintilador e colimador foram obtidos do banco de dados presente no NIST (*National Institute of Standards and Technology*). A Tabela 2 traz a composição química e fração de massa dos componentes do sistema simulado.

Os valores para densidade do catalisador, parede do *riser*, colimador, detector cintilador e ar são respectivamente: 0,83 g/cm³ *bulk* (empacotamento), 1,19 g/cm³, 11,32 g/cm³, 3,67 g/cm³ e 0,0012 g/cm³. A importância das informações presentes na Tabela 2 e a descrição da densidade dos materiais está em simular as condições reais da interação da radiação (fótons gama) com a matéria. O que torna possível a comparação de dados de saída do MCNPX com dados do XCOM, CFD e experimentos realizados.

Tabela 2 – Composição química e fração de massa dos materiais presentes na simulação.

| Composto - Catalisador | Fração de massa (%) |
|-------------------------------|----------------------------|
| Oxigênio | 50,63 |
| Silício | 31,25 |
| Alumínio | 15,84 |
| Lantânio | 1,33 |
| Zircônio | 1,13 |
| Estrôncio | 1,09 |
| Fósforo | 0,64 |
| Ferro | 0,49 |
| Zinco | 0,08 |
| Cobre | 0,08 |
| Cálcio | 0,05 |
| Enxofre | 0,04 |
| Composto - Riser | Fração de massa (%) |
| Carbono | 59,98 |
| Oxigênio | 31,97 |
| Hidrogênio | 8,06 |
| Composto - Ar | Fração de massa (%) |
| Nitrogênio | 78,07 |
| Oxigênio | 21,00 |
| Carbono | 0,03 |
| Argônio | 0,90 |
| Composto - Detector | Fração de massa (%) |
| Iodo | 84,67 |
| Sódio | 15,33 |
| Composto - Colimador | Fração de massa (%) |
| Chumbo | 100,0 |

Fonte: DADOS EXTRAÍDOS DA LITERATURA.

No total foram criados dois arquivos de entrada, sendo o primeiro correspondente ao *riser* vazio (INP_v) e o segundo ao *riser* em condição de fluxo (INP_F). Ambos os arquivos servem de base para todas as simulações envolvendo tomografia por transmissão gama. A partir deles que são geradas as projeções tomográficas de secções radiais do tubo-*riser*. Um modelo de arquivo INP para o tubo com catalisador e ar pode ser observado no Apêndice C do presente trabalho.

Dentro do arquivo INP correspondente ao *riser* com catalisador e ar, foram inseridos símbolos mnemônicos para o programa de importação de arquivos CFD ler as imagens e gerar, a partir dos dados presentes nas mesmas e no arquivo base, geometrias com distribuições

bifásicas dentro do *riser* virtual MCNPX. Na Figura 20, pode ser vista uma linha do arquivo base com símbolo mnemônico “@”, indicativo que logo após essa linha virão as linhas com a descrição geométrica da distribuição de sólidos e gás.

Figura 20 – Linha do arquivo INP com símbolo mnemônico em destaque.

```
10 P 1.0000 -0.0000 0 19.4100 $ Fim do detector@
```

Fonte: Próprio autor.

3.5.2.2 *Riser* vazio e em condição de fluxo

Os arquivos INPs também permitem a obtenção de parâmetros fluidodinâmicos, como, por exemplo, a fração volumétrica de sólidos e a concentração de sólidos em secções radiais do tubo, que são determinados através de dados da atenuação gama fornecidos após a execução de cada simulação MCNPX. Estes dados são inseridos em adaptações da equação de *Beer-Lambert* para avaliar as características fluidodinâmica do escoamento com a tomografia gama.

O *riser* em condição de fluxo (INP_F) é visto no MCNPX como sendo uma mistura de sólidos circunda por ar comprimido, ou seja, a ideia de leito fluidizado também é caracterizada no interior do código. Tal distribuição é variável de acordo com a distribuição de sólidos presente na imagem CFD.

O *riser* com ar, também chamado de vazio ou com gás (INP_V), é demonstrado no código como um tubo oco com uma substância gasosa no seu interior. Na Figura 21 é visto esse arranjo geométrico em corte transversal 2D no *Vised.exe* do MCNPX.

Figura 21 – Vista superior em corte transversal do sistema a ser simulado.



Fonte: Próprio autor.

Com a finalidade de manter o arranjo geométrico MCNPX fidedigno ao arranjo tomográfico experimental. As dimensões físicas existentes no mesmo foram respeitadas em todas as simulações. Assim, a distância fonte-detector foi de 0,285m, tendo o *riser* no centro do sistema, e o diâmetro interno do furo do colimador permaneceu como sendo de 5mm.

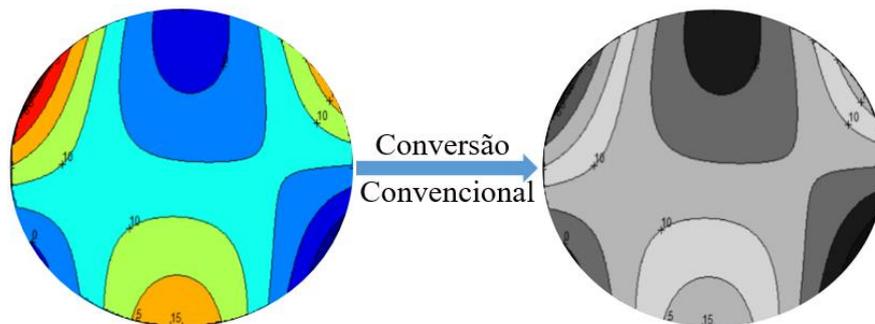
3.5.2.3 Conversão de imagens

Para efetuar a importação dos arquivos CFD para o código MCNPX, através do software de acoplamento, foi necessário, antes, executar uma conversão dos tons de cores que estavam no padrão RGB (imagem de 24 bits) para uma imagem com degradê em tons de cinza (*grayscale*) de 8 bits, onde do preto para o branco existem 256 tons (o preto, o branco e 254 tons de cinza), pois o programa de importação estima a média dos diferentes tons de cinza das imagens para criar uma distribuição de catalisador representada por pequenos *grids* (pixels). Cada pixel contém um valor de densidade [g/cm^3] que varia de acordo com fração volumétrica de sólidos presente na imagem CFD.

No entanto, um empecilho para conversão é o fato das escalas de tons de cores CFD variarem do azul (baixa concentração de sólidos) ao vermelho (alta concentração de sólidos). Neste caso, quando se aplica o método de conversão que leva em consideração a média dos três canais de cores para obter os tons de cinza (Equação 16), ou seja, a maneira convencional, não existe uma grande diferenciação entre o vermelho e o azul. Desta forma, a imagem resultante mostra ambas as cores em tons mais escuros (Figura 22).

$$C = (\text{Red} + \text{Green} + \text{Blue})/3 \quad (16)$$

Figura 22 – Conversão convencional de arquivos CFD para imagem com escala de tons de cinza.

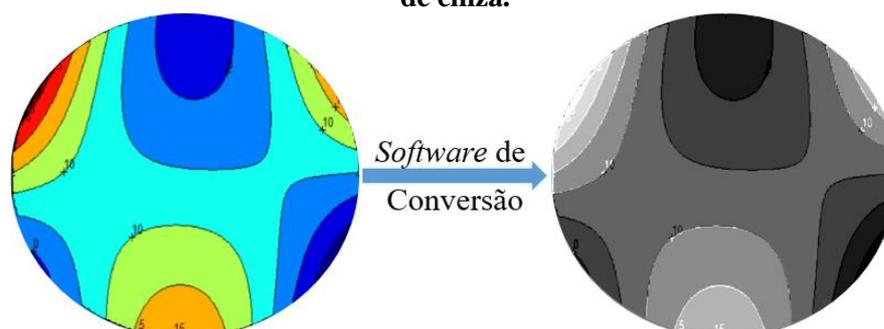


Fonte: Próprio autor.

Ou seja, quando o software de importação executa a leitura das imagens e cria os arquivos dentro do código, as informações da distribuição de sólidos, que variam em função da densidade, são inseridas de forma incorreta no MCNPX. Logo, o feixe de radiação “ver” os *pixels* correspondentes aos tons azul e vermelho como tendo as mesmas densidades (não os diferencia). Isso ocasiona um erro que impossibilita a comparação efetiva com os dados de simulações CFD e experimentais.

Porém, esse obstáculo foi superado a partir do desenvolvimento de um software de conversão no ambiente *Delphi*, que tem a função de inserir e o vetor vermelho do espaço de cores 3D para o extremo branco (ponto mais intenso, 255) na escala de tons de cinza e o vetor azul para o extremo preto (ponto menos intenso, 0) da mesma escala, sendo os tons de cinza intermediários (1 à 254) para as demais combinações de cores. A Figura 23, mostra um exemplo da conversão feita pelo Software *Conversor.exe*.

Figura 23 – Conversão por meio de software de arquivos CFD para imagem com escala de tons de cinza.



Fonte: Próprio autor.

O funcionamento do software consiste na inserção de uma escala de cores no modelo RGB, utilizada na imagem CFD, que será convertida. Em seguida, o usuário carrega o arquivo CFD para conversão. Após um tempo médio de 10 minutos para o notebook citado no item 3.1, a imagem resultante estará pronta para ser importada. Vale salientar, que todos arquivos citados devem estar no formato *BitMap* (mapa de bits), pois tanto o programa de conversão quanto o de importação possuem a limitação de ler apenas este tipo de arquivo.

É importante destacar que a conversão de imagens, descrita anteriormente, pode ser realizada diretamente em softwares, como o *ANSYS Fluent* e *SolidWorks*. No entanto, nem sempre todos os usuários terão acesso e/ou domínio sobre tais programas. Na hipótese de só existirem disponíveis arquivos CFD, o uso desse método de conversão, antes do acoplamento ao MCNPX, constitui uma ferramenta alternativa para tais usuários.

3.5.2.4 Softwares de importação

A importação dos arquivos representados por secções radiais do *riser* sem e em condição de fluxo bifásico para MCNPX, se mostrou viável devido ao desenvolvimento de dois programas de importação, sendo um voltado exclusivamente para inserção do arquivo do *riser* com ar e o outro dedicado a inserir o *riser* com ar-sólidos no código. O primeiro recebeu o nome de *MCNP_Tomogama_Riser_Ar* e o segundo de *MCNP_Tomogama_Grid_CFD*. Ambos

foram desenvolvidos em linguagem *Delphi*, com o primeiro criado em um trabalho anterior (OLIVEIRA, 2017) e modificado para execução das simulações atuais do *riser* com fluxo de ar, e o último desenvolvido em 2019 e posteriormente otimizado para completar o estudo atual do *riser* com diferentes distribuições de sólidos (Figura 24). Ambos os softwares foram desenvolvidos em parceria com o Centro de Informática da UFPE, CIN-UFPE.

Figura 24 – Interface do software *MCNP_Tomogama_Grid_CFD*.

Tomografia Gama de Riser Industrial de Primeira Geração

A tomografia assume que o conjunto fonte-detector será rotacionado e transladado
Assume-se que as densidades do objeto serão fornecidas pelo arquivo de imagem

Nome base: Rotações: Trajetórias por vista:
 Num. Inicial: Número de vistas: Cada vista possui: trajetórias.

Colimador: **Detector:**
 Raio do orifício: Raio externo:
 Raio externo: Parede frontal:
 Parede frontal: Parede traseira:
 Parede traseira:

Fonte: **Parede do Riser:** Prescrever passo
 Posição: Raio interno: Pos. inicial:
 Energia: Raio externo: Amplitude:
 Universo Passo:
 Raio:

Resolução de saída: Min Dens. do material: Imagem CFD:
 Max Dens. do material:

Gerar arquivos MCNP

Fonte: Próprio autor.

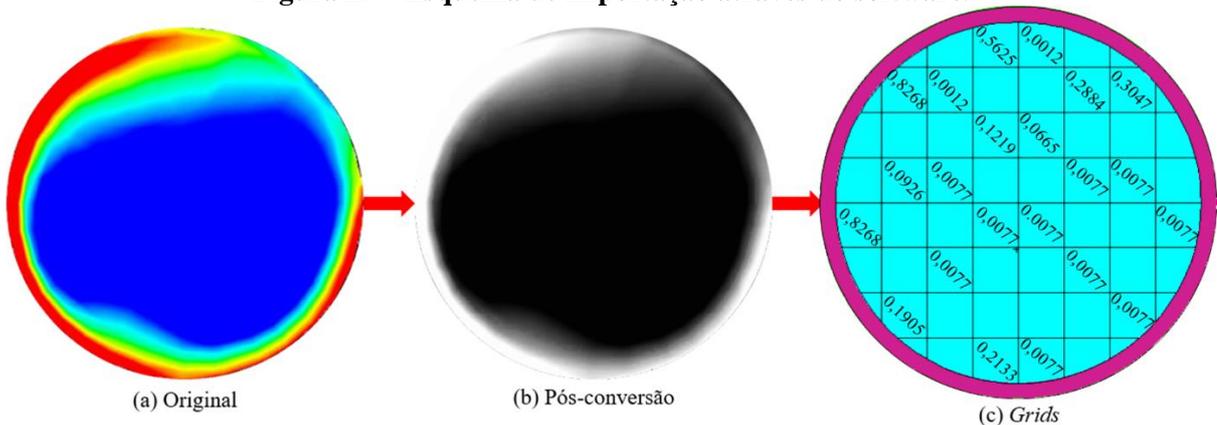
O funcionamento básico dos programas é praticamente idêntico e pode ser visto com mais detalhe no Apêndice B. No entanto, o software responsável por inserir as imagens no código tem um menu extra com essa função, conforme pode ser visto em destaque (Figura 24). Seu funcionamento consiste na importação da imagem CFD em tons de cinzas (convertida) a partir do botão “*Imagem CFD*”, antes de inseri-la, o usuário deve renomear a imagem para o nome de sua preferência. Depois é necessário escolher o valor mínimo e máximo de densidade das *grids* para o programa estimar valores médios, sendo a densidade mínima correspondente ao ar comprimido com $0,0012 \text{ g/cm}^3$ e a máxima é, geralmente, a densidade aparente (*bulk*) do catalisador, que segundo o experimento de OLIVEIRA (2018) é $0,83 \text{ g/cm}^3$. Porém, dependendo da imagem importada, este valor pode variar, fazendo-se necessário o uso de um fator de calibração. Por fim, o usuário pode escolher a resolução de saída que vai de 1 até a capacidade do código de rodar os arquivos (12 de resolução de saída)¹. O aumento na resolução

¹ Resolução de saída 1 = 4 pixels gerados, Resolução de saída 12 = 145 pixels gerados.

é diretamente proporcional ao aumento na quantidade de *grids* na secção do tubo e inversamente proporcional as dimensões físicas dos mesmos. Consequentemente, uma resolução de saída muito alta irá acarretar um aumento significativo no tempo de simulação. Assim, após várias simulações foi escolhido 8 como resolução de saída ideal para este estudo.

Após executar as tarefas importação descritas anteriormente, o usuário deve clicar no botão “*Gerar arquivos MCNP*”, pois isto permite gerar vários arquivos de entrada (INPs) com os pixels, ou seja, o processo de inserção estará finalizado. Para visualização da secção do *riser* acoplada ao MCNPX, utiliza-se o software nativo *vised.exe*. Na Figura 25, tem-se um exemplo de importação que vai desde a escolha da imagem original que pode ser validada ou não por experimentos (a), passa pela conversão através do software descrito na Subsecção 3.5.2.3 (b) e termina com a inserção e visualização da geometria no código (c).

Figura 25 – Esquema de importação através do software.



Fonte: Próprio autor.

Para trazer a ideia real de como é feita a interpretação da importação pelo código MCNPX, em (c) foram destacados alguns pixels com seus respectivos valores numéricos de densidade, ou seja, na Figura 25 observa-se que a geometria resultante da importação (c) é representada por grandes (*grids*) dentro do *riser*. Esses *grids* possuem forma geométrica e densidade [g/cm^3] variável de aproximadamente $0,83 \text{ g/cm}^3$ nas partes onde existe maior fração volumétrica de sólidos (vermelho na imagem original ou branco na imagem convertida) até o valor mínimo de $0,0012 \text{ g/cm}^3$ nas partes onde existem uma menor quantidade de catalisador (azul escuro na imagem original ou preto na imagem convertida).

No caso do *riser* com ar comprimido no seu interior, o software *MCNP_Tomogama_Riser_Ar* cria vários arquivos, onde a diferenciação de um arquivo para outro está no deslocamento do conjunto fonte, colimador e detector no decorrer do eixo *x* do tubo (varredura tomográfica).

3.6 SIMULAÇÃO DA TOMOGRAFIA GAMA DE FEIXE ÚNICO

O código MCNPX requer um arquivo de entrada para cada trajetória da varredura (posição do arranjo fonte-detector), pois as simulações realizadas nesse código apresentam a desvantagem de serem estáticas. Segundo OLIVEIRA (2017), esta limitação foi um empecilho para utilização do código para varreduras tomográficas, pois era preciso escrever e simular individualmente cada trajetória do tomógrafo.

Por exemplo, para simular o procedimento de varredura, análogo ao realizado experimentalmente no *riser* da UPF, pode-se utilizar 110 arquivos de entrada representando o movimento de translação e 1 arquivo representando a rotação. Esses arquivos totalizam $1 \times 110 = 110$ arquivos INPs. Esta quantidade pode variar, se for levado em conta o tamanho do passo, posição inicial do tomógrafo, amplitude da varredura e número de giros. De qualquer forma, para escrever cada um desses arquivos, o usuário notavelmente precisaria de um tempo muito longo, que de certo modo seria inviável devido a quantidade de arquivos de imagens acoplados ao MCNPX.

Portanto, conforme GUEDES (2016), as dificuldades na realização desse processo podem ser resumidas em:

1. gerar de maneira rápida os diversos arquivos com nomes diferentes;
2. executar de forma rápida e eficiente os arquivos;
3. e extrair os dados de saída para formar uma matriz.

Para contornar estes entraves, os programas *MCNP_Tomogama_Riser_Ar* e *MCNP_Tomogama_Grid_CFD*, também possuem a função de a partir de um arquivo base, gerar vários arquivos de entrada que irão simular o número de passos do tomógrafo, o número de trajetórias do feixe gama, bem como, o número de vistas, que corresponde a quantidade giros que o tomógrafo executa no entorno do objeto irradiado (ver Apêndice B).

3.6.1 Classificação das Imagens Importadas Para MCNPX

Para otimizar a organização dos dados provenientes das simulações tomográficas de arquivos inseridos no código, as dez imagens CFD descritas na subsecção 3.4.1, foram enumeradas de um a dez. Desta forma, a classificação das secções transversais do *riser*, representada por geometria com *grids*, ficou: CFD1, CFD2, CFD3, CFD4 referente as quatro imagens obtidas por SOUZA NETTO e colaboradores (2013); CFD5, CFD6, CFD7 designando os três arquivos de LIMA FILHO (2014) e CFD8, CFD9, CFD10 para as imagens de

CLAUDINO e colaboradores (2018). Portanto, além do *riser* com ar, também foi simulada a tomografia gama de feixe único de dez arquivos CFD no MCNPX. Na Tabela 3 são vistos, de maneira simplificada, todos os parâmetros experimentais utilizados para obtenção dos arquivos CFD.

Tabela 3 – Parâmetros experimentais utilizados para obtenção dos arquivos CFD.

| Arquivo MCNPX | Parâmetros de entrada | Altura do <i>riser</i> | Software de simulação | Autor da simulação | Ano | Validação experimental? |
|---------------|-----------------------|------------------------|-----------------------|--------------------|------|-------------------------|
| CFD1 | Entrada de gás: | 0,77 m | | | | |
| CFD2 | 1330,165 L/min | 1,52 m | ANSYS | SOUZA | 2013 | Não |
| CFD3 | Entrada de sólidos: | 3,52 m | Fluent | NETTO | | |
| CFD4 | 0,997 kg/s | 5,52 m | | et al. | | |
| CFD5 | Entrada de gás: | 0,65 m | | | | |
| CFD6 | 500 L/min | 1,384 m | ANSYS | LIMA | 2014 | Sim |
| CFD7 | Entrada de sólidos: | 3,424 m | Fluent | FILHO | | |
| | 0,0620 kg/s | | | | | |
| CFD8 | Entrada de gás: | 0,96 m | | | 2018 | Sim |
| CFD9 | 600 L/min | 1,06 m | SolidWorks | CLAUDINO | | |
| CFD10 | Entrada de sólidos: | 1,16 m | | <i>et al.</i> | | |
| | 0,1 kg/s | | | | | |

Fonte: Próprio autor.

As informações obtidas com as simulações da tomografia gama das secções do tubo-*riser* serão inseridas nas figuras com gráficos de acordo com a classificação para os arquivos MCNPX (imagens importadas) mostrada na Tabela 3.

3.6.2 Parâmetros Utilizados nas Simulações da Tomografia Gama do *Riser*

Diversas simulações foram executadas com intuito de selecionar os melhores parâmetros a serem aplicados na perfilagem gama do *riser* com e sem a presença de catalisador. Tais medidas são necessárias para otimizar as simulações e refinar os dados de saída do MCNPX. Estes parâmetros têm influência direta no tempo de simulação computacional, na confiabilidade dos dados e na qualidade das imagens tomográficas reconstruídas. Na Tabela 4, são mostrados os parâmetros utilizados nas simulações MCNPX referentes as secções radiais do tubo.

Tabela 4 – Parâmetros utilizados na tomografia MCNPX de secções radiais do riser.

| Parâmetros | Valores | |
|---|--------------------------|--------------------------|
| | Riser com catalisador | Riser sem catalisador |
| Raio interno do tubo | 4,6 cm | 4,6 cm |
| Raio externo do tubo | 5.0 cm | 5.0 cm |
| Energia dos fótons | 0,060 MeV | 0,060 MeV |
| Distância fonte-detector | 28.5 cm | 28,5 cm |
| Número de histórias simuladas | 3,5x10 ⁷ | 3,5x10 ⁷ |
| Número de vistas do tomógrafo | 13 | 13 |
| Número de trajetórias do feixe | 212 | 212 |
| Tamanho do passo | 0,05 cm | 0,05 cm |
| Raio do furo do colimador | 0,25 cm | 0,25 cm |
| Amplitude dos cortes | 10,6 cm | 10,6 cm |
| Posição inicial da varredura | 5,3 cm | 5,3 cm |
| Densidade da parede do tubo | 1,19 g/cm ³ | 1,19 g/cm ³ |
| Densidade aparente do catalisador | 0,8333 g/cm ³ | – |
| Densidade do ar comprimido | 0,0012 g/cm ³ | 0,0012 g/cm ³ |
| Número total de arquivos de entrada gerados | 2756 | 2756 |

Fonte: Próprio autor.

O número de vistas, trajetórias, amplitude dos cortes, resolução de saída (tamanho do passo), posição inicial da varredura e energia da fonte escolhidos para simulação, influenciam diretamente na matriz gerada nas reconstruções das imagens. Bem como, na construção de gráficos com os dados da atenuação gama, fração volumétrica, concentração de sólidos em secções radiais e etc. Esses fatores têm grande importância, principalmente, quando comparados com os dados experimentais e imagens adquiridas na fluidodinâmica computacional.

3.7 SIMULAÇÃO NO MCNPX

Antes de dar início a qualquer simulação de transporte de radiação, o MCNPX realiza diversas verificações na estrutura do arquivo *input* (INP), verificando possíveis erros cometidos pelo usuário. Quando algum problema é encontrado, mensagens de erro são exibidas e, caso o problema seja fatal, a execução é interrompida, sem que nenhum cálculo seja realizado.

Ao término da simulação, os resultados gerados a partir dos comandos específicos dos *tallies*² selecionados são escritos no arquivo de saída (*output*) juntamente com o tempo

² Tallies = Tipo de grandeza física desejada. Por exemplo, corrente passando por uma superfície [*I/I₀*].

computacional, o número de histórias e diversos outros dados. Além do *output*, o MCNPX gera também um arquivo *backup* denominado *runtype*, que permite interromper a simulação antes do término programado e dar prosseguimento em outro momento.

3.7.1 Análise de Resultados do MCNPX

Os dados de saída produzidos pelo MCNPX oferecem uma riqueza de informações sobre a simulação. Além de ter o cálculo de diversas grandezas físicas, como, corrente passando por uma superfície [I/I_0] e energia depositada em uma célula [MeV/g] (Subseção A.1.5 do Apêndice A), também é possível obter o erro relativo proveniente do resultado das simulações.

3.7.1.1 Erro relativo

Um fator que necessita de uma avaliação cuidadosa nas muitas tabelas de saída (arquivos de saída MCNPX) é o erro relativo, que está intimamente ligado ao número de histórias pré-selecionado. Este erro é a primeira estimativa de incerteza na contagem média das partículas (MCNP6 USER'MANUAL, 2017), dado por:

$$R = \frac{S_{\bar{x}}}{\bar{x}} \quad (17)$$

ou seja, o erro relativo, denotado R na Equação 17, é definido pelo desvio padrão estimado da média $S_{\bar{x}}$, dividido pela média estimada \bar{x} . No MCNPX, a quantidade requerida para esta estimativa do erro – o *tally* e seu segundo momento – são calculados após cada história completada pela partícula no Método Monte Carlo (MMC), o que explica o fato de que as várias contribuições para um *tally* proveniente da mesma história são correlacionadas. Em termo simples, R pode ser descrito como uma medida da boa qualidade dos resultados determinados nas simulações. Este erro relativo pode ser usado para formar intervalos de confiança sobre o principal valor estimado. Quando próximo a um número infinito de eventos, há uma chance de 68% (isto é, a $1S_{\bar{x}}$ de um intervalo gaussiano ao redor do valor médio) do resultado verdadeiro estar situado na faixa $\bar{x} (1 \pm R)$, 95% de estar em $\bar{x} (1 \pm 2R)$ e 99,73% $\bar{x} (1 \pm 3R)$. Para um *tally* bem comportado, o erro relativo R será proporcional a $1/N^{1/2}$, onde N é o número de histórias.

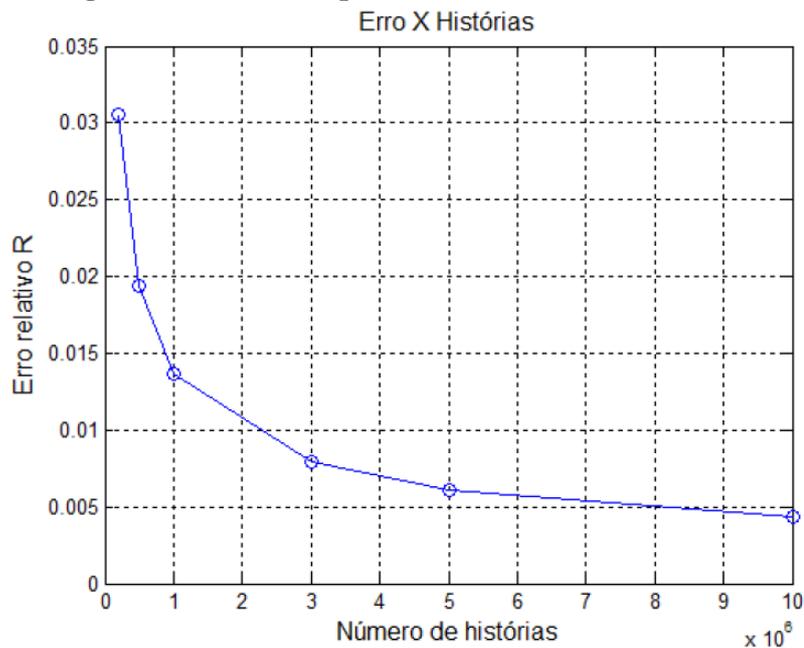
Desta forma, para reduzir R à metade, o número de histórias deve ser o quádruplo. O erro relativo é utilizado para avaliar a precisão dos resultados do presente estudo, e um guia para interpretação do erro relativo pode ser observado na Tabela 5.

Tabela 5 – Avaliação da qualidade da simulação de acordo com R.

| Valores de R | Qualidade do Registro |
|--------------|---|
| 0,5 a 1 | Desprezível |
| 0,2 a 0,5 | Pouco significativo |
| 0,1 a 0,2 | Questionável |
| <0,1 | Geralmente confiável, com exceção a detectores pontuais |
| <0,05 | Geralmente confiável para detectores pontuais |

Fonte: MCNP6 user's manual (2017).

De acordo com o manual do usuário do MCNP6 (MCNP 6.2.0, 2017), um erro menor que 5% é necessário para a *tally*, que representa um detector puntual, produzir resultados confiáveis. Na Figura 26, apresenta-se o gráfico “erro em função do número de histórias” pelo qual foi escolhido o número de histórias a ser tomado neste trabalho.

Figura 26 – Gráfico representativo de erros X histórias.

Fonte: GUEDES (2016).

O gráfico da Figura 26 mostra o comportamento do erro relativo em função do aumento do número de histórias. Para simulações envolvendo à tomografia gama MCNPX de objetos estático (ausência de escoamento bifásico), o número mínimo de histórias é 10^5 (GUEDES, 2016; OLIVEIRA, 2017). No atual estudo, onde é analisado o fluxo gás-sólidos em secções radiais do *riser*, é necessário obter exatidão na resposta do problema, sendo a utilização do valor $3,5 \times 10^7$ histórias presente na Tabela 4, o parâmetro de entrada das simulações justificável para obtenção de informações de qualidade elevada.

3.7.2 Arquivos de Saída das Simulações

Após a execução dos arquivos de entrada no formato TXT, referentes ao procedimento de varredura utilizados para cada um dos casos envolvendo a simulação, o código MCNPX retorna para cada arquivo de entrada, três arquivos de saída nos formatos (.TXTO), (.TXTM) e (.TXTR). Os arquivos de saída revelam o que aconteceu em toda a simulação e os resultados requeridos pelo usuário.

No arquivo TXTR encontram-se os resultados gerais da simulação como, por exemplo, o cartão de entrada com a descrição do arranjo geométrico simulado, composição dos materiais, energia utilizada, superfície de detecção, número de histórias, os resultados de secções de choque dos átomos que interagiram com as partículas escolhidas pelo usuário, as probabilidades de efeitos físicos da radiação no meio e quantidade de interações, tempo computacional, as quantidade de partículas que atingiram o detector; erro relativo, etc. Já o arquivo no formato .TXTO não fornece dados relevantes da simulação.

Dos três arquivos de saída, o no formato .TXTM é o mais importante para extração dos dados simulados, pois nele observa-se o número total de partículas que chegaram no detector, sendo que o número inicial (I_0) que emerge da fonte é proporcional a 100%, o cálculo de erro relativo (R) e, também os dados referentes as simulações tomográficas do *riser vazio* (I_v) e em condição de fluxo (I_F), sendo estes valores dados em intensidade gama relativa [I/I_0]. Um exemplo de arquivo .TXTM pode ser visto na Figura A.11 do Apêndice A.

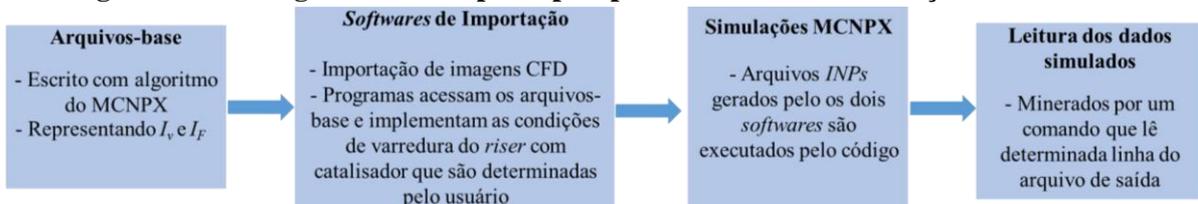
3.7.3 Mineração de Dados

Como visto na Tabela 4, para cada secção radial do *riser* estudada, são necessários 2756 arquivos MCNPX para produzir uma tomografia com 13 giros e resolução de 0,5mm. O problema referente a produção desse número de arquivos foi resolvido com a introdução dos programas descritos na Secção 3.6. Após as simulações, são criados 2756 arquivos de saída em .TXTM. A partir daí surge um novo empecilho que é a extração desse número de dados de forma prática e em curto espaço de tempo. Para resolver tal questão, um comando em *Shell Script* (Subsecção A.1.6 do Apêndice A) é executado no terminal do Linux, tornando possível apenas a extração de informações relevantes para este caso, como o erro relativo e intensidade gama relativa [I/I_0] proveniente da interação da radiação para cada trajetória do feixe. Assim, segundo GUEDES (2016), no momento da mineração de dados, é possível produzir uma

economia de tempo considerável de cerca de 9 horas ou mais, conforme verificou-se no estudo atual.

O procedimento de importação das imagens e automação da tomografia gama até a leitura dos dados simulados são resumidos no fluxograma mostrado na Figura 27.

Figura 27 – Fluxograma com os principais procedimentos da simulação com MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

3.8 DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS EXPERIMENTAIS E SIMULADOS COM O MCNPX

A leitura e o tratamento dos dados de saída do código MCNPX, abrem um leque de possibilidades para determinação de parâmetros físicos do catalisador, como, coeficiente de atenuação mássico [m^2/kg] e, também, parâmetros fluidodinâmicos, como, por exemplo, a concentração de sólidos [kg/m^3] em secções do riser. Geralmente, tais informações são comparadas com dados extraídos de simulações CFD de softwares *SolidWorks* e *Ansys Fluent* e/ou de experimentos presentes na literatura (SANTOS, 2013 e OLIVEIRA, 2018). Portanto, tem-se oportunidade de validar as simulações MCNPX com experimentos realizados no riser a frio, que junto com os dados fornecidos por softwares formam um modelo integrado a descrever um único sistema.

Após o processamento dos dados MCNPX, os mesmos são introduzidos em equações da fluidodinâmica, onde é feita avaliação quantitativa do escoamento gás-sólidos no interior tubo-riser. As subsecções a seguir explanam como parâmetros físicos: intensidade gama relativa, coeficiente de atenuação linear e mássico foram determinados. A partir destes e informações presentes em trabalho do grupo de pesquisa obtém-se parâmetros da fluidodinâmica: concentração de sólidos, fração volumétrica de sólidos e gás, bem como, as velocidades superficiais do gás e da partícula.

3.8.1 Coeficiente de Atenuação Linear do Catalisador

Como abordado anteriormente, a simulação da interação da radiação com a matéria dentro do código MCNPX permitem quantificar o número de fótons que saem da fonte emissora

de radiação e os que atingem a superfície de detecção. Através da relação entre os fótons transmitidos pelo material absorvedor (I) e os fótons transmitidos sem a presença do mesmo (I_0), que é dada pela lei de *Beer-Lambert*, aqui utilizada para um feixe monoenergético e expressa por:

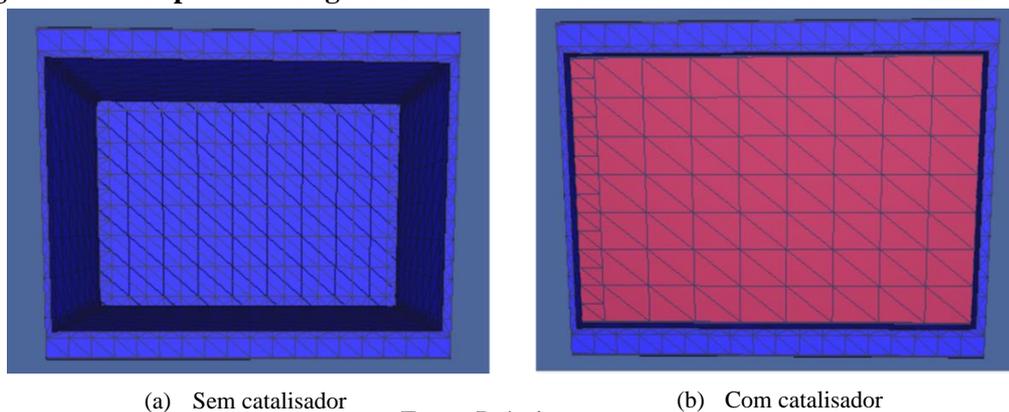
$$I = I_0 e^{-\mu(Z,E)x} \quad (18)$$

em que I e I_0 [W/cm^2] representam, respectivamente, as intensidades dos feixes da radiação transmitida e inicial, μ é o coeficiente de atenuação linear [cm^{-1}], específico para cada material, podendo variar com número atômico do meio (Z) e com a energia da fonte radioativa (E) e x a espessura do objeto absorvedor [cm].

Para viabilizar a comparação das informações mensuradas no experimento realizado por OLIVEIRA (2018) com os dados obtidos na plataforma de simulação MCNPX, foram inseridas duas fontes de radiação gama monoenergética no código, sendo elas de Am-241 com energia máxima de 0,06 MeV e outra de Cs-137 com energia de 0,662 MeV. A escolha dessas fontes, também, foi motivada pelo fato de μ variar com energia do feixe, como já foi dito, sendo possível comparar os parâmetros físicos obtidos por ambas. No entanto, enquanto OLIVEIRA (2018) utilizou dois tipos de catalisadores, aqui foi utilizado apenas o catalisador ativado (virgem) e sua composição química pode ser vista na Tabela 2.

A simulação consistiu em reproduzir as mesmas condições do experimento que foi realizado com um tomógrafo de primeira geração. Assim, foi modelada a geometria de um recipiente retangular de acrílico (composição química na Tabela 2), com as mesmas dimensões físicas das utilizadas na experimentação: comprimento de 119,44 mm, altura de 72,03 mm e largura de 94,42 mm. O recipiente virtual sem e com catalisador pode ser visto nas Figuras 28(a) e 28(b), respectivamente.

Figura 28 – Recipiente retangular sem e com catalisador visto no *vised.exe* do MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Para reproduzir o mesmo arranjo experimental de irradiação, o centro geométrico da caixa ficou exatamente equidistante da fonte e do detector, permitindo coincidir com a origem do eixo de coordenadas x e y do tomógrafo.

Assim como no experimento, foi necessário dividir o interior do recipiente em 9 compartimentos com volume fixo, tendo a finalidade de obter diferentes valores de atenuação do catalisador para diferentes espessuras. Desta forma, $\mu = \mu(I,x)$, sendo I valor da intensidade emergente e x a espessura decorrente das camadas de catalisador criadas. No entanto, a diferença entre a simulação e o experimento é que, no caso da primeira, não houve necessidade de inserir uma placa divisória de acrílico a fim de separar cada compartimento. Ou seja, na modelagem da geometria no interior do MCNPX, a espessura da placa divisória foi inserida em uma das bordas da caixa. Por conta disso, nas Figuras 28 e 29, observa-se a borda da direita do recipiente um pouco mais espessa em comparação a da esquerda, isto garante que o feixe irá percorrer a mesma espessura de material em ambas as condições.

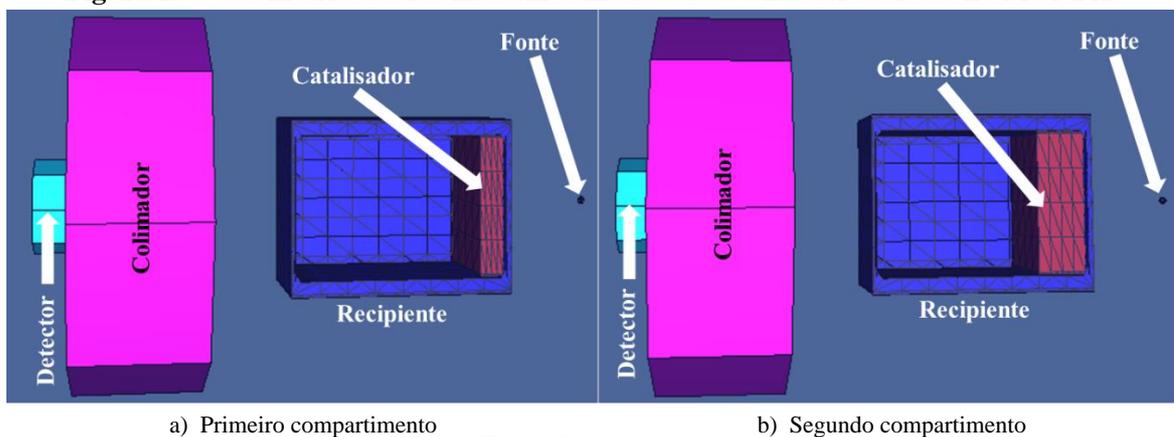
A variação das camadas de catalisador fixas, x_j , foi obtida a partir de uma progressão aritmética, representada por:

$$x_j = x_{j-1} + x_0, \text{ para } j = 1, 2, 3, \dots, N - 1, N. \quad (19)$$

sendo x_0 a espessura da camada com catalisador na primeira posição (12,75 mm) e $N=8$ é a quantidade de camadas criadas.

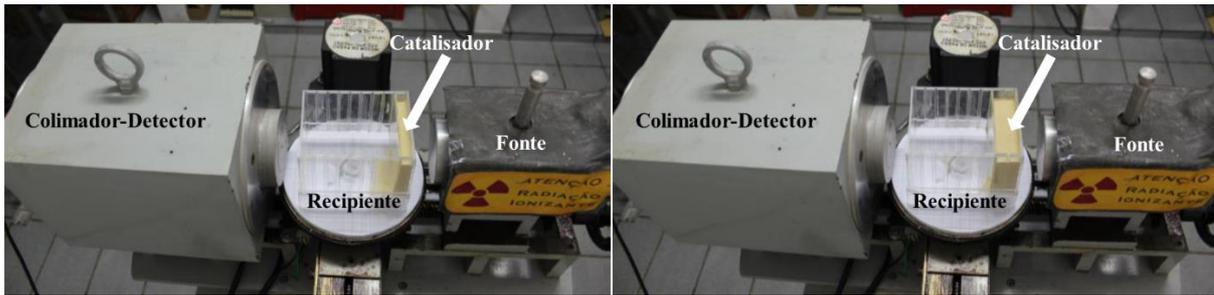
A critério de comparação, a representação do arranjo MCNPX (observado no software *vised.exe.*) e do arranjo experimental (OLIVEIRA, 2018) é vista, respectivamente, nas Figuras 29 e 30, onde observa-se a variação da espessura das camadas de catalisador no recipiente de acrílico, de forma a indicar a variação do volume de preenchimento da caixa, conforme a Equação 19, para o primeira e segunda camada, nesta ordem.

Figura 29 – Geometria do sistema com camadas de catalisador de FCC no MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Figura 30 – Arranjo experimental com camadas de catalisador de FCC no tomógrafo gama.



a) Primeiro compartimento

b) Segundo compartimento

Fonte: Adaptado de OLIVEIRA (2018).

Na finalidade de garantir maior confiabilidade nas simulações, foi escolhido para cada irradiação 10^7 histórias (100 milhões de histórias), que garante um erro relativo inferior a 2×10^{-3} para todos arquivos de saída. No total foram realizadas vinte simulações, sendo as duas primeiras com fontes de Cs-137 e Am-241 para irradiação do recipiente vazio, dezoito para irradiação do recipiente com camadas de catalisador, ou seja, nove simulações para cada fonte.

A partir de simulações do transporte de fótons gama pelo sistema formado por caixa de acrílico e catalisador (Figura 29) e com modificações na Equação 18, tem-se que a intensidade do feixe que percorre o recipiente de acrílico com catalisador, I_c (feixe de raios gama transmitido), poder ser expresso:

$$I_c = I_v e^{-\mu_c x_c} \quad (20)$$

em que μ_c é o coeficiente de atenuação linear do catalisador a ser analisado [cm^{-1}], x_c é a espessura da trajetória composta por catalisador [cm], e I_v é a intensidade do feixe que atravessa a caixa de acrílico vazia [W/cm^2], determinada por:

$$I_v = I_0 e^{-\mu_a x_a} \quad (21)$$

sendo, μ_a é o coeficiente de atenuação linear do material de acrílico [cm^{-1}]; I_0 é a intensidade da radiação inicial [W/cm^2], e x_a é a espessura de acrílico percorrida pela radiação ($x_a = 2x$).

Nos dados de saída das simulações, ao invés de utilizar as informações referentes a intensidade do feixe transmitido, I_v , definido pela Equação 21, foi levado em consideração as informações de atenuação no recipiente de acrílico nas mesmas condições, mas sem catalisador.

Modificando a Equação 20 e inserindo logaritmos neperianos em ambos os lados, obtém-se a equação da atenuação de raios gama para o catalisador, definida por:

$$\ln(I_v) = \ln(I_c) + \mu_c x_c \quad (22)$$

sendo I_c e I_v as intensidades do feixe que atravessam a caixa de acrílico nas simulações com e sem catalisador [W/cm^2], respectivamente, μ_c corresponde ao coeficiente de atenuação linear do catalisador a ser analisado [cm^{-1}], x_c a espessura da trajetória com catalisador [cm].

Reescrevendo a Equação 22, na forma da equação linear reduzida de uma reta, temos:

$$y_{mod} = b_0 + b_1 x \quad (23)$$

assim, a atenuação da radiação gama representada por $y_{mod} = \ln(l_c/l_v)$, $b_0 = 0$ e $b_1 = \mu_c$ o coeficiente de atenuação linear do catalisador.

Como visto na Equação 22, o coeficiente de atenuação linear pode ser estimado através de uma equação linear, desta forma, para os diferentes valores de intensidade relativa obtidos a partir da variação de espessuras criadas na caixa de acrílico, foi utilizado o método de Mínimos Quadrados Linear (MQL), que corresponde a um ajuste baseado na minimização dos erros residuais entre os pontos da curva e os dados determinados nas simulações, conforme OLIVEIRA, 2018.

Por meio do método MQL, que pode ser representado pela Equação 23, foi obtida a equação da reta que melhor representa os dados de atenuação adquiridos, com a finalidade de determinar os parâmetros b_1 , que representa o coeficiente de atenuação linear do catalisador de FCC em estado ativado.

3.8.2 Coeficiente de Atenuação Mássico do Catalisador

O coeficiente de atenuação linear apresenta uma outra desvantagem que é a de variar com o estado físico do material. A partir do cálculo da densidade aparente do catalisador, também chamada de densidade de *bulk* (OLIVEIRA, 2018) e da determinação do μ_c nas simulações MCNPX, conforme descrito na Subsecção 3.8.1, é possível obter o coeficiente de atenuação mássico do catalisador [cm^2/g].

Os valores do coeficiente de atenuação mássico para o catalisador de FCC, foram determinados por meio da seguinte equação:

$$\mu_m = \frac{\mu_c}{\rho} \quad (24)$$

em que μ_c é o coeficiente de atenuação linear do catalisador e ρ a densidade do meio. Em suma, serão obtidos valores de μ_m para o catalisador ativado (virgem) utilizando as fontes de Cs-137 e Am-241.

Além da comparação com os dados de OLIVEIRA (2018), as informações referentes a composição química e fração de massa para cada elemento que compõe o catalisador (Tabela 2), também permitem obter o μ/ρ através de simulações no software on-line *XCOM* do banco de dados NIST. O valor do μ/ρ extraído do *XCOM* pode ser multiplicado pelo valor do *bulk* da partícula de OLIVEIRA (2018) para obter-se o μ . Desta forma, tanto μ quanto μ/ρ são comparados com os dados mensurados nas simulações MCNPX, experimentos e *XCOM*.

3.8.3 Perfil da Atenuação Gama de Secções Radiais do *riser*

As simulações no código da tomografia por transmissão gama de secções radiais do tubo-*riser* representadas por onze arquivos acoplados no MCNPX (CFD1 à CFD10 e *Riser_Ar*), produzem, individualmente, uma matriz de dados com as atenuações sofridas pelas trajetórias do feixe gama ao passar pelo ar atmosférico (região externa), paredes do tubo e *grids* (região interna). Após a extração dessas informações, dadas em intensidade gama relativa [I/I_0], são organizadas planilhas de dados com 13 colunas contendo 212 linhas cada. A partir dos valores médios de atenuação inseridos em uma décima quarta coluna, determina-se a atenuação relativa do feixe em função do raio normalizado do *riser* (r/R).

Algumas das informações obtidas através da tomografia gama experimental realizada na primeira mesa da UPF por OLIVEIRA (2018) para o *riser* vazio e com abertura de válvula constante, tendo a vazão volumétrica de gás como parâmetro de variação, podem ser comparadas com os dados determinados nas simulações para tubo com ar e com o arquivo CFD9. Desta forma, simulações envolvendo a transmissão gama são validadas por experimentos.

Além destes, os demais arquivos presentes na Tabela 3, tiveram o perfil radial de atenuação gama em função de r/R obtidos e comparados. Assim, obtém-se figuras com gráficos representados pela atenuação relativa da radiação em função do raio normalizado do *riser* para os arquivos: *Riser_Ar*, CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4; outras para o grupo de arquivos de dados para CFD5, CFD6 e CFD7 e, também, CFD8, CFD9 e CFD10. Os três grupos de arquivos são separados de acordo com os parâmetros de entrada de gás-sólidos no sistema e representam fatias em alturas diferentes do *riser*, ou seja, dentro de cada uma das três divisões de arquivos, apenas, se variou as alturas para obtenção de dados.

3.8.4 Fração Volumétrica de Sólidos e Gás em Secções Radiais do *Riser*

Os resultados das simulações, obtidos no procedimento descrito na Subsecção 3.8.3, fornecem os valores da atenuação sofrida por cada trajetória do feixe ao passar por segmentos do *riser* vazio (INP_v) e em condição de fluxo (INP_F). Estes dados são provenientes do escaneamento com raios gama dos arquivos *Riser_Ar* e CFDs importadas, respectivamente. O valor do coeficiente de atenuação mássico [m^2/kg] calculado na Subsecção 3.8.2, e a densidade da partícula de 1190 kg/m^3 são introduzidos na Equação 2, para determinar a fração volumétrica de sólidos na secção radial (\mathcal{E}_{sr}). A determinação das cordas internas (Figura 2), C , do *riser* decorrentes da varredura radial por transmissão gama [m], definidas por:

$$C = 2(\sqrt{R^2 - r^2}), \text{ para } -R \leq r \leq R \quad (25)$$

no qual R e r são respectivamente, o raio interno e o intervalo de varredura radial no *riser* da UPF [m].

Como já foi dito, a tomografia da secção transversal do *riser* simulada no MCNPX permite obter uma matriz de dados de intensidade relativa [I/I_0] para as diferentes trajetórias da radiação, que são correspondentes ao tamanho das cordas internas do tubo calculadas pela Equação 25. Portanto, ao contrário das medidas de gradiente de pressão que fornecem valores médios, o escaneamento gama tem a vantagem de determinar, de forma direta, a fração volumétrica de sólidos em uma região específica do *riser* e, conseqüentemente, a fração volumétrica média de sólidos presente em cada arquivo CFD. A partir disso, também é possível obter o perfil referente a este parâmetro fluidodinâmico em diferentes secções radiais do *riser* em função da altura do mesmo.

Com os dados provenientes de \mathcal{E}_{sr} e a aplicação de modificações na Equação de DAVIDSON (2000), é possível determinar a fração volumétrica de gás, também chamada de fração de vazios (\mathcal{E}_{gr}), em secções transversais do *riser* dada pela Equação 26.

$$\mathcal{E}_{gr} = 1 - \mathcal{E}_{sr} \quad (26)$$

onde \mathcal{E}_{rs} é fração volumétrica de sólidos na secção radial do tubo-*riser*. Assim como é possível obter a fração média de sólidos das secções, também, pode-se determinar a fração média de vazios para cada imagem CFD.

Portanto, a partir das informações apresentadas, é possível criar figuras com perfil da fração volumétrica de sólidos e gás em função do raio interno (r/R) ou da altura do *riser* para os arquivos CFD1 à CFD10. Além disso, a fração volumétrica de sólidos radial determinada

nas simulações MCNPX de CFD5 à CFD7 são comparadas com valores experimentais de SANTOS (2013) e dados de simulações numéricas no *Ansys Fluent* de LIMA FILHO (2014). E as determinadas na CFD8 a CFD10 são relacionadas com as simulações no *SolidWorks* de CLAUDINO *et al.* (2018) e experimentos de OLIVEIRA (2018). Todos os dados são referentes a secções radiais do tubo-*riser* da UPF instalada no Laboratório de Ensaaios não Destrutivos e Fluidodinâmica Dr. Cornelius Keller do DEN-UPFE.

3.8.5 Perfil Radial da Velocidade *Slip*

A velocidade de *slip*, v_s , foi utilizada por DAVIDSON (2000) para estudar o padrão de escoamento núcleo – anular em sistema de leito fluidizado circulante. É calculada pela Equação 9, onde tem-se a diferença entre u_g e u_s , que são, respectivamente, a velocidade da fase gasosa e sólida [m/s]. Conforme descrito na subsecção 3.8.4, o perfil radial da fração volumétrica de sólidos (ϵ_{sr}) e gás (ϵ_{gr}) é determinado por meio do tratamento dos dados MCNPX, com ambos introduzidos nas Equações 7 e 10.

Além dos valores de ϵ_{sr} , para obtenção de u_s (Equação 7), é preciso ter o conhecimento da taxa de massa de sólidos no *riser* [kg/s] (fornecida na Tabela 3), da densidade da partícula, ρ_s , [kg/m³], cujo valor é 1190 kg/m³ (LIMA FILHO, 2014) e, também, da área da secção radial do tubo-*riser* [m²]. Por se tratar de um cilindro circular reto, o valor de A, área do *riser*, pode ser obtido pela seguinte expressão:

$$A = \pi \cdot r^2 \quad (27)$$

onde r é o raio interno do *riser* [m] e π é pi, cujo valor aproximado é 3,14.

Desta forma, são construídos os perfis radiais da velocidade de sólidos para todas as imagens CFD importadas para o código MCNPX.

Na Tabela 3, têm-se os valores de entrada do ar comprimido [L/min] para os três grupos de arquivos CFD. A obtenção do valor da vazão mássica da fase gasosa, \dot{m}_g , [kg/s] (Equação 10), é feita através da conversão da unidade L/min para kg/s (Tabela 3), realizada a partir do conhecimento da densidade do ar comprimido (Tabela 4). Assim, o produto de L/min pela densidade do ar, acrescentado de uma razão de 60, permite obter os valores de \dot{m}_g para os três grupos de imagens CFD, sendo 0,0266 kg/s da CFD1 à CFD4; 0,0100 kg/s da CFD5 à CFD7 e 0,0120 kg/s da CFD8 à CFD10. Portanto, com os valores do perfil da ϵ_{gr} , o valor de A (Equação 27) e a densidade do gás [kg/m³], é possível determinar o perfil radial da velocidade do gás para todas as imagens importadas.

Quando ambas as velocidades são introduzidas na Equação 9, obtém-se o perfil radial da velocidade *slip* e uma avaliação quantitativa do padrão de escoamento bifásico.

3.8.6 Densidade ou Concentração de Sólidos ao Longo do *Riser*

Um outro parâmetro que também pode ser mensurado nas simulações, é a concentração radial de sólidos, C_{sr} , dada em $[\text{kg}/\text{m}^3]$, que é consequência do produto das medidas de fração volumétrica, ϵ_{sr} , pela densidade da partícula $[\text{kg}/\text{m}^3]$, podendo ser calculada por:

$$C_{sr} = \rho_p \epsilon_{sr} \quad (28)$$

em que ρ_p é a densidade do sólido $[\text{kg}/\text{m}^3]$ e ϵ_{sr} é calculada pela Equação 2.

Desta maneira, é possível obter a densidade de sólidos nas secções radiais do *riser* para os dez arquivos CFD. E a partir da concentração média nestas secções determina-se o perfil da concentração em função da altura do tubo-*riser*.

A forma aqui utilizada para obter o perfil axial da concentração de sólidos no *riser* é por meio do produto dos valores médios das frações volumétricas de sólidos transversais pelo o valor de $1190 \text{ kg}/\text{m}^3$, ou seja, o valor da densidade da partícula (LIMA FILHO, 2014; BERTONY *et al.*, 2017).

3.9 RECONSTRUÇÃO DAS IMAGENS

A distribuição espacial de densidades no plano que é definido pelo o número de vistas e trajetórias utilizadas na simulação da tomografia, descrita no item 3.6, é o que possibilita a reconstrução. Deste modo, os valores extraídos das simulações de transmissão gama, referentes ao *riser* vazio e com presença de fluxo bifásico, são adicionados ao algoritmo de reconstrução que utiliza a Técnica de Reconstrução Algébrica Multiplicativa (MART – *Multiplicative Algebraic Reconstruction Technique*).

A partir de valores calculados, é possível reconstruir imagens de perfis radiais do *riser* com diferentes distribuições de catalisador. As reconstruções algébricas são feitas por meio da utilização do algoritmo MART, que é derivado do algoritmo de Reconstrução Algébrica com Correção Aditiva (ART – *Algebraic Reconstruction Technique*). O MART é aplicado, principalmente quando se dispõe de um número limitado de dados (VERHOEVEN, 1993).

Segundo OLIVEIRA (2011), vários estudos apontam o MART como mais rápido, mais flexível e de melhor acurácia quando comparado ao ART. Além disso, como tratado no item

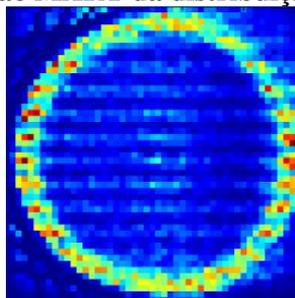
2.4, este método já vem sendo aprimorado há certo tempo, inclusive, foi utilizado em trabalhos recentes (GUEDES, 2016 e OLIVEIRA, 2017), apresentado resultados bastante satisfatórios.

3.9.1 Comparação de Secções Radiais do *Riser* Reconstruídas Com Imagens CFD

A partir das projeções tomográficas das secções radiais do *riser*, representadas por arquivos CFD importados, inseridos e simulados dentro do MCNPX (ver Tabela 3), é possível visualizar a distribuição radial de sólidos e comparar com a imagem CFD correspondente.

De início, as imagens reconstruídas no MART, apresentavam as partes referentes a distribuição de catalisador e parede do tubo com baixa resolução (baixa qualidade) causada, na maioria das vezes, por ruídos, como pode ser visto na Figura 31. O principal motivo dos ruídos está ligado ao fato da versão antiga do MART ter sido utilizada no Grupo de pesquisa para reconstruir imagens estáticas de arranjos com número limitado de componentes, conforme pode ser visto nos estudos de GUEDES (2016) e OLIVEIRA (2017).

Figura 31 – Exemplo da reconstrução MART da distribuição de catalisador no interior do *riser*.



Fonte: Próprio autor.

Contudo, foi preciso realizar modificações no algoritmo MART para otimizar os resultados de saídas das reconstruções de secções radiais e atender as necessidades do estudo atual. Assim, foi usada uma distribuição em polinômios a base do método de Chebychev (HEUERT e KHATCHATOURIAN, 2003). A introdução deste método interferiu significativamente na redução do tempo computacional necessário para geração de arquivos reconstruídos e, também, otimizou a qualidade dos mesmos, que permitiu uma visualização da distribuição de sólidos e gás, possibilitando uma melhor comparação entre as imagens CFD com as reconstruídas no MART.

A qualidade das imagens reconstruídas foi analisada através do Erro Médio Quadrático (RMSE), que é uma métrica equivalente à avaliação dos erros totais (GUEDES, 2016; OLIVEIRA, 2017). Em muitos estudos encontra-se o uso desta métrica no cálculo de erros. MAAD e JOHANSEN (2008) como MOSOROV *et al.* (2011) utilizam o RMSE para avaliar a qualidade da imagem obtida num tomógrafo.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados dessa dissertação são apresentados e discutidos nesta secção e se encontram divididos em três subdivisões. A primeira trata de dados determinados através de simulações da transmissão gama no MCNPX, onde se tem o coeficiente de atenuação linear e mássico da partícula e o perfil da intensidade gama para secções radiais do *riser*; a segunda aborda a obtenção de parâmetros fluidodinâmicos nas secções radiais e axial do tubo, como a fração volumétrica de sólidos e gás, velocidade de *slip* e concentração axial de sólidos; a terceira explana a análise qualitativa da distribuição radial de gás-sólidos por meio das reconstruções de imagens tomográficas no algoritmo MART otimizado.

4.1 DADOS DETERMINADOS ATRAVÉS DA SIMULAÇÃO DA TRANSMISSÃO GAMA NO MCNPX

O procedimento de importação de arquivos CFD para MCNPX e varreduras tomográficas, vistos nos Itens 3.4 ao 3.7, possibilitou a obtenção de informações referentes à tomografia por transmissão gama para onze arquivos simulados. Além disso, por meio da metodologia utilizada na Subsecção 3.8.1 e 3.8.2, determinaram-se os coeficientes de atenuação linear e mássico para o catalisador de FCC em estado ativado. Assim, os resultados para atenuação gama são apresentados na mesma ordem das três primeiras subsecções do item 3.8.

4.1.1 Coeficiente de Atenuação Linear do Catalisador

Conforme a metodologia descrita na Subsecção 3.8.1, foram determinados valores de atenuação do feixe de radiação gama em função das variações de espessura das camadas de catalisador inseridas no recipiente de acrílico.

A relação de dependência linear entre os valores de atenuação da radiação e a variação da espessura das camadas de catalisador foi determinada pelo erro relativo médio das simulações ($\bar{x}_{\text{médio}}$), cujo valor encontrado foi 0,0003 para as simulações com fonte de amerício (Am-241), ou seja, 99,97% de $\bar{x}_{\text{médio}}$ estar no intervalo de $1 \pm 3R$. Já as simulações com a fonte de Césio (Cs-137), o erro relativo médio foi de 0,0001, sendo 99,99% de probabilidade de $\bar{x}_{\text{médio}}$ estar no intervalo de $1 \pm 3R$. Portanto, segundo a Tabela 5, em ambos os casos foi demonstrada boa precisão nos dados determinados pelas simulações com todos os valores de R inferiores a 0,05.

Ainda segundo o apresentado na Subsecção 3.8.1, a lei de *Beer-Lambert* pode ser escrita como uma função linear, dessa forma, o modelo matemático escolhido para representar os dados simulados foi o de Mínimos Quadrados Linear (MQL), com finalidade de determinar os parâmetros da equação da reta, onde o coeficiente angular b_1 , representa o coeficiente de atenuação linear, μ . Os valores de b_1 , que representam μ obtidos com as simulações MCNPX, foram comparados com os determinados em experimento de OLIVEIRA (2018), bem como em cálculos a partir do valor fornecido pelo banco de dados NIST XCOM (2019), sendo todos obtidos pela irradiação do catalisador em estado ativado por fótons monoenergéticos com energia de 0,06 MeV e 0,662 MeV, que corresponde às energias emitidas pelos radioisótopos Amerício-241 e Césio-137, são dados na Tabela 6 com as suas respectivas incertezas expandidas.

Tabela 6 – Comparação dos valores do coeficiente de atenuação linear, utilizando fonte de Am-241 e Cs-137, para o catalisador ativado, associado as suas respectivas incertezas expandidas.

| Fonte Radioativa | Coeficiente de Atenuação Linear (cm ⁻¹) | | |
|------------------|---|-----------|-------------------------------|
| | Média das Simulações MCNPX | NIST XCOM | Experimental (OLIVEIRA, 2018) |
| Am-241 | 0,3115 ± 0,0007 | 0,3129 | 0,3159 ± 0,0092 |
| Cs-137 | 0,0638 ± 0,0009 | 0,0624 | 0,0706 ± 0,0044 |

Fonte: Próprio autor.

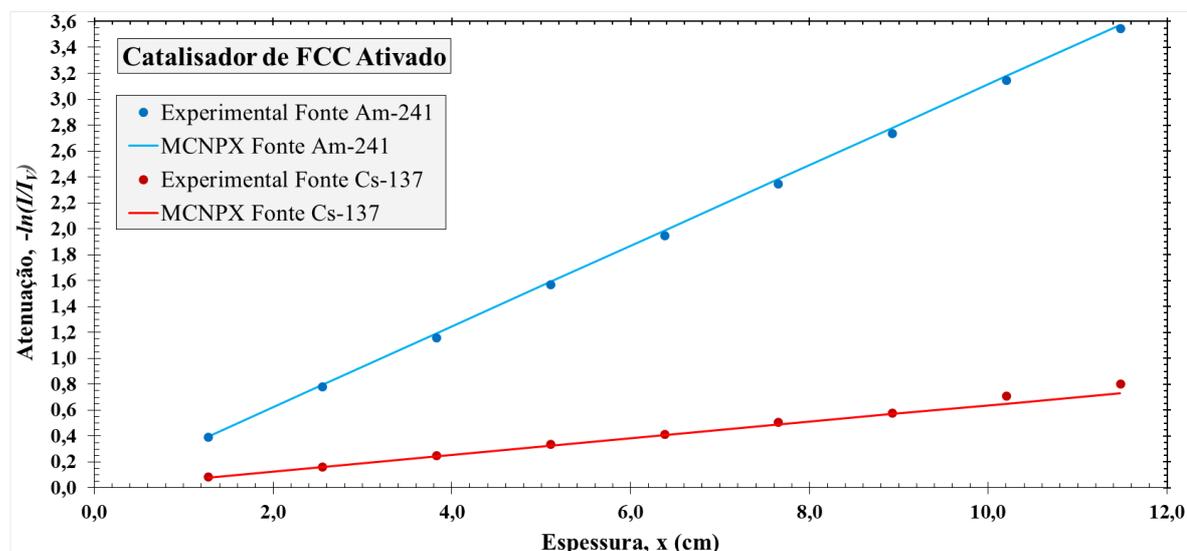
Através de cálculos analíticos, o erro relativo referente as medidas feitas com fonte de Am-241, para o coeficiente de atenuação linear do catalisador de FCC, encontrado para o valor simulado e o de referência do *NIST* é de 0,45%. O erro relativo entre a média simulada e a média experimental é de 1,41%.

O erro relativo das medidas feitas com fonte de Cs-137, para o coeficiente de atenuação linear do catalisador, encontrado para o valor simulado e o de referência do *NIST* é 2,19%. Já para média simulada e a média experimental é de 3,76%.

A partir da comparação entre os dados da Tabela 6, que foram mensurados em diferentes plataformas de medidas e da análise de erro, nota-se que as simulações no MCNPX demonstraram ter êxito na obtenção do coeficiente de atenuação linear para o catalisador utilizado no *riser* da UPF, pois existe um bom grau de exatidão entres os valores estimados nas simulações MCNPX com os dados extraídos do XCOM e reproduzidos em experimentos.

Na Figura 32 é mostrado o gráfico de dispersão dos dados simulados (linhas) e experimentais (pontos) para o catalisador irradiado com fonte de Cs-137 e Am-241

Figura 32 – Comparação da atenuação do catalisador ativado utilizando fontes de Am-241 e Cs-137.



Fonte: Próprio autor.

A qualidade do ajuste demonstrado na Figura 32, foi quantificada pelo coeficiente de determinação. O valor de r^2 encontrado foi de 0,9999 e 0,9999, para o catalisador irradiado com Am-241 e Cs-137, nesta ordem, indicando que a reta de regressão encontrada é capaz de explicar 99% dos dados.

No experimento realizado por OLIVEIRA (2018), os valores de r^2 obtidos através da irradiação do catalisador ativado por fontes de Am-241 e Cs-137, foram de 0,9999 e 0,9967, respectivamente. Assim, a reta de regressão encontrada no experimento também foi capaz de explicar 99% dos dados da população. Ou seja, em ambos os casos o valor de r^2 é muito próximo da unidade, atestando o bom funcionamento do modelo proposto.

4.1.2 Coeficiente de Atenuação Mássico do Catalisador

O coeficiente de atenuação mássico (μ/ρ) é obtido da divisão do coeficiente de atenuação linear pela densidade do material. Na Tabela 6 tem-se o μ , então foi necessário recorrer a informações presentes na literatura para obter o valor de ρ do catalisador [g/cm^3]. Por ser um pó (pó de Geldart de classe A), a densidade utilizada para este material é a densidade de empacotamento (*bulk*), esta foi encontrada no experimento realizado por OLIVEIRA (2018), que consistiu em inserir as partículas no interior de um recipiente cilíndrico de dimensões conhecidas e, a partir de cálculos envolvendo a determinação do volume interno desse recipiente, se chegou ao valor da densidade de bulk, sendo esta $0,8333 \text{ g}/\text{cm}^3$. Desta forma, através da razão entre μ pelo valor de bulk do catalisador, determinou-se o coeficiente de atenuação mássico [cm^2/g] para o catalisador irradiado nas simulações com Am-241 e Cs-137.

Na Tabela 7, tem-se a comparação dos μ/ρ obtidos no banco de dados NIST através da introdução dos dados da Tabela 2, com experimento de OLIVEIRA (2018) e dados MCNPX.

Tabela 7 – Comparação dos valores do coeficiente de atenuação mássico, utilizando fonte de Am-241 e Cs-137 para o catalisador FCC, associado as suas respectivas incertezas expandidas.

| Fonte Radioativa | Coeficiente de Atenuação Mássico (cm^2/g) | | |
|------------------|---|-----------|-------------------------------|
| | Média das Simulações MCNPX | NIST XCOM | Experimental (Oliveira, 2018) |
| Am-241 | $0,3738 \pm 0,0009$ | 0,3770 | $0,3791 \pm 0,0047$ |
| Cs-137 | $0,0765 \pm 0,0011$ | 0,0704 | $0,0847 \pm 0,0053$ |

Fonte: Próprio autor.

O erro relativo, para o coeficiente de atenuação mássico do catalisador em estado ativado, encontrado para o valor simulado com fonte de Am-241 e o de referência no XCOM é de 0,86%. O erro relativo entre a média das simulações e experimental é de 1,4% para o mesmo radioisótopo. No caso dos valores do erro para os procedimentos envolvendo a fonte de Cs-137, é de 7,97% para simulação e NIST XCOM. E entre simulação e experimento é de 3,79%.

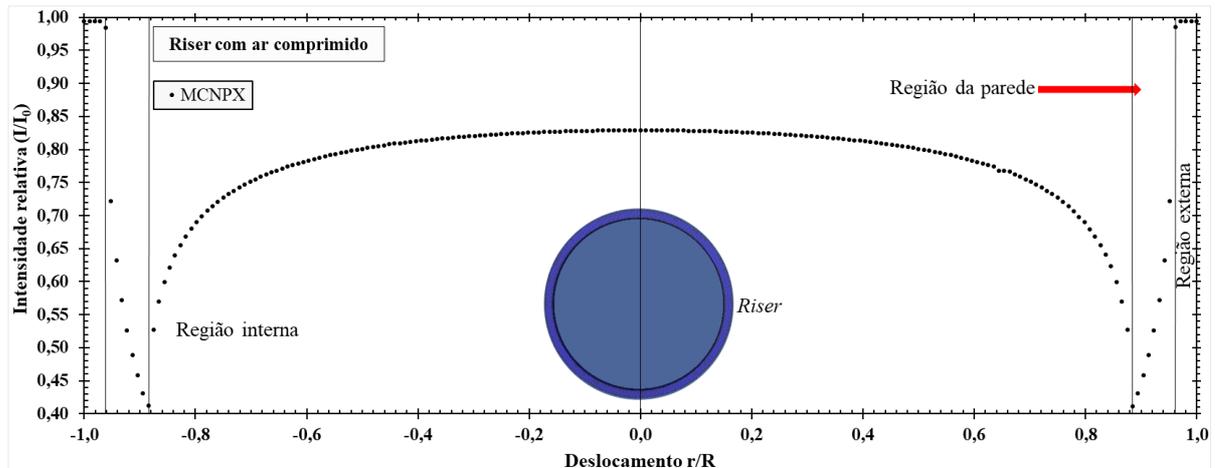
A comparação entre os erros mostra uma diferença praticamente insignificante entre os valores obtidos por simulações, experimento e no XCOM. Desta forma, a metodologia utilizada no código MCNPX pode ser utilizada na determinação de coeficientes de atenuação linear e mássico de catalisadores de FCC.

No entanto, os resultados da análise comparativa de erro para fonte de Cs-137, tanto para o μ quanto para o μ_m , foram superiores aos obtidos para fonte de Am-241, que pode ser explicável devido a elevada energia do feixe oriundo da fonte de césio-137. Isto pode indicar uma baixa secção de choque do catalisador para altas energias, ou seja, na maior parte das irradiações, praticamente, não haviam interações entre os fótons e o pó Geldart de classe A.

4.1.3 Perfil da Atenuação Gama em Secções Radiais do *Riser*

Conforme descrito na Subsecção 3.5, introduziu-se no código fatias radiais do *riser* da UPF com ar e com diferentes distribuições bifásicas, representadas por imagens CFDs importadas dos softwares *Ansys Fluent* e *SolidWorks*. Isso possibilitou a determinação de valores de intensidade relativa da radiação $[I/I_0]$ para I_V e I_F , sendo intensidade gama do *riser* vazio e intensidade gama relativa do *riser* em condição de escoamento, respectivamente. Através da tomografia gama MCNPX, foi determinado primeiro o valor de I_V , que pode ser visto no gráfico da Figura 33, representado pelo o perfil de intensidade da radiação relativa ao passar pela secção do *riser* com gás em função do raio normalizado do mesmo (r/R).

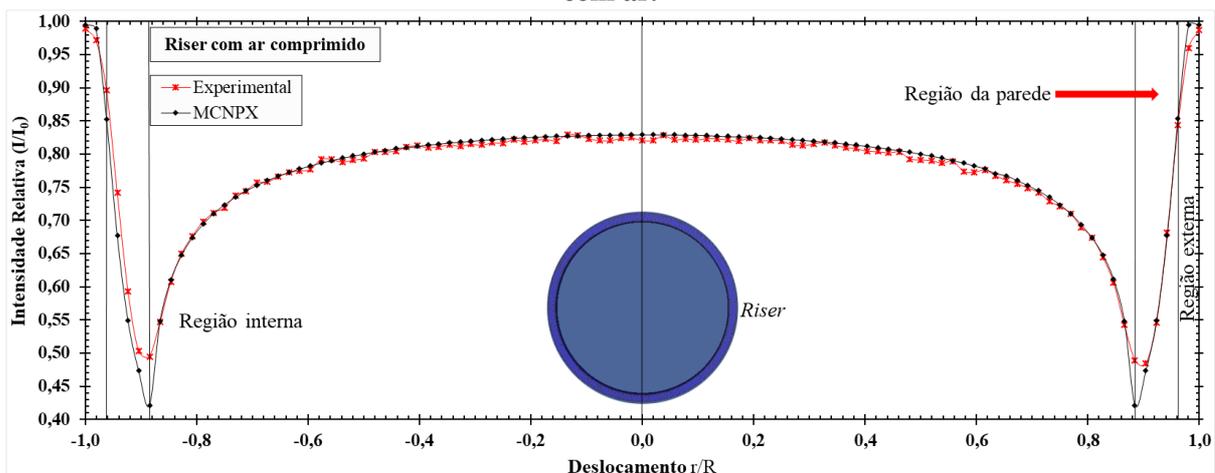
Figura 33 – Perfil radial de intensidade gama relativa para o riser vazio com dados do MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

O gráfico da Figura 33 foi obtido através da irradiação tomográfica simulada no código, possui 209 pontos determinados pela mesma quantidade de trajetórias do feixe emitido, que corresponde ao tamanho aplicado no passo de 0,5 mm. Esses dados foram comparados com dados experimentais, onde também foi utilizada a tomografia por transmissão gama, porém com resolução do corte de 1,0 mm. Então, para garantir uma boa comparação, foram selecionados os pontos do gráfico da Figura 33 correspondentes aos intervalos de varredura obtidos no escaneamento experimental de OLIVEIRA (2018). Os perfis da intensidade gama da secção radial do riser com ar, obtidos nas simulações e experimento são dados na Figura 34.

Figura 34 – Comparação entre dados experimentais e MCNPX para a tomografia gama do riser com ar.



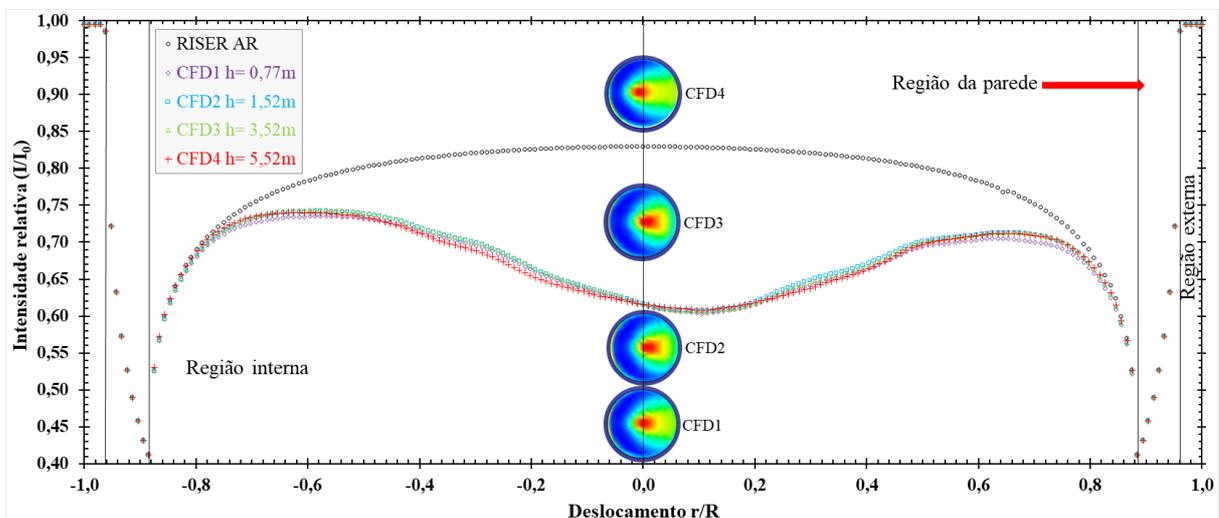
Fonte: Próprio autor.

Nas Figuras 33 e 34, são vistas as atenuações gama de três regiões bem definidas: região externa, da parede e interna. Na região externa a atenuação gama é mínima, pois não ocorreu a interação do feixe gama com o objeto irradiado. Na região da parede do tubo existe uma

atenuação máxima, que pode ser explicada pela modelo físico da Corda abordado por BRITO *et al.* (2013). Na região interna, atenuação é máxima próxima a parede do tubo e conforme o feixe segue para o centro geométrico do *riser* existe uma redução gradual da atenuação. Como visto na curva da intensidade presente no gráfico da Figura 34, nota-se uma ótima convergência entre dados experimentais e simulados para região interna do *riser*. Porém, na região da parede há uma pequena discrepância entre estas medidas, que pode ser explicada, segundo GUEDES (2016), pelo efeito da borda. De acordo com GRASSLER e WIRTH (1999), isso decorre do erro referente à distribuição de Poisson, uma vez que o número da contagem de fótons diminui bruscamente na região da parede, sendo as simulações MCNPX mais sensíveis a tais mudanças.

Após a validação dos dados determinados no código por dados experimentais de OLIVEIRA (2018) para o tubo-*riser* vazio, onde determinou-se os valores de I_v com exatidão, foram analisados dados das importações dos arquivos CFD pertencentes ao grupo de imagens iniciada com CFD1 e terminada na CFD4, estas simulam as condições operacionais descritas na Tabela 3. Isto possibilitou, através da técnica abordada no primeiro parágrafo desta subsecção, a obtenção do I_F , ou seja, o perfil radial da intensidade gama para as quatro distribuições de ar-sólidos em diferentes alturas do reator. Desta maneira, as informações de I_F foram extraídas para cada uma das quatro secções radiais e, em seguida, tiveram seus valores sobrepostos num único gráfico junto do perfil de I_v . A critério de comparação entre os diferentes perfis, observa-se na Figura 35, I/I_0 (eixo vertical) para *Riser_Ar* e *Riser* com sólidos em função do deslocamento normalizado por r/R (eixo horizontal), tendo às alturas das fatias como fator de variação, sendo CFD1 (0,77m), CFD2 (1,52m), CFD3 (3,52m) e CFD4 (5,52m).

Figura 35 – Perfil radial da intensidade da radiação gama nas condições com e sem fluxo de catalisador para o *riser* com ar e arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4.

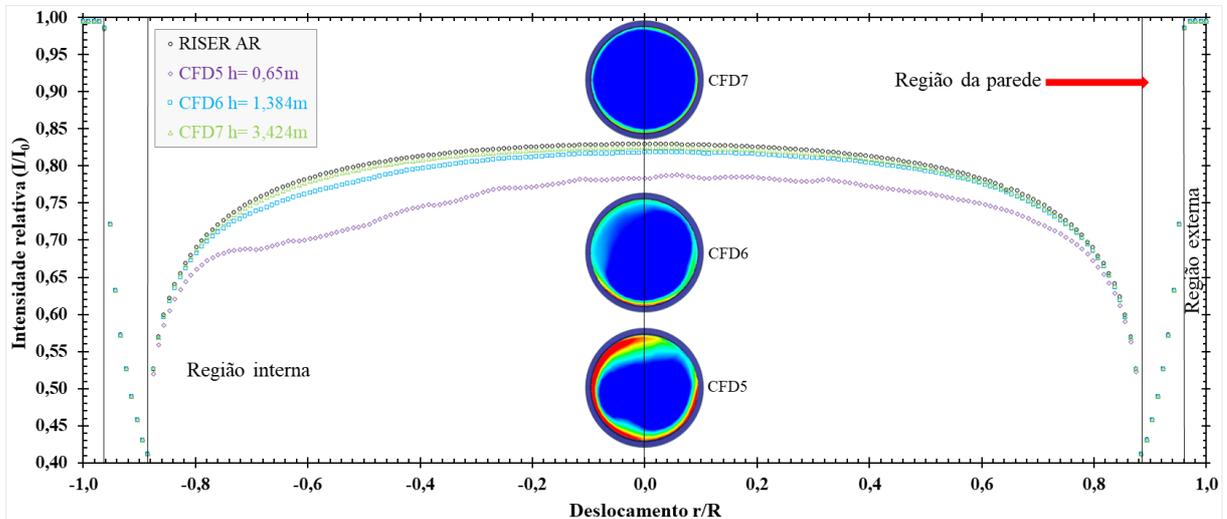


Fonte: Próprio autor.

Na região interna do *riser* com fluxo bifásico, vista no gráfico da Figura 35, observa-se uma maior atenuação do feixe gama na região central das imagens (próximo ao centro geométrico), onde a diferenciação entre as curvas de atenuação é mínima, porém, conforme o feixe gama se distancia do centro das imagens, é possível distinguir as diferentes atenuações sofridas pelos fótons na interação com os *grids* (pixels) de ar-sólidos presente nos arquivos, voltando a ter diferenciação mínima na região próxima a parede do tubo, pois nesta parte a densidade é constante. Isto ocorre devido as condições operacionais de escoamento introduzidas por SOUZA NETTO *et al.* (2013) nas simulações do *Ansys Fluent*, onde a elevada vazão de gás e entrada de sólidos produziu uma região central com alta concentração de sólidos.

As simulações MCNPX dos arquivos *Riser_Ar*, CFD5 (0,65m), CFD6 (1,384m) e CFD7 (3,424m), produziram também a figura do gráfico com a comparação dos perfis radiais da atenuação gama para as diferentes alturas. Assim como no caso anterior, a intensidade gama relativa é representada no eixo vertical e está em função do raio normalizado do tubo-*riser* (Figura 36).

Figura 36 – Perfil radial da intensidade da radiação gama nas condições com e sem fluxo de catalisador para o *riser* com ar e arquivos CFD5, CFD6 e CFD7.



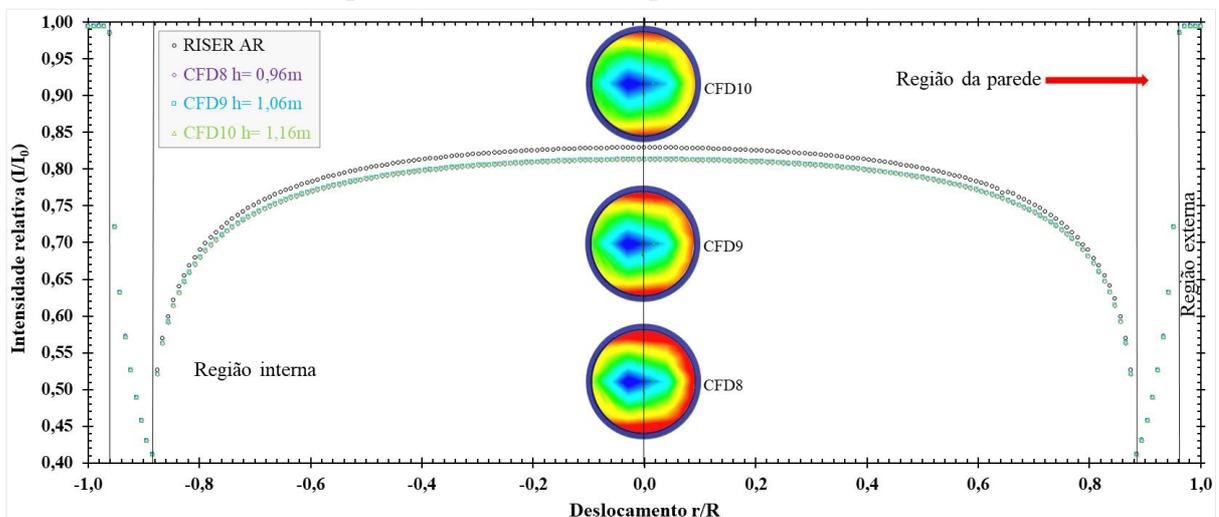
Fonte: Próprio autor.

Ao contrário do que se viu no gráfico da Figura 35, o acoplamento e simulação da tomografia gama das três imagens produziu curvas de atenuação bem diferenciadas, que pode ser consequência das condições operacionais inseridas por LIMA FILHO (2014) nas simulações CFD do *Ansys Fluent*, onde a entrada dos sólidos de 0,0620 kg/s e a vazão do gás de 500L/min criaram três regiões distintas, sendo elas: região de maior atenuação com a curva do perfil de intensidade gama relativa irregular para o CFD5, região de atenuação moderada

com a curva do perfil da interação da radiação pouco diferenciada para CFD6 e, para o arquivo CFD7 é identificada uma região de atenuação mínima com perfil gama semelhante ao do *riser* com ar, caracterizado pela uniformidade da transmissão gama em ambos os lados da figura. Portanto, conforme aumentava-se a altura de medição, mais fótons atingiam a superfície de detecção. Porém, em todas as imagens, a atenuação próxima a parede do tubo teve uma diferenciação mínima, ou seja, caracterizando uma maior concentração de sólidos nesta região.

As informações do escaneamento por transmissão gama para os arquivos *Riser_Ar*, CFD8, CFD9 e CFD10, onde as imagens CFD representam, respectivamente, as alturas de 0,96m, 1,06 m e 1,16m, também foram extraídas. Essas imagens foram adquiridas através de simulações CFD dentro do software *SolidWorks* (SW) em *loop* fechado no *riser* da UPFV. Apesar das secções radiais estarem separadas uma das outras por uma distância de 0,1m, observa-se uma sensível diferenciação dos perfis da intensidade gama relativa para estas secções, indicando uma variação mínima na concentração de sólidos entre 0,96m e 1,16m (Figura 37). Assim, define-se três regiões, sendo a externa com atenuação mínima da radiação, a da parede apresenta atenuação máxima na região da corda e região interna que possui o perfil gama relativo decrescente até o centro da secção. O mesmo comportamento foi apresentado na tomografia experimental executada por OLIVEIRA (2018), porém no caso do experimento manteve-se à altura de medição constante, alterando apenas os parâmetros de entrada. Portanto, o comportamento dos perfis de atenuação das três imagens (CFD8 à CFD10) confere com o perfil da experimentação, onde a entrada de ar foi de 600 L/min e abertura de válvula de 54%.

Figura 37 – Perfil radial da intensidade da radiação gama nas condições com e sem fluxo de catalisador para o *riser* com ar e arquivos CFD8, CFD9 e CFD10.



Fonte: Próprio autor.

4.2 OBTENÇÃO DE PARÂMETROS FLUIDODINÂMICOS

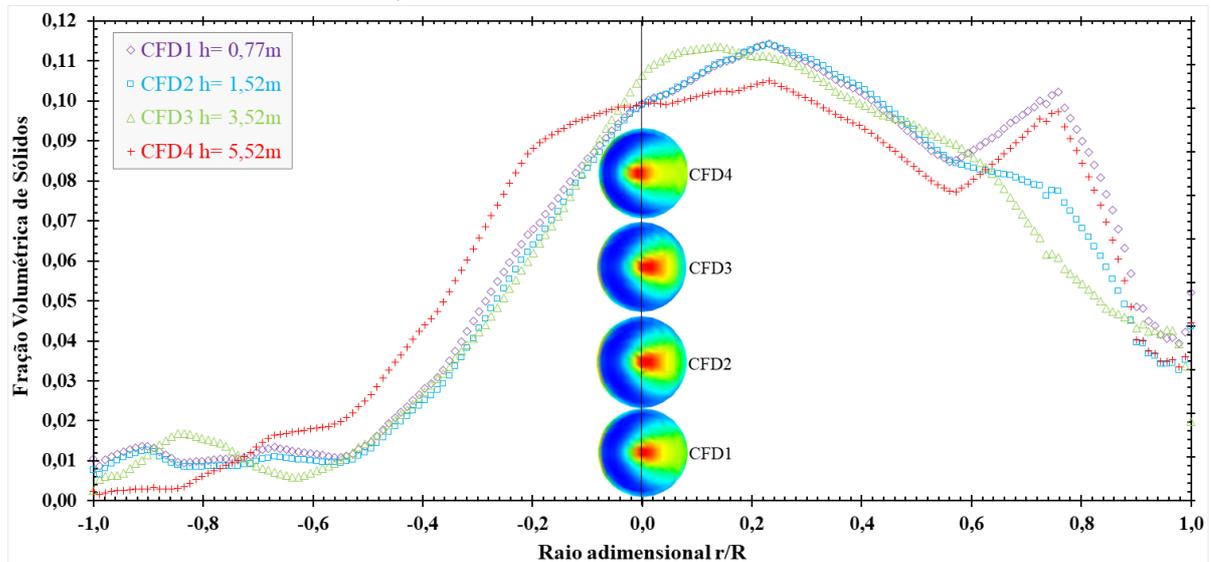
Os procedimentos descritos nas Subsecções 3.8.4 à 3.8.6, possibilitaram a obtenção de parâmetros fluidodinâmicos em secções radiais e axial do *riser* da UPF, como, por exemplo, concentração de sólidos e fração volumétrica de gás e sólidos.

4.2.1 Fração Volumétrica de Sólidos e Gás em Secções Radiais do *Riser*

A introdução na equação da fração volumétrica de sólidos (Equação 2) de valores referentes ao coeficiente de atenuação linear do catalisador obtido na simulação MCNPX com fonte de Am-241, cujo valor é de $0,3115 \text{ cm}^{-1}$; da densidade da partícula (ρ_p), vista na literatura como sendo de $1,190 \text{ g/cm}^3$; do valor da corda (C) para cada trajetória do feixe no interior do *riser* (Equação 25), mais os valores de I_v e I_F , que foram extraídos das informações obtidas nas simulações da tomografia gama (Subsecção 4.1.3), permitem à determinação do perfil radial da fração volumétricas de sólidos presente em cada fatia do *riser* para diferentes alturas.

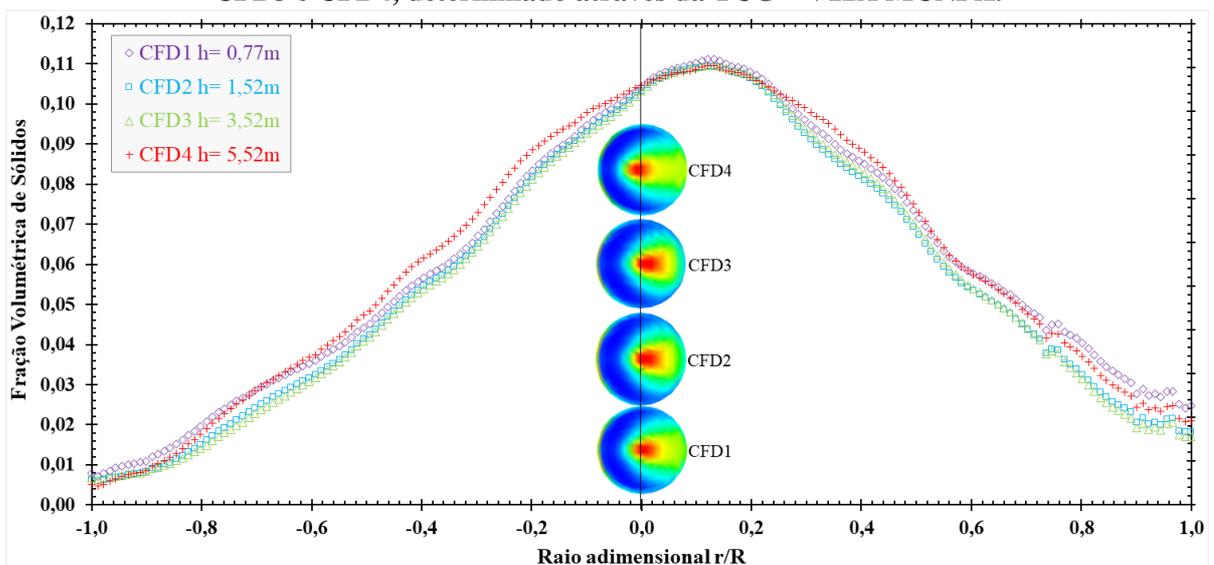
Nas Figuras 38 e 39, se tem a comparação desse parâmetro fluidodinâmico em função do raio adimensional do *riser* (r/R), onde a fração radial de sólidos foi determinada através das informações extraídas da simulação da Tomografia Computadorizada Gama com Varredura de 1 Ângulo (TCG – V1Â), ou seja, procedimento idêntico ao experimental (Figura 38). Como abordado no Item 3.3, para ampliar a capacidade de investigação, também, foi executada a Tomografia Computadorizada Gama com Varredura de 12 Ângulos (TCG – V12Â) (Figura 39). Ambas varreduras foram para os arquivos CFD1 (0,77m), CFD2 (1,52m), CFD3 (3,52m) e CFD4 (5,52m). É importante salientar que no eixo horizontal dos gráficos das Figuras 38 e 39, só é levada em consideração a região interna do *riser* que corresponde a área das imagens CFD estudadas.

Figura 38 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado através da TCG – V1Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Figura 39 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado através da TCG – V12Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Observa-se, tanto na Figura 38 quanto na Figura 39, o perfil da distribuição radial da fração volumétrica de sólidos não uniforme, evidenciando a formação de duas regiões distintas de catalisador: uma região menos concentrada próxima as paredes do *riser* e uma mais concentrada no centro do tubo-*riser*. Porém, o perfil obtido com TCG – V1Â possui oscilações ao longo das secções examinadas, explicável devido as áreas com formação de *clusters* (aglomerados de sólidos) que são detectados com maior facilidade pela tomografia com único ângulo de varredura, cuja sensibilidade é maior para pequenas alterações de densidade do meio.

Devido a elevada velocidade do gás e entrada de sólidos no sistema, em ambas as figuras não se observa formação de regiões com padrão de escoamento núcleo – anular ou diluídas em alturas intermediárias ou no topo do *riser*. Isto pode indicar a ausência de recirculação de sólidos ao longo das paredes do sistema. Contudo, o comportamento do perfil radial das curvas da fração volumétrica de sólidos mensuradas a partir dos dados de saída do MCNPX conferem com os perfis obtidos nas simulações do *Ansys Fluent* realizadas por SOUZA NETTO *et al.* (2013), principalmente os perfis obtidos com os dados da TCG – V12Â, ou seja, isso evidencia uma alta precisão na importação das imagens para o código.

Também foram determinadas as médias da fração volumétrica de sólidos para as quatro alturas (CFD1 à CFD4) vistas nas Figuras 38 e 39. Na Tabela 8, em ambos procedimentos de investigação, é observada uma queda acentuada da fração média de sólidos a partir da altura 1,52 m, mantendo-se praticamente constante até o topo do reator *riser*, também, nota-se uma proximidade entre os valores médios nas duas tomografias para as quatro alturas, indicativo que apesar das limitações técnicas da TCG – V1Â, está consegue determinar este parâmetro com ótima acurácia.

A partir da análise do modelo de escoamento bifásico de ZHU e WANG (2010), concluiu-se que a queda brusca da fração volumétrica de sólidos observável na Tabela 8, pode significar a passagem do regime de transporte denso para o regime de aceleração e devido às condições dos parâmetros operacionais de entrada aliadas as características físicas do *riser*, como, comprimento e diâmetro interno, não houve tempo suficiente para mudança do regime de aceleração para o de transporte diluído.

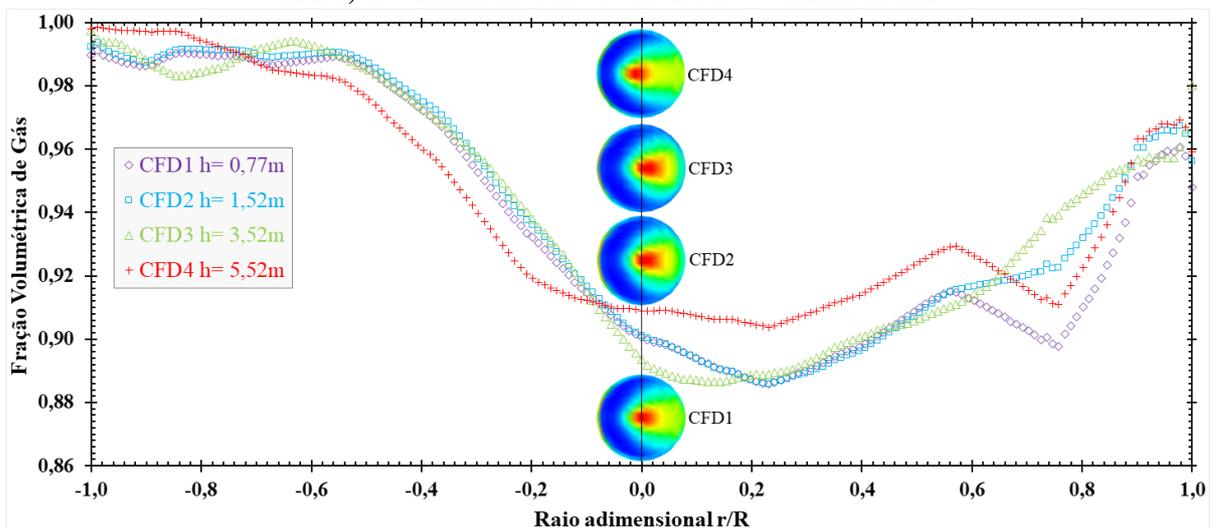
Tabela 8 – Médias da fração volumétrica de sólidos, para as imagens referentes às alturas do *riser* de 0,77m; 1,52m; 3,52m e 5,52m, determinadas na TCG – V1Â e TCG –V12Â MCNPX.

| Procedimento Simulado | Arquivo | Altura (m) | $\epsilon_{média}$ |
|-----------------------|---------|------------|--------------------|
| TCG – V1Â | CFD1 | 0,77 | 0,062985 |
| | CFD2 | 1,52 | 0,059116 |
| | CFD3 | 3,52 | 0,058719 |
| | CFD4 | 5,52 | 0,057586 |
| TCG – V12Â | CFD1 | 0,77 | 0,060382 |
| | CFD2 | 1,52 | 0,056838 |
| | CFD3 | 3,52 | 0,056633 |
| | CFD4 | 5,52 | 0,056540 |

Fonte: Próprio autor.

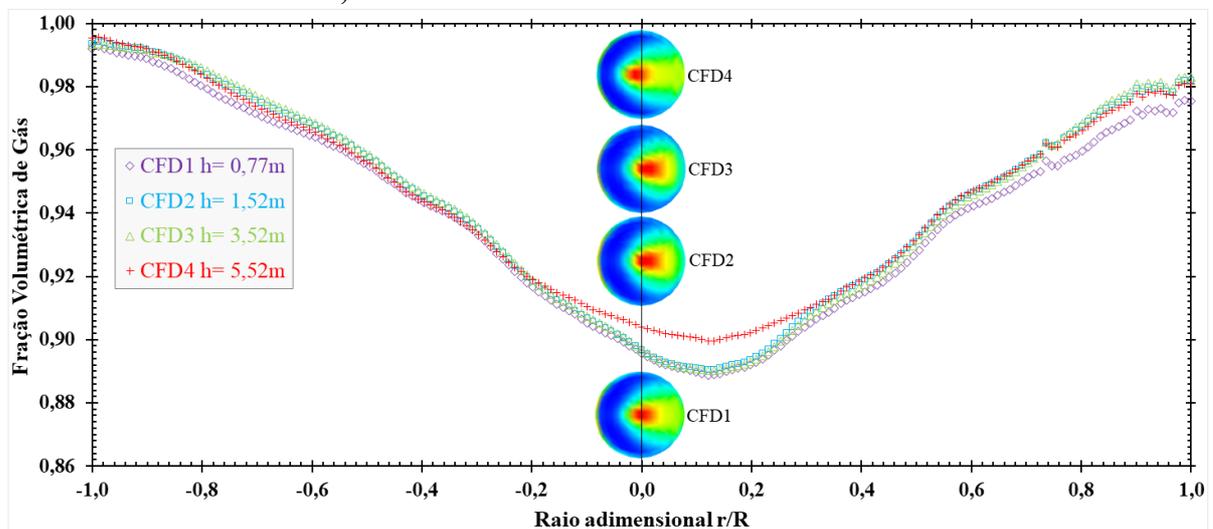
A introdução das informações presentes nas Figuras 38 e 39 na Equação 26, possibilitaram obter a comparação, através da sobreposição de resultados, da fração volumétrica de gás para as imagens CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4. Como era de se esperar, o perfil radial das curvas da fração de vazios em função de r/R é o inverso do apresentado para fração volumétrica de sólidos (Figuras 40 e 41). A principal importância na determinação de dados da fase gasosa está no fato de permitirem obter a velocidade desta fase e assim determinar a velocidade de *slip* do ar e catalisador, que contribui para estudar o problema da recirculação presente no *riser* da UPF e em *risers* industriais (LIMA FILHO, 2014; MOURA, 2015; OLIVEIRA 2018).

Figura 40 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado através da TCG – VIÂ MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Figura 41 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado através da TCG – V12Â MCNPX.

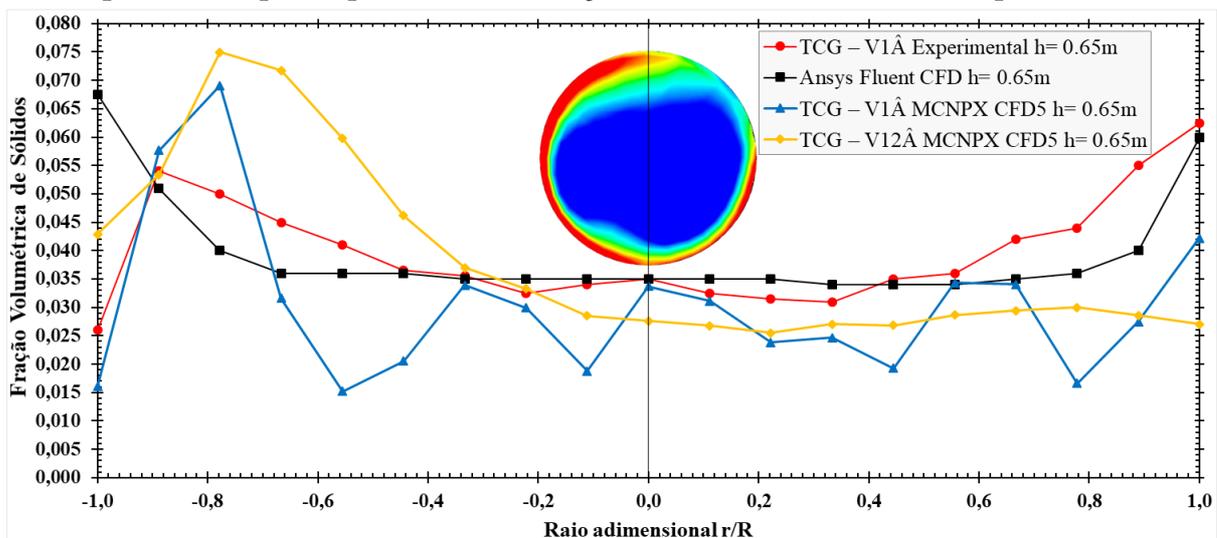


Fonte: Próprio autor.

O perfil da fração volumétrica de sólidos para os arquivos CFD5 (0,65m), CFD6 (1,384m) e CFD7 (3,424m), também foi determinado nas simulações MCNPX. Estas imagens possuem a vantagem de terem seus dados extraídos do *Ansys Fluent* para comparação com dados experimentais de SANTOS (2013). E como demonstrado por LIMA FILHO (2014), foram validadas por medidas experimentais feitas no *riser* da UPF.

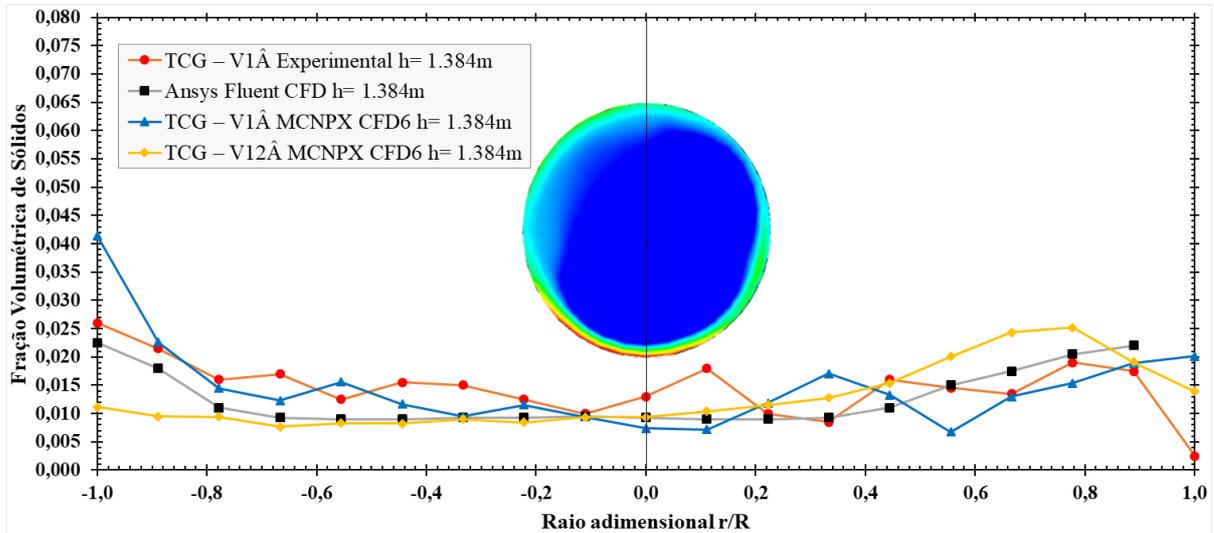
Os gráficos das Figuras 42, 43 e 44, apresentam os perfis radiais de frações volumétricas de sólidos em diferentes alturas do *riser* com parâmetros de entrada constante em todos os três casos. Nestas há comparação entres os perfis determinados nas simulações no *Ansys Fluent* (LIMA FILHO, 2014), nos experimentos da tomografia por transmissão gama com varredura de único ângulo (SANTOS, 2013) e nas simulações da TCG – V1Â (escaneamento idêntico ao feito por SANTOS, 2013) e da TCG – V12Â no MCNPX.

Figura 42 – Comparação de informações das tomografias MCNPX com dados do *Ansys Fluent* e experimentais para o perfil radial da fração volumétrica de sólidos do arquivo CFD5.



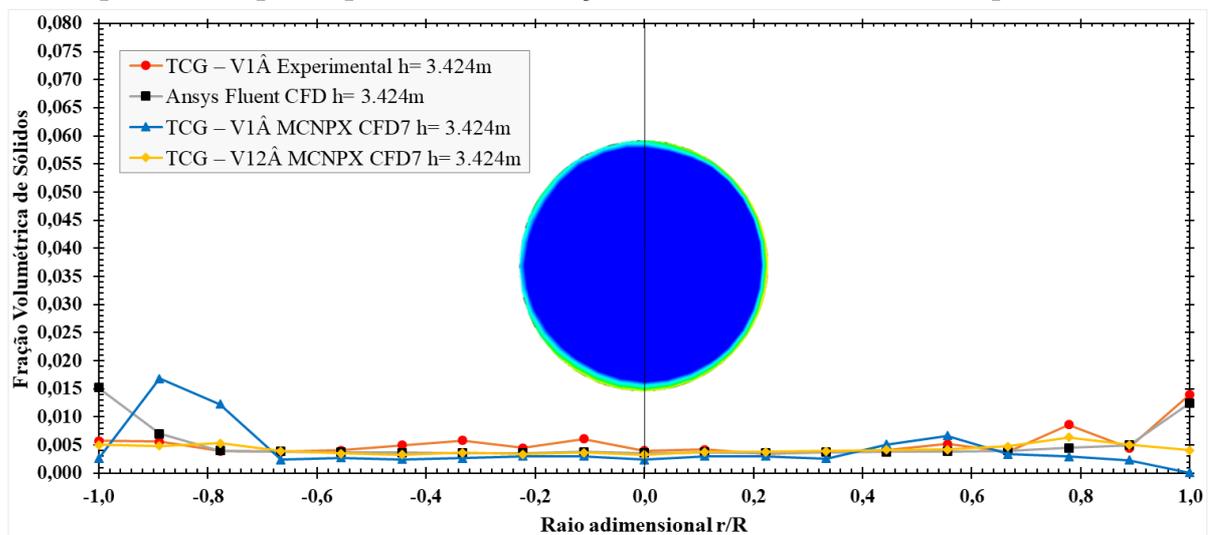
Fonte: Próprio autor.

Figura 43 – Comparação de informações das tomografias MCNPX com dados do *Ansys Fluent* e experimentais para o perfil radial da fração volumétrica de sólidos do arquivo CFD6.



Fonte: Próprio autor.

Figura 44 – Comparação de informações das tomografias MCNPX com dados do *Ansys Fluent* e experimentais para o perfil radial da fração volumétrica de sólidos do arquivo CFD7.



Fonte: Próprio autor.

Nos perfis da fração volumétrica de sólidos apresentados nos gráficos das três figuras, observa-se maior concentração de catalisador nas proximidades da parede e na secção próxima a base do *riser* (0,65m), que diminui conforme aumentava-se à altura de execução das medidas. Desta forma, por meio da modelagem matemática dos dados de saída do código para TCG – V1Â e TCG – V12Â, foi possível identificar três regiões distintas no *riser* com gradientes de concentração. A base (CFD5) é a região mais densa, caracterizada por ter grandes intensidades turbulentas e concentração assimétrica provocada pela região de entrada de sólidos. Isto explica as oscilações do perfil obtido no escaneamento gama com ausência de giro de fonte-colimador-detector no MCNPX, principalmente na região oposta a saída de sólidos.

Na região de escoamento plenamente desenvolvido (CFD6), tem-se uma região menos densa e aproximadamente simétrica, que refletiu numa curva radial da fração de sólidos constante na maior parte da secção, tanto na tomografia gama MCNPX sem giros quanto na com doze giros. Próximo ao topo do *riser* (CFD7) a concentração de sólidos é muito menor, com pequeno acúmulo nas proximidades da parede, que pode ser causado por um fluxo de menor intensidade no sentido descendente axial, ou seja, um possível indicativo de baixa recirculação de sólidos. É também neste ponto onde existe maior conformidade entre os dados de SANTOS (2013) e LIMA FILHO (2014) com os dados das simulações MCNPX, pois por se tratar da região diluída, torna mais difícil o surgimento de clusters de sólidos. Portanto, nessa região do tubo-*riser* observa-se a curva do perfil radial de sólidos mais estável com pouca variação no decorrer da secção radial.

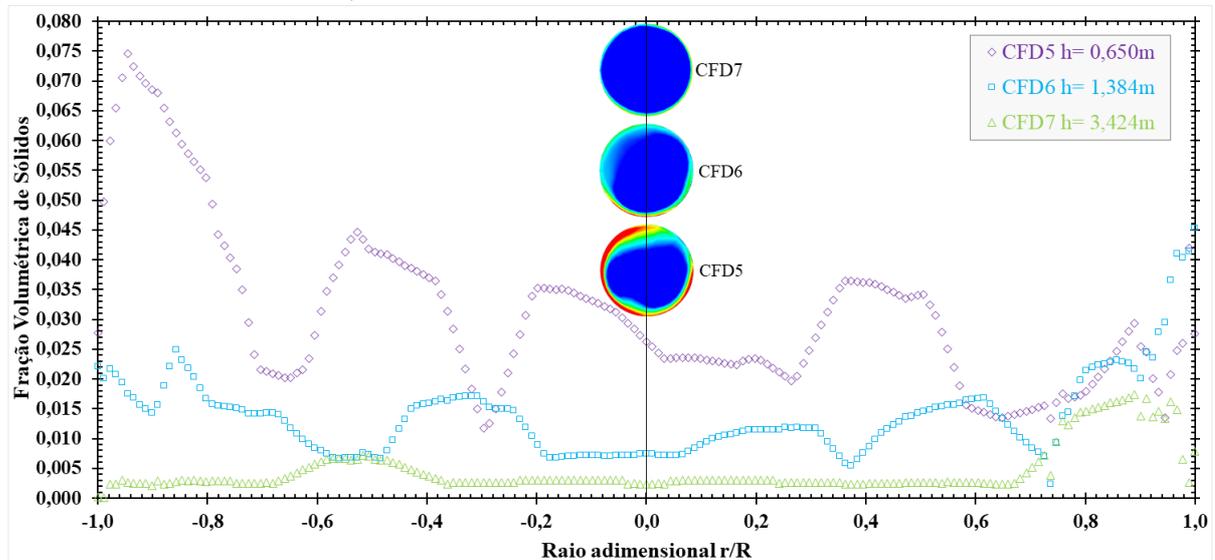
O fenômeno da recirculação foi abordado na dissertação de OLIVEIRA (2018), atualmente vem sendo estudado por CLAUDINO *et al.* (2018) através da otimização de simulações na UPFV, por VIANA *et al.* (2019) com medidas experimentais e, é bastante avaliado por grupos de pesquisa em todo mundo.

Apesar das aferições do perfil da fração volumétrica de catalisador terem sido realizadas em três diferentes plataformas de medidas, os dados obtidos nas simulações MCNPX conferem com os determinados no *Ansys Fluent* e experimento, devido aos valores presentes no eixo vertical das Figuras 42, 43 e 44 estarem numa escala muito abaixo de um, ou seja, as variações dos perfis estão dentro do limite aceitável para validação das simulações do código com medidas experimentais.

Nos gráficos das Figuras 45 e 46, tem-se, respectivamente, a comparação por TCG – V1Â e TCG – V12Â MCNPX entre os perfis radiais da fração volumétrica de sólidos dos arquivos CFD5 (0,65m), CFD6 (1,384) e CFD7 (3,424m) que foram validados na comparação presente nas Figuras 42, 43 e 44. Os regimes de escoamento apresentados por ZHU e WANG (2010) se destacaram, sendo, o regime de transporte denso (CFD5) com a formação de regiões núcleo – anular e alta taxa de recirculação de sólidos; regime de aceleração (CFD6) e regime de transporte diluído (CFD7), que em comparação com as demais apresenta a menor fração volumétrica de sólidos e, conseqüentemente menor taxa de recirculação.

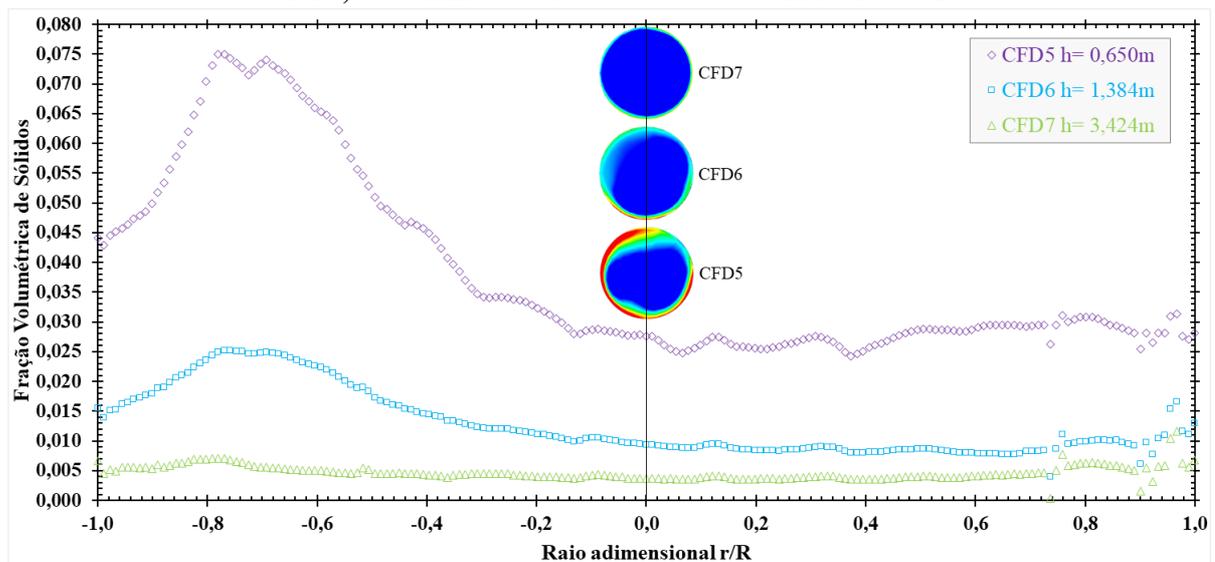
Na Tabela 9 tem-se a comparação entre os valores da fração médias de sólidos para as três alturas, que são referentes, respectivamente, aos procedimentos adotados nas Figuras 45 e 46. Observa-se uma pequena discrepância entre os valores médios da fração de sólidos para o arquivo CFD5, podendo ser explicável devido a sensibilidade da TCG – V1Â para região densa. No entanto, nos demais fatias radiais, os valores médios para fração volumétrica conferem.

Figura 45 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado através da TCG – V1Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Figura 46 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado através da TCG – V12Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

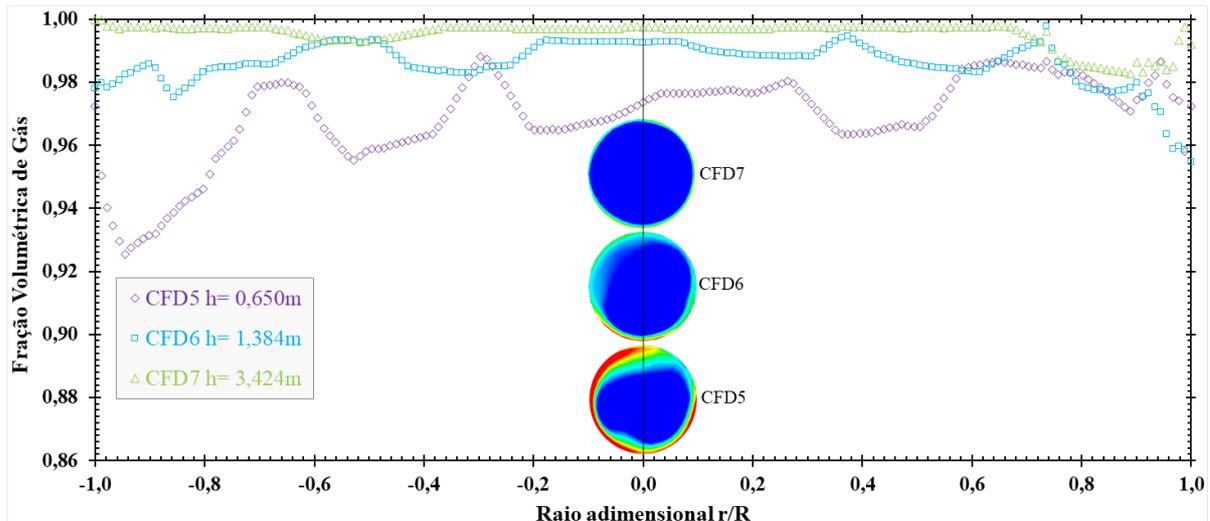
Tabela 9 – Médias da fração volumétrica de sólidos, para as imagens referentes às alturas do riser de 0,650m; 1,384m e 3,424m, determinadas na TCG – V1Â e TCG – V12Â MCNPX.

| Procedimento Simulado | Arquivo | Altura (m) | $\epsilon_{\text{média}}$ |
|-----------------------|---------|------------|---------------------------|
| TCG – V1Â | CFD5 | 0,650 | 0,030801 |
| | CFD6 | 1,384 | 0,013823 |
| | CFD7 | 3,424 | 0,004576 |
| TCG – V12Â | CFD5 | 0,650 | 0,038314 |
| | CFD6 | 1,384 | 0,012876 |
| | CFD7 | 3,424 | 0,004751 |

Fonte: Próprio autor.

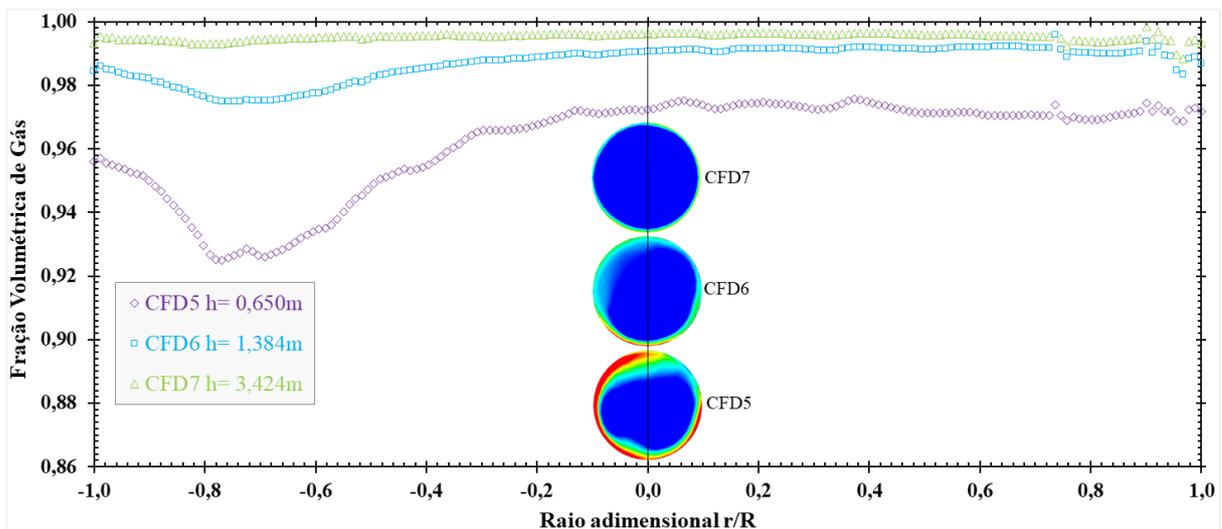
As simulações tomográficas MCNPX, também possibilitaram determinar e comparar, assim como ocorreu com as informações presentes nos gráficos das Figuras 38 e 39, os perfis radiais da fração volumétrica de gás referente aos arquivos CFD5, CFD6 e CFD7 com dados da TCG – V1Â (Figura 47) e TCG – V12Â (Figura 48).

Figura 47 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado através da TCG – V1Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

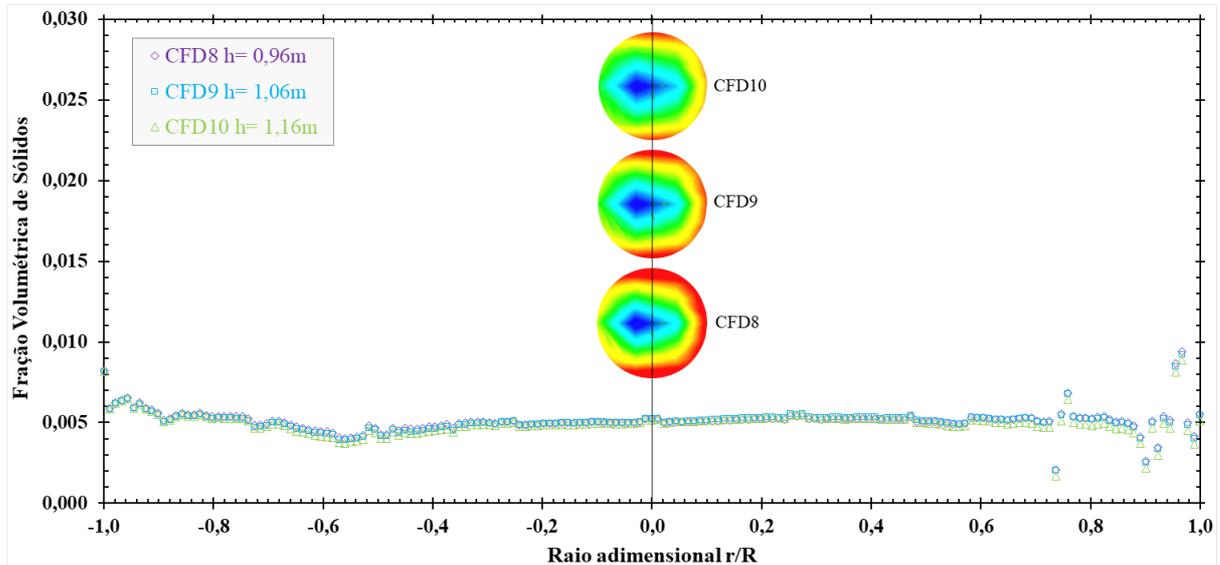
Figura 48 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado através da TCG – V12Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

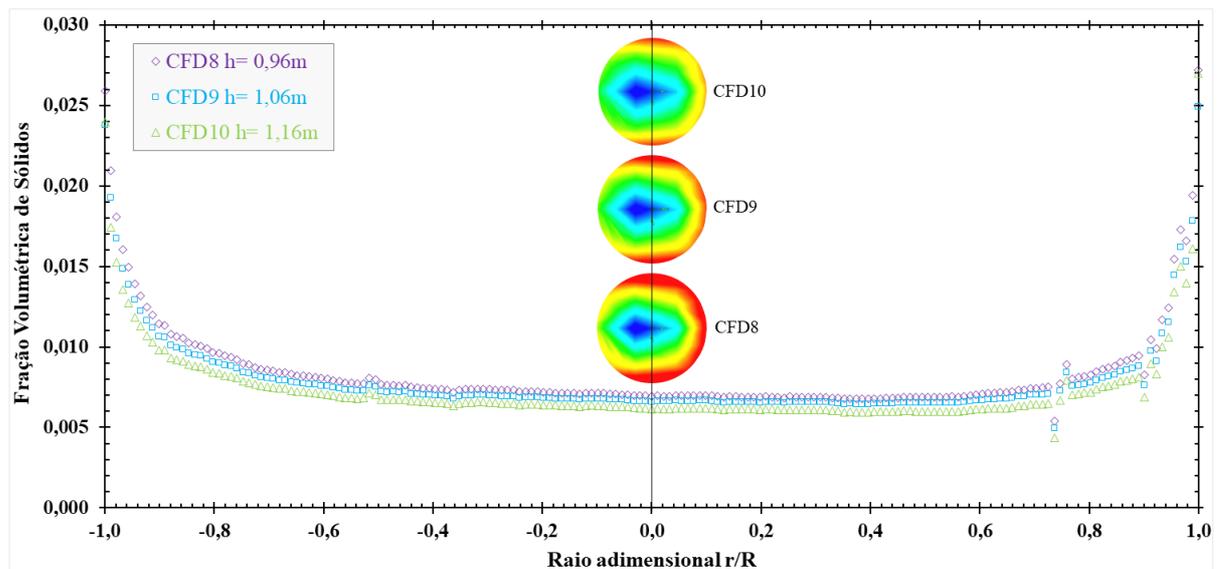
A comparação entre os perfis radiais da fração volumétrica de sólidos para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, extraídos das simulações no software *SolidWorks* (CLAUDINO e colaboradores, 2018), pode ser vista na Figura 49 (TCG – V1Â MCNPX) e na Figura 50 (TCG – V12Â MCNPX), onde nota-se a variação desse parâmetro no decorrer da secção transversal.

Figura 49 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, determinado através da TCG – V1Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Figura 50 – Perfil radial da fração volumétrica de catalisador, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, determinado através da TCG – V12Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Em ambas as figuras, a presença de catalisador é máxima na altura 0,96m, com perfis radiais pouco diferenciados para TCG – V1Â. Além disso, nos dois escaneamentos a fração decresce, conforme aumenta-se altura das medidas, até o valor mínimo encontrado na altura 1,16m. Devido aos parâmetros operacionais de entrada que geraram as imagens, observa-se por meio da análise de resultados das simulações no código, a identificação da região de escoamento núcleo – anular com simetria nos perfis transversais, sendo bem destacada para TCG – V12Â. Isto caracteriza o padrão de escoamento denso, pois como indicado nos gráficos das Figuras 49 e 50, a quantidade de sólidos é maior nas regiões próximas a parede do *riser*.

Assim como demonstrado nas Tabelas 8 e 9, também foram determinadas as médias das frações volumétrica de sólidos das três fatias radiais de CLAUDINO *et al.* (2018), onde utilizou-se dois métodos distintos de varreduras tomográficas MCNPX para obtenção de tal parâmetro. A comparação das médias determinadas com a simulações das TCG-V1Â e TCG – V12Â é apresentada na Tabela 10, onde comprova-se as informações de trabalhos teóricos e experimentais presentes na literatura (DAVIDSON, 2000; BRITO, 2014; MOURA, 2015; OLIVEIRA, 2018), que associam o decréscimo na quantidade de catalisador com aumento da altura da fatia avaliada.

No entanto, observa-se uma variação suave nas médias da fração volumétrica das três secções para a tomografia gama sem giro de fonte-colimador-detector, quando comparada ao comportamento expresso pela TCG –V12Â, esta última gera uma variação mais perceptível no decorrer das alturas. A diferença nas variações pode ser causada pelo fato da tomografia gama com varredura de doze ângulos produzir dados mais refinados quando comparada a outra técnica de aquisição e, também, a curta distância entre as secções.

Tabela 10 – Médias da fração volumétrica de sólidos, para as imagens referentes às alturas do riser de 0,96m; 1,06m e 1,16m, determinadas na TCG – V1Â e TCG –V12Â MCNPX.

| Procedimento Simulado | Arquivo | Altura (m) | $\epsilon_{\text{média}}$ |
|-----------------------|---------|------------|---------------------------|
| TCG –V1Â | CFD8 | 0,96 | 0,005120 |
| | CFD9 | 1,06 | 0,005082 |
| | CFD10 | 1,16 | 0,004952 |
| TCG –V12Â | CFD8 | 0,96 | 0,008471 |
| | CFD9 | 1,06 | 0,007977 |
| | CFD10 | 1,16 | 0,007388 |

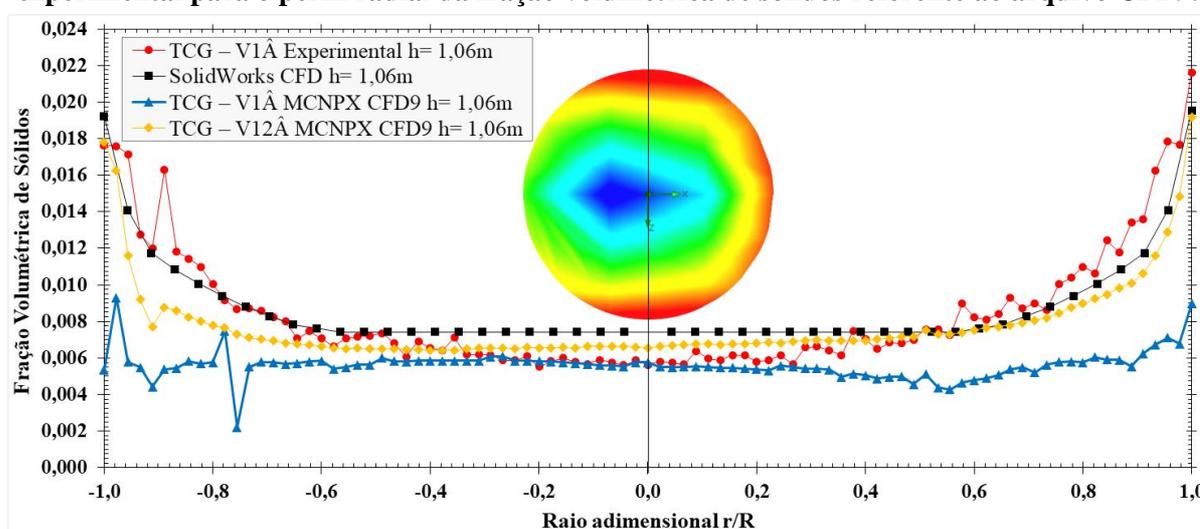
Fonte: Próprio autor.

Conforme abordado na Subsecção 3.4.1, entre os três arquivos extraídos do trabalho de CLAUDINO *et al.* (2018), o arquivo CFD9 tem a importância de possibilitar a comparação de dados determinados nas simulações no *SolidWorks* e MCNPX com dados experimentais, sendo estes últimos obtidos com o tomógrafo por transmissão gama de primeira geração que se encontra na primeira mesa do riser (Figura 1), pois a altura da secção da CFD9 (1,06m) converge com altura de saída do feixe de radiação do aparelho. A Figura 51 apresenta a comparação entre os perfis radiais da fração volumétrica de sólidos obtidos por CLAUDINO e colaboradores (2018), no MCNPX pela TCG – V1Â (procedimento similar ao realizado em experimento) e TCG –V12Â (ampliação da investigação) e o perfil experimental de OLIVEIRA

(2018), que introduziu no *riser* da UPF uma vazão de ar com 600L/min e abertura da válvula de controle (VPC) com 54%.

Como a tomografia experimental tem a limitação de possuir a resolução máxima de 1,0 mm, para comparação selecionou-se o intervalo de dados das tomografias no MCNPX com mesmo tamanho do passo do tomógrafo experimental. No caso do *SolidWorks* foram selecionados intervalos de dados com 3,0 mm (eixo horizontal), pois o perfil radial obtido nesse software tem variação insignificante no decorrer da secção transversal.

Figura 51 – Comparação entre as informações obtidas no MCNPX com dados do *SolidWorks* e experimental para o perfil radial da fração volumétrica de sólidos referente ao arquivo CFD9.



Fonte: Próprio autor.

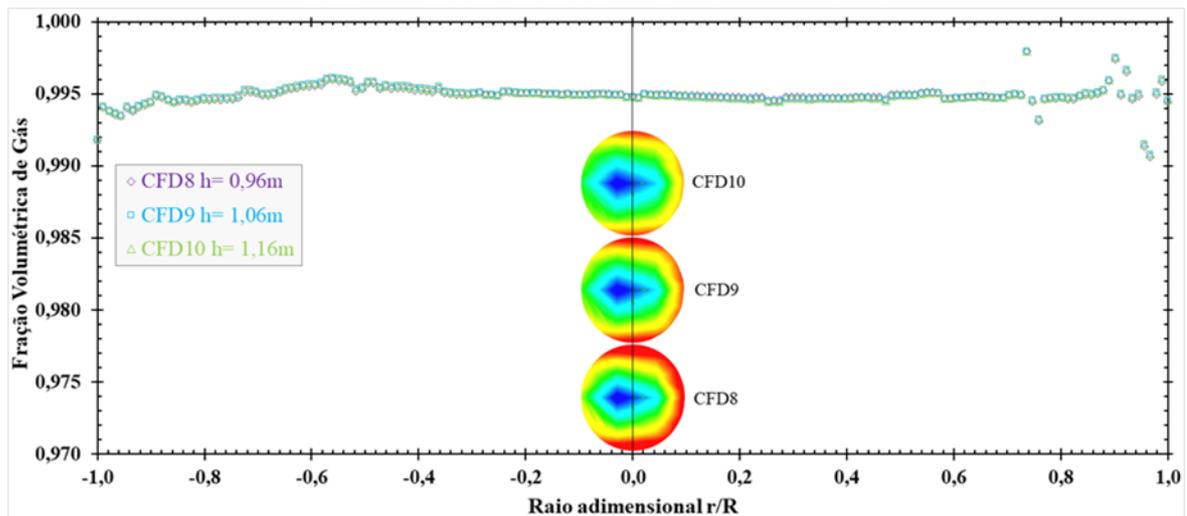
Levando em consideração a amplitude dos valores da fração volumétrica de sólidos presente no eixo vertical do gráfico da Figura 51, a análise das curvas dos perfis transversais, que foram determinados nas tomografias no código MCNPX, mostra conformidade com as informações obtidas nas simulações numéricas CFD e por experimento, principalmente, para o perfil extraídos da TCG – V12Â, onde a curva radial próxima a parede do *riser* possui comportamento muito próximo da curva experimental. No caso da TCG – V1Â, os valores convergem no centro do *riser* (região com menor concentração de catalisador) e se distanciam um pouco nas proximidades com a parede, que pode ser explicável devido a influência da parede do tubo ser mais notável nas simulações MCNPX, conforme visto no perfil radial de atenuação gama relativa de GUEDES (2016) e OLIVEIRA (2017).

Por ter uma distribuição assimétrica de sólidos presente na coordenada cartesiana horizontal, a porção direita da imagem CFD9 tem uma maior fração de catalisador, que é identificada com maior precisão nos dados TCG –V12Â MCNPX (Figura 51). Assim, o

comportamento da curva com seus pontos de medidas para o arquivo CFD9 foi validado por experimento de OLIVEIRA (2018), provando uma ótima qualidade nas importações e êxito nas simulações tomográficas MCNPX.

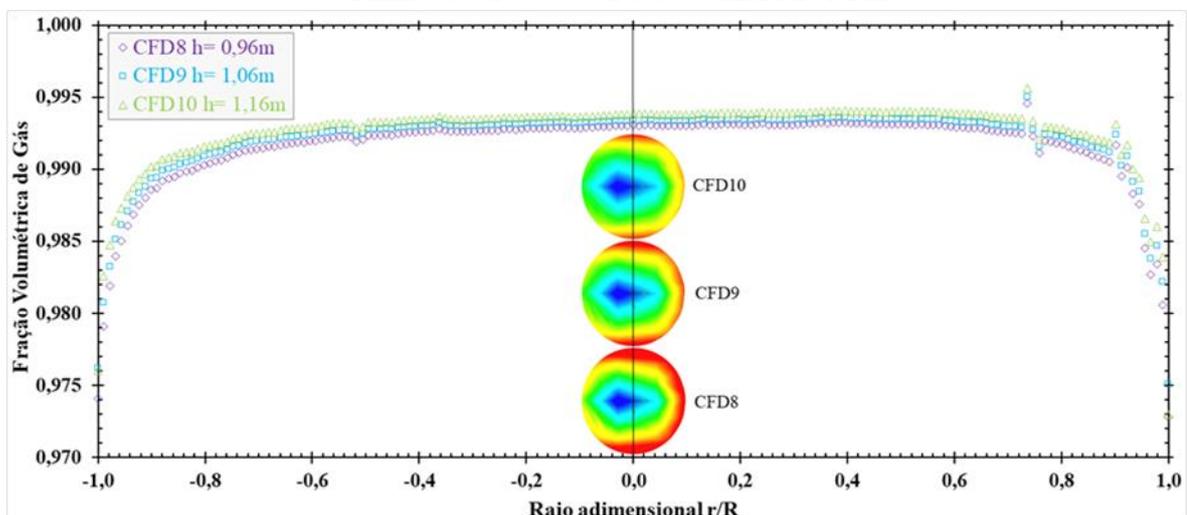
O parâmetro fluidodinâmico determinado e apresentado nas Figuras 49 e 50 contribuiu para obtenção dos perfis radiais da fração volumétrica de vazios para as alturas 0,96m, 1,06m e 1,16, que corresponde aos arquivos CFD listados na Tabela 10, com a TCG – V1Â e TCG – V12Â MCNPX, estes podem ser vistos nos gráficos das Figuras 52 e 53, respectivamente. Assim como ocorreu com os gráficos das demais figuras, a comparação do comportamento da curva para os perfis transversais de gás tem características inversas das apresentadas nas Figuras 49 e 50, onde tinham sido determinados os perfis radiais da fração volumétrica do catalisador.

Figura 52 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, determinado através da TCG – V1Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Figura 53 – Perfil radial da fração volumétrica de gás, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, determinado através da TCG – V12Â MCNPX.



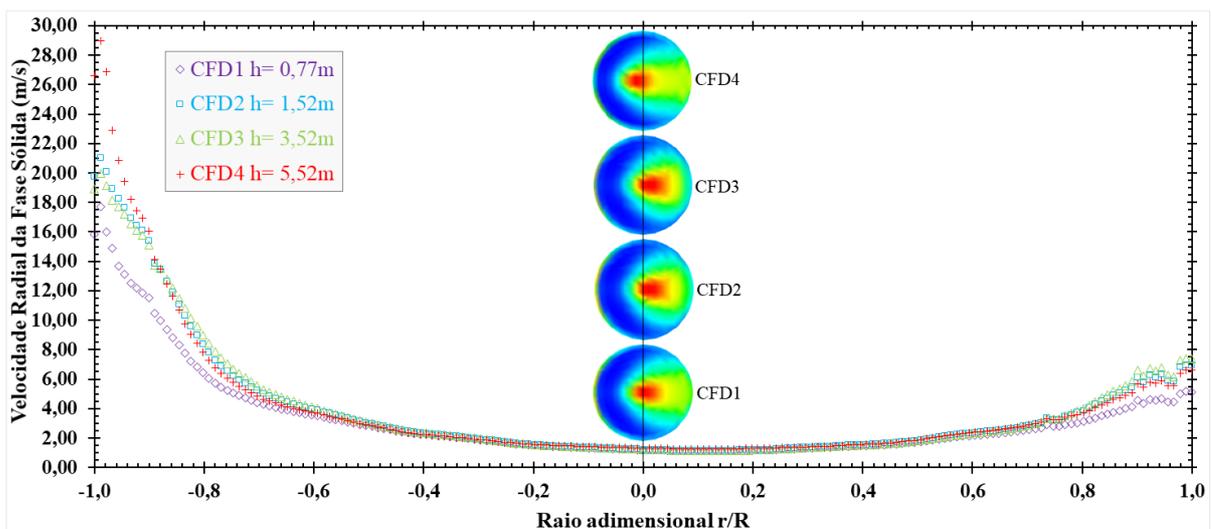
Fonte: Próprio autor.

4.2.2 Perfil Radial da Velocidade *Slip*

De acordo com o que foi abordado na Subsecção 3.8.5, o perfil radial da velocidade de *slip* é determinado por meio da diferença entre a velocidade da fase gasosa (Equação 10) e a velocidade da fase sólida (Equação 7) [m/s]. Desta maneira, com a introdução dos perfis das frações volumétrica de sólidos presentes nas Figuras 39, 46 e 50, obtém-se os perfis da velocidade de sólidos para as imagens de SOUZA NETTO *et al.* (2013), LIMA FILHO (2014) e CLAUDINO *et al.* (2018), conforme pode ser visto nos gráficos das Figuras 54, 55 e 56.

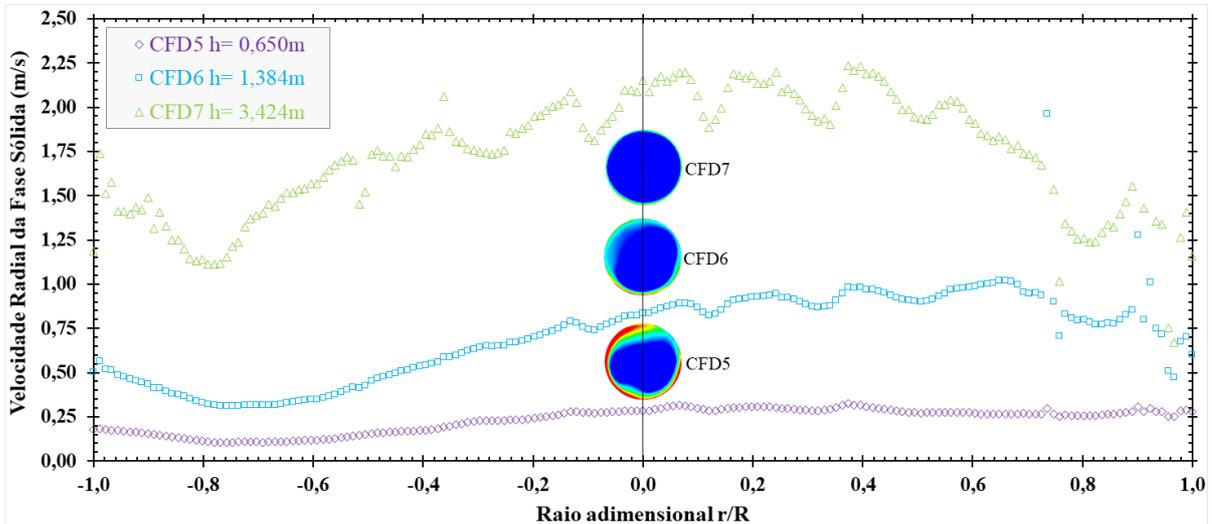
Os perfis da velocidade de sólidos vistos no gráfico da Figura 54 apresentam-se praticamente constantes na região central das imagens e não variam muito de secção para secção. No entanto, a porção esquerda próxima a parede do tubo, apresenta os perfis com uma acentuada velocidade quando comparada as demais áreas, com destaque para altura de 5,52 m. Esta oscilação brusca na velocidade pode ser causada pela vazão de gás no sistema, elevada quantidade sólidos no centro e pela localização da secção no *riser* (CFD4). Para as Figuras 55 e 56, o comportamento do perfil radial de velocidade de sólidos está dentro do modelo fluidodinâmico de fluxo bifásico núcleo – anular proposto por WANG *et al.* 2003, ou seja, conforme aumenta-se a altura, maior será a velocidade de sólidos, pois estes já têm atingido o regime de aceleração ou diluído.

Figura 54 – Perfil radial da velocidade da fase sólida, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX.



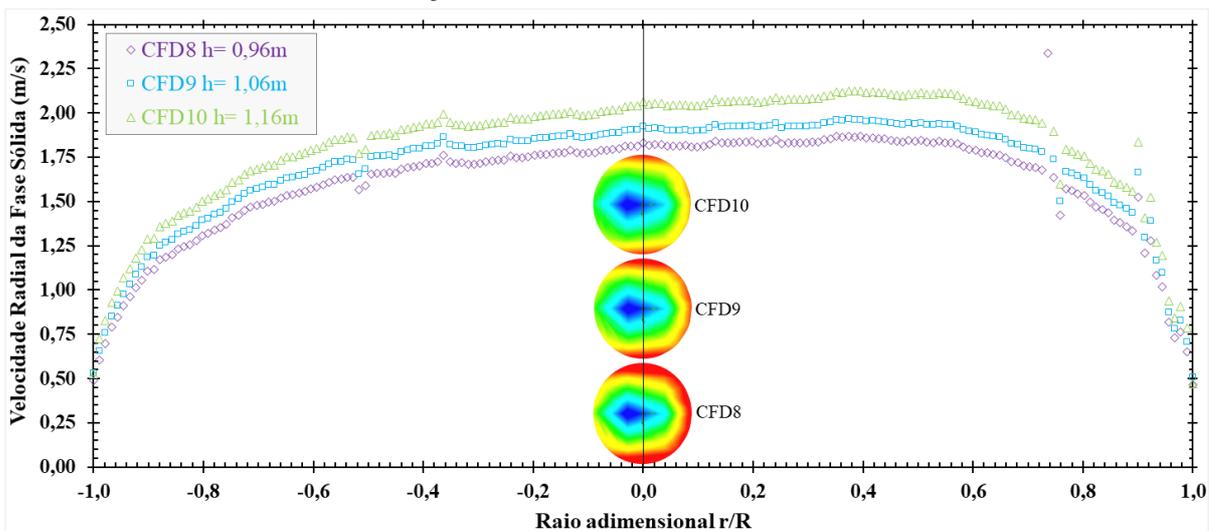
Fonte: Próprio autor.

Figura 55 – Perfil radial da velocidade da fase sólida, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Figura 56 – Perfil radial da velocidade da fase sólida, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX.

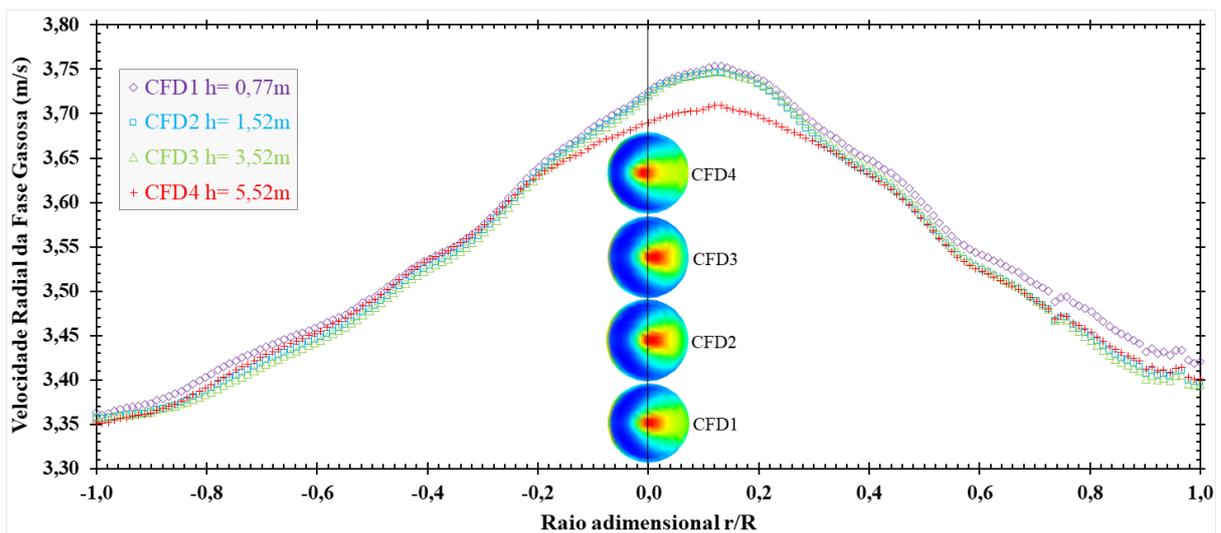


Fonte: Próprio autor.

A velocidade da fase gasosa é determinada a partir da introdução dos perfis da fração volumétrica de gás das secções transversais do *riser* na Equação 10, ou seja, os perfis presentes nos gráficos das Figuras 41, 48 e 53 permitem determinar este parâmetro para os arquivos CFD1 à CFD4, CFD5 à CFD7 e CFD8 à CFD10, que pode ser observado, respectivamente, nos gráficos das Figuras 57, 58 e 59. O perfil visto na Figura 57 apresenta uma área central, quando comparada as áreas próximas à parede, com maior velocidade do ar e, também, nota-se que o gás perde velocidade conforme ascende no *riser*, com menor velocidade na região do topo (CFD4) e velocidade máxima na região central da altura 0,77m (CFD1). Além disso, as curvas não são bem diferenciadas e têm valores muito próximos para as quatro alturas medidas. Na

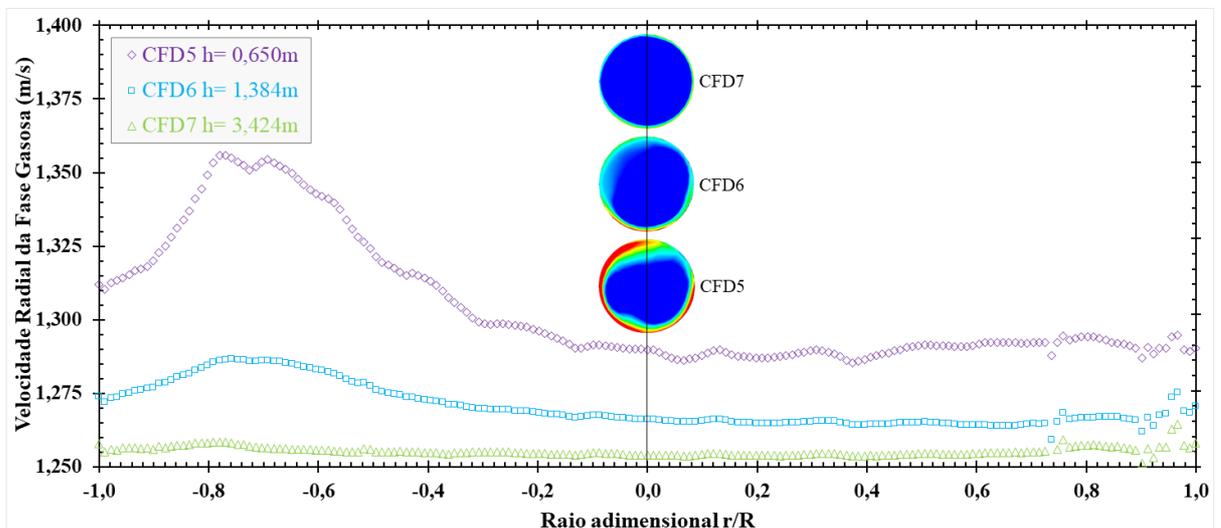
Figura 58 ocorre o contrário do observável no gráfico da Figura 57, os perfis transversais são bem diferenciados, a velocidade da fase gasosa é maior próxima à parede do tubo-*riser* e menor nas áreas centrais das três secções examinadas, porém, o fenômeno de decréscimo com o aumento da altura também é notado. As secções radiais com os perfis de velocidade radial do gás no gráfico da Figura 59, possuem como diferencial a grande proximidade entre as medidas e a divergência entre os perfis é mínima, ou seja, confere com o modelo de escoamento gás-sólidos para estas alturas. No entanto, neste último é observável a simetria entre os lados dos perfis com velocidade máxima nas bordas e mínima no centro do tubo.

Figura 57 – Perfil radial da velocidade da fase gasosa, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX.



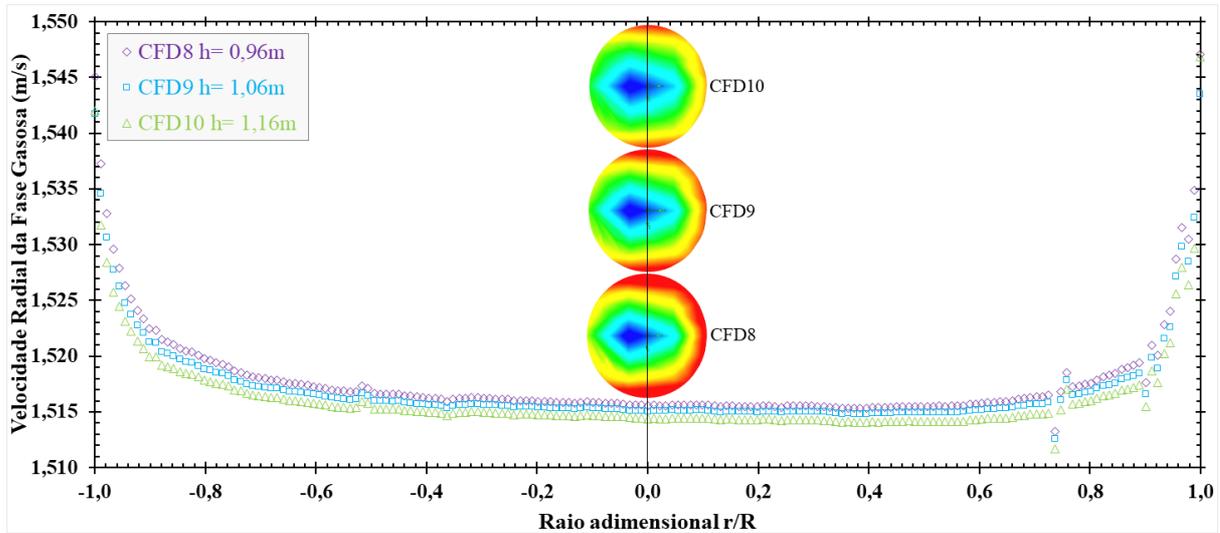
Fonte: Próprio autor.

Figura 58 – Perfil radial da velocidade da fase gasosa, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

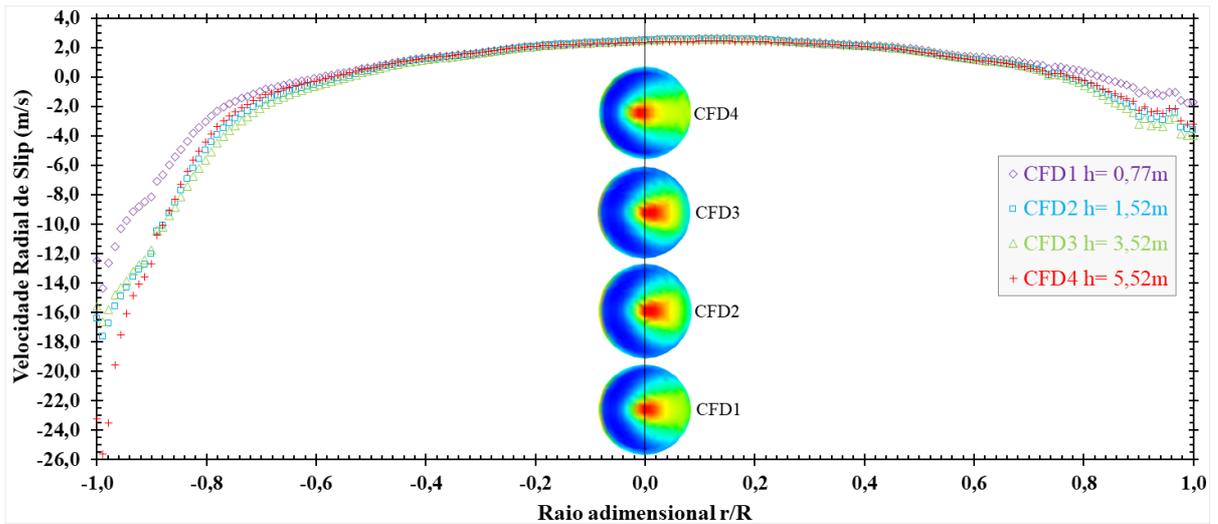
Figura 59 – Perfil radial da velocidade da fase gasosa, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

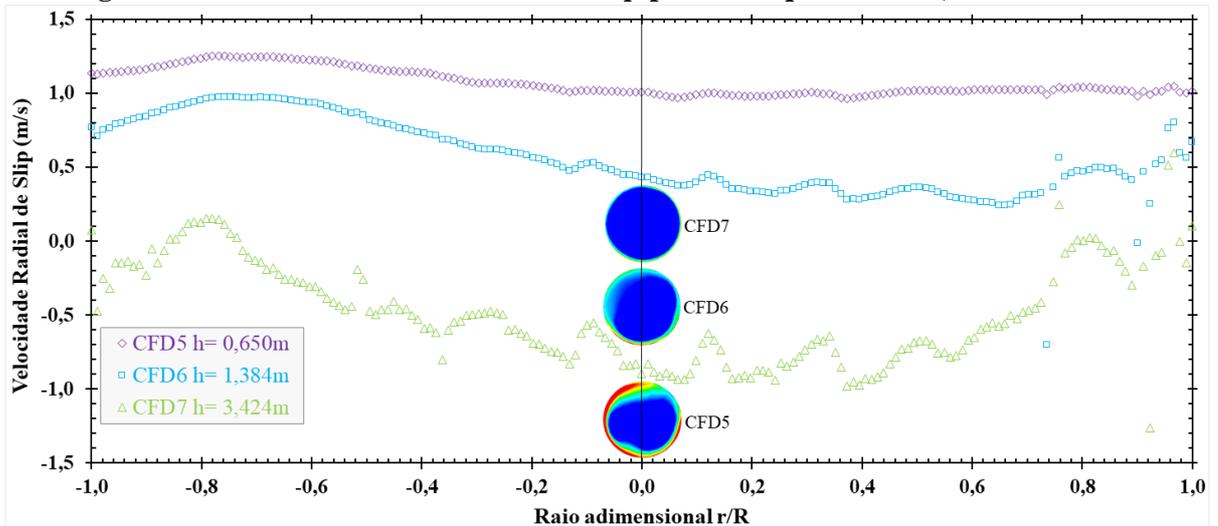
Os perfis da velocidade de gás e sólidos das Figuras 54 e 57, Figuras 55 e 58, Figuras 56 e 59, permitem avaliar a velocidade *slip* para todas as secções radiais do *riser*. Portanto, através da sobreposição das curvas dos gráficos em função do raio interno normalizado do *riser*, as velocidades de escorregamento para os arquivos CFD1 à CFD4 (Figura 60), CFD5 à CFD7 (Figura 61) e CFD8 à CFD10 (Figura 62) são dadas. Os quatro perfis presentes no gráfico da Figura 60 possuem velocidade positiva para toda a região central (plano cartesiano $x = -0,7$ à $0,8$) e velocidade negativa para as regiões próximas à parede do tubo (plano $x = -0,7$ à -1 e $0,8$ à 1), indicativo da existência e ausência de recirculação sólidos, respectivamente. Nestes casos, as curvas *slip* para as imagens de SOUZA NETTO *et al.*, (2013) mostram o comportamento diferente do esperado (DAVIDSON, 2000; ZHU e WANG, 2010). A Figura 61 apresenta perfis radiais de velocidade sólidos quantitativamente bem diversificados, sendo todo positivo para CFD5, positivo com poucos pontos negativos para CFD6 e praticamente negativo para CFD7, ou seja, na altura 0,65m (região densa) existe uma elevada taxa de recirculação de sólidos, principalmente na região esquerda próxima da parede (plano $x = -0,76$), que decresce na altura 1,384m (região de aceleração) e desaparece, quase que totalmente, a partir da altura 3,424m (região diluída) que possui perfil com alguns pontos positivos próximos da parede (baixíssima taxa de recirculação de sólidos). Já os perfis das secções de CLAUDINO *et al.*, (2018) têm o comportamento oposto do apresentado na Figura 60, com valores *slip* negativos no centro das imagens (plano $x = -0,7$ à $0,8$) e positivo conforme converge para parede (plano $x = -0,7$ à -1 e $0,8$ à 1) com pico máximo na região de interface. Portanto, as informações apresentadas nas Figuras 61 e 62 seguem os modelos teórico presentes na literatura para este tipo de escoamento.

Figura 60 – Perfil radial da velocidade de *slip* para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4.



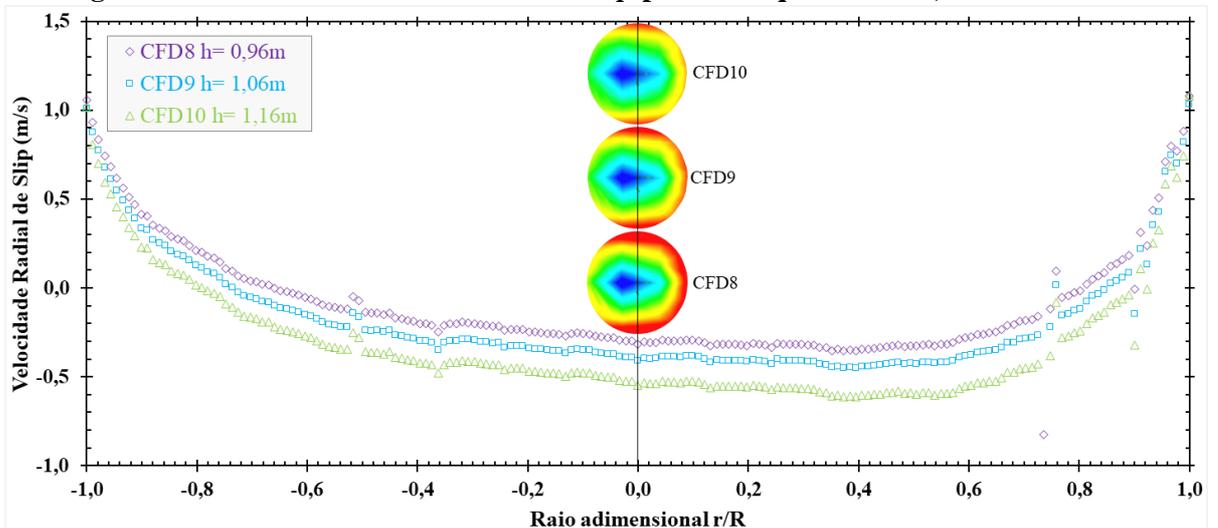
Fonte: Próprio autor.

Figura 61 – Perfil radial da velocidade de *slip* para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7.



Fonte: Próprio autor.

Figura 62 – Perfil radial da velocidade de *slip* para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10.



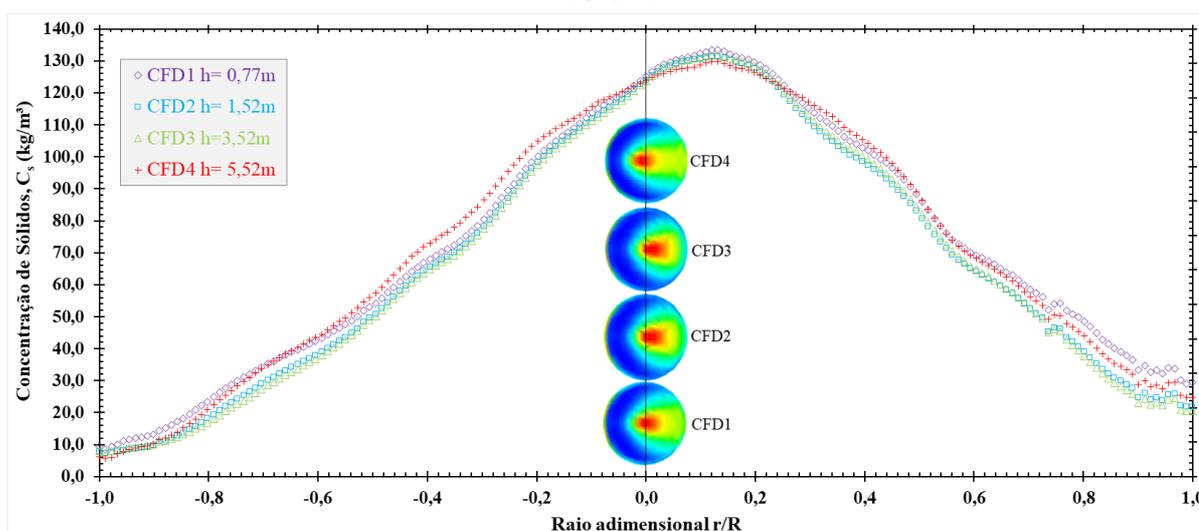
Fonte: Próprio autor.

4.2.3 Densidade ou Concentração de Sólidos ao Longo do *Riser*

A avaliação da fração volumétrica de sólidos dos arquivos CFD listados na Tabela 3, possibilitou determinar a concentração de sólidos [kg/m^3] nas secções radiais. Desta maneira, a introdução dos valores dos perfis radiais da fração de sólidos das imagens tomografadas CFD1 à CFD10 na Equação 25, possibilita a avaliação deste parâmetro fluidodinâmico no *riser* da UPF.

Conforme foi dito na subsecção 3.8.6, os perfis radiais da concentração de sólidos são obtidos por cálculos do produto presente na Equação 25. Estes perfis demonstram o mesmo comportamento dos perfis transversais da fração volumétrica de sólidos presentes nas imagens CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4 (Figuras 38 e 39); CFD5, CFD6 e CFD7 (Figuras 45 e 46) e CFD8, CFD9 e CFD10 (Figuras 49 e 50). Porém, o diferencial está na unidade do eixo vertical dos gráficos [kg/m^3]. Como exemplo, o gráfico da Figura 63 traz a comparação, por meio da sobreposição de dados MCNPX, do perfil da curva de concentração radial para os arquivos CFD1 (0,77m), CFD2 (1,52m), CFD3 (3,52m) e CFD4 (5,52m) em função do raio interno normalizado do *riser* (r/R). Já era de se esperar que a curva do perfil radial da densidade de catalisador para estes arquivos possuísse características idênticas às observadas no gráfico da Figura 39, pois como abordado anteriormente, ambos foram desenvolvidos com dados da TCG – V12Â MCNPX.

Figura 63 - Perfil radial da concentração de sólidos, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, determinado com os dados da fração volumétrica de sólidos extraída da TCG – V12Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Desta maneira, a ideia de se avaliar a densidade de sólidos ao longo do tubo-*riser*, fornece o perfil axial que é utilizado para estudar padrões de escoamento (ZHU e WANG,

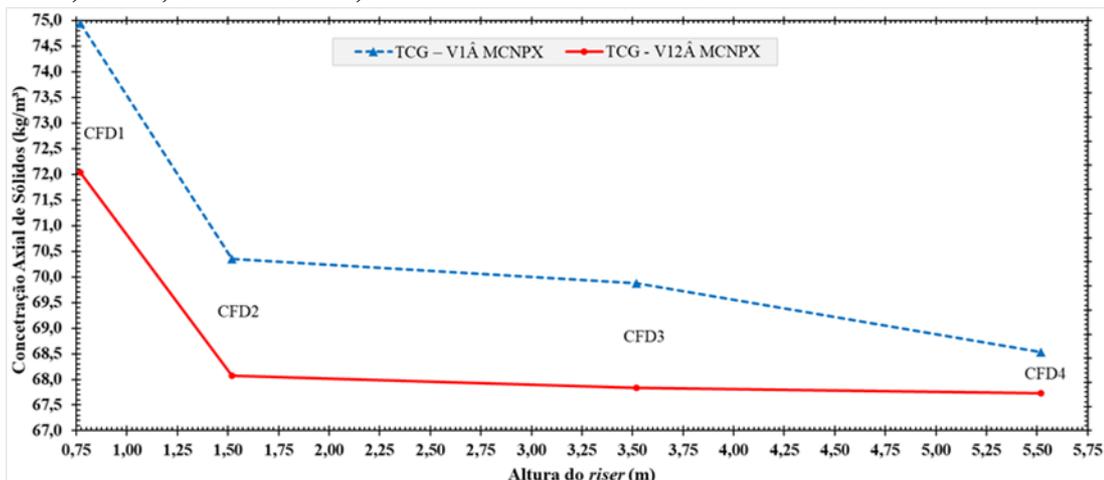
2010). A densidade da partícula e os dados fornecidos nas Tabelas 8, 9 e 10, são utilizados para determinar as médias de concentração nas fatias transversais e, a partir dessa informação, são obtidos os perfis de sólidos ao longo do *riser* com os dados da TCG – V1Â e TCG – V12Â MCNPX para os três grupos de imagens (SOUZA NETTO *et al.* 2013; LIMA FILHO, 2014 e CLAUDINO, 2018).

No gráfico da Figura 64, os perfis axiais determinados com os dados da TCG – V1Â e TCG – V12Â, mostram um grande decréscimo na densidade de sólidos na transição da altura 0,77m para 1,52m, se estabilizando entre 1,52m e o topo do *riser* (TCG – V12Â); decrescendo suavemente na transição da altura 1,52m para 3,52m e com uma queda bem perceptível a partir de 3,52m (TCG – V1Â). Porém, a diferença máxima da densidade de sólidos para os perfis são cerca de 3 kg/m³, garantido uma boa eficiência das técnicas para obtenção deste tipo de perfil. A análise também revela que a elevada entrada de ar e sólidos no sistema impossibilita formação de um padrão escoamento diluído com pequena concentração de partículas na parede do reator, caracterizando uma baixa taxa de recirculação de sólidos.

Nos perfis da Figura 65, tem-se um decréscimo notável a partir da primeira altura, caracterizando, conforme discutido anteriormente (Subsecção 4.2.1), três áreas distintas: densa, de aceleração e diluída. Tal padrão, também é observado na experimentação de OLIVEIRA (2018), onde foram utilizadas medidas de gradiente de pressão para obter o perfil de sólidos ao longo do *riser*. Tanto as medidas com TCG – V1Â quanto as medidas com TCG – V12Â, produziram perfis com valores e comportamento bem próximos para região de aceleração (CFD6) e praticamente idênticos para região diluída (2,50m). No entanto, apesar de mostrarem o acentuado decréscimo na região densa, é nesta área do *riser* onde se tem a maior distância dos valores da concentração das partículas, sendo de aproximadamente 10 kg/m³ na CFD5.

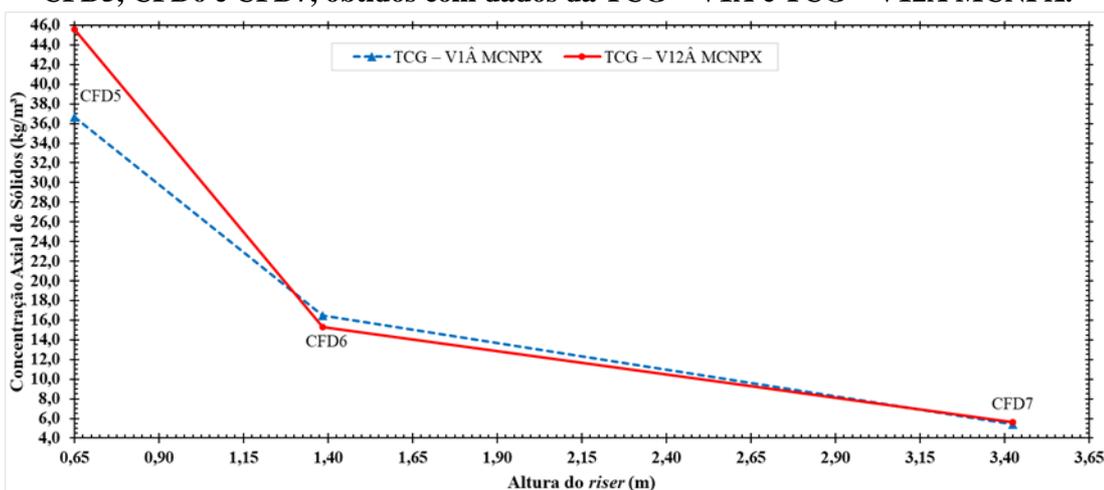
Já na Figura 66, por serem trabalhadas três alturas muito próximas, nota-se uma variação muito baixa para valores da densidade de sólidos entre 0,96m à 1,16m (TCG – V12Â) e um acentuado decréscimo com o perfil determinado com a TCG – V1Â. Porém, é na CFD8 onde observa-se maior diferença entre a densidade de catalisador, sendo de 4 kg/m³. Em ambos os casos, a tênue oscilação dos perfis mostra que os dados da secção axial, obtidos através da média de valores das fatias radiais, foram extraídos da mesma região do tubo-*riser*, ou seja, mesmo na possibilidade de não haver acesso às informações de alturas das secções, o grau de sensibilidade observado nas simulações tomográficas no MCNPX permite indicar que são de alturas muito próximas com padrão escoamento denso e no estado estacionário do sistema, onde não existe grande variação no fluxo bifásico

Figura 64 – Comparação entre os perfis axiais de concentração de sólidos, para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4, obtidos com dados da TCG – V1Â e TCG – V12Â MCNPX.



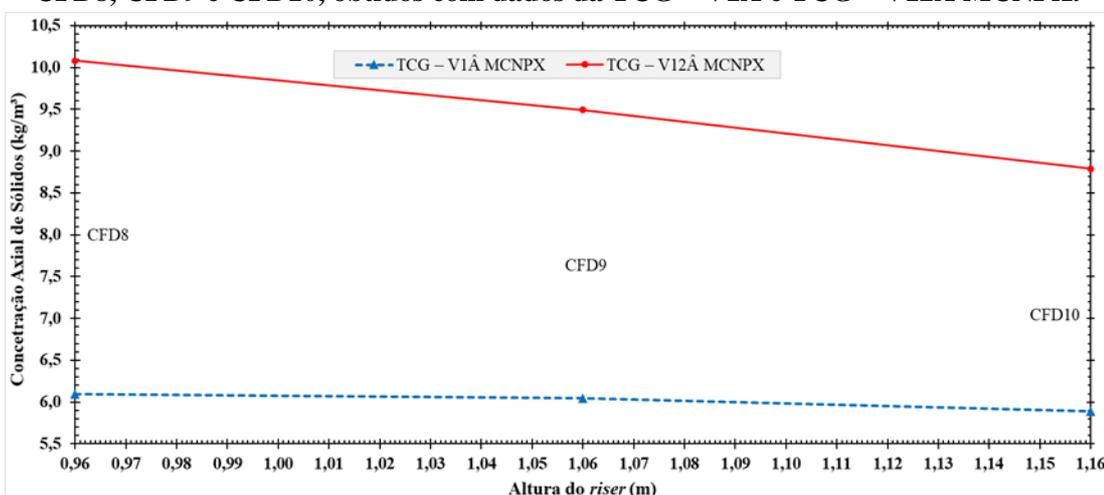
Fonte: Próprio autor.

Figura 65 – Comparação entre os perfis axiais de concentração de sólidos, para os arquivos CFD5, CFD6 e CFD7, obtidos com dados da TCG – V1Â e TCG – V12Â MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Figura 66 – Comparação entre os perfis axiais de concentração de sólidos, para os arquivos CFD8, CFD9 e CFD10, obtidos com dados da TCG – V1Â e TCG – V12Â MCNPX.



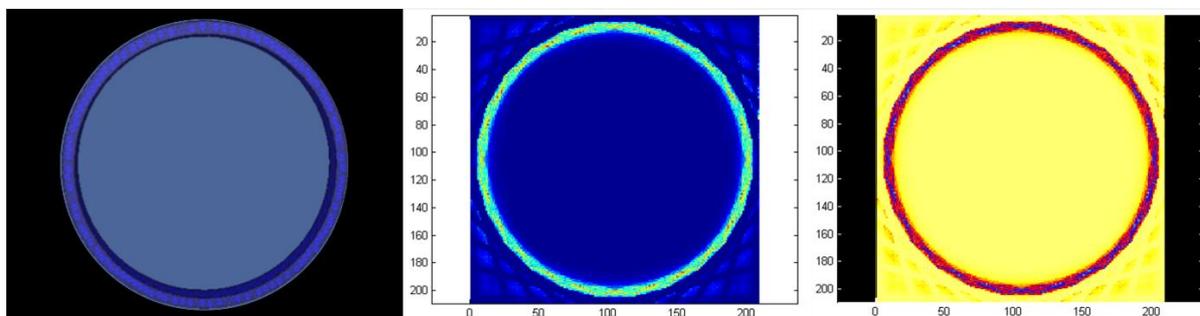
Fonte: Próprio autor.

4.3 RECONSTRUÇÃO DAS IMAGENS

Conforme o abordado na Subsecção 3.9.1, efetuou-se reconstruções com algoritmo MART das secções radiais referente aos dados de saída da tomografia simulada no código MCNPX para o *riser* vazio, arquivos CFD1, CFD2, CFD3, CFD4, CFD5, CFD6, CFD7, CFD8, CFD9 e CFD10. As 11 matrizes de dados, uma para cada arquivo, com as intensidades gama relativa foram criadas a partir do escaneamento do *riser* com 13 vistas, tendo cada giro 212 trajetórias que correspondem ao tamanho do passo (resolução espacial) de 0,5 mm, garantindo que o feixe gama simulado passe sempre por todos os pixels (*grids*) das imagens importadas. Como explanado na Subsecção 3.6.2, estes parâmetros estão ligados, também, a fatores qualitativos (óptico) das imagens reconstruídas, ou seja, têm por objetivo estabelecer outra perspectiva da distribuição bifásica gás-sólido e, ao fim, garantir uma comparação visual da distribuição bifásica presente na imagem CFD acoplada ao código com a CFD reconstruída.

Na Figura 67 é vista, por meio do *vised.exe* MCNPX, a secção radial do *riser* com ar (esquerda), a reconstrução tomográfica MART da mesma secção (centro) e com cores invertidas (direita). O Erro Médio Quadrático (RMSE) para esta imagem foi de 4,49%.

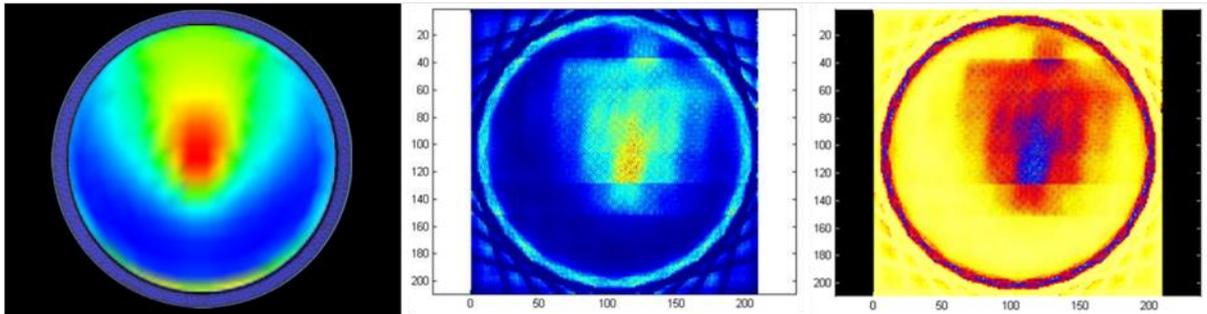
Figura 67 – Reconstrução de secção radial do *riser* vazio obtida com dados da simulação.



Fonte: Próprio autor.

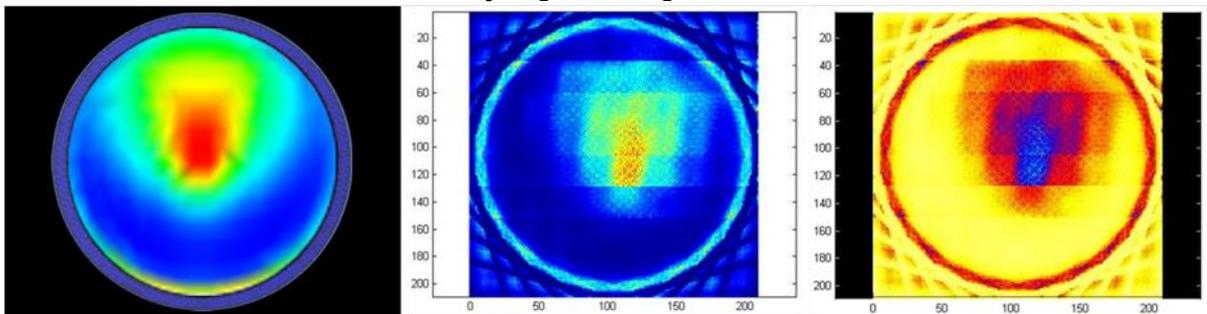
As Figuras 68, 69, 70 e 71, são resultados das reconstruções MART de secções radiais do *riser* com distribuição bifásica para os arquivos CFD1, CFD2, CFD3 e CFD4 e, apresentam o RMSE de 4,06%, 4,15%, 4,16% e 4,00%, respectivamente. A esquerda das figuras, observa-se a imagem com diferentes distribuições de ar-catalisador em tons de cores da escala CFD, no centro é apresentada a imagem reconstruída, correspondente ao arquivo CFD no qual se originou (imagem importada). Na finalidade de trazer uma outra perspectiva visual, à direita observa-se a reconstrução MART da mesma imagem com cores invertidas. Todas as quatro reconstruções destacam uma elevada densidade de sólidos na porção central das mesmas, sendo mínima na região correspondente ao tom de cor azul presente nos arquivos CFD.

Figura 68 – Reconstrução de secção radial do *riser* em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD1.



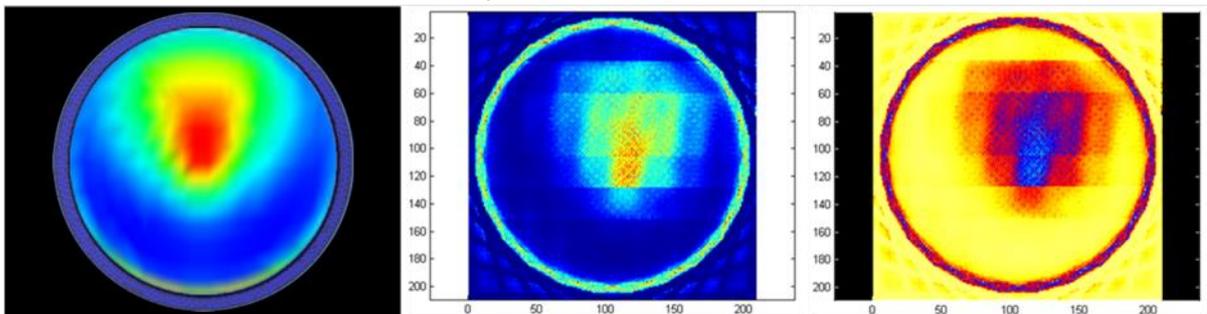
Fonte: Próprio autor.

Figura 69 – Reconstrução de secção radial do *riser* em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD2.



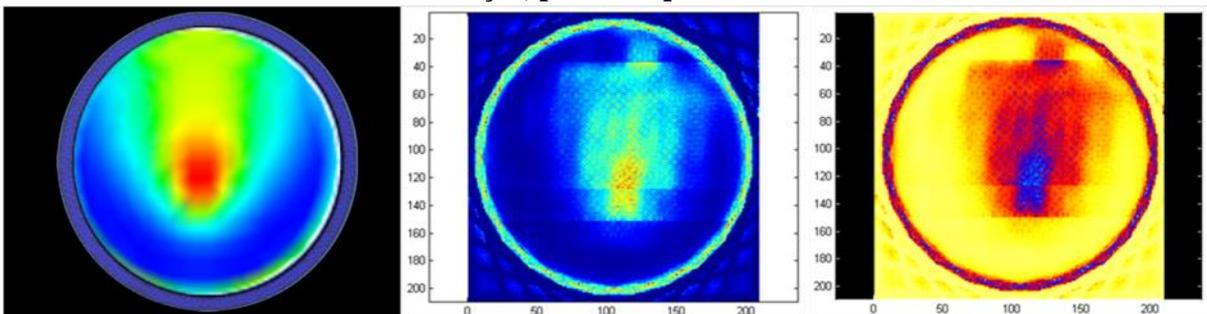
Fonte: Próprio autor.

Figura 70 – Reconstrução de secção radial do *riser* em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD3.



Fonte: Próprio autor.

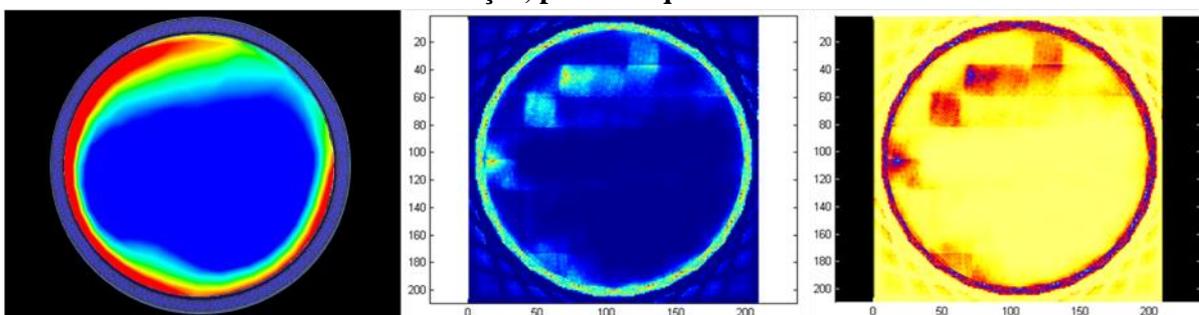
Figura 71 – Reconstrução de secção radial do *riser* em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD4.



Fonte: Próprio autor.

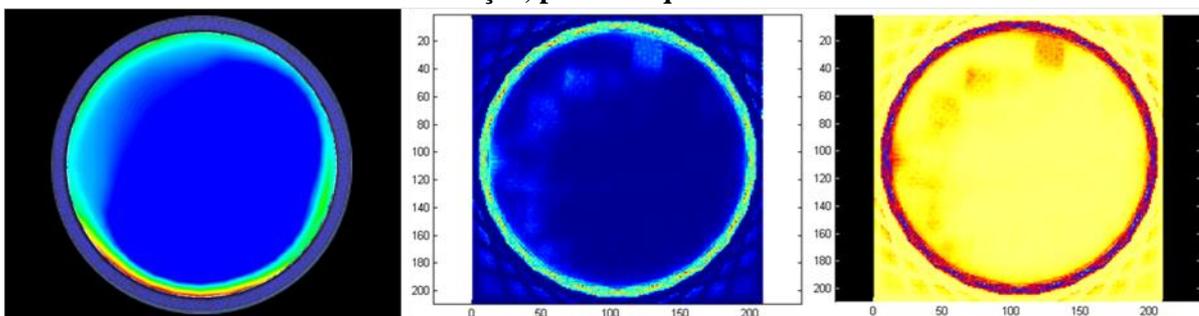
As reconstruções das imagens CFD5, CFD6 e CFD7 seguiram a mesma lógica da apresentada anteriormente, ou seja, a direita das figuras corresponde ao arquivo CFD importado, o centro a imagem reconstruída e a esquerda com cores negativas. O RMSE da reconstrução presente na Figura 72 é 4,72%, na Figura 73 é 4,28% e na Figura 74 é 4,79%. Nestas figuras, nas reconstruções nota-se um leve deslocamento das regiões mais densas em relação ao arquivo CFD acoplado (tons de vermelho), que pode ser resultado da interferência da parede do *riser* na interação da radiação gama com os pixels próximos a essa região, ou seja, provavelmente o efeito de borda (GUEDES, 2016) causado pela interface parede-catalisador.

Figura 72 – Reconstrução de secção radial do *riser* em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD5.



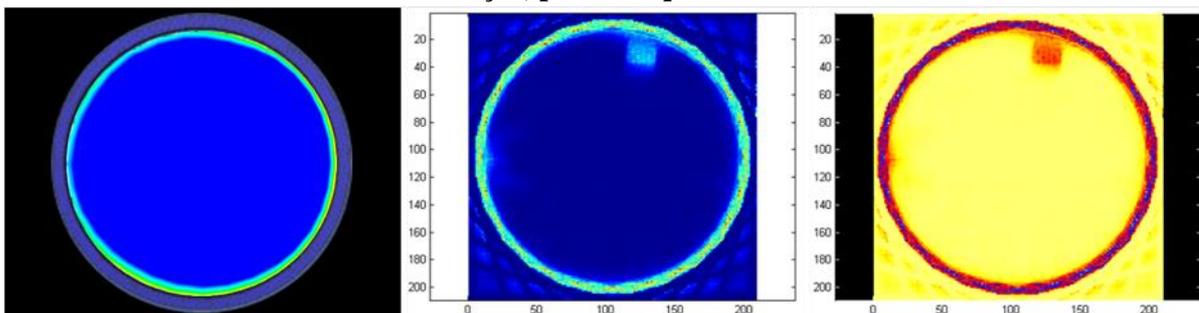
Fonte: Próprio autor.

Figura 73 – Reconstrução de secção radial do *riser* em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD6.



Fonte: Próprio autor.

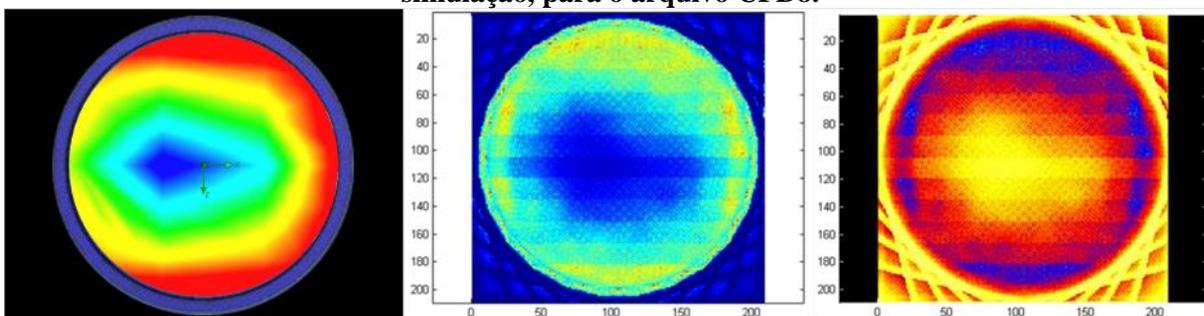
Figura 74 – Reconstrução de secção radial do *riser* em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD7.



Fonte: Próprio autor.

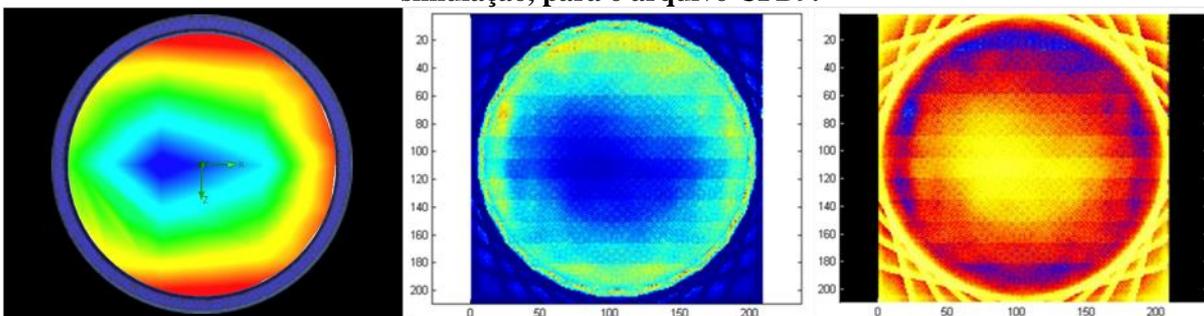
As reconstruções para os arquivos CFD8 (Figura 75), CFD9 (Figura 76) e CFD10 (Figura 77), por retratarem secções muito próximas, têm a particularidade de mostrar a influência da dinâmica no deslocamento gás-sólido em relação ao aumento da altura da secção radial examinada. Na CFD8 é vista maior concentração de sólidos próxima as paredes do tubo e uma região central com pouca densidade, conforme é aumentada a altura (CFD9) tem-se uma menor quantidade de sólidos na parede e uma região central mais destacada, sendo tais características mais evidenciadas na CFD10. Os arquivos possuem o RMSE de 4,14%, 4,31% e 4,44%, respectivamente, e bem ao contrário do que é visto nas Figuras 72, 73 e 74, não se vê interferência clara do efeito de borda na distribuição periférica de ar-catalisador.

Figura 75 – Reconstrução de secção radial do *riser* em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD8.



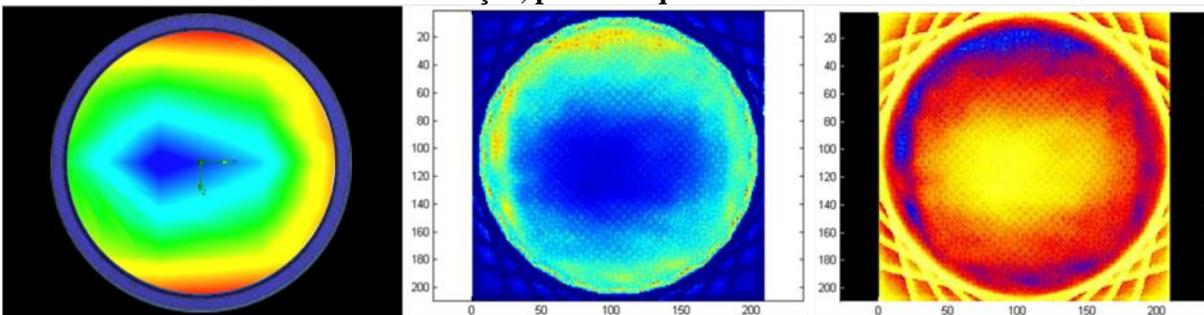
Fonte: Próprio autor.

Figura 76 – Reconstrução de secção radial do *riser* em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD9.



Fonte: Próprio autor.

Figura 77 – Reconstrução de secção radial do *riser* em condição de fluxo, obtida com dados da simulação, para o arquivo CFD10.



Fonte: Próprio autor.

5 CONCLUSÕES

A implementação de softwares específicos para importar geometrias representadas por secções radiais do tubo-*riser* com gás e arquivos de imagem CFD, descrevendo a distribuição bifásica nestas secções, para o código computacional MCNPX e a consequente execução da tomografia gama de primeira geração, mostraram resultados bastante promissores, onde de forma inédita no Grupo de pesquisa, se determinaram parâmetros da fluidodinâmica a partir de simulações Monte Carlo. Isto abriu caminho para comparação de informações obtidas com as simulações numéricas de CFD em softwares, como *SolidWorks* e *Ansys Fluent* e, também, com as medidas experimentais de transmissão gama executadas em pontos específicos da unidade física, sendo estes últimos fundamentais na validação de dados do MCNPX.

Além disso, a análise MCNPX do perfil radial da fração volumétrica e concentração de sólidos em várias secções nas diferentes alturas também viabilizou o estudo mais aprofundado de fenômenos presentes no escoamento vertical, entres eles, a diferença entres as velocidades das fases e a recirculação de sólidos, ambos identificados através do tratamento de dados de saída do código em conjunto com as imagens CFD. As simulações foram determinantes na identificação de mudança no padrão de escoamento bifásico ao longo das alturas do *riser*. Tais informações permitem uma vista axial mais aprofundada do comportamento de fluxo gás-sólidos, já que a experimentação com uso de radiação tem suas limitações, empecilho ausente nas simulações tomográficas MCNPX.

Parâmetros físicos, como os coeficientes de atenuação linear e mássico do catalisador, foram avaliados. A introdução das mesmas condições experimentais dentro do código possibilitou a perfilagem de dados simulados por resultados inerentes da experimentação e comparação com informações do banco de dados NIST XCOM. O escaneamento gama de fatias radiais do *riser* propiciou avaliar a atenuação gama relativa em situação de fluxo gás-sólidos e sem fluxo. Além disso, tal parâmetro foi fundamental na geração de matrizes para reconstrução das imagens com o algoritmo MART otimizado. A qualidade das imagens reconstruídas foi testada por meio de comparação com a distribuição bifásica presente nos arquivos CFD acoplados, mostrando ótima precisão na avaliação qualitativa de escoamento.

Portanto, o processo de integração das diferentes plataformas de estudo, como o *Solidworks*, *Ansys Fluent*, experimentação, sistema de controle e MCNPX, iniciou-se quando as informações extraídas da mesma amostra de referência convergiram entre si, conforme foi visto no estudo atual. Assim, dados obtidos com as simulações no MCNPX, além de validados por experimentos, complementaram as avaliações fluidodinâmicas do sistema presente na UPF.

6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como trabalhos futuros ficam as seguintes propostas:

- Manter a vazão gás-sólido constante e no estado estacionário na UPF para realizar rodadas de medidas experimentais através da técnica tomográfica por transmissão gama nas três mesas do *riser* da UPF e obter dados por análise do gradiente de pressão ao longo do tubo-*riser*, incluindo às secções avaliadas nas irradiações gama;
- A partir dos novos dados experimentais, realizar simulações do escoamento gás-sólido na Unidade Piloto a Frio Virtual para gerar arquivos CFD validados pelos mesmos;
- Executar simulações da tomografia por transmissão gama de primeira geração, com e sem ângulos, dos arquivos de imagem acoplados ao MCNPX e otimizar a resolução de saída das *grids* ou número de pixels;
- Determinar nas simulações MCNPX, através de inserção de dados MCNPX nas adaptações de equações da fluidodinâmica, as diferenças dos gradientes de pressão em secções radiais do *riser*, comparar com dados experimentais e simulações CFD executadas no software *SolidWorks*;
- Validar os parâmetros fluidodinâmicos determinados no MCNPX com dados experimentais extraídos das medidas de pressão e por transmissão gama;
- Utilizar algortimo de reconstrução algébrica de imagens tomográficas, disponíveis no toolbox para MATLAB ASTRA, para estudar a distribuição bifásica em secções radiais;
- Introduzir cores da escala CFD nas reconstruções das secções radiais e interpolar às mesmas para obter à reconstrução do perfil axial de gás e sólido;
- Implementar o modelo integrado de simulações MCNPX/CFD como forma de avaliação ampliada dos fenômenos fluidodinâmicos presentes na Unidade Piloto a Frio experimental.

REFERÊNCIAS

AMBEKAR, Aniket; SIVAKUMAR, R; ANANTHARAMAN, N; VIVEKENANDAN, M. CFD simulation study of shell and tube heat exchangers with different baffle segment configurations. **Applied Thermal Engineering**, 108, 999-1007, 2016.

BARKMEYER, J. E.; FEENEY, A. B.; DENNO, P.; FLATER, D. W.; LIBES, D. E.; STEVES, M. P.; WALLACE, E. K. “**Concepts for Automating Systems Integration**” National Institute of Standards and Technology, NISTIR 6928.

BERTONY, Vieira, E.; CRUZ FILHO, A. J.; BARBOSA, E. S.; LIMA, E. A.; MELO, S. B.; DANTAS, C. C.; CLAUDINO, Leandro. Computational integration strategy to investigate the circulating two-phase flow in a cold pilot unit and experimental data validation. In: INAC 2017 – **International Nuclear Atlantic Conference**, 2017, Belo Horizonte. 2017.

BRIEMEISTER, J.F. Ed. “**MCNP - A General Monte Carlo N Particle Transport Code, Version 4C**,” LA-13709-M. 2000.

BRITO, M. F. P; NETTO, W. F. S.; MIRANDA, M. V. F. E. S.; JUNIOR, I. A. S.; DANTAS, C. C.; SANTOS, V. A.; MELO, S. B.; LIMA E. A. O. Monitoring catalyst flow rate in a fcc cold pilot unity by gamma ray transmission measurements. **International Nuclear Atlantic Conference**, 24-29, 2013.

BRITO, M. F. P. **Monitoramento da Taxa de Fluxo do Catalisador FCC em uma Unidade Piloto a Frio por Medição de Transmissão Gama**. Dissertação de mestrado – Departamento de Energia Nuclear – Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2014.

CABRAL, M. O. M. **Desenvolvimento de um Modelo Computacional de Exposição Para Uso em Avaliações Dosimétricas em Gestantes**. Dissertação de mestrado – Departamento de Energia Nuclear – Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2015.

CARTER L.L., SCHWARZ R.A., and PFOHL J. “**A Microsoft Windows Version of the MCNP Visual Editor**,” Trans. Amer. Nucl. Soc., **81**, 256-257 (1999).

CARTER, L.L. and R.A. SCHWARZ, “**MCNP Visual Editor Computer Code Manual**,” distributed with RSICC package C00710. 2002.

CASSOLA, V.F. **Acoplamento dos Fantomas Tomográficos FAX06 e MAX06 ao Código Monte Carlo GEANT4**. Tese de Doutorado – Departamento de Energia Nuclear – Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2007.

CLAUDINO L. SILVA, VIEIRA E. BERTONY, DANTAS C. C, BARBOSA E. SANTOS AND OLIVEIRA M. F. M. two-phase flow in 3d cad pilot unit simulation and gamma ray tomography validation, **9th World Congress on Industrial Process Tomography**, World Heritage City of Bath – England, 2 – 6 September 2018.

CONSTANTIN, M; CONSTANTIN, D.E; KEALL, P.J; NARULA A; SVATOS M; PERL J. **Linking computer-aided design (CAD) to Geant4-based Monte Carlo Simulations for Precise Implementation of Complex Treatment Head Geometries.** *Phys Med Biol*,v.55, p 211-220, 2010.

CORREIA, I. K.S. **Estudo por Monte Carlo de Espectros de Raios X de Radiodiagnóstico para Aplicações na Física Médica.** Dissertação de mestrado –Universidade Estadual de Santa Cruz, Ilhéus-Bahia, 2011.

CRUZ, A J, Dantas C. C, (2016), et all, IPT in Industry – Digital Control Design for a Circulating Fluidized Bed Unit Using Gamma Transmission Measurements, **ISIPT 8th World Congress in Industrial Process Tomography**, Igaussu Falls, Brazil.

DANTAS, C. C.; SANTOS, V. A.; MELO, A. C. B. A., GRIEKEN, R. V. Precise gamma ray measurement of the radial distribution of a cracking catalyst at diluted concentrations in a glass *riser*. **Nuclear Instruments and Methods in Physical Research**, vol. 251, p. 201-208, 2006.

DAVIDSON, J. F. **Circulating fluidized bed hydrodynamics.** *Powder Technology*, v. 113, p. 249-260, 2000.

DEROUIN, C.; NEVICATO, D.; FORISSIER, M.; WILD, G.; BERNARD, J. R. Hydrodynamics of *riser* units and their impact on FCC operation, **Industrial and Engineering Chemistry Research**, vol. 36, p. 4504-4515, 1997.

DIXIT, Tisha.; GHOSH, Indranil.. Simulation intricacies of open-cell metal foam fin subjected to convective flow. **Applied Thermal Engineering**, 137, 532-544, 2018.

DUDUKOVIC, M. P. Use of gamma ray computed tomography (CT) and computer aided radioactive particle tracking (CARPT) in multiphase reactors. **Industrial Engineering Chemical Research**, V. 57, n.6, p.249-261, 2003.

ERTHAL, R. H. **Modelagem e Simulação Dinâmica de um Conversor de Craqueamento Catalítico.** Dissertação de mestrado – Departamento de Pesquisa e Pós-Graduação – Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná. Curitiba, 2003.

GRASSLER, T.; WIRTH, K. E.. X-Ray computed tomography in mechanical engineering - a non-intrusive technique to characterize vertical multiphase flows. **Computerized tomography for industrial applications and image processing in radiology.** Vol. 67, pp. 203-219. 1999.

GUEDES, K. A. N. **Simulação por Meio do Código MCNPX de Tomografia Gama e Validação com Dados Experimentais.** Dissertação de mestrado – Departamento de Energia Nuclear – Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2016.

GURECKY, W. L. **Development of an MCNP6 - ANSYS FLUENT Multiphysics Coupling Capability**. Dissertação de mestrado – Department Science in Mechanical Engineering– The University of Texas. Austin, 2015.

HOWARD, W.E., MUSTO, J.C. **Introduction to Solid Modeling Using Solidworks**. *McGraw-Hill*, 2006.

HEUERT, J., KHATCHATOURIAN, O. **Aplicação de Métodos de Polinômios de Chebyshev e de Extrapolação para Aceleração de Métodos Iterativos**. Departamento de Física, Estatística e Matemática - Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul. Ijuí, 2003.

LIANG, Yongshi; ZHANG, Yongmin; LU, Chunxi. CPFD simulation on wear mechanisms in disk-donut FCC strippers. **Powder Technology**, v279, p. 269 – 281, 2015.

LIMA FILHO, H. J. B. **Validação de modelos CFD bi e tridimensionais de um riser piloto a frio com auxílio de medidas de transmissão gama**. Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Química - Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2014.

LUCKOS, A.; HOED, P. A study into the hydrodynamic behavior of heavy minerals in circulating fluidized bed, **Industrial Fluidization South Africa**, v. 1, p. 345-355, 2005.

LUO, Y. **Research on Models Conversion and its Application in MCNP Modeling**. Dissertação de Mestrado - Universidade de Tecnologia de Hefei. Hefei, 2005.

MAAD, R. e JOHANSEN, G. A.. Experimental analysis of high-speed gamma-ray tomography performance. **Measurement Science and Technology**. Bergen, vol 19, number 8. Junho, 2008.

MATSEN, J. M. Scale-up of fluidized bed processes: Principle and practice, **Powder Technology**, vol. 88, p. 237-244, 1996.

MCNP6 User's Manual. Los Alamos, Outubro 2017.

MOSOROV, V.; JOHANSEN, G.A.; SANKOWSKI, D. **Monte Carlo Simulation for Multi-Channel Gamma-Ray Process Tomography**. *Measurement Science and Technology*, 22, 01-10, 2011.

MOURA, A. E. **Controle da injeção de catalisador em uma unidade piloto tipo FCC a frio**. Dissertação de mestrado – Departamento de Energia Nuclear – Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2015.

MUSARUDIN, M.; SARIPAN, M. I.; MASHOHOR, S.; SAAD, W. H. M.; NORDIN, A. J.; HASHIM, S.; Preliminary Results From Attenuation Correction for MCNP-Generated PET Image. **International Conference on Biomedical Engineering and Sciences**, 2012.

NIST – **National Institute of Standards and Technology. XCOM.** Disponível em <<http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html>>. Acesso em: 2 de maio 2019.

OLIVEIRA, E. F. **Reconstrução Tomográfica com Superfícies B-Splines.** Dissertação Mestrado — Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, 2011.

OLIVEIRA, K. M. **Tomografia Gama Computadorizada e Simulações com MCNPX Aplicados para Estudo da Solda.** Dissertação de mestrado – Departamento de Energia Nuclear – Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2017.

OLIVEIRA, M.F.M. **Modelagem Do Transporte de Sólidos em Regime Denso em Unidade Piloto A Frio por Medição de Transmissão Gama.** Dissertação de mestrado – Departamento de Energia Nuclear – Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2018.

PALENSTIJN, W. J; BATENBURG K.J; SIJBERS, J. “The ASTRA Tomography Toolbox”. **Proceedings of the 13th International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering.** – CMMSE. 2013.

PEIXOTO, P.H.R. **Desenvolvimento de um Modelo Computacional Para Avaliações Dosimétricas em Ratos.** Tese de Doutorado – Departamento de Energia Nuclear – Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2008.

PELOWITZ, D. B., **MCNPX User’s Manual Version 2.6.0,** Los Alamos National Laboratory, United States of America, 2008.

SALGADO, W.L. **Metodologia Para a Modelagem de um Sistema de Monitoração de Interface de Subprodutos de Petróleo em Polidutos Usando a Atenuação da Radiação Gama.** Dissertação de Mestrado – Instituto de Engenharia Nuclear – Comissão Nacional de Energia Nuclear. Rio de Janeiro, 2018.

SANTOS, K.A.L. **Validação Da Simulação Por CFD do Riser de uma Unidade Piloto a Frio de FCC Utilizando Transmissão Gama.** Dissertação de mestrado – Departamento de Energia Nuclear – Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2013.

SANTOS, W.S. **Avaliação das Doses Ocupacionais e Médicas e dos Risco de Câncer em Procedimentos Cardíacos de Radiologia Intervencionista Utilizando Método de Monte Carlo.** Tese de Doutorado – Núcleo de Pós-Graduação em Física – Universidade Federal de Sergipe. São Cristovão, 2014.

SANTOS, A. **Estudo, Utilizando Simulações em Monte Carlo Para Transformação da Pilha Subcrítica do Centro Tecnológico do Exército em um Reator Multipropósito Moderado a Grafite e Refrigerado a Ar.** Tese de doutorado – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2015.

SCHWARZ, R.A. SCHWARZ, A.L. and CARTER, L.L. “Conversion of Computer Aided Design (CAD) Output Files to Monte Carlo N-Particle (MCNP) Input Files,” Monte Carlo 2005 topical meeting, The Monte Carlo Method: **Versatility in a Dynamic Computing World**, Chattanooga, Tennessee. 2005.

SCHWARZ, R.A. **Graphical User Interface for High Energy Multi-Particle Transport. Final Report.** 2008 Disponível em:<
http://www.mcnpvised.com/Downloads/mcnp_x_conversion_final_website.pdf> Acesso em: 17 novembro. 2018.

SHAH, M. T.; UTIKAR, R. P.; TADE, M. O.; PAREEK, V. K. Hydrodynamics of an FCC riser using energy minimization multiscale drag model. *Chemical Engineering Journal*, v.168, p.812-821, 2011.

SHULTIS, J. K.; FAW, R. E. **An mcnp primer.** 2011. Disponível em: <<http://www.mne.k-state.edu/~jks/MCNPprmr.pdf>>. Acesso em: 16 abril. 2019.

SILVA, LEANDRO C.; VIERA, EUDES B.; DANTAS, CARLOS C.; BARBOSA, ENIVALDO S.; OLIVEIRA, MARCELA F. M. A Two-Phase Flow in 3D Cad Pilot Unit Simulation and Gamma Ray Tomography Validation. In: **WCIPT 2018**, Bath. United Kingdom, 2013.

SONG, J. SURH, H.B. KIM, S .J, KOO, B. Elaborate SMART MCNP Modelling Using ANSYS and Its Applications. *Chemical Engineering Journal*, v. 96, pp. 81– 98, 2003. EPJ Web of Conferences, v, 153, p. 305– 310, 2017.

SOUZA NETTO, Wilson F.; BRITO, Marcio F. P.; DANTAS, Carlos C.; SILVA, Jose Marcos F.; FREITAS, Romero B.; SANTOS, Valdemir A.; BARBOSA, Enivaldo S. A Fluiddynamic Model For Catalyst Flow In Riser Of A FCC Cold Pilot Unity Is Validated By Gamma Ray Transmission Measurements. In: **INAC 2013**, Recife. Rio de Janeiro: ABEN, 2013. Volume. 1, 2013.

VAN WACHEM, B. G. M., ALMSTEDT, A. E., “Methods for multiphase computational fluid dynamics”, *Chemical Engineering Journal*, v. 96, pp. 81– 98, 2003.

VIANA, M. S.; DANTAS, C. C.; BARBOSA, E. S.; ANDRADE, B.; VIEIRA, E. B.; SILVA, L. C.; HARDMAN, M.; SILVA, V. H. F.F. A model for calculating the recirculation rate of solids by means of fluid dynamics parameters validated by CT gamma ray tomography. **International Nuclear Atlantic Conference**, 21-25 October, 2019.

VIEIRA, J. W., LEAL NETO, V., LIMA FILHO, J. M., LIMA, L. F., LOPES FILHO, F. J., ROCHA, E. A., and LIMA, F. R. A., Estimate of Dose Distribution in Voxel Phantom Irradiated by a Planar Source Modeled by Translational Normal Probability Density Functions. 2012, **International Symposium on Radiation Physics**, Rio de Janeiro, Brazil, 7-12 October, 2012a

WANG, Yinfeng; WANG, Xiauyuan; CHEN. Haijun; TAYLOR, Robert; ZHU, Yuezhao. A combined CFD/visualized investigation of two-phase heat and mass transfer inside a horizontal loop thermosiphon. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, 112, 607-619, 2017.

ZHOU, Q; YANG, J; WU, J; TIAN, Y; WANG, J; JIANG, H e LI, K,C. An improved algorithm to convert CAD model to MCNP geometry model based on STEP file. **Annals of Nuclear Energy**. v, V8. P, 81-88. 2015.

ZHU, C; WANG, D. Resistant Effect of Non-Equilibrium Inter-Particle Collisions on Dense Solid Transport. **Particuology**, vol. 8, p.544-548, 2010.

ZIEGLER. J. "An Interface Program For The Conversion of Ansys to MCNPX Geometry", **Scientific and Technical**. v, VI. P, 136-137. 2002.

APÊNDICE A – CONSTRUÇÃO DO ARQUIVO DE ENTRADA DAS GEOMETRIAS NO MCNPX

A.1 O MCNPX

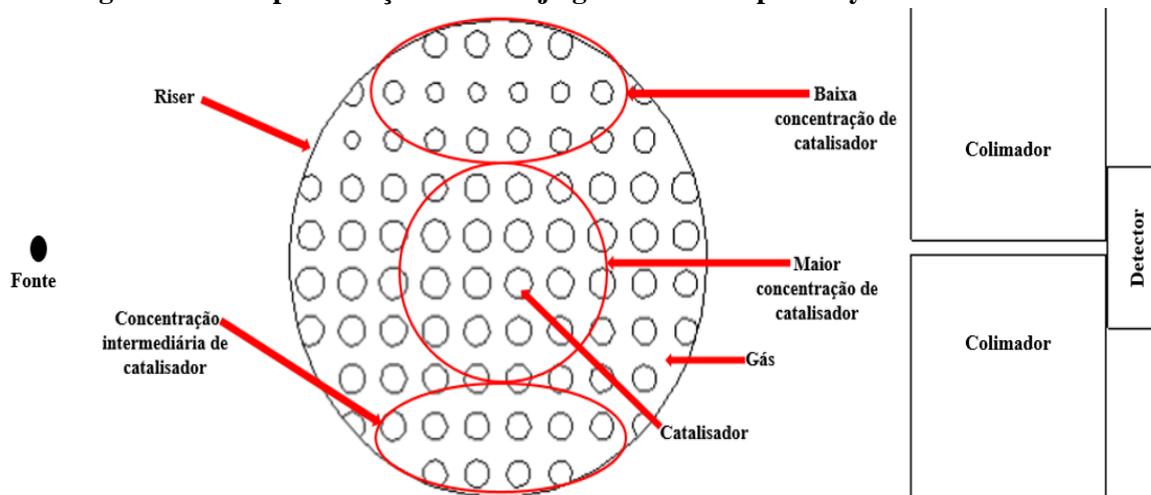
Os cálculos desenvolvidos pelo MCNPX recorrem a uma biblioteca de secções de choque, seguidos de um arranjo de forma pontual (energia contínua), discreta ou multigrupo; além disso, possui diversas técnicas de redução de variância. O arquivo de entrada do MCNPX (*Input*) permite ao usuário especificar: tipo de fonte, de detector, configuração da geometria e condições gerais do sistema desejado, como tamanho, forma, espectro de energia, composição da fonte de radiação bem como do meio que a radiação irá interagir e definição da geometria do detector desejado.

A.1.1 Arquivo de Entrada do MCNPX

Para executar a simulação pelo MCNPX, foi necessário escrever um arquivo de entrada no formato txt. e executá-lo através da tela de comando. Após a simulação, o MCNPX gera um arquivo de saída que contém a resposta desejada.

Nesse arquivo é expressado a geometria do sistema considerado, tal como pode-se observa na Figura A.1, onde um feixe gama de 60 keV, proveniente da fonte de Am-241, incide sobre um cilindro de acrílico (*riser*) com catalisador no interior. Nesta figura é possível observa a geometria do tomógrafo no plano xy com fonte, detector, colimadores e o objeto-teste.

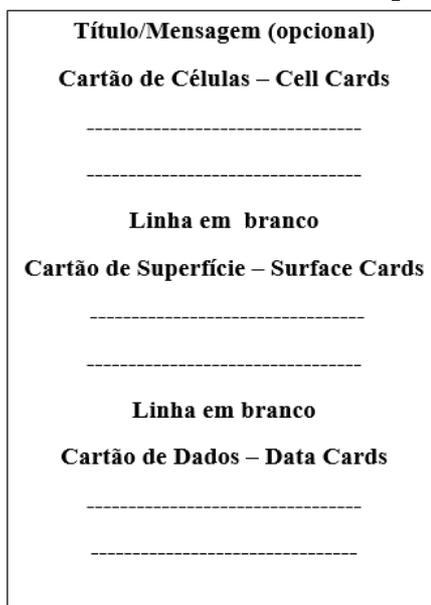
Figura A.1 – Representação de arranjo geométrico no plano xy visto no MCNPX.



Fonte: Próprio autor.

Esses dados são fornecidos ao código através de 4 bloco de dados, o Título/Mensagem (opcional), os “CELL Cards”, os “SURFACE Cards” e os “DATA Cards”, na Figura A.2 é possível visualizar a representação do arquivo de entrada no MCNPX.

Figura A.2 – Estrutura comum a todos os arquivos de entrada.



Fonte: Próprio autor.

A palavra “cartão” é usada no manual do MCNPX para descrever uma única linha de até 80 caracteres, no arquivo de entrada.

A.1.1.2 Título

O título é a descrição básica do problema ou modelo a ser simulado. Abrange a primeira linha do arquivo de entrada, podendo ser omitido. A Figura A.3 mostra a descrição do objeto-teste (*riser*) utilizado com o raio interno de 46 mm, raio externo de 50 mm e, conseqüentemente, tendo a espessura da parede de 4 mm.

Figura A.3 – Descrição do objeto-teste.

Riser: Tubo cilíndrico de polimetilmetacrilato com ar R.E=5.0cm R.I:4.6cm

Fonte: Próprio autor.

A.1.1.3 Cartão de células

O cartão de célula (*cell cards*) é a primeira informação sobre a geometria do sistema a ser simulado (a numeração da célula; o material; a densidade; a importância) e engloba os objetos do sistema da simulação.

A geometria é feita com construções como plano, esfera, cilindro, cone entre outros. Além disso, são usadas as funções de interseção, união e complementar.

As células são numeradas para que seu material constituinte seja definido no cartão de dados. Se o material for o vácuo não é necessário numerá-lo.

A densidade é determinada em unidades de 10^{24} átomos por centímetro cúbico (quando o valor vem sem sinal) ou gramas por centímetro cúbico (quando antes do valor vem o sinal negativo).

A importância (comando “IMP”) é determinada em relação à partícula escolhida (“N” para nêutrons, “P” para fótons, “H” para prótons e “E” para elétrons) na simulação e indica se a célula é importante ou não para a simulação (“1” ou “0”, respectivamente). Exemplo:

- IMP:N=1 O transporte de nêutron será simulado
- IMP:N=0 O transporte de nêutron não será simulado

Como é possível simular mais de uma partícula, o comando “IMP” fica, por exemplo, “IMP:P,E”, para simulações de fótons e elétrons.

Formato do algoritmo célula é: j m d o p.

Em que: “j” é o número da célula; “m” é o material do qual é feito a célula (0 indica vácuo); “d” é a densidade do material da célula (ausente no vácuo) em unidades 10^{24} átomos/cm³ ou g/cm³; “o” é a operação; e “p” é o parâmetro de importância da célula na simulação.

Por exemplo, a Figura A.4.

Figura A.4 – Exemplo de algoritmo do cartão de célula do MCNPX.

```
C Cell cards
1 1 -1.19 1 -2 -3          imp:p=1 $ Parede do Tubo de Acrilico
```

Fonte: Próprio autor.

Na figura acima lê-se: célula 1 constituída pelo material 1 de densidade 1,19 g/cm³ (densidade do polimetilmetacrilato), é limitada pelas superfícies 1 (parte externa) e 2 (parte interna) e encontra-se dentro da superfície 3, tem importância para simulação de fótons e um comentário que pode ser opcional.

A.1.1.4 Cartão de superfície

Este cartão (*surface card*) determina as formas geométricas pré-definidas, que podem ser bi e tridimensionais, como planos, esferas, elipsoides, paraboloide, hiperboloide, dentre

outras, a serem utilizadas na representação do problema. Para isso, são utilizados símbolos mnemônicos (dado pelo manual do código) indicando o tipo de superfície e, em seguida, os coeficientes que caracterizam a superfície selecionada. Por exemplo, para uma superfície plana normal ao eixo X, o código é: “PX”.

O algoritmo pede que se informe a numeração da superfície (normalmente cada célula tem duas superfícies), o código geométrico da superfície (como falado acima) e a entrada dos coeficientes de acordo com a tabela mnemônica presente no manual (Figura A.5).

Formato do algoritmo célula é: j a l

Em que: “j” é o número da superfície; a é o código da geometria (fornecido no manual); e “l” é a entrada da geometria segundo os parâmetros da mesma tabela, tais parâmetros são dados em centímetros.

Figura A.5 – Exemplo de algoritmo do cartão de superfície do MCNPX.

```
c surface cards
1  cz  4.60    $ Parede interna do cilindro paralela a Z
2  cz  5.00    $ Parede externa do cilindro paralela a Z
```

Fonte: Próprio autor.

O que está escrito na figura acima são as superfícies 1 e 2, a qual representa um único cilindro paralelo ao “eixo z” e cujo os raios externo e interno são respectivamente: 5 centímetros e 4,6 centímetros, que corresponde as medidas reais do *riser* da UPF.

A.1.1.5 Cartão de dados

No bloco de dados são fornecidas todas as informações sobre os tipos de radiação permitidos na simulação, a fonte (tipo, posição, energia, direção), a composição dos materiais empregados nas células, as saídas de interesse, a aparência do arquivo de saída (*output*), o tempo de processamento (número de histórias).

(a) Tipo de radiação:

São os “*mode cards*”. Determina o tipo de radiação a ser simulada usando-se a mesma nomenclatura do cartão de células. O MCNPX pode simular o transporte de nêutrons (padrão); nêutrons e transporte de fótons induzidos por nêutrons; apenas o transporte de fótons; apenas o transporte de elétrons; transporte de fóton elétrons e nêutrons; fótons induzidos por nêutrons; transporte de elétrons e mais 34 partículas diferentes.

Aqui se define o modo de simulação: N apenas o transporte de nêutrons (padrão); N P para nêutrons e transporte de fótons induzida por nêutrons; P apenas o transporte de fótons; E

apenas o transporte de elétrons; P E fóton e de transporte de elétrons; e N P E nêutrons, fótons induzidos por nêutrons e de transporte de elétrons; H apenas para o transporte de prótons; H P para prótons e transporte de fótons de freamento induzido por prótons; N P H para o transporte de nêutrons, fótons e prótons, um exemplo é mostrado na Figura A.6.

Figura A.6 – Exemplo de algoritmo do cartão de tipo de radiação do MCNPX.

```
c data card
mode p
```

Fonte: Próprio autor.

A figura acima indica que a fonte de radiação simulada nesse trabalho foi apenas de fótons, ou seja, modo de simulação de fótons.

(b) Materiais:

Nos cartões de materiais (*material cards*), são definidos os materiais que constituem as células, através de suas composições isotópicas, representadas pelo número atômico (Z) e massa (A) de cada elemento. Também é possível ter mais de um material constitutivo na célula; neste caso, informa-se a fração atômica ou mássica, como exemplificado na Figura A.7.

Formato do algoritmo célula é: m Z A F

Em que: “m” é o material do qual é constituído a célula; “Z” é o número atômico do material; “A” é a massa atômica do material (usada apenas quando há simulação do transporte de nêutrons); e “F” é a fração atômica (positivo) ou fração de massa (negativo) do constituinte do material.

Figura A.7 – Exemplo de algoritmo do material do MCNPX.

```
c Material cards
M1  6000.  -0.599848  $ Carbono (C-12) - Parede do Riser da UPF
    8000.  -0.319614  $ Oxigênio (O-16)
    1000.  -0.080538  $ Hidrogênio (H-1)
```

Fonte: Próprio autor.

A imagem significa: o material da célula 1 é composto por aproximadamente 59,98 % do elemento de número atômico 6 (carbono), 31,96 % do elemento de número atômico 8 (oxigênio) e 8,05 % do elemento de número atômico 1 (hidrogênio), todos de isótopo mais estável. Esta é a composição do objeto-teste sem catalisador, que corresponde a composição real do *riser* de acrílico utilizado em experimentos.

(c) Fonte:

As especificações da fonte (*source definition*) necessitam das seguintes informações: energia, posição e a partícula simulada (Figura A.8).

Figura A.8 – Exemplo de algoritmo da especificação de fonte do MCNPX.

```
c source definition
SDEF ERG=0.060 POS=-11.20 0 0 DIR=1 VEC=1 0 0 AXS=1 0 0 EXT=0 RAD=d1 PAR=2
SI1 0 0.275 $ Distribuição radial da amostra
SP2 -21 1 $ Peso radial da amostragem
```

Fonte: Próprio autor.

Com comando SDEF, defini-se a fonte a ser utilizada na simulação. Esse comando possui a forma:

SDEF → Variáveis= Especificações

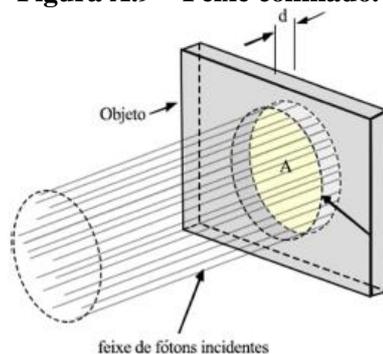
Muitas das variáveis da fonte são quantidades intermediárias, isto é, são quantidades necessárias para definição de outras variáveis. Dessa forma, utilizou-se nas simulações parâmetros idênticos aos utilizados em experimentos. Logo,

1. ERG=0,060: A energia é definida sempre em megaelétron-volt (MeV), ou seja, o valor corresponde a energia do fotopico do radioisotopo Am-241.
2. POS= -11,2 0 0: a posição usa coordenadas canônicas x, y, z e os valores são em centímetros. Nesse caso, a fonte encontra-se a 11,2 cm de distância do centro do *riser* e a 28,4 cm da superfície do detector.
3. DIR=1: é cosseno do ângulo entre VEC=1 0 0, e a direção do fluxo de partículas. Dessa forma, o feixe tem sentido do arco que, em relação ao vetor (1,0,0), tem cosseno 1.
4. AXS=1 0 0: é o vetor referência para, EXT = 0, distância da fonte em relação a posição de referência POS, e RAD = d1, distribuição radial da fonte. Logo, aqui é possível definir o tipo de fonte. Nesse trabalho, utilizou-se uma fonte puntiforme.
5. PAR=2: a definição da partícula, onde “1” para nêutrons, “2” para fótons e “3” para elétrons. Simulou-se apenas fótons.

Formato do algoritmo célula é: t e p d v p

Em que: “t” é o tipo da fonte; “e” é a energia da fonte em MeV; “p” é o ponto da posição (x,y,z); “v” é a direção e sentido do feixe; e “p” é a escolha da partícula.

Os comandos SI1 e SP1 são o cartão de informação e probabilidade da fonte, respectivamente. No comando SI1, está informado que a fonte tem distribuição radial com raio 0;275cm. E no comando SP1, o peso radial da fonte, que emite um feixe colimado o qual irá incidir no objeto irradiado, tal como pode-se observar na Figura A.9.

Figura A.9 – Feixe colimado.

Fonte: SÁ *et al.*, (2017).

(d) Registro:

A definição dos pedidos (*tallies*), ou seja, o que especifica a informação que se pretende extrair da simulação efetuada, e feita por meio do *tally card* que, escrito na parte final do *input*, permite o cálculo de diversas grandezas. Várias opções de *tallies* disponíveis no MCNPX são apresentadas na Tabela A.1.

Tabela A.1 – Tipos de pedidos (*tallies*) disponíveis no MCNPX.

| Tipo | Descrição (TALLY) | Partícula | Unidades Fn | Unidades *Fn |
|------|---|-----------|----------------------------|---------------------|
| F1 | Corrente passando por uma superfície | N, P e E | Número de partículas | MeV |
| F2 | Fluxo médio sobre uma superfície | N, P e E | Partículas/cm ² | MeV/cm ² |
| F4 | Fluxo médio sobre uma célula | N, P e E | Partículas/cm ² | MeV/cm ² |
| F5 | Fluxo em um ponto | N e P | Partículas/cm ² | MeV/cm ² |
| F6 | Energia depositada em uma célula | N e P | MeV/g | erg/g |
| F7 | Deposição da energia média de fissão em uma célula | N | MeV/g | erg/g |
| F8 | Distribuição de pulsos de energia gerados no detector | P e E | Pulso | MeV |

Fonte: MCNP6 user's manual (2017) .

Neste cartão também é necessário informar em qual superfície ele deve processar a simulação. Para isso se utiliza a numeração já definida no cartão de superfície.

Em alguns registros (como a corrente integrada) é necessário diferenciar a contagem das partículas que atravessam a superfície considerada daquelas que são refletidas.

Na Figura A.10, após o comentário, Definição de Tally, a quantidade física de interesse é a corrente de fótons sobre a superfície 9, que corresponde ao detector.

Figura A.10 – Definição dos dados de saída no MCNPX.

```
c tally definition
F1:p 9
```

Fonte: Próprio autor.

APÊNDICE B – FUNCIONAMENTO DOS PROGRAMAS DE IMPORTAÇÃO E AUTOMAÇÃO DA TOMOGRAFIA GAMA DO RISER NO MCNPX

B.1 SOFTWARES MCNP TOMOGAMA RISER AR E MCNP TOMOGAMA RISER GRID CFD

Estes programas foram adaptados e utilizados para gerar todos os dados necessário para execução da simulação, entre eles: trajetórias e rotação do tomógrafo; espessura do corte e amplitude da varredura do *riser* sem catalisador. Eles lêem cada caractere do arquivo de entrada base (que é em extensão txt) e gerar outros arquivos com os caracteres repetidos, ou seja, com o mesmo algoritmo. Os programas reconhecem, através de um caractere específico, qual a entrada da geometria da superfície deve ser modificada para que sejam estabelecidas os parâmetros da simulação tomográfica. A escolha do ambiente se deveu a ter uma interface fácil de ser feita, com botões e campos de texto fáceis para implementar. A Figura B.1 apresenta a interface do programa.

Figura B.1 – Programa para geração de arquivos *input* do *riser* com gás no MCNPX.

Tomografia Gama de Riser Industrial de Primeira Geração

A tomografia assume que o conjunto fonte-detector será rotacionado e transladado
Assume-se que as densidades do objeto serão fornecidas pelo arquivo de imagem
Pode ser utilizado para simular a tomografia do riser com ar e defeitos de solda na parede de cilindros

Nome Base: Input_Riser_Ar Rotações: Trajetórias por vista:
Num. Inicial: 1 Número de Vistas: 13 Cada Vista Possui: 49 Trajetórias:

Colimador: Detector:
Raio do Orifício: 0,25 cm Raio Externo: 2,54 cm
Raio Externo: 10,275 cm Parede Frontal: 17,41 cm
Parede Frontal: 10,4 cm Parede Traseira: 19,41 cm
Parede Traseira: 17,4 cm

Fonte Radioativa: Parede do Cilindro: Prescrever Passo
Distância Fonte-Centro do Objeto: -11,2 cm Raio interno: 4,6 cm Posição Inicial: 5,3 cm
Energia: 0,06 MeV Raio externo: 5,0 cm Amplitude: 10,6 cm
Universo Densidade da Parede: 1,19 g/cm³ Passo: 0,05 cm
Raio: 30,0 cm

Raio das Esferas 1: 0 cm Quantidade: 0 Dens. do Material 1: 0 g/cm³
Raio das Esferas 2: 0 cm Dens. do Material 2: 0 g/cm³

Gerar arquivos MCNP

Fonte: Autoria do Grupo de Pesquisa, (2019).

1. Nome base: é o nome do arquivo de entrada já escrito no algoritmo do MCNPX. Sendo que o arquivo tem que está na mesma pasta que o executável do programa.
2. Número inicial: o programa gera os arquivos com o mesmo nome do arquivo base seguidos de um número. Este campo, portanto, indica com qual numeração o programa deve iniciar ao nomear os novos arquivos.

3. Número de vistas: é o número de rotações executadas pelo sistema fonte-detector.
4. Cada vista possui x Trajetórias: número de passos para o movimento de translação.
5. Colimador:
 - a) Raio do orifício – raio em centímetros do orifício cilíndrico formado pelos colimadores de chumbo;
 - b) Raio externo – parte externa do cilindro em centímetros;
 - c) Parede frontal – parte frontal do colimador em centímetros;
 - d) Parede traseira – parte traseira do colimador em centímetros.
6. Fonte:
 - a) Posição – distância em centímetros da fonte do objeto-teste em relação ao eixo x;
 - b) Energia – dada em MeV, corresponde energia da radiação emitida pela fonte.
7. Parede do Riser:
 - a) Raio interno – raio interno do tubo em centímetros;
 - b) Raio externo – raio externo do tubo em centímetros;
 - c) Densidade – densidade da parede do *riser* em g/cm^3 .
8. Posição inicial: posição inicial do tubo em relação a fonte-detector. Esse parâmetro é dado em centímetros e varia de acordo com o raio externo do tubo.
9. Amplitude: é dado em centímetros, corresponde ao intervalo de varredura.
10. Passo: dado em centímetros, representa o passo para o movimento de translação. Quando menor o passo, melhor será a qualidade da imagem reconstruída e maior o tempo de simulação computacional.
11. Universo: dado em centímetros, corresponde ao raio da esfera que delimita o sistema simulado.

As opções acima, são comuns a ambos os softwares. Já as opções abaixo não foram utilizadas nas simulações, pois simulam defeitos em tubos por pequenas esferas, que variam em tamanhos. Esse tipo de problema foi tratado no trabalho de OLIVEIRA (2017).
12. Raio da esfera 1: dado em centímetros, corresponde raio da esfera.
13. Raio da esfera 2: dado em centímetros, corresponde ao raio da esfera.
14. Quantidade: quantidade das esferas presentes na parede do tubo.
15. Densidade do material 1: dado em g/cm^3 , corresponde a densidade do primeiro grupo de esferas. Por exemplo: o usuário insere 4 esferas, onde 2 terão a densidade do material 1.
16. Densidade do material 2: dado em g/cm^3 , corresponde a densidade do segundo grupo de esferas. Por exemplo: o usuário insere 6 esferas, onde 3 terão a densidade do material 2.

APÊNDICE C – EXEMPLO DE CARTÃO DE ENTRADA DO MCNPX: RISER COM FLUXO BIFÁSICO DE SÓLIDOS E GÁS

```

Objeto Irradiado: Tubo-Riser UPF com Gás-Sólidos R.E=5.0cm R.I=4.6cm E.P=0.4cm
c Source/detector center position
C Cell cards
1  1 -1.19  1 -2 -3          imp:p=1 $ Parede do Tubo de Acrílico
2  0           3          imp:p=0 $ Mundo externo
3  2 -11.32  4 -5 6 -7      imp:p=1 $ Colimador do Detector
4  3 -3.67 -8 9 -10        imp:p=1 $ Detector NaI@

C Surface cards
1  RCC 0 0 -2 0 0 10 4.6000 $ Raio interno do Riser
2  RCC 0 0 -2 0 0 10 5.0000 $ Raio externo do Riser
3  so  30.0000 $limites do mundo externo
4  GQ  0.0000 1.0000 1 0.0000 0 0 -0.0000 -16.4000 0 67.1775 $ Limite interno do colimador
5  GQ  0.0000 1.0000 1 0.0000 0 0 -0.0000 -16.4000 0 -38.3356 $ Limite externo do colimador
6  P  1.0000 -0.0000 0 10.4000 $ Limite frontal do colimador
7  P  1.0000 -0.0000 0 17.4000 $ Limite posterior do colimador
8  GQ  0.0000 1.0000 1 0.0000 0 0 -0.0000 -16.4000 0 60.7884 $ Detector
9  P  1.0000 -0.0000 0 17.4100 $ Começo do detector|
10 P  1.0000 -0.0000 0 19.4100 $ Fim do detector@

c Data cards
mode p
c Material cards
M1  6000. -0.599848 $ Carbono (C-12) - Parede do Riser da UPF
    8000. -0.319614 $ Oxigênio (O-16)
    1000. -0.080538 $ Hidrogênio (H-1)
M2  82000. -1.000000 $ Chumbo (Pb-207) - Colimador
M3  11000. -0.153373 $ Sódio (Na-23) - Detector (Baseado na ICRU Report 44 - 1989)
    53000. -0.846627 $ Iodo (I-127)
M4  8000. -0.210000 $ Oxigênio (O-16) - Ar Atmosférico (Baseado na ICRU Report 44 - 1989)
    7000. -0.780700 $ Nitrogênio (N-14)
    18000. -0.009000 $ Argônio (Ar-39)
    6000. -0.000300 $ Carbono (C-12)
M5  13000. -0.151842508 $ Alumínio (Al-27) - Catalisador Ativado (VIEIRA,2014)
    8000. -0.506328467 $ Oxigênio (O-16)
    14000. -0.312595660 $ Silício (Si-28)
    26000. -0.004880416 $ Ferro (F-56)
    29000. -0.000789100 $ Cobre (Cu-63)
    57000. -0.013276539 $ Lantânio (La-139)
    15000. -0.006391910 $ Fósforo (P-31)
    16000. -0.000397800 $ Enxofre (S-32)
    20000. -0.000469900 $ Cálcio (Ca-40)
    40000. -0.001131000 $ Zircônio (Zr-91)
    30000. -0.000807950 $ Zinco (Zn-65)
    38000. -0.001088750 $ Estrôncio (Sr-87)

c Source definition @
SDEF ERG=0.060 POS=-11.20 0 0 DIR=1 VEC=1 0 0 PAR=2 $Fonte @
c Tally definition
f1:p 9
c1 0 1
nps 35000000
PRDMP 2J -2

```