



128907006

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

**Implementação de modelo de fechamento em risers de FCC
através de código comercial CFD**

Autor: Daniel da Cunha Ribeiro

Orientador: Milton Mori

Dissertação de Mestrado apresentada à
Faculdade de Engenharia Química como parte
dos requisitos exigidos para a obtenção do
título de Mestre em Engenharia Química

Campinas – São Paulo

06/2001

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

N.º CHAMADA	T/UNICAMP
R354i	
V.	
T. INFO 90/	47691
PREC	837/02
C.	
PREC	0811,00
DATA	07-02-02
N.º CPD	

CM00163706-1

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

R354i Ribeiro, Daniel da Cunha
Implementação de modelo de fechamento em risers
de FCC através de código comercial CFD / Daniel da
Cunha Ribeiro.--Campinas, SP: [s.n.], 2001.

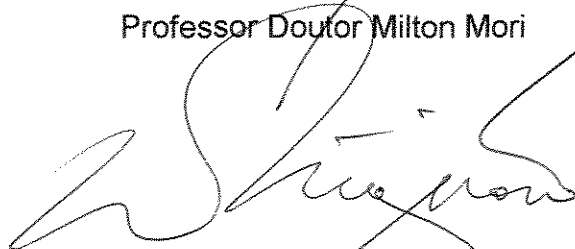
Orientador: Milton Mori.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Modelos matemáticos. 2. Teoria cinética da
matéria. 3. Craqueamento. I. Mori, Milton. II.
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. III. Título.

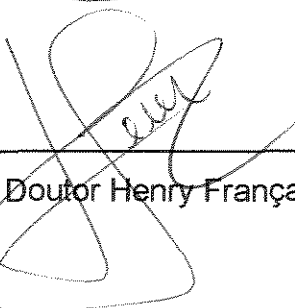
Esta versão corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida pelo Engenheiro Químico Daniel da Cunha Ribeiro, e aprovada pela comissão julgadora em 22 de junho de 2001.



Professor Doutor Milton Mori



Doutor Waldir Pedro Martignoni



Professor Doutor Henry França Meier

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado ou Tese de
Doutorado em Engenharia Química.



Milton Mori - Orientador

Dedico este pequeno texto às grandes pessoas da minha vida.

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

AGRADECIMENTOS

À gênese por tudo,
À gênese da gênese por ser compreensiva e querida a vida,
Ao amor que soube ser fiel e acolhedor quando tudo era cinza,
Aos amigos, antigos ou novos, de sempre, pois estes ocupam a parte cativa no
coração e da memória,
Aos colegas engenheiros pelo momento de descontração e concentração,
À orientação firme e humana que me abriu as portas.

Πάντα ρηει
Heráclito

Resumo

A tese concerne em um estudo do escoamento gás sólido (a saber, catalisador sólido e ar) em um riser. O riser é tratado como sendo um tubo sem simetria axial. Este tratamento permite que alguns fenômenos sejam visualizados, principalmente a transferência de massa e quantidade de movimento através do centro do tubo, diferentemente de uma abordagem simétrica. A geometria utilizada retrata duas dimensões: a direção axial e a direção radial. Nesta geometria três entradas permitem a simulação dos efeitos reais de entrada de um riser 3D. Isso permite que o modelo preveja as oscilações, em torno do eixo do riser, do perfil de velocidades. O modelo matemático é fechado com uma equação de transporte para a temperatura granular advinda da teoria cinética dos gases densos que permite a definição e o cálculo da viscosidade da fase sólida. Tendo em mãos essas grandezas com valores fisicamente razoáveis é possível a obtenção de campos mais realistas do escoamento. A equação de transporte para a temperatura granular aqui usada está na forma simplificada, sem os termos convectivo-difusivo e transiente. Além disso, são testadas forças extras sobre a fase sólida, mais especificamente, duas forças: força de Saffman e força de pressão na fase sólida. A força de Saffman age no sentido radial de forma a prever o efeito da inércia do fluido sobre a partícula sólida. Já força de pressão é devida a deformação do campo de concentração de sólido gerando o binário segregação-aglomeração na fase sólida. Esses fatores somados serviram para prever o comportamento qualitativo dos fenômenos que ocorrem dentro do riser do FCC. As simulações numéricas foram realizadas no código comercial de fluidodinâmica computacional (CFD) CFX-4.3 da AEA Technologies.

Abstract

This work concerns in a study about a gas-solid flow (the gas mixture is air; the solid is catalyst particles) in the FCC riser. The riser is treated like a pipe without axis symmetry. This treatment allows the visualization of some of mass and momentum transfer phenomena through the center of pipe that cannot be predicted in a axisymmetrical approach. The geometry uses two dimensions: the axial and the radial direction. In this geometry, to obtain mixing at the entrance, three inlets allow to simulate the 3D effects of the cylindrical riser of the experiment. The inlets are: two symmetrical ones with a mixture gas-solid and one with a gas stream. This entrance scheme permits the interchange of the properties between the two half of the riser. The mathematical model is closed by the Kinetic Theory of Granular Flow. This theory calculates some solid properties hard to estimate as viscosity. Other property that arises from the Kinetic Theory is the solid pressure. These parameters, with reasonable values, are important to obtain a coherent flow field. The transport equation presented here is in its statical form. It means that the original partial differential equation is reduced to a quadratic algebraic equation. Besides, extra forces are tested in order to predict agglomeration and segregation motion of particles. These movement are the base of downflow near the walls. The forces tested are the Saffman lift force and the pressure force. The first one have its influence around the riser center in order to radially push the particles to walls. The second is significant where the solid concentration field have high variations. The final result of this modeling is a good prediction of experimental data from KNOWLTON et al. (1995)

Sumário

Símbolos	xix
Capítulo I - Introdução	1
1.1 Antes de tudo	2
1.2 Introdução técnica	2
Capítulo II - Revisão Bibliográfica	9
2.1 O sistema que concerne o trabalho	10
2.2 O Estado da Arte da Modelagem Hidrodinâmica	13
2.3 Teoria Cinética Dos Escoamentos Granulares	15
2.4 Força Lift	22
2.5 Outras Forças Extras	24
Capítulo III - Modelagem Matemática	27
3.1 Pequeno Ensaio Introdutório	28
3.2 Equações que Governam o Fenômeno	29
3.3 Teoria Cinética	31
3.4 Relações Constitutivas	35
3.5 Abordagem Estacionária da Teoria Cinética	39
3.6 Força Auxiliar ("Lift") de Saffman	41
3.7 Condições de contorno	43
Capítulo IV – Método Numérico	47
4.1 Método Dos Volumes Finitos	48
4.2 Acoplamento Pressão-Velocidade	56
4.3 Algoritmos De Resolução Do Sistema De Equações	

Algébricas	60
4.4 Condições De Contorno – Aspectos Numéricos	62
4.5 Difusão Numérica E Oscilação	62
4.6 Geração Da Malha	64
Capítulo V - Introdução às Simulações	67
5.1 Descrição do sistema	68
5.2 Discretização da malha	69
5.3 Sistema de equações a ser utilizado na simulação	72
Capítulo VI – Resultados e conclusões	73
6.1. Ensaios experimentais: análise sobre a limitação das observações	74
6.2 Resultados e Discussões	75
6.3 Sugestões	99
Bibliografia Citada	101
Bibliografia Consultada	107
Apêndice A	109
Apêndice B	117

Lista de símbolos

Latinos

a	raio da partícula [m]
c	Velocidade real da partícula na Teoria Cinética [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
C	Velocidade flutuante aleatória da partícula [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
d_p	diâmetro da partícula [m]
e	coeficiente de restituição
f	funções de distribuição na equação de Boltzmann
F_l	força lift [N]
g	vetor aceleração da gravidade [$\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$]
G	taxa de cisalhamento local do escoamento médio [s^{-1}]
g_0	função distribuição radial
I	tensor unitário ou matriz identidade
J	função de ajuste da força lift
k	energia cinética turbulenta [$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}$]
m	massa de uma partícula [kg]
n	número de partículas
p	“pressão normal” de sólido na equação da energia flutuante [Pa]
P_i	pressão da fase i [Pa]
q	condução de energia flutuante [$\text{kg}\cdot\text{s}^{-3}$]
R	raio do riser [m]
r	posição radial [m]
Re	número de Reynolds
t	tempo [s]
T	temperatura [K]
U	vetor velocidade [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
u	componente axial [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
v	componente radial [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]

Gregos

β	coeficiente de transferência de momento entre as fases [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$]
Θ	temperatura granular [m^2s^{-2}]
ε	dissipação da energia turbulenta (k) [m^2s^{-3}]
ν	viscosidade cinemática [m^2s^{-1}]
π	constante a 3,14159265359 (quociente do perímetro pelo diâmetro de uma circunferência)
κ	condutividade da energia flutuante das partículas [$\text{Pa}\cdot\text{s}$]
γ	dissipação da energia colisional [Pa]
τ_i	tensor tensão da fase i [Pa]
ρ_i	densidade da fase i [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$]
μ_i	viscosidade do meio da fase i [$\text{Pa}\cdot\text{s}$]
ξ_i	viscosidade de cisalhamento da fase i [$\text{Pa}\cdot\text{s}$]
α_i	fração volumétrica da fase i

subscritos

dil	diluído
g	fase gás
max	valor máximo da propriedade
p	valor na parede
s	fase sólida

sobrescritos

(2)	binário
'	propriedade após colisão
cin	parte cinética da propriedade
col	parte colisional da propriedade

"O mundo é absurdo, mas o homem não o é, e como ele é o ser com sentido, pertence a ele dar sentido também às coisas".

Jean Lacroix

CAPÍTULO I – Introdução

Neste capítulo comenta-se aspectos gerais desta dissertação. Apresenta-se uma breve explanação sobre o escoamento multifásico em reator de FCC, expõe-se os objetivos gerais do trabalho; descreve-se sucintamente como o trabalho está organizado.

1.1 ANTES DE TUDO

O universo é interação. Partindo desta frase pode-se especular sobre qualquer fato natural pois o princípio de tudo que ocorre é oriundo do choque de coisas diversas em sua origem. É assim que surgem as atividades humanas. É assim que surgiu a ciência. E para o homem e suas realizações, se fez a engenharia. No mundo atual, muitas pessoas vivem melhor (e em alguns aspectos, pior) devido as evoluções promovidas pela engenharia.

No choque entre entidades diferentes da natureza, observa-se fenômenos ímpares, os quais aparecem como desafios para a compreensão e previsão do homem. No caso particular que concerne o projeto de pesquisa proposto aqui, o desafio é analisar as interações intrafásicas partícula-partícula e interfásica gás-sólido.

Parafraseando Sir Isaac Newton, sabe-se que este texto é apenas um grão de areia na praia do conhecimento desta área de pesquisa. Mas a praia é composta de grãos de areia que dão a impressão de imensidão.

1.2 INTRODUÇÃO TÉCNICA

Muitos processos industriais, onde o escoamento de fluidos se faz presente, incluem fenômenos multifásicos tipo gás-partícula. Os exemplos são o transporte pneumático, conversão de energia, manufatura de papel, manufatura alimentícia e aplicações farmacêuticas (ENWALD et al., 1996). A simulação numérica desses processos provê novas ferramentas para o projeto de novas unidades e a otimização das existentes. Os reatores químicos como os sistemas de leito fluidizado circulante (CFB – Circulating Fluidized Bed) (MATHIESEN et al., 2000a) são um exemplo de grande interesse industrial. Inserido nessa classe de reatores estão as unidades de craqueamento catalítico em leito fluidizado (FCC – Fluid Catalytic Cracking). A FCC é uma operação industrial (que no mundo girou 1 trilhão de dólares em 1995) que converte hidrocarbonetos pesados (frações pesadas do petróleo) em produtos de peso molecular menores tal e qual a

gasolina (AVIDAN, 1997 apud NERI et al. 2000; SQUIRES et al., 1985). Uma unidade de FCC consiste em duas subunidades: um reator e um regenerador. No reator (ou *riser*), o catalisador regenerado aquecido é posto em contato com a carga composta de gasóleo pré aquecido e vapor d'água superaquecido onde as reações de craqueamento ocorrem. No regenerador, o catalisador desativado vindo do reator é regenerado pela queima do coque depositado sobre sua superfície. Ambas as reações, craqueamento e queima, são processadas em leitos fluidizados (mais especificamente, leitos de arraste). O calor de combustão do coque na regeneração também aquece o catalisador, fornecendo tanto a energia requerida para o aquecimento e vaporização da carga quanto para a reação de craqueamento que é endotérmica (ARBEL et al., 1995 apud GAO et al., 1999). Todo o processo dentro do reator riser, em unidades industriais, não dura mais que 5 s. Maiores detalhes podem ser enumerados no trabalho de ALVES, 1998. Uma classificação sobre CFBs também pode ser encontrada em ZHOU (1993) onde pode-se vislumbrar os processos de leito fluidizado e onde se encaixa o processo de FCC. Em BERRUTI et al. (1995) tem-se uma revisão de modelos de leito fluidizado de acordo com sua classificação. De qualquer forma, podemos afirmar a partir destas referências que o riser, foco deste estudo, é um leito fluidizado circulante onde ocorre um transporte pneumático de partículas sólidas (catalisadores). Em outras palavras, trata-se de um escoamento bifásico gás-sólido diluído. Mas, por razões que logo serão elucidadas, apesar do leito do riser ser diluído como um todo, em certas regiões do equipamento pode-se observar concentrações de sólido de até 50%, principalmente próximo a parede.

Os modelos matemáticos são desenvolvidos (de uma forma diferente de antes quando os modelos eram tratados de maneira analítica) desde o advento da computação de alta performance de forma a incluir o máximo de fenômenos que estão presentes nos escoamentos multifásicos. Desse esforço surgiu a Fluidodinâmica Computacional (CFD) que nada mais é do que uma compilação de técnicas numéricas para modelagem, simulação e análise de sistemas dinâmicos onde estão presentes fluidos. Na prática muitos sistemas são tratados com os conceitos de CFD. Entre os maiores desafios da análise de CFD são exatamente os reatores FCC. No riser de FCC, ocorre um transporte pneumático das

partículas de catalisador. Dentro desses reatores tomam lugar três fenômenos básicos que regem toda a operação: escoamento gás-partícula, transferência de calor e reação química. Existe um grande acoplamento matemático-numérico entre as equações e é fundamental a distribuição das partículas no leito influenciando diretamente nas taxas das reações de craqueamento. Assim, um perfeito conhecimento do escoamento pode contribuir para elucidação dos fenômenos que ocorrem no riser de FCC. Para tanto, neste trabalho, lança-se mão das técnicas CFD.

O papel desempenhado pelas técnicas de CFD na engenharia tornou-se tão forte que em muitos textos já se pode ver se formar um triângulo ao invés da clássica relação bipolar da pura experimentação com a pura teoria, como salienta J.D. Anderson em WENDT, 1992. Desde 1687, quando veio a luz o Principia de Issac Newton, foram alcançados avanços na área da mecânica dos fluidos graças a combinação sinérgica dos experimentos pioneiros e das análises teóricas básicas. Análises essas que quase sempre requeriam hipóteses simplificadoras ao processo afim de se obter formas fechadas das equações de transporte. Entretanto, esses modelos simplificados formam as bases de identificação de muitos parâmetros fundamentais de um problema. Mesmo assim, esse procedimento carrega em bojo a desvantagem de não incluir todos os fenômenos que regem o problema em questão. Neste ponto, a técnica de CFD entra neste vazio entre a teoria ideal e a dura prática. A habilidade de lidar com as equações de um sistema em sua forma exata e ainda incluir modelos de fenômenos locais, faz das técnicas CFD uma ferramenta popular e, por certo, duradoura em análises de engenharia.

Dentro deste quadro, os objetivos dessa tese emergem em dois planos. Em um primeiro plano, o estudo pretende testar modelos fenomenológicos para uma melhor predição do escoamento gás-sólido, especialmente dos perfis de fração volumétrica e de velocidade axial das partículas. Como se vê subentendido nas entrelinhas, o fenômeno aqui tratado é o do escoamento bifásico e não do processo de FCC como um todo. Assim, deve-se ressaltar, que não se incluem as complexas reação químicas que ocorrem dentro do equipamento. Em um segundo

plano, vislumbra-se um aprofundamento do conhecimento sobre os escoamentos gás-sólido em si. Por si só este tipo de escoamento é bastante complexo tanto que aqui (como na maioria dos trabalhos publicados na literatura) será abordada uma perspectiva bidimensional. Esse conhecimento será de grande valia para o Laboratório de Modelagem e Simulação de Processos Químicos (LMSPQ) pela utilização do pacote de CFD CFX e pela continuidade dos trabalhos do LMSPQ, de ALVES (1998) e MUNIZ (1995).

Neste trabalho, a abordagem será Euleriana. Esta abordagem se fundamenta na geração das equações que regem os fenômenos através de um referencial estático no espaço. Esta escolha se justifica pelo fato de que a abordagem Lagrangeana (referência Lagrangiana, onde a referência segue as linhas de fluxo do escoamento e eventuais partículas) é inviável devido ao número de partículas envolvidas. Assim, apenas dois conjuntos de equações serão resolvidos ao invés da N (partículas) + 1 (fase contínua) equações da abordagem Lagrangiana.

No Capítulo de revisão bibliográfica serão revisados os pontos concernentes desta pesquisa, a saber: o equipamento, o riser, sua importância e os fenômenos que ocorrem em seu interior; a modelagem matemática, onde revisar-se-á as equações básicas que regem o escoamento bifásico, modelos de turbulência, teoria cinética dos escoamentos granulares e forças auxiliares como a força lift de Saffman; a evolução dos métodos numéricos com ênfase no Método dos Volumes Finitos (MVF); e, finalmente, alguns resultados marcantes na área dos escoamentos gás-sólido.

Um aspecto importante na modelagem deste processo é a turbulência (que será discutido melhor no Capítulo II), já que as velocidades atingidas dentro do riser são altas. Existem várias abordagens possíveis hoje em dia. Desde Boussinesq, no final do século XIX, centenas de modelos foram propostos mas nenhum realmente geral. O que existem são modelos mais populares como o $k-\epsilon$ que é o preferido em aplicações de engenharia em geral. Há os que abordam esse escoamento como laminar de forma a testar teorias mais recentes (como, por exemplo, a teoria cinética dos escoamentos granulares) de descrição da fase

dispersa. Outros já incluem a turbulência na fase contínua e na da fase dispersa. No entanto, algumas distorções físicas são consentidas para se fazer analogias com o, por exemplo, $k-\epsilon$ para o gás. Assim, muitos modelos (inclusive o clássico $k-\epsilon$) devem ser utilizados com cuidado. A título de ilustração, o modelo de turbulência $k-\epsilon$ é usado em modelagens de geometria tridimensional mesmo sendo este modelo isotrópico. Uma pequena resenha é exposta no Capítulo II da Revisão Bibliográfica.

Sendo o sistema de equações diferenciais parciais muito rígido numericamente e matematicamente acoplado entre as variáveis, uma sofisticada elaboração do método numérico foi feita durante décadas. Entre os nomes importantes na contribuição dos métodos de resolução estão PATANKAR (1980), VERSTEEG & MALALASEKERA (1995), entre outros. O método numérico é fundamental para a resolução do sistema de equações diferenciais parciais (EDP). O método de discretização utilizado para resolução das equações é o Método dos Volumes Finitos (MVF). Sua descrição vai ser esmiuçada no Capítulo IV. Porém, podemos adiantar que a maior vantagem deste método é o fato que ele força o fechamento do balanço de massa em cada volume de controle do domínio.

A ferramenta utilizada para a modelagem do riser é o pacote computacional comercial CFX-4.3. Este software incorpora várias vantagens que o estudo precisa e, assim, foi preferido sobre outros pacotes do mercado de CFD. Entre as vantagens estão a flexibilidade por possuir muitos modelos de turbulência, escoamentos multifásicos e algoritmos numéricos (MVF) vários. Além disso, pode-se incorporar outros modelos através de subrotinas em linguagem FORTRAN 77. Mais detalhes serão vistos no Capítulo V ou Do Pacote CFD CFX-4.3.

Por achar de relevância para o trabalho de simulação computacional, um item especial será incluído ao capítulo V onde se comentará a confiabilidade dos dados experimentais e que isso impacta nos modelos e na simulação destes.

No Capítulo VI, das Conclusões, a partir dos resultados, alguns modelos que foram testados na modelagem do riser serão postos a comparação com

modelagens recém publicadas e dados experimentais mais renomados da literatura técnica da área.

A mim, parece que nunca acabei de ser criança. Uma criança que brincou na praia, que encontrou uma pedra bem polida, uma concha multicolorida, enquanto o grande oceano da verdade continua a se estender, ainda inexplorado, diante de meus olhos.

Isaac Newton

CAPÍTULO II - Revisão Bibliográfica

Onde se trata do estado da arte de modelagem matemática e numérica de leitos fluidizados circulantes. Revê-se a literatura clássica da área de CFD, modelagem de risers e métodos numéricos relacionados a discretização do sistema de EDP pelo método dos volumes finitos.

2.1 O sistema a que concerne o trabalho

Como já dito, os fenômenos que ocorrem dentro de um riser de FCC podem ser vistos em outros equipamentos que utilizam semelhante sistema de operação. O exemplo mais conhecido dentro da engenharia química é o caso dos secadores de sólidos. Porém, muitos outros exemplos podem ser encontrados na literatura como, por exemplo, o transporte pneumático.

Existem muitas configurações de FCC já testadas e utilizadas por várias empresas. As figuras 2.1 e 2.2 mostram duas que fizeram muito sucesso na indústria. O primeiro não tem muitas unidades operando. O segundo, esquema da Kellog (fig. 2.2), ainda se encontra em operação hoje.

Novas configurações para FCC como a unidade com “downer” (no lugar do riser, CHENG et al., 1999). Este tipo de equipamento, em fins de contas, não trouxe grandes vantagens em relação ao riser. O próprio trabalho de CHENG et al. (1999) mostra isso. Recentes simulações no pacote CFX-4 (feitas por pesquisadores da PETROBRAS, MARTIGNONI, 2000) corroboram este fato.

Configurações novas como a de Dunquerque, França surgem por todo mundo através de ferramentas CFD, BARTHOLD et al., (1999). É uma das primeiras unidades de FCC totalmente desenvolvidas em ambiente computacional. Esse exemplo reforça a relevância do computação (em especial da CFD) na engenharia moderna.

A figura 2.3 mostra essa configuração criada a partir de CFD.

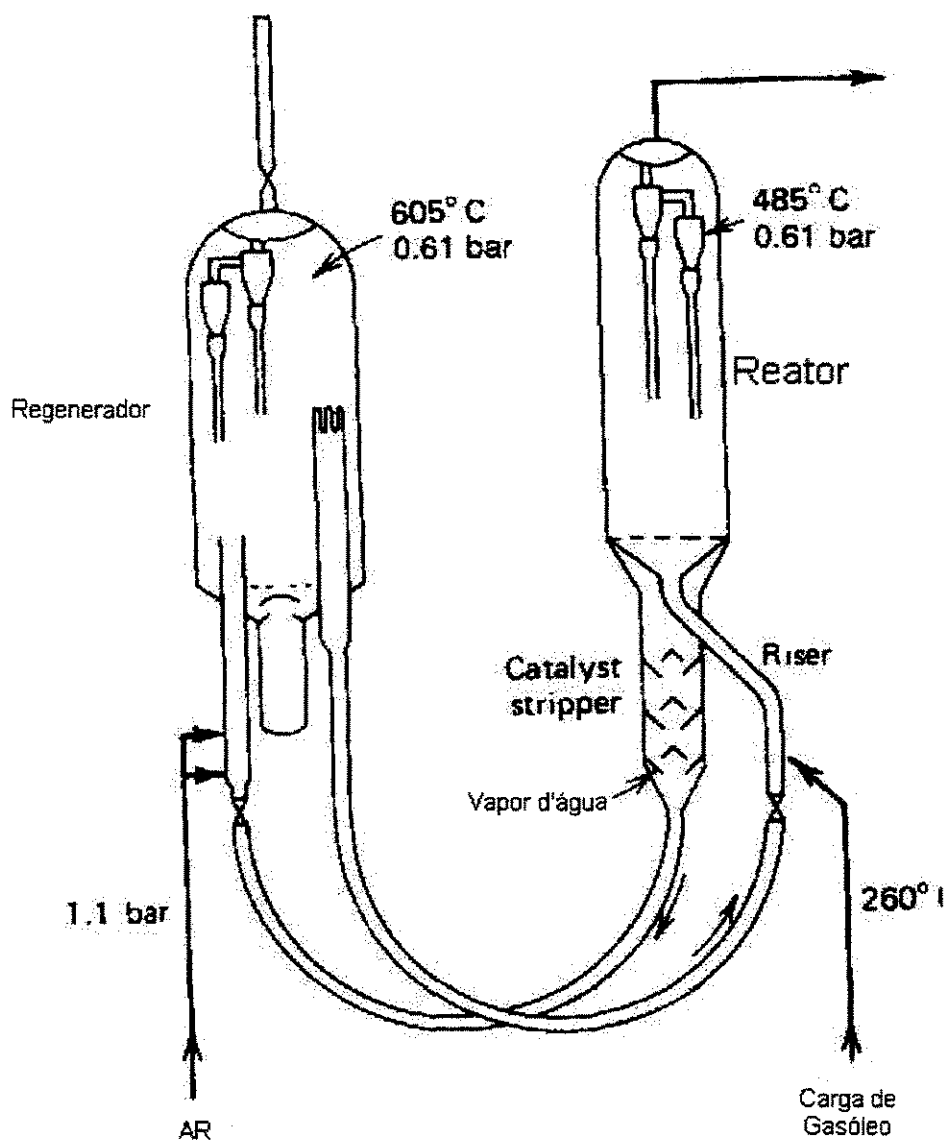


Figura 2.1 Antiga configuração de uma unidade de FCC

(FROMENT, G.F., BISCHOFF, 1990)

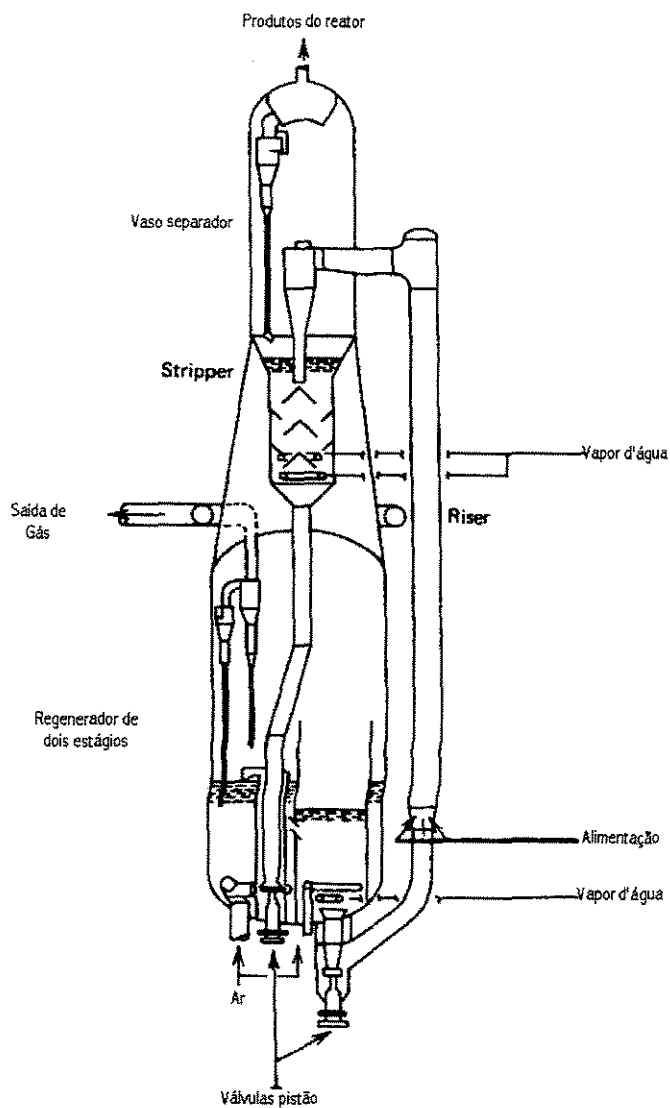


Figura 2.2 Conversor ortofluxo Kellogg com regenerador e riser de duplo estágio (Orthoflow) (FROMENT, G.F., BISCHOFF, 1990)

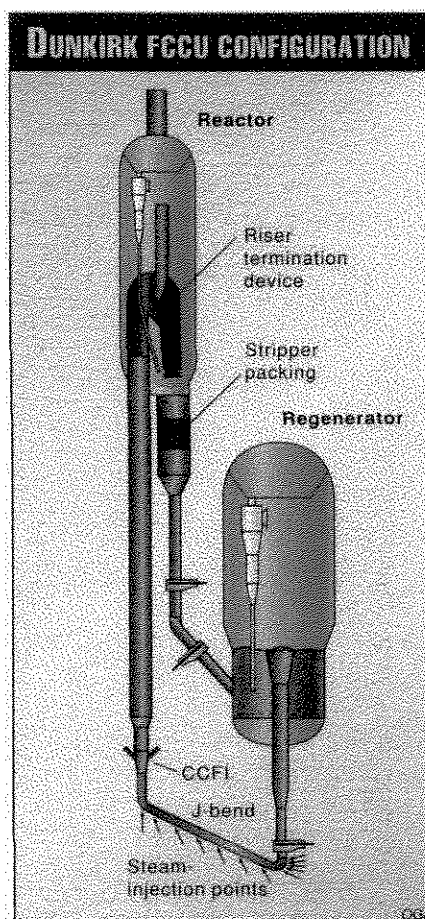


Figura 2.3: Unidade de FCC idealizada para uma refinaria francesa. (BARTHOLD, 1999)

2.2 O Estado da Arte da Modelagem Hidrodinâmica

A modelagem hidrodinâmica tem seus primórdios na Grécia antiga com seu maior nome em Arquimedes. Vários nomes foram importantes na edificação desta arte mas um em especial foi quem deu vida a dinâmica dos fluidos: Isaac Newton. Em seu livro *Principia* (1687), o autor estabelece as três leis fundamentais da dinâmica dos corpos. A partir dele, vários nomes surgiram até os dias de hoje, e citá-los aqui seria uma tarefa laboriosa.

Após todos os conhecimentos alcançados no séc. XVIII, os estudiosos se dividiram em dois grupos que se desenvolveram separadamente. Hidrodinâmica foi o termo dado ao estudo teórico e matemático, com análises abstratas do fluido perfeito sem atrito, enquanto o termo Hidráulica foi utilizado para descrever os

aspectos experimentais do comportamento real dos fluidos. Esta falta de comunicação entre os dois grupos explica o desenvolvimento lento da mecânica dos fluidos como ciência até os fins do séc. XIX.

Navier (1827) e Stokes (1845), em trabalhos independentes, generalizaram as equações de movimento com a inclusão do conceito de viscosidade, equações estas de aplicação restrita a determinada classe de fluidos, denominados newtonianos. Porém, muitos resultados de experimentações não eram ainda explicados por tais equações.

No fim do séc. XIX, experiências realizadas por Reynolds começaram a elucidar possibilidades de aplicações das equações de Navier-Stokes pelo estabelecimento do conceito de dois diferentes tipos de escoamentos: o laminar e o turbulento.

Em 1904, num artigo clássico apresentado pelo professor alemão Ludwig Prandtl, foi introduzido o conceito de "camada limite fluida", o qual representou a base para a reunificação das duas abordagens até então utilizadas na mecânica dos fluidos. A idéia proposta por Prandtl é que os escoamentos em torno de fronteiras podem ser subdivididos em duas regiões: uma próxima às paredes, onde os efeitos viscosos são muito importantes (camada fina de fluido – camada limite) e outra, adjacente à esta, onde o fluido se comporta como um fluido ideal, sem atrito. Este conceito, relativamente simples, forneceu o ímpeto necessário para a resolução dos conflitos que existiam entre os que trabalhavam com a hidrodinâmica e os que trabalhavam com a hidráulica.

Para ser mais específico, o escoamento bifásico gás-sólido em tubos experimentou sua grande explosão científica quando do advento das unidades de FCC, mais exatamente do riser. Por se tratar de um escoamento turbulento, os pesquisadores se concentraram por muitos anos na pesquisa de modelos de turbulência para escoamentos gás-sólido. (BIRD et al., 1960)

Mais recentemente, a partir da publicação do livro de CHAPMAN e COWLING (1970), a pesquisa em escoamentos gás-sólido ganhou um novo impulso com o advento da teoria cinética dos gases densos. Problemas como a

prescrição da viscosidade da fase sólida e a adição implícita de forças extras como a força de Saffman.

2.3 Teoria Cinética Dos Escoamentos Granulares

A teoria cinética tratada aqui é uma analogia da Teoria Cinética Clássica que analisa os gases. A abordagem da teoria cinética granular foi iniciada por CHAPMAN & COWLING (1970). No entanto, geralmente é creditado a BAGNOLD (1954) o pioneirismo dessa abordagem (GIDASPOW, 1994). Essa abordagem tinha em seu bojo todo ferramental teórico, no entanto, era quase impraticável. Uma nova análise desta analogia, já clássica na literatura, foi proposta por JENKINS & SAVAGE (1983). Neste trabalho, os autores simplificam a análise para partículas esféricas, quase elásticas, rígidas, de forma suave e idênticas. Usando formas gerais das funções de distribuição de probabilidade para a velocidade de uma única partícula e usando o método da verossimilhança para obter a frequência (ou, função probabilidade) das colisões binárias, eles derivaram expressões para o balanço de massa, momento linear e energia cinética flutuante e ainda expressões integrais para a tensão, fluxo de energia e dissipação de energia que aparecem nesses balanços.

Outro trabalho clássico nesta área, é de Lun e colaboradores (LUN et al., 1984) onde o escoamento bifásico é tratado como se o sólido fosse constituído de material granular uniforme e esférico, porém, inelástico. Neste trabalho, é onde se tem notícia da primeira aplicação da teoria cinética em escoamentos granulares, partindo do trabalho de JENKINS e SAVAGE (1983), daí seu pioneirismo.

GIDASPOW, em 1994, lança seu livro no qual revisa a teoria cinética até aquele momento e faz descrições de sistemas multifásicos lançando mão desta ferramenta. SINCLAIR e JACKSON (1989) foram os primeiros a aplicar a teoria cinética para modelar um escoamento gás – sólido totalmente desenvolvido em um tubo. DING e GIDASPOW (1990) derivaram expressões para a viscosidade do sólido e para pressão de um escoamento denso gás-sólido a partir da equação íntegro-diferencial de Boltzmann e assumindo uma distribuição de frequência

maxwelliana para velocidade das partículas. Nesse último trabalho, vale ressaltar o significado desses parâmetros. A “viscosidade” de um sólido, em si, não tem significado como a viscosidade de um gás ou líquido na escala de comprimento utilizada no trabalho. O mesmo vale para a tal pressão que DING & GIDASPOW (1990) chegaram. Em verdade, são produtos da analogia com a teoria cinética dos gases.

No mesmo livro supracitado de GIDASPOW (1994), o autor estende a formulação para leitos diluídos através da consideração de distribuição não maxwelliana da velocidade.

Em recente trabalho, VAN WACHEN (2000) faz também uma revisão mais detalhada da teoria cinética onde o autor parte da equação de Boltzmann para chegar na equação de Enskog. Com esses resultados, o autor os aplica em condições de distribuição de tamanho de partícula bimodal em leito fluidizados como os regeneradores.

De uma forma geral, podemos dizer que a teoria cinética nos fornece resultados de cunho estatístico (de fato, é um balanço de energia a partir de conceitos da mecânica estatística), ao contrário de uma abordagem da mecânica clássica. Resultados do comportamento a cada partícula de um sistema completo (abordagem lagrangeana) ainda hoje e para a próxima década são impraticáveis.

Neste trabalho, a apresentação da teoria cinética será baseada em VAN WACHEN (2000), GIDASPOW (1994) e NIEUWLAND et al. (1996) indicando para o leitor a primeira referência como mais completa.

2.3.1 Abordagem transiente da Teoria Cinética

Para começar a exposição da teoria cinética dos escoamentos granulares, é preciso estabelecer duas principais diferenças conceituais para a teoria cinética dos gases. A primeira é a possível dissipação de energia cinética flutuante no meio granular durante as colisões das partículas devido a deformações

inelásticas. Além disso, a energia pode ser dissipada por atrito das partículas com o fluido que o circunscreve.

Na teoria cinética, a velocidade instantânea da partícula é decomposta em uma velocidade média local e uma velocidade flutuante aleatória. Associada com o movimento aleatório médio das partículas pode-se definir uma temperatura aparente ou pseudo temperatura:

$$\frac{3}{2}\Theta = \frac{1}{2}\overline{C \cdot C} \quad [2.1]$$

onde se identifica C como sendo a velocidade flutuante média das partículas. O uso do símbolo C se justifica para não se confundir essa velocidade flutuante com a definição da energia cinética turbulenta. A sobre barra denota uma média de conjunto. Em outras palavras, a temperatura granular é um terço do quadrado da velocidade flutuante. A equação [2.2] define a decomposição das velocidades para as partículas (fase dispersa) de uma forma análoga a mediação de Reynolds para um fluido contínuo.

$$\mathbf{c} = \mathbf{v} + \mathbf{C} \quad [2.2]$$

A denominação temperatura granular vem classicamente de JENKINS & SAVAGE (1983) e depois de seus colaboradores. A seguir uma tabela explicativa dessa analogia.

Tabela 1: De GIDASPOW (1994)

Molecular	Granular
Definição da temperatura absoluta T	Definição da temperatura granular Θ
$k_B T = \frac{1}{3} m \langle C^2 \rangle$	$\Theta = \frac{1}{3} \langle C^2 \rangle$
onde k_B é a constante de Boltzmann	onde o denominador 3 é devido ao movimento nas 3 dimensões.
Definição da pressão hidrostática P:	Definição da pressão particulada P:
$P = \frac{1}{3} \rho \langle C^2 \rangle$	$P = \frac{1}{3} \rho \langle C^2 \rangle$
onde $\rho = nm$	onde $\rho = \varepsilon_s \rho_s$, e a fração 1/3 é devido a isotropia
<i>Lei dos gases ideais</i>	<i>Equação do estado ideal do particulado</i>
$p = nk_B T$	$p = \varepsilon_s \rho_s \Theta$
com n é o número de moléculas	
<i>Energia interna por molécula $\langle U \rangle$</i>	<i>Energia interna granular $\langle U \rangle$</i>
$n \langle U \rangle = \int \frac{1}{2} m C^2 f(t, r, c) dc$	$\langle U \rangle = \frac{3}{2} m \Theta$
usando a definição da temperatura absoluta	<i>A entropia das partículas</i>
$n \langle U \rangle = \frac{3}{2} nk_B T$	$dS = \frac{1}{\Theta} dU + \frac{P}{\Theta} dV = C_{vs} \frac{d\Theta}{\Theta} - \frac{d\varepsilon_s}{\varepsilon_s}$
	com $C_{vs} = 3/2m$ e $V = (\varepsilon_s \rho_s)^{-1}$. Então,
	$S = C_{vs} \ln(\Theta) - \ln(\varepsilon_s) + \text{constante}$

Naturalmente, se vê que essas grandezas dependem da pseudo temperatura e para tanto se faz necessário uma equação de transporte para determinação do campo de temperaturas aparentes.

A referida equação de transporte tem seu embrião na equação íntegro-diferencial de Boltzmann. Essa equação é resultado da caracterização dos mecanismos de transporte vislumbrados no movimento das partículas, a saber, transporte cinético e colisional. Aqui a hipótese é que as colisões sejam binárias e instantâneas. Assim, igualando esses dois transportes:

$$\frac{Df}{Dt} + \mathbf{C} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{C}} (\mathbf{F}f) - \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{C}} - \frac{\partial f}{\partial \mathbf{C}} \mathbf{C} : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v} = \iint \left\{ f^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{r}; \mathbf{c}_1', \mathbf{r} + d_p \mathbf{k} : t) - f^{(2)}(\mathbf{c}, \mathbf{r}; \mathbf{c}_1, \mathbf{r} - d_p \mathbf{k} : t) \right\} d_p^2(\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1 \quad [2.3]$$

onde f é a densidade numérica das partículas ou função distribuição de velocidades, $\mathbf{r}$ é o vetor posição da partícula, $f^{(2)}$ é a função de distribuição dos pares, $\mathbf{k}$ é o vetor unitário, $\mathbf{c}_{12}$ é a velocidade da partícula 1 em relação a 2. Define-se, também, $\mathbf{c}'$ como a velocidade da partícula após uma colisão. Esta se relaciona com $\mathbf{c}$ através do coeficiente de restituição. $\mathbf{F}$ é a força externa por unidade de massa atuando em cada partícula. A integral dupla no lado direito da [2.3] representa a taxa de mudança da função distribuição f com o tempo devido as colisões entre as partículas. Por se considerar somente colisões binárias, somente se leva em consideração funções binárias para a descrição dessas colisões.

A partir desta equação, para a caracterização dos mecanismos de transporte da flutuação da energia cinética do particulado, basta explicitar as funções f e $f^{(2)}$.

A equação de transporte de Maxwell resulta da multiplicação da equação de Boltzmann por uma grandeza da partícula ϕ e da integração da mesma sobre todas as velocidades possíveis.

$$\frac{D}{Dt}(n\bar{\phi}) + n\bar{\phi} \frac{\partial}{\partial r} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial}{\partial r} \cdot n\bar{\phi} \mathbf{C} - n \left\{ \begin{aligned} &\overline{\frac{D\phi}{Dt}} + \mathbf{C} \cdot \overline{\frac{\partial \phi}{\partial r}} + \mathbf{F} \cdot \overline{\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{C}}} - \\ &\overline{\frac{D\mathbf{v}}{Dt}} \cdot \overline{\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{C}}} - \overline{\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{C}}} \mathbf{C} : \overline{\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial r}} \end{aligned} \right\} = \quad [2.4]$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \cdot \theta_c (\mathbf{C} + \mathbf{v}) + \chi_c (\mathbf{C} + \mathbf{v})$$

onde se identifica θ_c e χ_c como integrais de colisão (que podem ser encontradas de forma resumida em Nieuwland, 1996) e c_{12} é a velocidade relativa da partícula 1 para a 2. n é o número de partículas presentes por unidade de volume. Define-se

$$n = \int f(\mathbf{c}, r; t) d\mathbf{c} \quad [2.5]$$

$$\bar{\phi} = \frac{1}{n} \int \phi f(\mathbf{c}, r; t) d\mathbf{c} \quad [2.6]$$

Nessa equação substituindo a grandeza ϕ pela massa de sólido ela passa a ser idêntica a continuidade da fase sólida. Onde a velocidade que aparece no termo convectivo é definida como:

$$\langle c \rangle = \frac{1}{n} \int c f d c \quad [2.7]$$

Assim, a equação da continuidade obtida pela teoria cinética é idêntica a obtida por balanço de fluxos mássicos em um volume de controle, pois a definição da velocidade média é a mesma da técnica de mediação de Reynolds.

Já para se obter a equação de transporte do momento deve-se levar em conta as forças externas F . Essas forças externas costumam ser levadas em conta, para escoamentos gás-sólido, apenas a ação da gravidade, o arrasto aerodinâmico e forças mecânicas (gradiente de pressão). Existem autores (GIDASPOW, 1994) que desprezam este último efeito. Forças extras em geral não são consideradas; como exemplo, forças de Saffman e Basset. Essas forças são discutidas mais a frente neste capítulo. Então, há mister de se substituir a energia cinética flutuante na equação de Maxwell para se obter a equação de transporte para a temperatura granular ou pseudo temperatura, ou em outras palavras, o balanço de energia flutuante (DING e GIDASPOW, 1990).

A forma geral da solução é:

$$\begin{aligned} & \frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \Theta) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \underline{v}_s \Theta) \right] = \\ & - (\underline{P}_s I + \alpha_s \underline{s}_s) : \nabla \underline{v}_s + \nabla \cdot \alpha_s \underline{h} + \beta (\overline{C_g C} - 3\Theta) - \gamma \end{aligned} \quad [2.8]$$

Esta será a forma a ser utilizada neste trabalho. O fechamento desta equação esta exposto no próximo capítulo.

2.4 Força Lift

Muitos pesquisadores foram na direção de tentar encontrar uma forma mais geral para a força lift. McLaughlin amortizou a restrição do número de Reynolds na fórmula de Saffman incluindo um fator de correção devido ao quociente dos números de Reynolds. Mas essa formulação ainda possui a restrição de somente valer longe das paredes. VASSEUR E COX (1977) obtiveram uma fórmula para a força devido a presença de uma parede válida em pontos longe da parede, em outras palavras, as paredes ficam em uma região fora da ação da perturbação da partícula. COX E HSU (1977) derivaram uma fórmula para a velocidade de migração inercial de uma partícula esférica em um escoamento linearmente cisalhante e vertical:

$$v_m = \frac{3}{32} \frac{av_s^2}{v} - \frac{11}{64} \frac{Gav_s l}{v} \quad [2.9]$$

A força lift correspondente, a qual inclui tanto uma parte devido ao cisalhamento quanto a induzida pela parede pôde ser obtida:

$$F_\ell = \frac{3}{32} \pi \rho_g a^2 v_s (6v_s - 11Gl) \quad [2.10]$$

Essa fórmula ainda possui restrições. Só vale para distâncias entre a partícula e a parede muito maior que o raio da partícula, ou seja, $l/a \gg 1$. Essa forma de força lift, em teoria, seria suficiente para descrever o fenômeno estudado neste trabalho pois as distâncias mínimas entre as partículas e a parede não passam da ordem de 10^{-3} m. Dado que o diâmetro das partículas neste estudo seja $76 \cdot 10^{-6}$ m, a relação l/a é muito maior que a unidade.

É evidente que os estudos nesta área seguiram e formas mais gerais foram encontradas. CHERUKAT & MCLAUGHLIN (1994) derivaram uma forma aplicável quando a distância entre a partícula e a parede é da ordem do raio da partícula. Essa fórmula se reduz para a forma de COX & HSU (1977) quando a condição de $l/a \gg 1$.

Para a partícula longe da parede, McLaughlin, em 1993, obteve uma solução fechada para a força lift a qual fornece uma conexão entre os vários casos limitantes considerados pelos investigadores supracitados. A expressão resultante vem aqui representada por:

$$F_{\ell} = -\frac{9}{\pi} \mu_g a^2 v_d \sin \alpha (G) \left[\frac{|G|}{v} \right]^{1/2} J \quad [2.11]$$

onde a função J incorpora os efeitos do cisalhamento puro e da indução da parede em dois termos, respectivamente: J^u e J^p . McLaughlin chegou a expressões para J^u em 1991 e para J^p em 1993. Essas funções têm como variáveis um parâmetro adimensional que depende dos números de Reynolds acima descritos (em verdade, é o parâmetro acima descrito como o quociente dos números de Reynolds) e da distância adimensional do centro da partícula a parede. A fórmula geral obtida por ele é tão complicada que seus valores foram tabelados

Em 1997, Wang e colaboradores chegaram a uma expressão “ótima” para a força lift em tabela onde, de acordo com o valor dos parâmetros adimensionais acima descritos, usa-se uma expressão que melhor se encaixa na situação. Essa pequena revisão também se encontra neste artigo.

Hall, em 1988, mediu a força lift atuante sobre esferas próximas a parede de uma camada limite turbulenta. Ele chegou a seguinte correlação de seus dados:

$$F_{\ell}^{+} = 20,90(a^{+})^{2,31} \quad [2.12]$$

onde essa correlação vale para faixa de a^{+} entre 1,8 e 70.

Em trabalho mais recente, ASMOLOV & MCLAUGHLIN (1999) refinam seus resultados para esferas com movimento não estacionário, exatamente ao contrário do que os pesquisadores anteriores haviam calcado seus estudos. No entanto, a frequência e amplitude de oscilação das esferas consideradas neste trabalho já vai além da escala de comprimento e de tempo do presente trabalho.

2.5 Outras Forças Extras

No pacote CFX-4.3, existem quatro tipos de força extras (forças conhecidas como de diferentes de arrasto, ou, non-drag) pré-definidas a se incorporar na equação do momento. A saber, força de massa virtual, força lift, força devido a lubrificação da parede e força induzida por turbulência. (CFX, 1997)

A força de massa virtual é dada em termos das acelerações relativas das fases:

$$F_{MV} = -\alpha_s \rho_g C_{MV} \left(\frac{D}{Dt} [U_s] - \frac{D}{Dt} [U_g] \right) \quad [2.13]$$

onde C_{MV} é um coeficiente que depende da forma e da natureza da partícula. Para uma distribuição de apenas um diâmetro e partículas esféricas o seu valor é 0,5.

A força lift do pacote CFX-4.3 é dada em termos da velocidade de deslizamento e do rotacional da velocidade da fase contínua:

$$F_l = -\alpha_s \rho_g C_l (U_s - U_g) \times \nabla \times U_g \quad [2.14]$$

aqui, C_l assume o valor de 0,5 para escoamentos invíscidos e entre 0,01 e 0,05 para escoamentos víscidos.

A força devido a lubrificação da parede é sempre normal a parede e decai conforme a distância em relação a parede aumenta.

$$F_{lp} = \frac{\alpha_s \rho_g (U_s - U_g)^2}{d} \max \left(0, C_1 + C_2 \frac{d}{y_p} \right) \underline{n} \quad [2.15]$$

y_p é a distância do centro da partícula a parede e $\underline{n}$ é o vetor normal a parede. Tipicamente, C_1 assume o valor -0,01 e C_2 , 0,05. Isso significa que a força somente se expressa em regiões onde a distância para a parede seja de 5 diâmetros. Essa força só pode ser vislumbrada em malhas muito finas.

A força de dispersão da turbulência depende da intensidade da turbulência da fase contínua e do gradiente da fração volumétrica da mesma. Em outras palavras,

$$F_t = C_{dt} \rho_g k_g \nabla \alpha_g \quad [2.17]$$

C_{dt} assume um valor em torno de 0,1. Esse modelo pode ser encontrado em KURUL & PODOWSKI (1990).

No presente trabalho, somente serão testados os modelos de força lift aqui apresentados. A referência será com o número da equação.

“A mim, parece que nunca acabei de ser criança. Uma criança que brincou na praia, que encontrou uma pedra bem polida, uma concha multicolorida, enquanto o grande oceano da verdade continua a se estender, ainda inexplorado, diante de meus olhos.”

Isaac Newton

CAPÍTULO III – Modelagem Matemática

Onde serão discutidos os aspectos matemáticos dos modelos empregados. A natureza das equações geradas, das condições de contorno e das equações constitutivas. Serão apresentadas as equações de transporte, a teoria cinética dos escoamentos granulares, as forças extras e uma breve discussão da turbulência presente no processo.

3.1 Pequeno Ensaio Introdutório

Como já foi apresentado, o fenômeno é de escoamento multifásico ocorrendo em um tubo cilíndrico. Portanto, a primeira decisão a tomar é como se tratar o comportamento de cada fase em si. Isto é, se a fase sólido será tratada como um fluido contínuo ou como partículas que se dispersa no fluido (gás) percolante. Resumindo, adotar o sistema euleriano-euleriano ou euleriano-lagrangiano.

Aqui será adotado o sistema euleriano-euleriano. Pode-se observar alguns motivos a se adotar esse sistema. Primeiramente, o nível de formulação que se propõe neste trabalho se refere ao equipamento como um todo. Em geral, em operações industriais de craqueamento o riser possui dimensões de comprimento que variam de 20 a 60 m. Assim, seria inviável tratar o problema na escala de comprimento das partículas (da ordem de 10^{-4} a 10^{-5} m). Segundamente, o sistema euleriano-euleriano tem se mostrado em trabalhos anteriores (MARTIGNONI, 1998) mais representativo dos fenômenos que ocorrem dentro dos equipamentos que o sistema alternativo.

Existe uma classificação de equações diferenciais parciais onde se pode identificar o comportamento do sistema analisando os coeficientes que aparecem na equação. No entanto, sabe-se de antemão que o processo aqui estudado é governado por um sistema de equações cada uma com sua característica. Assim, pode-se classificar o sistema de forma mista (adicionando cada efeito de cada equação) ou analisando pela ordem de grandeza de cada termo o efeito dominante.

A referida classificação é dividida em elíptica, hiperbólica e parabólica. A primeira se identifica por necessitar de condições de contorno globais. Isto é, os termos como difusão e pressão estão presentes e se propagam em todas as direções do escoamento. Esse tipo de equação é de difícil tratamento pois não permite a solução em regime de marcha em alguma coordenada espacial. O segundo e o terceiro tipo aparecem quando os termos difusivos não estão presentes ou quando os termos convectivos (que se propagam somente no

sentido do escoamento). Nesses casos, somente informações na coordenada de cálculo e a montante dela serão necessárias. A diferença entre uma equação parabólica e uma hiperbólica é a região de influência. Na parabólica, toda cota espacial na qual o ponto de interesse está inserido sofre influência deste ponto. Já na hiperbólica, a região de influência é apenas uma área determinada a jusante do ponto de cálculo. Pode-se identificar a diferença também pela velocidade do escoamento. Uma velocidade baixa (ou melhor, um número de Reynolds baixo, na região laminar) caracteriza um sistema parabólico.

Como será visto, o sistema gerado terá equações elípticas (momento e energia flutuante) e parabólicas (massa). No entanto, como se pode verificar no próprio processo, a natureza do sistema como um todo é elíptica pois as condições de contorno são de extrema relevância.

3.2 Equações que Governam o Fenômeno

Como se disse na introdução, a Fluido Dinâmica Computacional baseia-se na aplicação de princípios físicos largamente conhecidos, a saber:

1. a massa do sistema se conserva;
2. para o sistema, vale a segunda lei de Newton (1687);
3. a energia se conserva.

As derivações para se chegar as seguintes equações pode-se encontrar em detalhes na excelente revisão de ENWALD et al., 1996 e no clássico BIRD et al., 1960.

Assim, pelo primeiro princípio, surge a equação da continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \underline{v}_k) = 0 \quad [3.1]$$

onde o índice k subentende a fase. As variáveis e suas respectivas definições se encontram na lista de símbolos. Há mister de se notar que não existem efeitos difusivos nesta equação de transporte devido a consideração que cada fase é homogênea. A ausência de termos fontes remete a não inclusão de reações químicas.

De acordo com o segundo princípio, tem-se, em fins de contas, a conservação espacial do momento linear dentro do sistema. Por se tratar de um escoamento multifásico, a interação entre as fases é necessária.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \underline{v}_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \underline{v}_k \underline{v}_k) = \nabla \cdot \underline{T}_k - \alpha_k \nabla P - \beta(\underline{v}_k - \underline{v}_i) + \rho_k \alpha_k \underline{g} \quad [3.2]$$

Essa forma de apresentar a conservação do momento linear de escoamentos multifásicos varia de autor para autor. A equação [3.2] é baseada em BENYAHIA et al, 2000. No entanto, outras formas (inclusive, formas que levam em conta outras interações) podem ser encontradas. Em NERI & GIDASPOW, O termo de forças de campo (último termo em [3.2]) para o balanço de momento na fase sólida é tido como proporcional a diferença entre as densidades das fases e para a fase gás esse termo não tem influência da fração volumétrica. Aqui, todos os efeitos da presença de ambas as fases serão levados em conta. Isso é feito naturalmente pelo pacote CFX-4 devido a sua formulação interna.

Lembra-se que o problema de estudo é a fluido dinâmica de um riser. Neste sistema, não será considerada a cinética química envolvida no processo de

craqueamento. Também não será levado em conta a dissipação viscosa. Consequentemente, o processo será isotérmico.

No próximo item, tem-se resultado da aplicação do terceiro princípio em nível das colisões das partículas da fase sólida. Esse é o preceito básico da teoria cinética dos escoamentos granulares. Uma breve derivação e a forma final utilizada aqui foram apresentadas no item 2.2. Logo após passar-se-á para as relações constitutivas.

3.3 Teoria Cinética

A equação de transporte para a energia cinética flutuante, advinda da derivação do capítulo II, é dada por:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \Theta) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \underline{v}_s \Theta) \right] =$$

$$- (P_s I + \alpha_s \underline{s}_s) : \nabla \underline{v}_s + \nabla \cdot \alpha_s \underline{h} + \beta (\overline{C_g C} - 3\Theta) - \gamma \quad [2.8]$$

O fechamento desta equação depende da definição dos seguintes termos:

$$p = p^{\text{cin}} + p^{\text{col}} = P_s I + \alpha_s \underline{s}_s \quad [3.3]$$

$$p^{\text{cin}} = nm \overline{CC} \quad [3.4]$$

$$p^{\text{col}} = \theta_c (mC) \quad [3.5]$$

$$q = q^{\text{cin}} + q^{\text{col}} = \alpha_s \underline{h} \quad [3.6]$$

$$q^{\text{cin}} = \frac{1}{2} n m \overline{C^2} C \quad [3.7]$$

$$q^{\text{col}} = \theta_c \left(\frac{1}{2} m C^2 \right) \quad [3.8]$$

$$\gamma = -\chi_c \left(\frac{1}{2} m C^2 \right) \quad [3.9]$$

Para avaliação destas quantidades, funções explícitas para a função distribuição de velocidade f e a função distribuição par $f^{(2)}$ são requeridas. Existem várias formas que são encontradas na literatura para descrever essas funções (DING & GIDASPOW, 1990; NIEUWLAND et al., 1996). Enskog aproximou a função distribuição par por um produto da distribuição de velocidades de duas partículas e uma função de correlação g_0 , a função distribuição radial:

$$f^{(2)}(\underline{c}, r - d_p \underline{n}; \underline{c}_1, r_1; t) = g_0 \left(r - \frac{1}{2} d_p \underline{n} \right) f(\underline{c}, r - d_p \underline{n}; t) f(\underline{c}_1, r_1; t) \quad [3.10]$$

O objetivo da função distribuição radial é corrigir a probabilidade de uma colisão para o efeito do covolume das partículas, em outras palavras, o volume ocupado pelas partículas. Somente colisões levemente inelásticas estão presentes na modelagem e portanto, a isotropia colisional será considerada. Esse fato faz com que g_0 seja apenas função da fração de sólidos (NIEUWLAND, 1996). Assim, um simples ajuste de dados experimentais de ALDER e WAINWRIGHT (1960) foi realizado por OGAWA et al. (1980) apud NIEUWLAND (1996).

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad [3.11]$$

Uma sugestão de multiplicar esta função por 0,6 feita por DING e GIDASPOW (1990) para que haja um melhor ajuste escoamentos com frações de sólido maiores. Porém, essa correção falha para escoamentos diluídos como é o caso dos risers pois g_0 não alcança a unidade quando a fração de sólido tende para zero, como é previsto na definição da função distribuição radial.

Estas funções são utilizadas para obter a função distribuição de velocidades através da resolução da equação de Boltzmann. Essa resolução pode ser obtida em várias ordens de acurácia (VAN WACHEN, 2000; NIEUWLAND, 1996). Exemplos dessas várias soluções são mostradas por DING e GIDASPOW (1990) que utilizaram aproximação de ordem zero (ou distribuição maxwelliana de velocidades), LUN et al. (1984) obtêm a solução para a adoção de uma aproximação de primeira ordem. NIEUWLAND et al., 1996, utilizaram aproximação de quarta ordem.

Neste trabalho, será testado o modelo de DING e GIDASPOW (1990) para o caso do riser. Ela foi escolhida por sua simplicidade e por já possuir exemplos disponíveis na literatura (NERI e GIDASPOW, 2000; GIDASPOW e HUILIN, 1998). Deste modo, os termos representados em [3.10] a [3.16] são:

$$p^k = \alpha_s \rho_s \Theta \quad [3.12]$$

$$p^c = 2(1+e)g_0\alpha_s^2\rho_s\Theta - 2\alpha_s\mu_s^c\underline{\underline{\nabla v}} - \alpha_s\xi_s(\nabla \cdot v) \quad [3.13]$$

$$q^k = 0 \quad [3.14]$$

$$q^c = -\alpha_s \kappa^c \nabla \Theta \quad [3.15]$$

$$\gamma = 3(1 - e^2) \alpha_s^2 \rho_s g_0 \Theta \left(\frac{4}{d_s} \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} - \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \quad [3.16]$$

onde

$$\kappa^c = 2\alpha_s \rho_s d_s g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} \quad [3.17]$$

Assim sendo, as equações derivadas por esses pesquisadores foram:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \Theta) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s \Theta) \right] = \underline{\underline{T}}_s : \nabla \mathbf{v}_s + \nabla \cdot \kappa \nabla \Theta + \beta (\overline{C_g C} - 3\Theta) - \gamma \quad [3.18]$$

Esta é a equação de transporte da energia cinética flutuante. Os termos do lado esquerdo da equação são o termo transiente e o convectivo. Do lado direito, os termos são respectivamente a geração de energia cinética devido a deformação irreversível do campo de velocidade; o transporte condutivo ou difusivo da energia cinética flutuante; transferência de energia flutuante devido ao transporte de momento interfásico; dissipação de energia flutuante devido a interações partícula-partícula inelásticas.

3.4 Relações Constitutivas

As relações constitutivas necessárias para o fechamento da equação de transporte são os :

O tensor tensão da fase sólida, o mesmo que entrará na equação do momento:

$$\underline{\underline{T}}_s = (-P_s + \xi_s \nabla \cdot \underline{v}_s) \cdot \underline{I} + 2\mu_s \underline{\underline{\tau}}_s \quad [3.19]$$

A pressão de sólido:

$$P_s = \alpha_s \rho_s \Theta [1 + 2(1 + e)g_0 \alpha_s] \quad [3.20]$$

Tensor tensão da fase gás:

$$\underline{T}_g = 2\alpha_g \mu_g \underline{\underline{\tau}}_g \quad [3.21]$$

Tensor taxa de deformação para a fase gás:

$$\underline{\underline{\tau}}_g = \frac{1}{2} [\nabla \underline{v}_g + (\nabla \underline{v}_g)^T] - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \underline{v}_g) \cdot \underline{I} \quad [3.22]$$

Viscosidade do meio sólido (bulk):

$$\xi_s = \frac{4}{3} \alpha_s^2 \rho_s d_s (1+e) g_0 \left(\frac{\Theta}{\pi} \right)^{1/2} \quad [3.23]$$

Viscosidade cisalhante

$$\mu_s = \frac{2\mu_{s,dil}}{(1+e)g_0} \left[1 + \frac{4}{5} (1+e) g_0 \alpha_s \right]^2 + \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_s d_s (1+e) g_0 \left(\frac{\Theta}{\pi} \right)^{1/2} \quad [3.24]$$

com

$$\mu_{s,dil} = \frac{5\sqrt{\pi}}{96} \rho_s d_s \Theta^{1/2} \quad [3.25]$$

sendo a viscosidade cisalhante em um sistema diluído.

Novamente, a função distribuição radial prevê o arranjo espacial das partículas:

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad [3.26]$$

Segundo GIDASPOW e HUILIN (1998) esta forma de distribuição radial representa bem o arranjo espacial das partículas de FCC. No entanto, NIEUWLAND et al., 1996 ressalta que a função distribuição radial não vai para 1 assintoticamente para sistemas diluídos (como é o caso dos risers), o que daí surge uma inconsistência com a própria definição da função distribuição radial.

A condutividade da energia flutuante da partícula é:

$$\kappa = \frac{2\kappa_{dil}}{(1+e)g_0} \left[1 + \frac{6}{5}(1+e)g_0\alpha_s \right]^2 + 2\alpha_s^2\rho_s d_s (1+e)g_0 \left(\frac{\Theta}{\pi} \right)^{1/2} \quad [3.27]$$

$$\kappa_{dil} = \frac{75\sqrt{\pi}}{384} \rho_s d_s \Theta^{1/2} \quad [3.28]$$

E, o termo de dissipação de energia por unidade de volume é:

$$\gamma = 3(1-e^2)\alpha_s^2\rho_s g_0 \Theta \left[\frac{4}{d_s} \left(\frac{\Theta}{\pi} \right)^{1/2} - \nabla \cdot \underline{v}_s \right] \quad [3.29]$$

Agora falta apenas a definição do coeficiente de transferência de momento entre as fases. Este cálculo é realizado da seguinte forma:

Definição do coeficiente de arrasto para os diversos regimes de escoamento:

- regime de Stokes:

$$C_D = \frac{24}{Re} \quad [3.30]$$

- regime viscoso (correlação de SCHILLER-NAUMANN, 1933):

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,687}) \quad [3.31]$$

- regime turbulento ou inercial (regime de Newton):

$$C_D = 0,44 \quad [3.32]$$

A escolha entre os diversos modelos é feita de acordo com o número de Reynolds local, automaticamente.

Para frações volumétricas abaixo de 0,80 da fase contínua usa-se a correlação de Ergun para o cálculo do coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases:

$$\beta = 150 \frac{(1-\alpha_g)^2 \mu_g}{\alpha_g d_s^2} + 1,75 \frac{(1-\alpha_g) \rho_g |U_s - U_g|}{d} \quad [3.33]$$

Para frações volumétricas acima de 0,80 da fase contínua vale a equação:

$$\beta = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_s} \alpha_s \rho_g |U_s - U_g| \quad [3.34]$$

Para tanto, a definição do número de Reynolds é baseada no diâmetro da partícula.

$$Re = \frac{d_s U \rho_g}{\mu_g} \quad [3.35]$$

Aqui cabem alguns comentários. O terceiro termo da direita da equação de transporte da energia flutuante, em muitos casos é negligenciada por se supor que a produção de energia flutuante devido a turbulência do gás seja balanceada pelo arrasto do fluido quando se trata de escoamentos completamente desenvolvidos (CAO e AHMADI, 1995; MA e AHMADI, 1986). Desta forma o balanço de energia flutuante para a fase gás não se faz necessário (NERI e GIDASPOW, 2000; BENYAHIA et al., 2000).

Esse modelo também somente leva em conta a parte colisional de μ_s e κ_s , ou seja, a parte cinética é negligenciada. Isso compromete a prescrição dessas variáveis em regimes extremamente diluídos. Esse fato tentar-se-á observar nesta pesquisa. O modelo transiente é testado em forma de equação adicional via subrotinas em linguagem FORTRAN.

3.5 Abordagem Estacionária da Teoria Cinética

No presente trabalho, será considerada a formulação de equilíbrio para a equação da energia flutuante. Essa formulação somente leva em consideração os termos de geração de energia flutuante devido a deformação do campo médio de velocidades e o de dissipação da energia flutuante. Esta formulação está presente no CFX como algoritmo já incluído. A seguir, apresenta-se a modelagem da teoria cinética na sua forma de equilíbrio.

Para muitos problemas de leito fluidizado, o modelo simples de pressão de sólidos é suficiente para prever as colisões entre as partículas:

$$-\nabla p_s = -\exp(E(\alpha_s - \alpha^\perp)) \nabla \alpha_s \quad [3.36]$$

No pacote CFX, o comando Kinetic Theory realiza cálculos da teoria cinética na hipótese de equilíbrio para o transporte da energia flutuante. Essa forma da equação prescreve que a geração de energia flutuante devido a deformação do campo de velocidades médias é igual a dissipação como definida em [3.29]. Assim,

$$(-p_s \delta + \tau_s) \cdot \nabla \mathbf{U}_s = \gamma \quad [3.37]$$

Nesta equação são definidos:

O tensor tensão da fase sólida é escrito:

$$\tau_s = \left(\xi_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \cdot \mathbf{U}_s \delta + \mu_s \left[\nabla \mathbf{U}_s + (\nabla \mathbf{U}_s)^T \right] \quad [3.38]$$

A função distribuição radial é descrita por:

$$g_0 = 0,6 \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad \alpha_s > 0,001 \alpha_{s,\max} \quad [3.39]$$

$$g_0 = A + B(\alpha_s - \alpha_c) + C(\alpha_s - \alpha_c)^2 + D(\alpha_s - \alpha_c)^3 \quad \alpha_s < 0,001 \alpha_{s,\max} \quad [3.40]$$

onde $A=1,079 \cdot 10^3$, $B=1,08 \cdot 10^6$, $C=1,08 \cdot 10^9$ e $D=1,08 \cdot 10^{12}$.

A pressão da fase sólida implementada no pacote é a mesma definida por DING & GIDASPOW (1990):

$$P_s = \alpha_s \rho_s \Theta [1 + 2(1+e)g_0 \alpha_s] \quad [3.41]$$

O mesmo vale para as viscosidades cisalhantes e do meio sólido. Assim, a equação que rege a temperatura granular no pacote recai em uma equação algébrica de segundo grau. Essa hipótese simplificadora será testada no presente trabalho.

3.6 Força Auxiliar (“Lift”) de Saffman

Partículas pequenas (em geral, da ordem de microns a milímetros) podem experimentar forças extras (lift) como resultado da inércia de um fluido. Existe um grande número de aplicações em engenharia onde as forças extras são conhecidas ou suspeita-se que possuam um importante papel. Entre os fenômenos reconhecidamente influenciados por essas forças, estão a deposição e acumulação de partículas próximo a superfícies sólidas em escoamentos turbulentos (KALLIO E REEKS, 1989; MCLAUGHLIN, 1989; CHEN E MCLAUGHLIN, 1996). Em trabalho de 1982, LEE & DURST demonstraram que o movimento de uma partícula e a difusão em um campo de escoamento turbulento tem que ser simulado numericamente incluindo a força lift de SAFFMAN (HUILIER & BURNAGE, 1996).

Apesar o termo lift em inglês significa ascensão, passar-se-á a denominá-lo de transversal. Isso porque, devido a sua natureza, essa força foi observada como a motriz do movimento de partículas, em um fluido escoando laminarmente, de uma linha de corrente para outra (e provavelmente para cima). Porém, para o caso presente a força atua na direção radial ou, de um modo geral, na direção transversal a principal componente da velocidade do escoamento.

Apesar da fórmula de Saffman para a força lift considerar as partículas se movimentando longe dos efeitos de contornos sólidos, numericamente, o valor deste termo balanceia a força de arrasto de forma a gerar um deslocamento no sentido da parede. No entanto, nas proximidades da parede a fórmula de Saffman deixa de valer e portanto, cuidados devem ser tomados.

Saffman obteve, em 1965, a seguinte fórmula para a força transversal:

$$F_{\ell} = 6,46\mu_g a^2 v_s \sqrt{\frac{|G|}{\nu}} \text{sign}(G) \quad [3.42]$$

onde G é a taxa de cisalhamento

Para isso, Saffman fez uma consideração em termos novos números de Reynolds. Definindo-os de Reynolds baseado na velocidade de deslizamento e baseado na cisalhamento devido a velocidade de fluido, respectivamente:

$$Re_d = \frac{|v_s| d_p}{\nu}; \quad [3.43]$$

$$Re_G = \frac{|G| d_p^2}{\nu}. \quad [3.44]$$

Para chegar nesta fórmula, Saffman considerou que $Re_G^{1/2} / Re_s$ é muito maior que a unidade. No entanto, MCLAUGHLIN (1991) mostrou que, em média, $Re_G^{1/2}$ é menor que Re_s para transporte aerossol em um escoamento turbulento interno (WANG et al., 1997).

Outras formas de força lift estão referenciadas no capítulo anterior e ficarão como sugestão de trabalhos futuros.

3.7 Condições de contorno

As condições iniciais são condições de contorno especiais pois somente servem para iniciar a simulação. Na literatura as condições iniciais são várias mas em trabalhos recentes (NERI e GIDASPOW, 2000; BENYAHIA et al., 2000) a condição de leito contendo somente gás vem sendo adotada como mais real e coerente. Esse fato vem principalmente devido a evolução da frequência de processamento dos chips atuais. Assim, enquanto a anos atrás se iniciava a simulação de um problema com um perfil estabelecido para acelerar a convergência, hoje se começa a utilizar uma simulação partindo do leito vazio. No entanto, mesmo com toda evolução dos processadores, o tempo de computação de um problema típico onde se necessita rodar 40s reais, se leva, em máquinas como Sun Ultra 10 de 3 a 4 semanas. Assim, a técnica usada nesta pesquisa foi rodar uma simulação transiente bem convergida em cada intervalo de tempo até 10s onde se começa, em geral, a se contar a dinâmica do equipamento para efeito de média temporal das variáveis. A partir desta simulação, os testes foram realizados.

As condições de contorno são em geral de dois tipos: Neumann e Dirichlet. Nesta última, o valor da variável é prescrito enquanto naquela o fluxo é prescrito. As condições de contorno, em geral, nas entradas são de Dirichlet e as condições na parede e na saída são do tipo de Neumann.

Entrada

Na entrada são prescritas as velocidades normais (os escoamento de entrada são considerados pistonados), as frações volumétricas e a temperatura granular de ambas as fases.

Saída

Nas saídas são impostas condições de pressão. Essas condições são para prescrição da pressão e condição de Neumann para todas as outras variáveis.

Parede

Para a fase sólida as velocidades normais a parede são anuladas. As velocidades tangenciais às paredes são encontradas através de balanços de forças nas proximidades da parede. É a condição escorregamento com atrito zero (HUI et al., 1984).

$$u_{s,w} = -A \frac{\partial u_{s,w}}{\partial n} \quad [3.45]$$

$$A = \frac{6\mu_s \alpha_{s,\max}}{\sqrt{3}\pi\Phi\rho_s \alpha_s g_0 \sqrt{\Theta}} \quad [3.46]$$

Para o gás, as velocidades são nulas pela hipótese da aderência da fase a superfície da parede.

A condição de parede da temperatura granular também é obtida através de um balanço (só que de energia) nas proximidades da parede (JOHNSON e JACKSON, 1987).

$$\Theta_p = -B_1 \frac{\partial \Theta_p}{\partial n} + B_2 \quad [3.47]$$

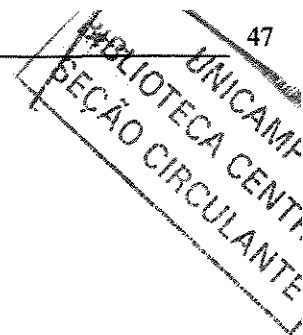
$$B_1 = \frac{\kappa \Theta}{\gamma_p} \quad [3.48]$$

$$B_2 = \frac{\sqrt{3}\pi\Phi\rho_s\alpha_s u_{s,desl}^2 g_0 \Theta^{3/2}}{6\alpha_{s,max}\gamma_p} \quad [3.49]$$

A dissipação nas proximidades da parede é dado por (GIDASPOW e HUILIN, 1996):

$$\gamma_p = \frac{\sqrt{3}\pi(1-e_p^2)\alpha_s\rho_s g_0 \Theta^{3/2}}{4\alpha_{s,max}} \quad [3.50]$$

O coeficiente de especularidade Φ é a fração do momento total transferido para a parede quando partículas colidem em sua superfície. Essa grandeza mede a rugosidade da mesma.



Capítulo IV – Dos Métodos Numéricos

Neste capítulo apresenta-se os aspectos numéricos adotados no pacote CFX-4. Serão discutidos discretização em malha co-localizada, geração da malha, esquemas de interpolação, entre outros. Também apresentam-se uma introdução às simulações onde serão caracterizadas e explicitadas as condições para realização das mesmas.

4.1 Método Dos Volumes Finitos

O método dos volumes finitos é descrito em várias obras recentes como em PINTO e LAGE (1997), MALISKA (1995), MUNIZ (1995), ALVES (1998), PEIXOTO (1998), MEIER (1998), FUDIHARA (2000). MUNIZ (1995) realiza a discretização em arranjo desencontrado, assim como PATANKAR (1980). Aqui o método será mostrado brevemente já que se tem em mãos abundante referência. O arranjo co-localizado será o abordado nesta tese.

O método dos volumes finitos foi, em seu âmago, desenvolvido para tratar problemas de valor de contorno. Muitas vezes, este método é confundido com o método das diferenças finitas (MDF), que em muitos casos a discretização resulta no mesmo sistema de equações algébricas. No entanto, o MDF é de cunho matemático cujas aproximações das derivadas se baseiam na expansão de série de Taylor. O MVF surge de um prisma físico.

Existem duas formas de se obter as equações aproximadas no método dos volumes finitos. Uma é aplicar as leis fundamentais consideradas nos volumes elementares. A outra é integrar a equação diferencial em sua forma conservativa (ou quando os fluxos aparecem dentro das derivadas) sobre o volume finito. É muito comum a segunda forma de obtenção das equações discretizadas.

4.1.1 Discretização do Sistema de EDP

Assim, o processo de discretização das equações diferenciais começa da equação genérica de transporte onde todos os termos possíveis são considerados e integrados sobre o volume finito. Essa é a forma da equação que o pacote CFX trabalha, tanto para as equações fundamentais quanto para as equações que o usuário, por ventura, quiser inserir em seu modelo. Seja a equação genérica dada a seguir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \phi_k) + \nabla \cdot (\alpha_k (\rho_k \underline{U}_k \phi_k - \Gamma_{\phi,k} \nabla \phi_k)) = \\ \alpha_k S_{\phi,k} + \sum_{k=1}^{NF} \beta(\phi_k - \phi_i) + \sum_{k=1}^{NF} (\dot{m}_{ki} \phi_k - \dot{m}_{ik} \phi_i) \end{aligned} \quad [4.1]$$

onde o último termo somente aparece se houver transferência de massa entre as fases. O índice i remete uma outra fase que não seja k .

Para integrarmos esta equação sobre o volume de controle $\forall$ cuja área interfacial seja $\tilde{A}$, usar-se-á apenas os termos como se houvesse apenas uma fase (sem transferência interfásica).

$$\int \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \phi_k) d\forall + \int \alpha_k (\rho_k \phi_k \underline{U}_k - \Gamma_{\phi,k} \nabla \phi_k) \cdot \underline{n} d\tilde{A} = \int S_{\phi,k} d\forall \quad [4.2]$$

Assim, temos três integrais a se resolver para obter as equações discretizadas. Na ordem em que aparecem na equação acima: o termo transiente; o termo advectivo-difusivo; e, o termo fonte.

A partir de agora, por questão de simplicidade de nomenclatura, a discretização de cada termo será levada como monofásico

4.1.2 Termo Transiente

No CFX, o termo transiente é tratado de forma totalmente implícita. Assim, para uma aproximação de primeira ordem utilizando a retroaproximação de Euler:

$$\int \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV = \frac{\phi_P^j - \phi_P^{j-1}}{\Delta t} \Delta V \quad [4.3]$$

Aqui j se refere a iteração atual. Nessa formulação, surge um sistema de equações, uma vez que as equações estão acopladas entre si por se tratar de todos pontos considerados estarem no mesmo nível de tempo. Em outras palavras, a avaliação dos fluxos se dá no final do intervalo de tempo.

4.1.3 Termo Advectivo-Difusivo

No termo advectivo e no difusivo, a discretização resulta respectivamente em

$$\int \rho \phi \underline{U} \cdot \underline{n} d\tilde{A} = \sum_P^{DIN} (F_I A_I \phi_I - F_O A_O \phi_O); \quad [4.4]$$

$$\int \Gamma_\phi \nabla \phi \cdot \underline{n} d\tilde{A} = \sum_P^{DIN} \left[\frac{\Gamma_I A_I}{\delta_I} (\phi_L - \phi_P) - \frac{\Gamma_O A_O}{\delta_O} (\phi_P - \phi_O) \right]. \quad [4.5]$$

onde F significa o fluxo convectivo, Γ a difusividade e δ a distância entre o centro do volume e a interface designada no subscrito. DIN é a dimensão considerada na modelagem.

Neste termo surgem valores do campo ϕ que deveriam ser conhecidos nas interfaces. Esses valores devem ser calculados através de funções de interpolação. A natureza e a utilização destas funções será exposta mais a diante.

4.1.4 Esquemas De Interpolação

Os termos advectivos merecem um especial tratamento quando se tratam de malhas co-localizadas. Na discretização destes termos, aparecem pontos que não pertencem a malha computacional. Mais especificamente, esses pontos recaem sobre as interfaces dos volumes de controle e esse valores tem que ter um tratamento especial na aplicação do método numérico para evitar problemas na marcha da solução numérica.

O tratamento dos termos advectivos determina a acurácia obtida na solução das equações do modelo do CFX. O tratamento destes termos é delicado pois quando um esquema tende a ser mais acurado ele, por conseguinte, tende a ser menos robusto ou mais lento. Por esse motivo, o pacote CFX apresenta uma vasta lista de opções de esquemas de interpolação disponíveis (CFX, 1997). Porém, neste texto serão apresentados somente os esquemas tipo UPWIND em suas várias formas onde se diferenciam pela ordem de acurácia. Em outros trabalhos do LMSPQ (FUDIHARA, 2000; ALVES, 1998 (a), (b), (c); MUNIZ, 1995; MEIER, 1998), pode-se encontrar descrições mais detalhadas, além, é claro, de outros clássicos da literatura como MALISKA, 1995 e PATANKAR, 1980.

Mas antes de começar a descrição das funções de interpolação deve-se explicar a preferência pelas funções do tipo UPWIND. Em MALISKA (1995) existe uma explanação mais alongada e por isso aqui ter-se-á apenas um breve comentário sobre o UPWIND e sua significação física.

Sem delongas, o uso de esquemas de diferenças centrais em problemas de convecção dominante gera, na maioria dos casos, soluções não realísticas por serem esquemas não dissipativos. Por outro lado, o uso de esquemas upwind produzem soluções fisicamente coerentes, mas têm a propriedade de suavizar os altos gradientes, por serem dissipativos. Assim, para escoamentos de velocidades altas, o esquema upwind seria mais indicado pois ele dissipa oscilações geradas na solução numérica ante fortes gradientes das variáveis. O esquema de diferenças centrais é mais indicado para problemas onde a difusão é mais pronunciada. A fundamentação física dessas funções de interpolação pode ser encontrada a página 79 de MALISKA (1995).

Os itens serão nomeados de acordo com o pacote CFX.

UPWIND

Nesse esquema, o valor advectivo da variável ϕ na face oeste do volume de controle é tida como ϕ_W , assim:

$$\int \rho \phi \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} dA = \rho U_W A_W \phi_W \equiv C_W \phi_W \quad [4.6]$$

onde C_W é o coeficiente de advecção na face oeste. Deste modo, o coeficiente da matriz que comporá o sistema linear resultante da discretização do sistema de EDP será:

$$\Lambda_W = \max(C_W, 0) + D_W \quad [4.7]$$

D_W é o coeficiente de difusão definido por a partir de [4.5]:

$$D_W = \frac{\Gamma A_W}{\delta_W} \quad [4.8]$$

Esse esquema é, então, de primeira ordem.

HIGHER UPWIND

Este é um esquema de segunda ordem de acurácia por extrapolar valores da face de dois pontos a montante. Em outras palavras, ϕ_w é dado por

$$\phi_w = \frac{1}{2}(3\phi_W - \phi_{WW}) \quad [4.9]$$

Esse e os esquemas que seguem são menos compactos que o anterior devido a presença do termo de dois pontos a montante ϕ_{WW} . Para manter a estrutura da matriz no código do CFX-4, o esquema é rescrito como:

$$\phi_w = \phi_W + \frac{1}{2}(\phi_W - \phi_{WW}) \quad [4.10]$$

O segundo termo é incluído no termo fonte como uma correção procrastinada, ou seja, somente começa a ser calculada algumas iterações depois do processo iterativo iniciar. Na face oposta, leste, a interpolação se dá como:

$$\phi_e = \frac{1}{2}(3\phi_P - \phi_W) \quad [4.11]$$

Essas fórmulas podem ser escritas em uma única forma para a contribuição da matriz do sistema:

$$\Delta_W = \max(C_W, 0) + \frac{1}{2} \max(C_E, 0) + D_W \quad [4.12]$$

Maiores detalhes em THOMPSON & WILKES (1982).

QUICK (Quadratic Upwind Differencing)

Esse é um esquema tipo upwind de terceira ordem de acurácia para os termos advetivos. Outros termos como a difusão mantêm a acurácia de segunda ordem. Esse esquema usa dois pontos a montante e um a jusante.

$$\phi_w = \frac{5}{8} \phi_W + \frac{3}{8} \phi_P + \frac{1}{8} (\phi_W - \phi_{WW}) \quad [4.13]$$

onde os dois últimos termos vão para o termo fonte.

Na face leste, o valor na face é escrito de forma a manter a positividade da matriz do sistema.

$$\phi_e = \frac{3}{8} (\phi_E - \phi_P) + \frac{9}{8} \phi_P - \frac{1}{8} \phi_W \quad [4.14]$$

Nesta fórmula, o primeiro termo é tratado no termo fonte. A contribuição para a matriz pode ser escrita como:

$$\Lambda_W = \frac{5}{8}\max(C_W, 0) + \frac{1}{8}\max(C_E, 0) + D_W \quad [4.15]$$

CCCT

Esquemas tipo upwind podem produzir respostas não satisfatórias (maiores que as esperadas) quando perante a valores não físicos. Por exemplo, a energia cinética turbulenta pode se tornar negativa. O CCCT é uma modificação do QUICK que é discreto e idêntico para todas as variáveis. Esse esquema segue a fórmula:

$$\phi_W = \left(\frac{3}{8} - \iota\right)\phi_P + \left(\frac{3}{4} + 2\iota\right)\phi_W - \left(\frac{1}{8} + \iota\right)\phi_{WW} \quad [4.16]$$

onde ι é um parâmetro depende da curvatura da variável ϕ .

4.1.5 Termo Fonte

O termo fonte é tratado como linear de tal forma que a sua integração resulta em:

$$\int S_\phi dV = S_u \underline{V} + S_p \underline{V} \phi_P \quad [4.17]$$

Aqui, classicamente, a linearização deve possuir coeficiente angular negativo de forma a evitar casos fisicamente inviáveis como geração contínua da grandeza ϕ . Assim, um cuidado especial deve ser dispensado a este termo que numericamente é o mais complicado. Comumente, em equações de um modelo físico, o termo fonte

decrece com ϕ . Nestes casos, a linearização via série de Taylor pode ser usada, já que o valor de S_p será negativo (PINTO e LAGE, 1997).

Quando não for o caso supracitado, o tratamento sugerido é:

$$S_u = S(\phi_P^*) \quad [4.18]$$

$$S_p = 0 \quad [4.19]$$

Ou ainda, fazer uma linearização artificial onde S_p fica negativo. Esse procedimento diminui a convergência.

Ainda, no pacote CFX-4, um procedimento, principalmente em modelos como o de turbulência $k-\varepsilon$, é incorporar o termo S_p em S_u simplesmente dividindo S_p pelo valor da iteração anterior de ϕ

4.2 Acoplamento Pressão-Velocidade

Após o processo de discretização das equações em si e da determinação dos termos nas interfaces dos volumes através das funções de interpolação, depara-se com um problema: o campo de pressões é tido como conhecido na equação do momento linear, no entanto, isso quase nunca é verdade. Então, como calcular o campo de pressões se não existe uma equação cuja variável seja a pressão? A resposta vem através de uma manipulação algébrica das equações de continuidade de forma a acoplar o campo de pressões ao campo de velocidades. Este processo chama-se correção de pressão, mas também corrige o campo de velocidades iterativamente na forma de predição correção. Neste momento, a característica do escoamento faz a diferença no tratamento do acoplamento, ou seja, se o escoamento é compressível ou incompressível. O caso aqui presente, a hipótese da incompressibilidade não é irrealística. Portanto, segui-la-se-á.

Então, o desafio do acoplamento é determinar um campo de pressões que, quando inserido nas equações do movimento, origine um campo de velocidades que satisfaça a equação da conservação de massa. O método SIMPLE (PATANKAR & SPALDING, 1972 apud PATANKAR, 1980) está exposto em várias publicações da área, ressaltando-se que esta formulação está presente, de forma detalhada, em ALVES (1998) e MALISKA (1995). Este método é a base para os outros dois métodos presentes no pacote CFX, a saber, SIMPLEC e PISO (ISSA, 1985) e uma extensão é feita de forma direta.

No algoritmo do PISO, é resolvida uma segunda equação de correção de pressão para melhorar a solução das equações de momento enquanto a continuidade é mantida. Os dois passos de correção de pressão vão, evidentemente, aumentar o custo por repetição do algoritmo de PISO quando comparado com o SIMPLE. Porém, o algoritmo é menos aproximado e normalmente resulta em uma redução no número de iterações globais para convergência. Particularmente para escoamentos onde as características dominantes são governadas por conservação de massa e momento, a convergência mais rápida pode compensar o custo extra. Até mesmo se isto é não o caso, o acoplamento velocidade-pressão melhorado PISO faz o algoritmo mais fidedigno. É possível executar correção adicional da pressão para melhorar a solução em comum mais adiante das equações de quantidade de movimento linearizadas e de continuidade, fixando a palavra-chave, NÚMERO DE PASSOS DE CORREÇÃO PISO para ser maior que 2.

Para usar PISO do modo original, quer dizer, como um algoritmo transiente semi-implícito não-iterativo, deve-se utilizar a palavra-chave NON ITERATIVE PISO e fixar o número de máximo de iterações para 1. Quer dizer, uma única iteração é executada a cada passo de tempo, com duas iterações de correção. Neste caso, dever-se-ia fixar um critério bastante apertado de iteração nas equações individuais para prevenir erros acumulados de um passo a outro.

O algoritmo NON ITERATIVE PISO (que é a forma original do algoritmo) difere do PISO básico incluindo um pouco de informação de condição de limite na estrutura da matriz, de forma que as condições de limite são implementadas implicitamente ao invés do modo explícito habitual.

Para evitar que essa correção do campo de pressões gere uma oscilação na resposta do sistema, um método de interpolação é utilizado no pacote CFX-4. Trata-se do Método de Interpolação de Rhie-Chow (RHIE & CHOW, 1983). Em verdade, esse método calcula valores de velocidades normais às faces dos volumes de controle a partir de velocidades corrigidas nos centros dos mesmos volumes.

Poucos algoritmos de CFD no mercado utilizam o Rhie-Chow para essas interpolações. Portanto, aqui uma breve formulação será exposta.

4.2.1 Interpolação Rhie-Chow

Seja a equação do momento discretizada em coordenadas cartesianas válida para qualquer ponto P da malha co-localizada escrita de uma forma abreviada, porém compreensível:

$$U_P + (B\nabla P)_P = (AU)_P + S_P \quad [4.20]$$

O método tradicional para evitar as oscilações no campo de pressões é utilizar as velocidades nas faces dos volumes de controle. Em outras palavras, utilizar uma malha deslocada (cujos centros de volume recaem sobre as faces da malha principal) para calcular esses valores de face. Nessas equações, os gradientes de pressão são calculados baseando-se nas distâncias entre o centro e a face da malha original (ou entre dois centros das malhas deslocadas).

O método de interpolação de Rhie-Chow propõe simplesmente soluções aproximadas da [4.20] aplicada sobre a face (na malha original, ou o centro da malha deslocada) a partir de soluções obtidas da [4.20] quando aplicada nos centros adjacentes a face em questão.

Se for assumido que o lado direito da [4.20] quando aplicado na face puder ser aproximado por uma interpolação linear ponderada dos termos correspondentes da [4.20] aplicada nos centros adjacentes, pode-se escrever:

$$U_e + (B\nabla P)_e = \overline{(AU)}_e + \bar{S}_e = \bar{U}_e + \overline{(B\nabla P)}_e \quad [4.21]$$

$$U_e = \bar{U}_e + \overline{(B\nabla P)}_e - B_e \nabla P_e$$

Assumindo que $B_e \approx \bar{B}_e$ e que $\overline{(B\nabla P)}_e \approx \bar{B}_e \cdot \overline{\nabla P}_e$ (que não são de forma algumas hipóteses grosseiras), chega-se a fórmula de interpolação de Rhie-Chow:

$$U_e = \bar{U}_e + \bar{B}_e (\overline{\nabla P}_e - \nabla P_e) \quad [4.22]$$

Algumas observações presentes em CFX (1997) são interessantes de serem reproduzidas aqui:

1. *Ordem de precisão de cálculo do gradiente de pressão.* De uma análise de erro feita em uma malha uniforme e assume diferenças centrais, e consequentemente precisão segunda de ordem, para gradientes de pressão. Para manter a mesma ordem de precisão em uma malha não-uniforme, é essencial manter precisão de segunda ordem nos gradientes de pressão.
2. *Dependência de fator de subrelaxamento.* Coeficientes dos algoritmos de acoplamento são dependentes dos fatores de relaxação. No pacote CFX-4, esses coeficientes são segregados do fator de relaxação de forma que a

matriz quando calculada, a influência dos fatores de relaxação desaparece na iteração interna do algoritmo de acoplamento.

3. *Dependência do passo de tempo.* Como a diagonal da matriz também depende do passo de tempo, soluções de estado estacionário convergidas para simulações transientes dependem fracamente do passo de tempo usando o Procedimento padrão de Rhie-Chow. Em contraste com o caso da dependência do fator de relaxação, o CFX-4 nada faz para remover a fraca dependência do passo de tempo. Supoe-se ser muito mais robusto se o usuário especifica um campo de fluxo inicial para um escoamento de fluido incompressível que não satisfaz conservação de massa.

4.3 Algoritmos De Resolução Do Sistema De Equações Algébricas

Finalmente, as equações discretizadas juntas ao acoplamento da pressão são postas a serem resolvidas como um sistema linear cuja matriz de coeficiente é extremamente esparsa. Aqui cabe observar dois pontos: a “linearidade” das equações e o algoritmo empregado para a resolução do sistema de equações algébricas. A linearidade é uma forma figurada de falar deste sistema pois os coeficientes da matriz que constitui o sistema depende de valores do campo. Esse fato leva diretamente ao problema da escolha do algoritmo de resolução do sistema algébrico. Esses algoritmos devem ser iterativos ao invés dos diretos (tal como o de Gauss). Um dos motivos é que a matriz de coeficientes é esparsa e assim, um método iterativo trabalhará apenas com os elementos não nulos dessa matriz consumindo menos processamento e memória. Além disso, o algoritmo iterativo lida com mais eficiência as não linearidades que, em verdade devido a física do problema, existem.

O conjunto de equações linearizadas de uma variável particular, uma equação para cada volume de controle no escoamento, passa por um *solver* de equação linear simultâneo que usa um método solução de iterativo. Uma solução exata não é requerida porque este é um passo na iteração exterior não-linear.

No CFX existem opções de métodos iterativos de resolução que serão brevemente expostos aqui (nomeados de acordo com as denominações no pacote):

- STONE – método de STONE para campo completo;
- AMG – método multigrid algébrico;
- ICCG - gradientes conjugados preconditionados;
- BLOCK STONE – método de STONE por bloco;
- LINE SOLVER - relaxação linear;
- GENERAL AMG – versão generalizada do AMG.

Cada equação de cada fase pode ser resolvida por diferentes algoritmos acima citados. Dois métodos acima utilizam o método MSIP (Modified Semi Implicit Procedure) (STONE, 1968). O primeiro (STONE) trata o sistema de equações de uma só vez e o segundo (BLOCK STONE) resolve bloco por bloco. Obviamente, os dois seguem o mesmo caminho se a malha for construída com apenas um bloco.

Os métodos multigrid (AMG e GENERAL AMG) não são utilizados neste trabalho por serem mais adequados para problemas multiblocos.

O método ICCG é o padrão para a equação de pressão do pacote. Este algoritmo é recomendado para problemas onde reconhecidamente os gradientes da variável são não suaves e portanto, geram matrizes não condicionadas.

Mais detalhes do emprego destes métodos será exposto no CAPÍTULO V.

4.4 Condições De Contorno – Aspectos Numéricos

As condições de contorno em um método numérico tem grande importância na solução das equações discretizadas. Problemas mal prescritos em suas fronteiras pode levar a divergência ou até a campos convergidos com valores errôneos. Portanto, muito cuidado deve se dispensar neste item da discretização.

No MVF, pode-se construir a malha em três configurações nas fronteiras do domínio de cálculo: adequação da malha à condição de contorno; utilização de volumes fictícios; e, a utilização de balanços para volumes inteiros no contorno.

Na utilização do ajuste dos centros de volumes na fronteira deve-se tomar cuidado pois serão formados meio-volumes. Esses meio-volumes não terão o mesmo tratamento que os volumes internos e assim, a implementação computacional será mais complicada. Essa é a maior desvantagem.

O volume inteiro no contorno tem a vantagem que todos os volumes terão a uniformidade conservada o que facilita a implementação computacional. Muitos pesquisadores recomendam este tipo de tratamento pois é o que apresenta o menor número de volumes inteiros.

A aplicação de volumes fictícios é a utilizada no pacote CFX-4. Esse tratamento tem a vantagem de conseguir tratar fenômenos mais complexos como condução em sólidos. O CFX-4 escolheu esse tratamento por ser mais geral mesmo não sendo o mais eficiente numericamente.

4.5 Difusão Numérica E Oscilação

As aproximações numéricas obtidas por volumes finitos envolvem os valores da variável dependente nos pontos de uma dada malha. Portanto, a equação discretizada obtida por volumes finitos é similar à obtida por diferenças finitas (como foi citado na introdução deste capítulo), sendo também possível associar um erro de truncamento com a primeira, tal qual como é feito para a segunda. A característica do erro de

truncamento da equação discretizada fornece qual o tipo de comportamento que a solução numérica pode apresentar.

Em geral, nos textos técnicos, esse problema é discutido em função da diferença da utilização do esquema de diferenças centrais e *upwind*. Como essa diferença ficou patente no item de termos advectivos, aqui serão somente comentadas as naturezas numérica e física da difusão numérica ou falsa difusão.

Como é sabido, os termos advectivos podem ser tratados por esquemas dissipativos (*upwind*) ou não dissipativos (diferenças centrais). Classicamente, esses esquemas são denotados a difusão numérica em problemas difusivos e a oscilação numérica em problemas convectivos, respectivamente.

O aparecimento ou não da difusão numérica ou falsa difusão na solução é explicado por várias maneiras e enfoques. Primeiramente, para os analistas numéricos, a interpretação vem do erro de truncamento das aproximações por série de Taylor. O aparecimento de um termo de derivada primeira análogo a difusão quando se usa aproximações de primeira ordem (eq. [4.24]) seria a origem da falsa difusão, como é possível vislumbrar nas equações [4.23] e [4.24].

$$\Lambda_w = \rho_w u_w \phi_w + O(\Delta x^2) \quad [4.23]$$

$$\Lambda_w = \rho_w u_w \phi_w - \rho_w u_w \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w + O(\Delta x^2) \quad [4.24]$$

Patankar (1980) retorque a esta interpretação dando um enfoque mais físico. Alega que há casos, onde descontinuidades existem, em que se emprega uma função de interpolação de primeira ordem e se obtém a solução exata do problema sem dissipação. O autor define, então, que a difusão se deve à obliquidade da direção do escoamento em relação a direção da malha.

Já Maliska (1995), contestando os anteriores, define a difusão numérica como “sendo os erros de truncamento de natureza dissipativa, associados à aproximação dos termos advectivos por esquemas dissipativos, causados pelo fato de a função de interpolação não ser exata.”

Com o conhecimento obtido destes pesquisadores, pode-se afirmar que os esquemas dissipativos, no caso upwind, são os mais indicados para o problema deste trabalho por estes fatores:

1. O escoamento sendo predominantemente convectivo deve sentir menos os efeitos dissipativos de tal esquema;
2. Para os resultados em nível de engenharia, é mais importante obter solução consistente que não obter nenhuma solução (oscilações numéricas podem levar a divergência do processo iterativo);
3. Refinando a malha a posteriori pode-se obter resultados melhores até, em um limite, anular todos os erros de truncamento.

4.6 Geração Da Malha

Depois de definida a geometria, ou espaço físico, do problema, vem o seguinte passo: como resolver numericamente as equações que governam o fenômeno dentro deste espaço físico? A resposta é a malha ou grade computacional. E outra: como arranjar as variáveis dentro deste espaço computacional? A malha tem por objetivo criar um espaço computacional, onde se darão os cálculos numéricos da simulação, a partir do espaço físico do problema.

A geração da malha numérica no pacote CFX-4.3 pode ser dar de duas maneiras: retangular e ajustada a geometria. A discretização das equações varia de acordo com a forma da geração. Na primeira, a discretização se dá de modo direto pois não há necessidade de transformação de variáveis. Em outras palavras, as equações vão ter as direções coordenadas cartesianas tanto no espaço físico quanto no espaço computacional. No outro tipo de malha, discretização passa por uma transformação de

coordenadas, o que equivale dizer que as equações discretizadas são resolvidas em um espaço vetorial diferente das equações contínuas, segundo palavras da álgebra.

Quanto ao arranjo, ainda é um ponto de celeuma entre os pesquisadores qual o melhor arranjo dentre o co-localizado e o descontraído para determinado sistema. O arranjo co-localizado se diferencia do outro por unificar a discretização de todos os campos a se calcular em uma única malha. Esse arranjo tem a desvantagem de potencialmente gerar difusão numérica (e/ou oscilação) e ter que, conseqüentemente, interpolar a pressão com valores de volumes adjacentes ao volume em questão (FUDIHARA, 2000). Métodos foram desenvolvidos para tentar contornar o problema de oscilação do campo de pressão como a interpolação de Rhie-Chow aqui apresentada. No entanto, esse tipo de arranjo é interessante pois a carga computacional é menor. Precisa-se de menos pontos tendo apenas uma malha enquanto o descontraído pode ter até n malhas onde n é o número de variáveis a se resolver no sistema. Para concluir, ainda hoje essa vantagem computacional do arranjo co-localizado é bastante rica pois o maquinário que dispõe-se não nos dá liberdade de escolher o arranjo descontraído sem grande perda de performance.

A malha também pode ser estruturada ou não estruturada. A diferença entre as duas é que a primeira possui a característica de seus volumes internos (que não sejam da fronteira) têm sempre o mesmo número de volumes vizinhos. Para o grau de detalhe do caso em questão, o riser, uma malha não estruturada seria um esforço desnecessário pois a forma do equipamento não apresenta dificuldades de ser dividido em volumes estruturados. No entanto, vale ressaltar que para o método numérico empregado aqui, o fato da malha ser estruturada ou não, não faz diferença. O MVF simplesmente integra as equações de conservação sobre os volumes elementares independente da forma. As malhas não estruturadas são muito úteis para equipamentos de geometria mais complexa como o regenerador (caso os distribuidores sejam inclusos) e ciclones, cujos problemas o LMSPQ estuda intensamente.

Outro ponto a se observar na geração da malha é como serão tratadas as fronteiras do sistema. Em geral, se aplica a discretização de duas formas: coincidindo os contornos com os centros dos volumes ou com as interfaces. A primeira forma de tratamento das fronteiras potencialmente viola a integridade da conservação das

variáveis na fronteira, ficando estas parcelas de volumes fora do domínio de cálculo. Pela segunda forma, um balanceamento específico na região entre a interface e o centro do volume da fronteira é necessário. Porém, para contornar a geração de mais equações (possivelmente, diferenciais parciais) emprega-se a técnica dos volumes fictícios. Essa técnica prevê volumes extras que vão avizinhar os últimos volumes do domínio de cálculo. Assim, estes volumes não entrarão nos balanços servindo apenas como consistência para as condições de contorno prescritas no problema. Essa é a técnica empregada pelo pacote CFX.

CAPÍTULO V - Introdução às Simulações

Neste capítulo serão estabelecidas as combinações dos modelos matemáticos e métodos numéricos descritos a priori que foram utilizados nas simulações.

5.1 Descrição do sistema

A seção longitudinal simulada do riser é mostrada na figura 4.1. Trata-se de um riser experimental usado no *benchmark* proposto por KNOWLTON et al (1995) de 20 cm de diâmetro. Neste trabalho, a vazão mássica de sólidos é de 489 kg/m^2 como o do arranjo experimental.

A alimentação é feita por três entradas: duas simétricas de 10 cm a 30 cm da base do riser e uma central do tamanho do diâmetro do riser. Na central, é admitido no reator gás puro com velocidade normal constante de 5,2 m/s. Nas duas entradas simétricas, entram gás e sólido a uma proporção de 40% de sólido a uma velocidade também normal ao plano de entrada e constante a 0,476 m/s (para ambas as fases). BENYAHIA et al. (2000) salientam que no experimento referido a entrada é feita por um lado apenas mas que a escolha de duas entradas era para simular os efeitos de mistura observados na geometria tridimensional cilíndrica real.

A altura total do riser é de 14,2 m.

5.1.1 Condições iniciais

Dentro do riser foi considerada ausência de movimento de ambas as fases e todo preenchimento físico era de gás. Por hipótese dos autores, a temperatura granular foi fixada em $10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}^2$. Eles afirmam que sob condições de fluidização mínima é esperado um valor baixo para a temperatura granular.

5.1.2 Descrição das condições físicas

As partículas sólidas foram tomadas como de catalisador típico de FCC de único diâmetro igual a $75 \text{ }\mu\text{m}$, massa específica constante a 1712 kg/m^3 . As condições térmicas adotadas foram de isotermicidade a 300 K e pressão inicial atmosférica.

5.2 Discretização da malha

Durante as simulações, as malhas utilizadas foram as mais simples possíveis de modo a não complicar muito o problema. Em geral, as malhas são uniformes com divisão de células proporcional da direção coordenada.

A malha básica deste trabalho é a mesma de BENYAHIA et al (2000) cujas dimensões são:

- direção radial: 18 células
- direção axial: 210 células não uniformes

Na direção axial, a não uniformidade da malha é devida ao ajuste das células às entradas e saídas da geometria.

É evidente que o tamanho da malha é importante na modelagem na medida em que o seu tamanho (tamanhos das unidades topológicas) influencia no passo de tempo permitido pelo critério de estabilidade de Courant (MALISKA, 1995). No entanto, o objetivo do trabalho não foi encontrar uma malha ótima para o problema devido ao tempo disponível para a realização das simulações, mesmo sendo o tamanho de malha um fator importante.

O sistema coordenado adotado foi o cartesiano. Este sistema possui uma maior flexibilidade no manuseio das equações tais como a energia cinética flutuante dos sólidos. Além disso, em alguns trabalhos publicados tais como CHENG et al. (1999); NERI e GIDASPOW (2000) e BENYAHIA et al. (2000), afirma-se que não há diferença de resultado entre o sistema retangular e o cilíndrico.

A figura 4.2 apresenta um esquema simplificado de malha numérica utilizada nas simulações.

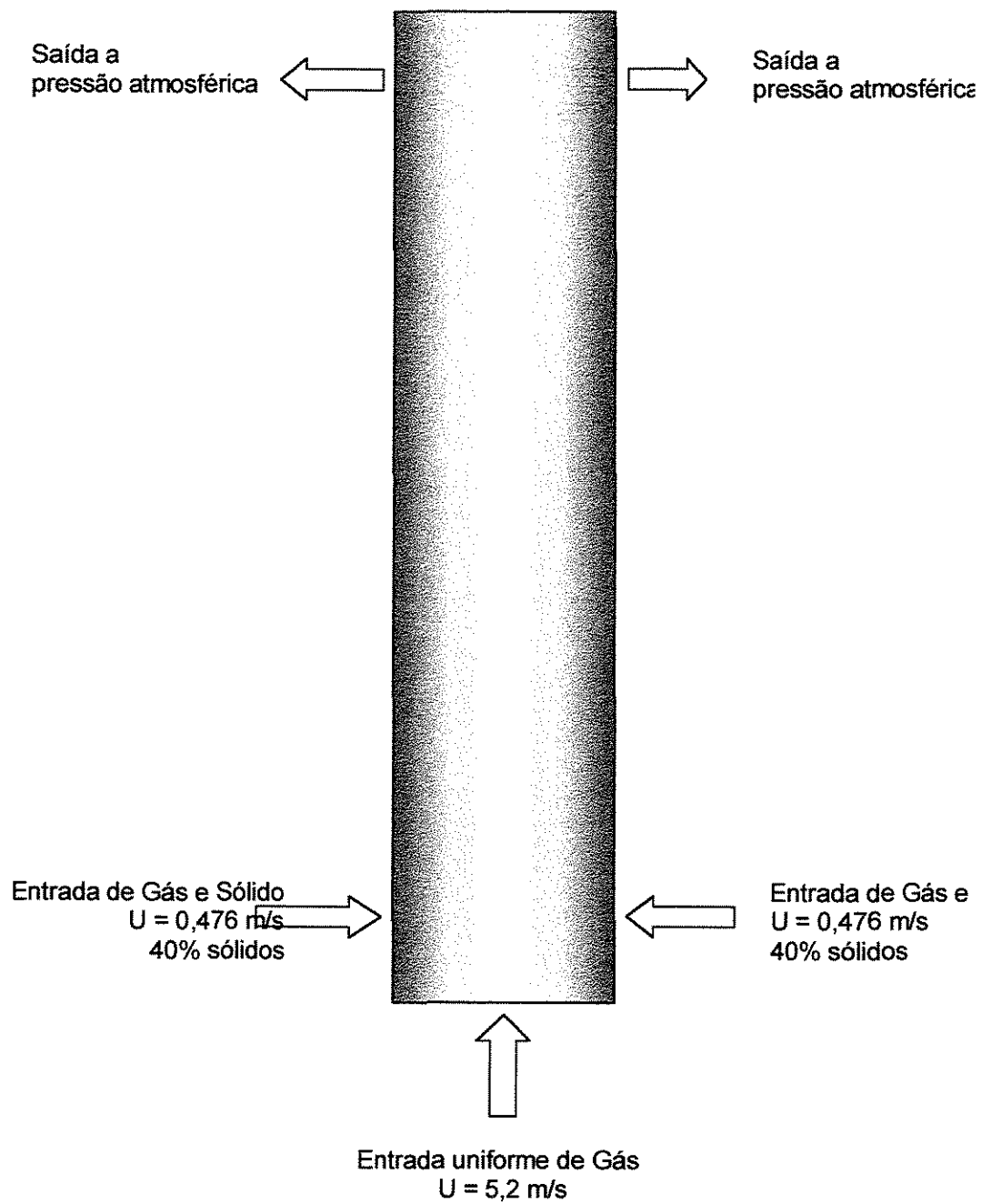


FIGURA 4.1: esquema geométrico adotado neste trabalho

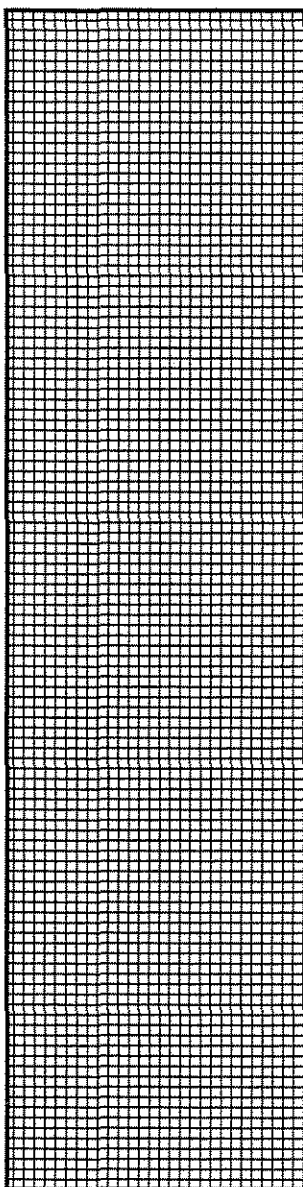


FIGURA 4.2. Ilustração simplificada da malha não uniformemente distribuída com $210 \times 18 = 3780$ células

5.3 Sistema de equações a ser utilizado na simulação

Para as simulações realizadas no trabalho, o sistema de equações é resumido aqui de acordo com a numeração empregada nos capítulos anteriores.

2 equações de continuidade	Eq. [3.1]
4 equações de momento	Eq. [3.2]
1 equação da pseudo energia	Eq. [2.8]

Com relação aos métodos numéricos, as fórmulas usadas estão todas contidas no capítulo IV. Um comentário a mais pode ser tecido aqui. As funções de interpolação usadas nas simulações são todas da família Upwind. No entanto, para melhorar a convergência no início do processo iterativo, foi dada mais importância aos esquemas de alta ordem como o Quick e o CCCT. Após algumas iterações (em geral uma centena), preferiu-se utilizar os métodos de menor ordem como o Higher Upwind e o Upwind. Funções de menor ordem tendem a ser mais rápidas e necessitam menos memória de armazenamento das variáveis.

O algoritmo de resolução das equações algébricas é o MSIP de Stone (1968).

There are more things, Horatio, between heaven and earth than our philosophy can
predict.
Hamlet, Acto I

Capítulo VI - Discussões e conclusões

Neste capítulo são analisados os resultados das simulações realizadas e, sob a luz dessa análise, são expostas as conclusões do trabalho. Como introdução, são discutidos aspectos dos dados experimentais e suas limitações como base de comparação.

6.1. Ensaios experimentais: análise sobre a limitação das observações

Com a evolução das técnicas experimentais, mais e mais informação fica disponível para o mundo acadêmico e profissional. Esse fato permite que novas hipóteses sejam levantadas e que antigas sejam elucidadas. No caso de sistemas fluido dinâmicos não é diferente. Técnicas como LDV, anemômetro de fio quente e tomografia são técnicas que vêm auxiliar na observação mais precisa dos fenômenos que ocorrem dentro de equipamentos como riser entre outros.

No entanto, as simulações numéricas evoluíram proporcionalmente mais que as técnicas de apuração experimental e já existem casos em que uma simulação é tomada como base de comparação de um fato experimental (como no caso da DNS – Simulação direta das equações Navier-Stokes).

As técnicas clássicas de medição são desaconselháveis pois em geral utilizam métodos intrusivos e, portanto, modificam o sistema a ser medido. Técnicas mais modernas se baseiam em métodos óticos não intrusivos estão agora sendo francamente empregados na obtenção de perfis.

Os dados experimentais utilizados aqui foram retirados de KNOWLTON et al. (1995). Esses dados são confiáveis na medida em que foram obtidos por um benchmark. Todavia, esses dados possuem alguns inconvenientes. O primeiro, e mais específico, concerne o fato de que os dados foram tomados considerando o riser como simétrico em torno do eixo. Sabe-se de antemão que essa hipótese não é verdadeira pois é notado experimentalmente que a natureza do escoamento neste equipamento é oscilatória. E essa oscilação trafega através do eixo indistintamente de forma que é insustentável essa hipótese para o riser. Pelo mesmo motivo, a hipótese de estado estacionário é precária e é neste fato que as medidas se baseiam e toda simulação (em transiente distorcido) na literatura atual se baseia. Porém, isso se aproxima do real quando se compara um perfil médio no tempo de um grande tempo de simulação real com os resultados obtidos de um transiente distorcido. Isso será assunto para o próximo item.

O segundo inconveniente consiste no fato de que as informações próximas a parede são imprecisas e para certas variáveis (como a concentração de sólidos) sequer possui um ponto próximo a parede. Isso não permite que se tire conclusões sobre o comportamento quantitativo dos sólidos na parede.

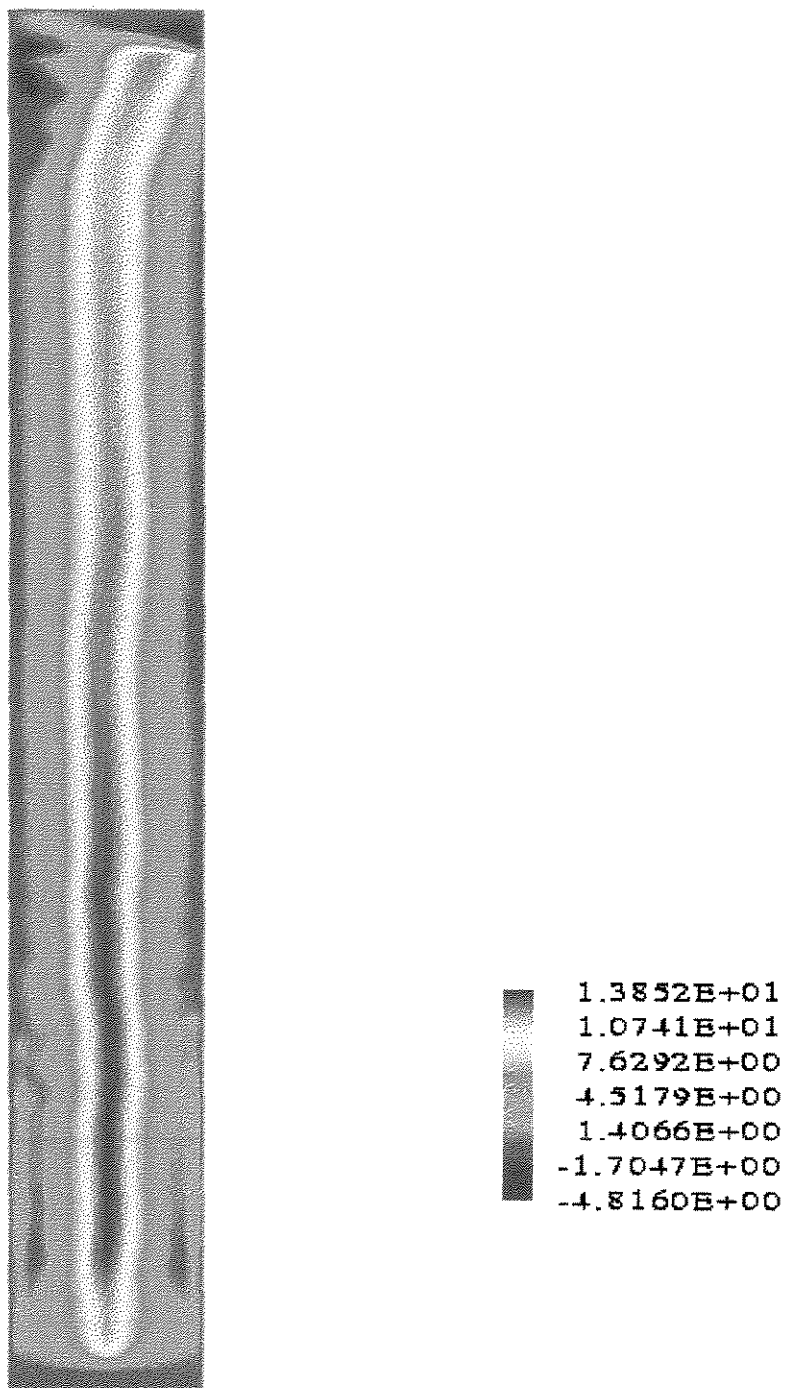
Um terceiro inconveniente é a impossibilidade de analisar o próprio comportamento oscilatório. Trabalhos recentemente publicados (NERI e GIDASPOW, 2000; BENYAHIA et al., 2000; BALZER, 2000) relatam esse comportamento de forma qualitativa. Todos concordam com o comportamento oscilatório que se conhece por “snake-like motion”, por se assemelhar ao movimento que a cobra faz ao se deslocar.

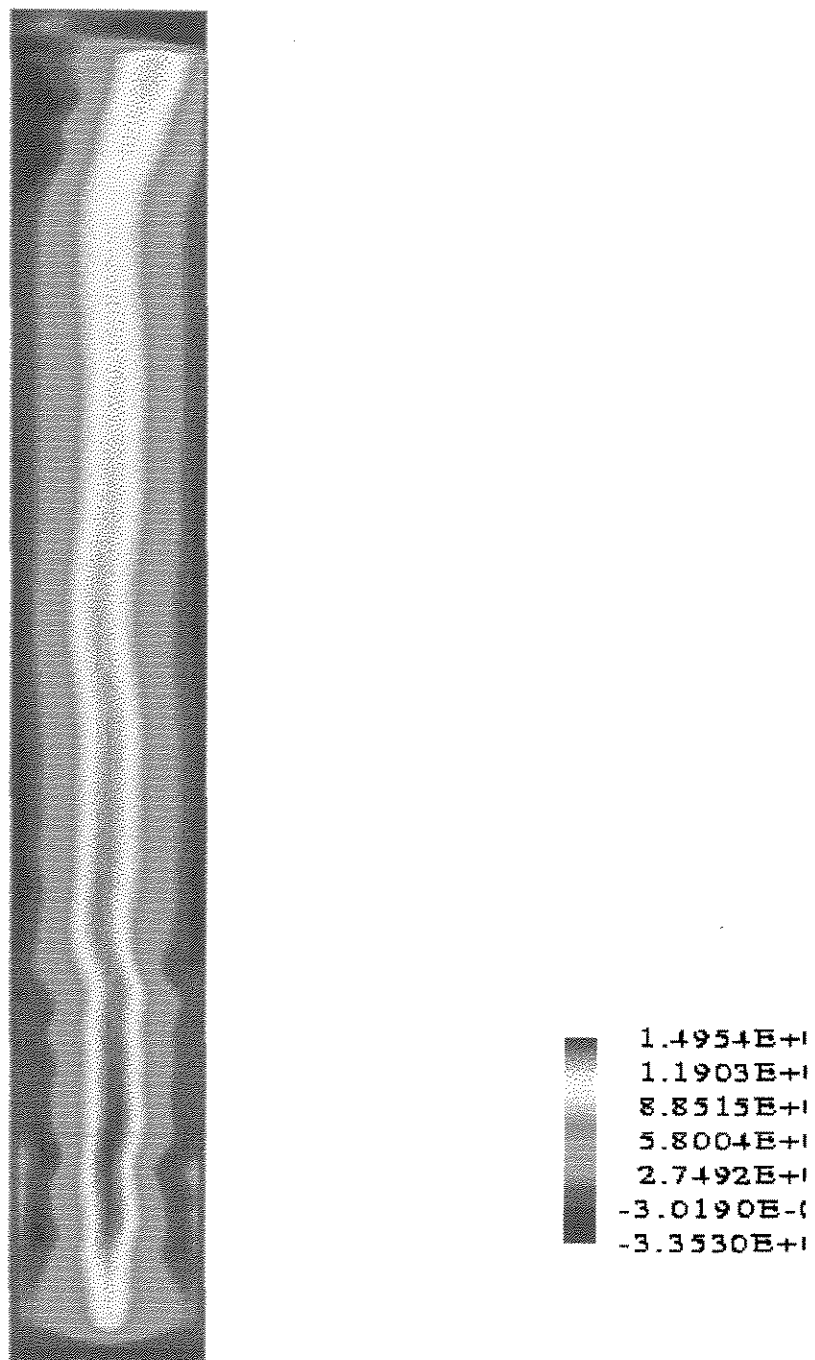
Nesse dilema, o autor preferiu ficar com os dados limitados por se tratarem de dados confiáveis (advindos de um “benchmark”). Mas deve-se ressaltar que a predição deste perfil (que se dá a uma certa altura do leito) é apenas um indicativo pontual da qualidade do modelo e não que seja largamente aplicável.

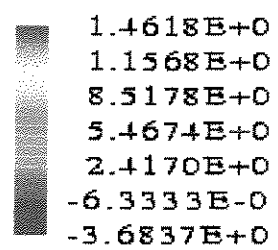
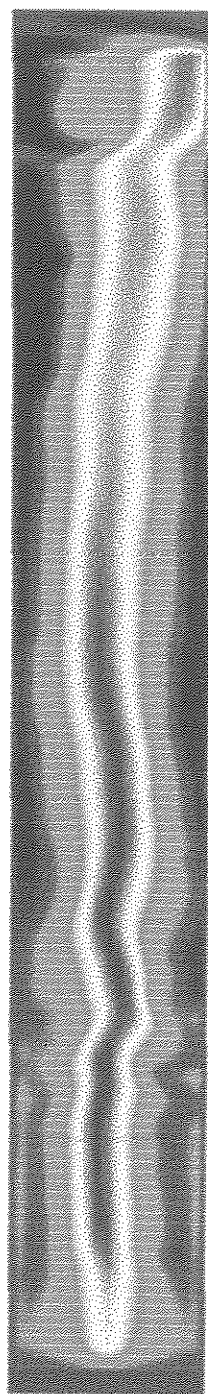
Apenas incluindo um pequeno comentário, os dados tomados por Knowlton e colaboradores (1995) foi em um aparato experimental em escala piloto que consistia em tubo vertical de 14,2 m de altura. A entrada e saída eram joelhos de 90° em relação ao tubo vertical. O ar e o catalisador eram admitidos juntos como em um transporte pneumático através de um compressor. Sete (7) sondas foram postas a cada 1,9 m para tomada de pressão e uma a 3,9 m para tomada de vazão mássica.

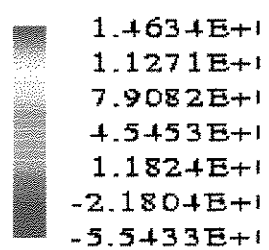
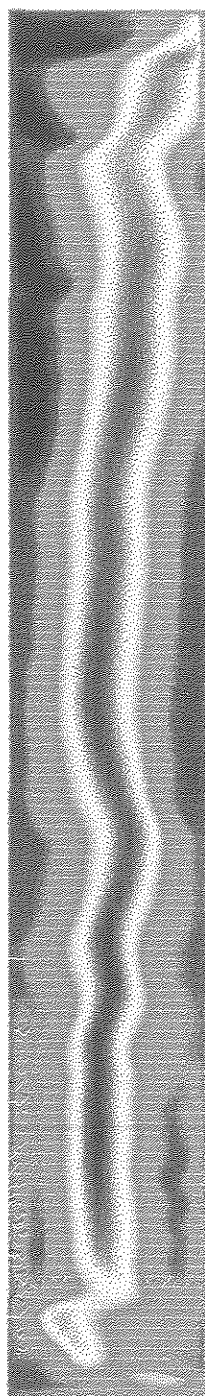
6.2 Resultados e Discussões

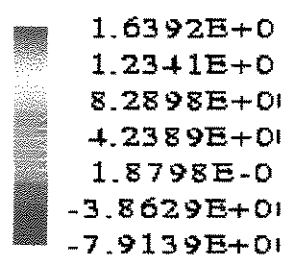
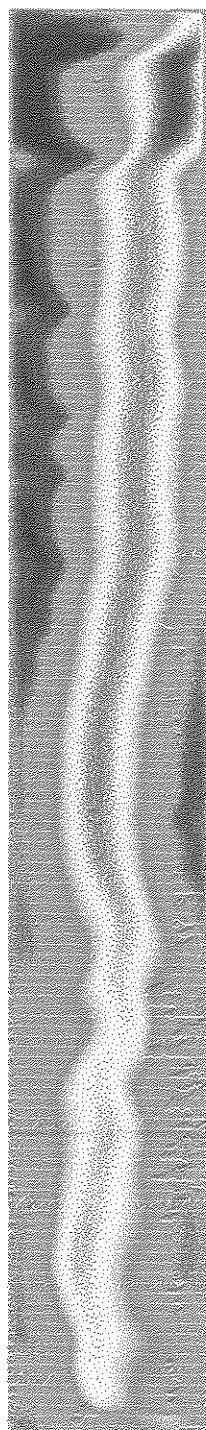
Os resultados da simulação transiente (cuja modelagem foi apresentada no capítulo anterior) são mostrados na figura 6.1 para a velocidade axial da fase sólida.

(a) $t=4s$

(b) $t=5s$

(c) $t=6s$

(d) $t=7s$

(e) $t=8s$