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

Daniel de Brito Dias

Avaliação de Técnicas de Fluidodinâmica Computacional em Ciclones

Campinas 2009

Daniel de Brito Dias

Avaliação de Técnicas de Fluidodinâmica Computacional em Ciclones

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

Orientador: Milton Mori

Co-Orientador: Waldir Pedro Martignoni

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

D543a

Dias, Daniel de Brito

Avaliação de técnicas de fluidodinâmica computacional em ciclones / Daniel de Brito Dias. --Campinas, SP: [s.n.], 2009.

Orientadores: Milton Mori, Waldir Pedro Martignoni. Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Ciclones. 2. Escoamento multifásico. 3. Escoamento turbulento. 4. Métodos de simulação. I. Mori, Milton. II. Martignoni, Waldir Pedro. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Título em Inglês: Evaluation of computational fluid dynamics techniques applied to cyclones

Palavras-chave em Inglês: Cyclones, Multiphase flow, Turbulent flow, Simulation methods

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Henry França Meier, Jhon Jairo Ramirez Behainne

Data da defesa: 16/02/2009

Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Daniel de Brito Dias

Avaliação de Técnicas de Fluidodinâmica Computacional em Ciclones

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

Aprovação em 16/02/2009

Prof. Dr. Milton Mori - UNICAMP

Prof. Dr. Henry França Meier - FURB

mei I for eeur

Prof. Dr. Jhon Jairo Ramirez Behainne

- UFABC

Este exemplar corresponde à versão final da tese de mestrado em Engenharia Química

Orientador

Dedicatória

Dedico este trabalho à minha família.

Agradecimentos

Agradeço a todos os integrantes e ex-integrantes do PQGe¹ onde, além do período do mestrado, passei boa parte dos meus anos de graduação. Apesar de com eles ter aprendido muito, os considero como amigos antes de colegas.

Agradeço aos colegas da FURB ² pela igual amizade e auxílio; ao Prof. Henry por ter me dado sugestões muito produtivas.

Agradeço ao engenheiro Waldir Pedro Martignoni pela co-orientação ao longo deste trabalho.

Agradeço ao Prof. Milton Mori pela orientação, apoio, amizade. Sua atuação foi indispensável na minha formação como pesquisador.

Agradeço aos amigos de graduação, os que seguiram outros caminhos e os que me acompanharam na pós-graduação.

Agradeço a Tatiana, pela paciência e pelo amor compartilhado ao longo destes anos.

¹Laboratório de Pesquisa em Processos Químicos e Gestão Empresarial

²Universidade Regional de Blumenau



Resumo

Ciclones são equipamentos amplamente utilizados em indústrias como separadores gássólido. Apesar deste equipamento possuir princípios de funcionamento simples, estudos já demonstraram que o escoamento vorticial confinado inerente aos separadores ciclônicos é, na realidade, muito complexo. O recente avanço em métodos numéricos e poder computacional tornou possível o uso de ferramentas avançadas como a fluidodinâmica computacional (CFD), técnica que propõe a solução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia através de métodos numéricos. Sua aplicação a ciclones não deixou sombra de dúvida da complexidade da fluidodinâmica envolvida, mas mesmo com dificuldades abriu caminho para muitos avanços na área. O presente estudo busca somar à vasta literatura ao discutir a variação de alguns parâmetros específicos para a simulação de ciclones. O primeiro parâmetro foi a condição de contorno de saída de sólidos. Foram estudadas algumas configurações que incluem a saída direta, com dipleg, com caixa coletora e parede. Estas variações provaram ser de enorme influência em toda a fluidodinâmica do sistema. Em sequida é feito um estudo da influência do modelo de turbulência nos campos de escoamento. São aplicados os modelos k-epsilon, RNG k-epsilon, SSG-Reynolds Stress Model (SSG-RSM) e Large Eddy Simulation (LES). Os dois primeiros se mostraram inadequados, o SSG-RSM mostrou-se adequado e o LES promissor, porém limitado pela malha esparsa utilizada. Por fim, variou-se a abordagem de modelagem da fase sólida, primeiramente utilizando um modelo Euleriano-Euleriano (E-E) que levava em consideração apenas um diâmetro para a fase sólida e depois um modelo E-E₃, com três fases sólidas de diâmetros diferentes sendo simuladas simultaneamente. Através destes modelos foram obtidas curvas de eficiência de coleta fracional e global. Ambos os modelos representaram bem os dados experimentais, mas o E-E₃ mostrou superioridade, principalmente no que diz respeito ao tempo total de processamento e escalabilidade da simulação. As geometrias e malhas numéricas foram construídas no pacote ICEM CFD, e os casos resolvidos utilizando o software comercial ANSYS CFX, rodando em paralelo em um *cluster* de alta performance. Dados experimentais da literatura foram utilizados para validação.

Palavras-chave: ciclones, escoamento multifásico, escoamento turbulento, métodos de simulação

Abstract

Cyclones are widely used in industries as gas-solid separators. Although this equipment features simple operational principles, studies have shown that the confined vorticial flow found in cyclonic separators is, in fact, very complex. Recent advances in numerical methods and computational power have made possible the use of advanced tools such as computational fluid dynamics (CFD), a technique that proposes the solution of the equations of conservation of mass, momentum and energy through numerical methods. Applied to cyclones, CFD has left no doubt on the complexity of the fluid dynamics involved, but much progress has been done in this area. The present study seeks to add to this vast literature with the discussion of the variation of a few specific parameters to cyclone simulation. The first chosen parameter was the boundary condition for the outlet of solids. A few configurations were studied, including a direct outlet, dipleg, dust hopper and wall. These variations proved to be of enormous influence to the fluid dynamics of the system. As a second study, four turbulence models were compared: k-epsilon, RNG k-epsilon, SSG-Reynolds Stress Model (SSG-RSM) and Large Eddy Simulation (LES). The first two proved to be inadequate, SSG-RSM performed the best and LES showed promise, but it suffered the limitations of a coarse mesh. The last studied parameter was the modeling approach to the solids phase, first by utilizing an Eulerian-Eulerian (E-E) model that considered a single diameter for the solid phase and second an E-E₃ model, with three solid phases of different diameters being simulated simultaneously. Through these methods the fractional and overall collection efficiency curves were obtained. Both approaches reproduced the experimental data well, but E-E₃ was more accurate, also presenting a reduced overall computational time and better scalability. The geometries and numerical meshes were built using the code ICEM CFD, and the cases solved using commercial software ANSYS CFX, running in parallel mode in a high performance computing cluster. Experimental data available in the literature was used as validation.

Keywords: cyclones, multiphase flow, turbulent flow, simulation methods

Sumário

1	Intro	odução		1
	1.1	Motivaç	ão	2
	1.2	Apresen	tação	3
2	Revi	isão Bibli	iográfica	5
	2.1	Princípio	os Básicos	5
	2.2	Modelos	s Empíricos e Semi-Empíricos	7
		2.2.1	Campo de Velocidades	ç
		2.2.2	Queda de Pressão	10
		2.2.3	Eficiência de Coleta	10
	2.3	CFD - E	Escoamento Monofásico	12
	2.4	CFD - E	Escoamento Multifásico	14
3	Mod	delagem	Matemática e Métodos Numéricos	21
	3.1	Equaçõe	es de Transporte	22
		3.1.1	Equação da Conservação de Massa	22
		3.1.2	Equação da Conservação de Quantidade de Movimento	23
	3.2	Equaçõe	es de Fechamento	28
		3.2.1	Frações volumétricas	28
		3.2.2	Coeficiente de arraste interfásico	28

	3.3	Lurbul	ência	29
		3.3.1	Modelo k-epsilon	31
		3.3.2	Modelo RNG k-epsilon	32
		3.3.3	Modelo 'Reynolds Stress Model' (RSM)	33
		3.3.4	Modelo 'Large Eddy Simulation' (LES)	35
	3.4	Métod	o Numérico: Fluidodinâmica Computacional	37
		3.4.1	Criação de Geometria e Malha	38
		3.4.2	Refinamento de Malha Numérica	42
		3.4.3	Pré-Processamento	43
		3.4.4	Solução Numérica	44
		3.4.5	Pós-Processamento	47
4	Simi	ulações	Monofásicas	51
	4.1	Descri	ção do Caso	51
		4.1.1	Experimento	51
		4.1.2	Simulação	52
		4.1.3	Condições de Contorno	54
	4.2	Resulta	ados - Verificação dos Modelos de Turbulência	57
		4.2.1	k-epsilon e RNG k-epsilon	57
		4.2.2	SSG-RSM e LES	62
	4.3	Resulta	ados - Variação da Condição de Contorno	70
		4.3.1	Saída Direta e Saída com 'Dipleg'	70
		4.3.2	Parede direta e Caixa coletora	75
5	Simi	ulações	Multifásicas	79
	5.1	Descri	ção do Caso	80
		511	Experimento	80

Re	Referências Bibliográficas 99			
6	Con	clusões	e Sugestões para Trabalhos Futuros	95
		5.2.3	Demanda Computacional e Escalabilidade	93
		5.2.2	Eficiência Global de Coleta	92
		5.2.1	Eficiência Fracional de Coleta	90
	5.2	Resulta	ados	86
		5.1.3	Condições de Contorno	83
		5.1.2	Simulação	81

Lista de Figuras

Figura 2.1:	funcionamento de um separador ciclônico	6
Figura 2.2:	tipos de entradas em ciclones	8
Figura 2.3:	perfil do vórtice de Rankine	9
Figura 3.1:	fluxo de massa através de volume de controle	22
Figura 3.2:	fluxo de quantidade de movimento através de volume de controle .	24
Figura 3.3:	escoamento laminar e turbulento ao redor de um objeto liso	29
Figura 3.4:	diferentes tipos de malhas numéricas	39
Figura 3.5:	cortes em bloco primordial de uma geometria-exemplo	40
Figura 3.6:	ilustração do corte especial 'o-grid'	41
Figura 3.7:	efeito do corte especial 'o-grid' na malha numérica	41
Figura 3.8:	projeção das arestas da malha à geometria	42
Figura 3.9:	ilustração simplificada do processo típico de geração de malhas para ciclones	43
Figura 3.10:	algoritmo de solução do CFX, adaptado de CFX-11 User's Guide (2006)	48
Figura 3.11:	algoritmo de solução do CFX utilizado no presente trabalho, adaptado de CFX-11 User's Guide (2006)	49
Figura 4.1:	cotas do ciclone tipo Stairmand e posições de tomadas de dados experimentais SLACK et al. (2000)	52

Figura 4.2:	geometrias e condições de contorno para os casos do ciclone monofásico	53
Figura 4.3:	teste de malha para o ciclone estudado no caso monofásico	54
Figura 4.4:	detalhes da malha de 70.000 elementos utilizada para as simulações monofásicas	55
Figura 4.5:	comparação da velocidade axial experimental e simulada para os casos k-epsilon e RNG k-epsilon	59
Figura 4.6:	comparação da velocidade tangencial experimental e simulada para os casos k-epsilon e RNG k-epsilon	60
Figura 4.7:	campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o modelo k-epsilon	61
Figura 4.8:	Campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o modelo RNG k-epsilon	61
Figura 4.9:	comparação da velocidade axial experimental e simulada para os casos SSG-RSM e LES	64
Figura 4.10:	comparação da velocidade tangencial experimental e simulada para os casos SSG-RSM e LES	65
Figura 4.11:	campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o modelo SSG-RSM	66
Figura 4.12:	campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o modelo LES	66
Figura 4.13:	comparação da velocidade axial experimental e simulada para os casos SSG-RSM (em malha esparsa) e LES (em malha de um milhão de elementos)	68
Figura 4.14:	comparação da velocidade tangencial experimental e simulada para os casos SSG-RSM (em malha esparsa) e LES (em malha de um milhão de elementos)	69

Figura 4.15:	campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o modelo LES em malha de um milhão de elementos	70
Figura 4.16:	comparação da velocidade axial experimental e simulada para os casos saída direta e saída com dipleg	72
Figura 4.17:	comparação da velocidade tangencial experimental e simulada para os casos saída direta e saída com dipleg	73
Figura 4.18:	campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o caso saída direta	74
Figura 4.19:	campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o caso saída com dipleg	74
Figura 4.20:	comparação da velocidade axial experimental e simulada para os casos parede direta e caixa coletora	76
Figura 4.21:	comparação da velocidade tangencial experimental e simulada para os casos parede direta e caixa coletora	77
Figura 4.22:	campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o caso parede direta	78
Figura 4.23:	campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o caso caixa coletora	78
Figura 5.1:	cotas para o ciclone do caso multifásico, adaptado de ZHAO et al. (2004)	80
Figura 5.2:	geometria construída para o ciclone estudado no caso multifásico .	81
Figura 5.3:	malha de 350.000 elementos construída para o ciclone estudado no caso multifásico	82
Figura 5.4:	teste de malha para o ciclone estudado no caso multifásico	83
Figura 5.5:	perfis de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para a fase gás na simulação E-E com velocidade de entrada de 12 m/s e diâmetro de 5,97 micron	86

Figura 5.6:	perfis de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano			
	central axial para a fase gás na simulação E-E ₃ com velocidade de			
	entrada de 12 m/s	87		
Figura 5.7:	fluxo mássico ao longo do tempo para simulação E-E3 já estabili-			
	zada comparado para diversos diâmetros	89		
Figura 5.8:	eficiência fracional de coleta comparada para as velocidades de 12,			
	16, 20 e 24 m/s	91		
Figura 5.9:	comparação da eficiência global de coleta para os métodos aplicados	93		
Figura 5.10:	tempo de simulação versus número de processos paralelos para os			
	métodos aplicados	94		

Lista de Tabelas

Tabela 4.1:	Condições de contorno da simulação monofásica	56
Tabela 4.2:	Propriedades físicas do fluido da simulação monofásica	56
Tabela 4.3:	Condições numéricas da simulação monofásica	56
Tabela 4.4:	Balanço de massa no ciclone para as diferentes condições de contorno	71
Tabela 5.1:	Condições de Contorno da simulação multifásica	83
Tabela 5.2:	Propriedades físicas do fluido da simulação multifásica	84
Tabela 5.3:	Condições numéricas da simulação multifásica	84
Tabela 5.4:	Condições de entrada da fase particulada para as simulações E-E .	85
Tabela 5.5:	Condições de entrada da fase particulada para as simulações E-E ₃ .	85
Tabela 5.6:	Comparação das eficiências de coleta globais e fracionais obtidas	
	experimentalmente e em simulação	88
Tabela 5.7:	Comparação dos desvios relativos para as eficiências de coleta glo-	
	bais entre os resultados experimentais e simulados	89

Nomenclatura

Letras Latinas

2	tancar	4~	anicatronia
а	tensor	ue	anisotropia

A matriz de coeficientes

B matriz de solução

 c_s constante do Reynolds Stress Model

 C_{sma} constante de Smagorinsky

 C_{r1} constante do Reynolds Stress Model

 C_{r2} constante do Reynolds Stress Model

 C_{r3} constante do Reynolds Stress Model

C_{r4} constante do Reynolds Stress Model

 C_{r5} constante do Reynolds Stress Model

 C_{s1} constante do Reynolds Stress Model

 C_{s2} constante do Reynolds Stress Model

 C_{vf} constante do vórtice forçado, $\frac{1}{s}$

 C_{vl} constante do vórtice livre, $\frac{m^2}{s}$

 $C_{\varepsilon 1}$ constante do modelo k-epsilon e RSM

 $C_{\varepsilon 1RNG}$ constante do modelo RNG k-epsilon

 $C_{\varepsilon 2}$ constante do modelo k-epsilon e RSM

 $C_{\varepsilon 2RNG}$ constante do modelo RNG k-epsilon

 C_{μ} constante do modelo k-epsilon

 $C_{\mu RNG}$ constante do modelo RNG k-epsilon

d diâmetro, m

dp diâmetro da partícula, m

 f_{φ} coeficiente do modelo de turbulência RNG k-epsilon

F força, N

g aceleração do campo gravitacional, $\frac{m}{s^2}$

G função filtro Gaussiano

i variável genérica

j variável genérica

k energia cinética turbulenta, $\frac{m^2}{s^2}$

l comprimento, *m*

n vetor normal à superfície, m^2

p pressão parcial, Pa

P pressão, Pa

 P_k produção de turbulência devido a forças viscosas, $\frac{kg}{ms^3}$

q vetor de direção

r raio m

Re número de Reynolds

s área da superfície, m^2

S termo fonte para a equação de conservação de quantidade de movimento, $\frac{kg}{m^2s}$

 S_χ termo fonte para a equação de conservação de χ , $\frac{kg}{m^3s}$

 S_d taxa de deformação, $\frac{m}{s}$

t tempo, s

v velocidade, $\frac{m}{s}$

V volume, m^3

W vorticidade, $\frac{m}{s}$

x distância, m

Letras Gregas

 α coeficiente da discretização do termo advectivo

 β coeficiente de arraste interfásico, $\frac{kg}{m^3s}$

 β_{RNG} constante do modelo RNG k-epsilon

 Γ coeficiente difusivo para χ , $\frac{kg}{ms}$

 δ função delta de Kronecker

 ϵ fração volumétrica

arepsilon dissipação da energia cinética turbulenta, $rac{m^2}{s^3}$

 μ viscosidade dinâmica, $\frac{kg}{m \cdot s}$

 ρ massa específica, $\frac{kg}{m^3}$

 σ desvio padrão

 σ_k constante para a energia cinética da turbulência, modelo k-epsilon

 $\sigma_{arepsilon RNG}$ constante para a dissipação da turbulência, modelo RNG k-epsilon

 $\sigma_{arepsilon}$ constante do modelo k-epsilon e RSM

au tensão, Pa viscosidade do modelo de escala de sub-malha, $\frac{kg}{ms}$ ϕ deformação devido à pressão, $\frac{kg}{ms^3}$ φ coeficiente para o modelo RNG k-epsilon Φ produção exata de turbulência, $\frac{kg}{ms^3}$ escalar passivo genérico

Superescritos

referente ao instante anterior

referente ao instante seguinte

corr

correção da variável

referente à pressão

viz

referente a um nó vizinho

v_x

referente à velocidade na direção x

referente à velocidade na direção y

referente à velocidade na direção z

Subscritos

 V_V

 V_Z

diâmetro maior do que o de 15,87% da mistura de partículas

diâmetro maior do que o de 50% da mistura de partículas (ou diâmetro médio)

diâmetro maior do que o de 84,13% da mistura de partículas

coletado referente à saída inferior do ciclone

ef referente à propriedade efetiva

emitido referente à saída superior do ciclone

entrada referente à entrada do ciclone

g referente à fase gás

i índice

j índice

k índice

vetor na direção /, notação indicial

Im tensor nas dimensões *l* e *m*, notação indicial

m vetor na direção m, notação indicial

n vetor na direção *n*, notação indicial

lam referente à contribuição laminar da variável

montante referente a um ponto situdo à montante do atual

p referente à fase do partículado

p.i. referente a um ponto de integração

turb referente à contribuição turbulenta da variável

vol referente ao volume

x coordenada cartesiana

y coordenada cartesiana

z coordenada cartesiana

Símbolos e Operadores

d diferencial total

T matriz transposta

∂ diferencial parcial

Δ diferença de uma variável

 $\sum \qquad \text{somat\'orio}$

→ notação vetorial

– média

_ contribuição de grande escala

′ flutuação

" contribuição de pequena escala

fluxo mássico

produto escalar

⊗ produto diádico

|| módulo

Siglas

CAD Computer Aided Design

CFD Computational Fluid Dynamics

DNS Direct Numerical Simulation

E-E Euleriano-Euleriano

 \mathbf{E} - \mathbf{E}_n Euleriano-Euleriano com n fases particuladas

E-E₃ Euleriano-Euleriano com 3 fases particuladas

E-L Euleriano-Lagrangeano

FCC Fluidized Catalytic Cracking

LDA Laser-Doppler Anemometry

LES Large Eddy Simulation

LU Lower Upper

MVF Método dos Volumes Finitos

RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes

RNG ReNormalization Group

RSM Reynolds Stress Model

SGS Sub-Grid Scale

SSG Speziale-Sarkar-Gatski

VC Volume de Controle

Capítulo 1

Introdução

O assunto desta dissertação é o separador ciclônico, um equipamento de limpeza centrífuga de gases comumente encontrado na indústria química em áreas diversas, como a indústria de cimento e unidades de craqueamento catalítico da indústria de refino de petróleo (FCC), de incineramento de resíduos, madeireiras, entre diversas outras.

Apesar de ter princípios de montagem e operação relativamente simples, o escoamento vorticial confinado encontrado dentro dos ciclones é complexo, de modo que até hoje as técnicas de projeto mais difundidas, visando uma alta eficiência de coleta aliada à uma baixa queda de pressão, são baseadas em métodos empíricos e semi-empíricos já com algumas décadas desde a sua formulação.

Recentes avanços numéricos e computacionais possibilitaram a análise de problemas como este via métodos computacionais. Em destaque como ferramenta de análise e projeto para a obtenção da melhor performance do equipamento está a fluidodinâmica computacional (CFD), método que se baseia na solução numérica das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. Com ela podem ser estudados problemas sem a necessidade de se recorrer a experimentos custosos, demorados e, por vezes, impraticáveis. Aplicada ao escoamento de ciclones, a fluidodinâmica computacional não deixa dúvidas quanto à complexidade dos fenômenos envolvidos. Neste sentido, diversos trabalhos surgiram, e os modelos utilizados foram se tornando cada vez mais elaborados.

O presente trabalho teve como objetivo somar à literatura, contribuindo com o entendimento do equipamento e da aplicação da CFD neste tipo de problema. Para isto, simulações são feitas utilizando o código computacional ANSYS 11, em um cluster da SGI dotado de

32 nós com dois processadores Dual-Core Intel Xeon a 3,00 GHz cada, sendo três o número máximo de nós utilizados para o mesmo caso.

1.1 Motivação

Duas motivações básicas regem este trabalho, uma em relação ao objeto e outra à ferramenta de estudo.

Em relação ao objeto, o separador ciclônico, deseja-se entender melhor o funcionamento do aparelho, desde os princípios básicos até aqueles que requerem um olhar mais minucioso. Para tanto são estudados o comportamento de campos de velocidade e pressão, e da eficiência de coleta (quando aplicável), sempre voltando a atenção para estudos anteriores, que servem como validação para as discussões aqui apresentadas.

Em relação à ferramenta, a fluidodinâmica computacional, o objetivo é esmiuçar algumas possíveis configurações na definição dos problemas. Isto se faz necessário na medida em que não existem procedimentos-padrão na CFD, devido à grande quantidade de parâmetros e modelos e diversidade de fenômenos estudados. Assim, a função do 'especialista' ainda se faz necessária. Alguns parâmetros importantes para a simulação de ciclones foram então escolhidos para tentar esboçar um guia geral (*best practice guide*): condições de contorno, modelos de turbulência e tratamento da fase sólida. Nas discussões, sempre é tido em mente que generalizações e extrapolações devem ser feitas com muito cuidado numa área ampla e diversificada.

A condição de contorno variada corresponde à região de saída de sólidos. Quatro casos específicos foram estudados em simulação monofásica. Os dois primeiros casos possuem uma pressão atmosférica prescrita na saída, e são diferenciados por duas geometrias distintas: uma com saída direta ao final da seção cônica do equipamento e outra com uma extensão na forma de um *standpipe*. Os dois casos finais são de condições de parede, um previsto também no final da seção cônica e o outro na adição de uma caixa coletora de sólidos. Esta última condição corresponde à dos dados experimentais, disponíveis em SLACK et al. (2000), e que servem de base para as comparações.

Neste mesmo caso, usando a geometria da caixa coletora, foram avaliados diferentes modelos de turbulência para estudar o seu desempenho e características. Os quatro modelos

selecionados foram k-epsilon, RNG k-epsilon, SSG-RSM e LES. Uma análise crítica a seu respeito é feita tendo em mente mais uma vez a comparação com a prática.

Por fim, simulações multifásicas são feitas baseadas em ZHAO et al. (2004), onde são estudadas duas abordagens diferentes em relação ao tratamento da fase sólida. O objetivo é obter as curvas de eficiência de coleta fracional e global, necessitando para isso a inclusão de diversos diâmetros de partícula. O primeiro método consiste no Euleriano-Euleriano tradicional (E-E), com a repetição da simulação para diversos diâmetros de partícula. O segundo método, denominado $E-E_n$, prevê a inclusão de n fases sólidas de diâmetros diferentes na mesma simulação.

Espera-se que, ao final, um modelo suficientemente robusto para prever o escoamento dentro de ciclones seja obtido, bem como que sejam formuladas discussões relevantes acerca de algumas de suas possíveis variações.

1.2 Apresentação

Esta dissertação está dividida em seis capítulos, aqui descritos resumidamente.

- Capítulo 1 Introdução: é feita uma breve apresentação do tema da dissertação, sua motivação e objetivos, além deste breve resumo de sua estruturação.
- Capítulo 2 Revisão Bibliográfica: são explicados os princípios de funcionamento do ciclone e suas aplicações. Após isto é feito uma compilação dos principais artigos que deram o embasamento teórico para este trabalho, dos pioneiros até o estado da arte.
- Capítulo 3 Modelagem Matemática e Métodos Numéricos: os modelos matemáticos que compõem as simulações de ciclones são descritos, desde as equações básicas de conservação de massa e quantidade de movimento até as equações de fechamento e modelos de turbulência estudados. Após isto é feita uma explicação do método dos volumes finitos, bem como dos pacotes computacionais adotados.
- Capítulo 4 Simulações Monofásicas: são detalhadas as condições e exibidos os resultados para as simulações de escoamento de gás, onde foram estudados os efeitos da variação de diferentes condições de contorno na saída de sólidos: a saída direta para a atmosfera, com dipleg, com caixa coletora e com parede. Além disto, o desempenho

de alguns modelos de turbulência são comparados. A validação é feita a partir de dados experimentais obtidos da literatura.

- Capítulo 5 Simulações Multifásicas: a abordagem da fase sólida é discutida, comparandose a utilização de apenas um diâmetro médio (uma fase Euleriana sólida) com a utilização de mais de um diâmetro (três fases Eulerianas sólidas), do ponto de vista dos resultados de eficiência de coleta, novamente validados experimentalmente com artigos da literatura.
- Capítulo 6 Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros: no fechamento do trabalho, os principais resultados são revistos e são tecidas as discussões finais. Estão incluídas também sugestões para trabalhos futuros visando ampliar os objetivos aqui alcançados.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo são abordados alguns tópicos principais da literatura que servem de base ao desenvolvimento deste trabalho. Primeiramente é discutido o equipamento ciclone, explicando seu funcionamento e conceitos básicos. Um resumo então sobre os principais trabalhos em que a fluidodinâmica computacional é aplicada ao estudo do escoamento em ciclones é feito, discutindo a evolução de tais pesquisas.

2.1 Princípios Básicos

Ciclones são equipamentos que separam sólidos ou líquidos de gases através da ação de forças centrífugas. Esta seção detalha seu funcionamento e algumas de suas características, sendo que um detalhamento completo pode ser encontrado em OGAWA (1984) e HOFFMANN e STEIN (2002). São abordados primariamente ciclones reversos de separação gás-sólido, uma vez que a separação gás-líquido (feita em hidrociclones) não é tema desta dissertação.

Normalmente o ciclone é composto de uma entrada tangencial a um barril cilíndrico que, por sua vez, possui um duto coaxial na sua parte superior que serve de saída do gás limpo (vortex finder). O cilindro se prolonga até uma certa distância, quando então a área transversal começa a diminuir, formando um cone. No final do cone ocorre a saída de sólidos. Este processo está detalhado na Figura 2.1.

O equipamento funciona da seguinte maneira: a carga de gás e sólidos é alimentada tangencialmente no barril cilíndrico e acaba se acelerando em um movimento vorticial des-

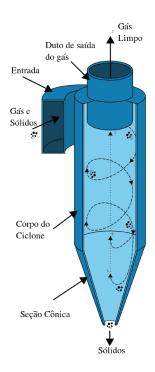


Figura 2.1: Funcionamento de um separador ciclônico (Wikimedia Commons, 2008)

cendente, no qual a fase mais densa é direcionada à parede devido à inércia e às forças gravitacionais. Ao atingir a seção cônica, a restrição de área causa a aceleração das fases. Isto, somado à zona de baixa pressão formada ao longo do eixo central do equipamento, causa a reversão do escoamento na forma de outro vórtice, desta vez de gás limpo. As partículas por sua vez são coletadas ao fundo do equipamento. Este vórtice duplo confinado é um dos motivos pelos quais este é um fenômeno cuja modelagem requer uma abordagem avançada da turbulência, como é apresentado nas seções posteriores.

Os separadores centrífugos apresentam vantagens e desvantagens em relação aos equipamentos alternativos (filtro de mangas, precipitador eletrostático, lavador de gases, etc.). HOFFMANN e STEIN (2002) descrevem algumas delas:

- (+) O produto coletado permanece seco, facilitando a manutenção;
- (+) Baixo custo de construção e manutenção;
- (+) Comporta altas pressões e temperaturas;
- (+) Não possui partes móveis;

- (+) Alta robustez;
- (+) Queda de pressão constante;
- (+) Ampla gama de materiais possíveis para construção;
- (+) Equipável com protetores à erosão e corrosão;
- (+) Pode separar sólidos, líquidos, ou até mesmo ambos;
- (-) Baixa eficiência para partículas abaixo do chamado diâmetro de corte;
- (-) Queda de pressão maior do que outros separadores equivalentes;
- (-) Sujeito à erosão quando operado com sólidos abrasivos.

A soma de suas características faz do ciclone um equipamento muito versátil, o que pode ser comprovado pela sua ampla utilização em processos diversos como o refino de óleo e gás (processo FCC), geração de eletricidade, processos de incineração, indústria de ferro e aço, madeireiras, indústria alimentícia e indústria de cimento.

Existem diversas variações de geometria observadas em separadores ciclônicos. A Figura 2.2 mostra quatro possíveis configurações de entrada: tangencial, voluta, helicoidal e axial. A primeira é a mais comum, e os dois ciclones estudados neste trabalho possuem este tipo de entrada. Porém, todas possuem suas peculiaridades e são recomendáveis em casos específicos.

Além da entrada, os próprios parâmetros geométricos (diâmetros e alturas) do corpo do equipamento podem assumir diversas configurações na busca do melhor desempenho para sua aplicação específica. É comum ver estes parâmetros serem exibidos como função do diâmetro do equipamento. Como exemplo cabe citar os projetos mais conhecidos: o de LAPPLE (1950) e o de STAIRMAND (1949). Muitos destes projetos foram fruto de observações experimentais aliadas com alguns conceitos teóricos básicos. Um breve histórico destes métodos, chamados de empíricos e semi-empíricos, é abordado em seguida.

2.2 Modelos Empíricos e Semi-Empíricos

A história do separador ciclônico começa no final do Século XIX. Segundo HOFFMANN e STEIN (2002), relatos desta época indicam que a primeira fábrica de carros da Renault era

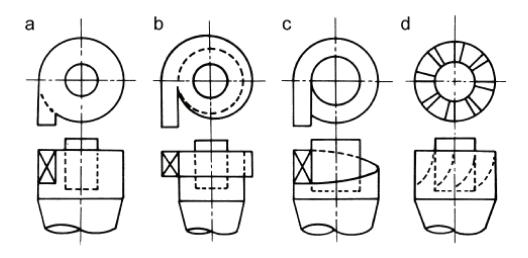


Figura 2.2: Tipos de entradas em ciclones a) tangencial b) voluta c) helicoidal d) axial, DIRGO e LEITH (1986)

equipada com um sistema de extração composto por ciclones, sendo que a primeira patente de um separador ciclônico, atribuída a O. M. Morse, data de 1886. O desenvolvimento partiu de várias frentes simultâneas e independentes, de diferentes partes do mundo (Estados Unidos, Japão, Reino Unido, Alemanha e o leste europeu, para citar algumas) convergindo para padrões semelhantes de projeto. O objetivo era otimizar os principais parâmetros operacionais do ciclone (eficiência de coleta e queda de pressão) através de mudanças na configuração do equipamento. Isto obviamente requer um profundo conhecimento da influência dos parâmetros geométricos no escoamento, o que foi auxiliado pela evolução de aparatos de medição experimental (culminando na anemometria laser Doppler) e apenas mais recentemente pelas técnicas numéricas de CFD.

A busca começa, porém, com modelos algébricos empíricos e semi-empíricos que tentam modelar o comportamento de variáveis-chave do equipamento. São citados, a seguir, os modelos clássicos mais difundidos.

2.2.1 Campo de Velocidades

Uma componente de velocidade de grande interesse no escoamento de ciclones é a velocidade tangencial $(v_z)^1$, que apresenta um comportamento muito característico, conhecido como 'vórtice de Rankine' (ver Figura 2.3). Presente em vórtices de escoamentos de fluidos viscosos reais, este fenômeno caracteriza-se por uma zona central com um vórtice forçado (conhecido como rotação de corpo sólido, Equação 2.1) cercada por uma zona de vórtice livre (irrotacional, Equação 2.2).

$$v_z = C_{vf} r \tag{2.1}$$

$$v_z = C_{vl}/r \tag{2.2}$$

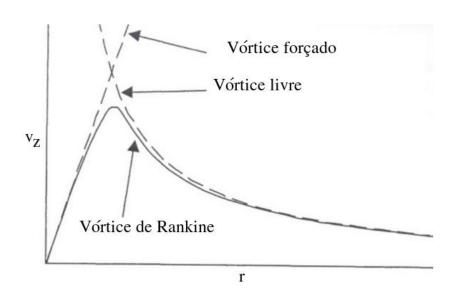


Figura 2.3: Perfil do vórtice de Rankine, HOFFMANN e STEIN (2002)

A partir destes fundamentos surgiram alguns modelos clássicos de predição da velocidade tangencial. ALEXANDER (1949) foi um dos pioneiros, propondo uma forma modificada do vórtice de Rankine. Seu ajuste é recomendado para ciclones tangenciais e em voluta, com paredes lisas. O modelo prevê o efeito da temperatura, mas não o da alta concentração de sólidos.

 $^{^{1}}$ Como o sistema de coordenadas utilizado para a solução neste trabalho é o cartesiano, fugiremos um pouco da convenção de nomes de coordenadas cilíndricas assinalando v_x , v_y e v_z como velocidades radial, axial e tangencial respectivamente.

BARTH (1956) propôs uma correlação para o cálculo da velocidade tangencial na parede a partir da qual a velocidade tangencial máxima poderia ser calculada. Seu método é também aplicável a ciclones tangenciais e em voluta. Posteriormente, MUSCHELKNAUTZ (1972) refinaria este método, incluindo efeitos de fricção com a parede e concentração de sólidos.

2.2.2 Queda de Pressão

A queda de pressão em ciclones é normalmente tida como a diferença entre a pressão *total* (*dinâmica* mais *estática*) na entrada e na saída de gases do ciclone (Equação 2.3). Isto é significativo pois no escoamento vorticial da saída está acumulada uma contribuição de pressão dinâmica difícil de ser medida experimentalmente. Esta diferença, apesar de não ser tratada aqui, renderia um trabalho interessante.

$$\Delta P = P_{entrada} - P_{topo} \tag{2.3}$$

Três contribuições para a perda de pressão podem ser destacadas em ciclones, em escala crescente de magnitude: perdas na entrada, perdas no corpo do ciclone e perdas no *vortex finder*. Em geral observa-se uma proporcionalidade entre a queda de pressão e o quadrado do fluxo volumétrico de gás

Obviamente estuda-se este parâmetro no intuito de minimizá-lo. Dentre diversos avanços na modelagem da queda de pressão em ciclones cita-se o trabalho de STAIRMAND (1949), que considerou o efeito da fricção na parede mas desprezou o da carga de sólidos. BARTH (1956) propôs mais tarde um novo modelo, suprindo esta deficiência. Já SHEPHERD e LAPPLE (1939) e CASAL e MARTINEZ-BENET (1983) desenvolveram modelos empíricos restritos a ciclones tangenciais e baixa concentração de sólidos.

2.2.3 Eficiência de Coleta

A eficiência de coleta é a razão de massa de sólidos capturada no ciclone pela massa de sólidos alimentada. Claramente é o parâmetro mais importante do equipamento, pois é um indicativo de quanto dos sólidos alimentados está sendo recuperado ou, de outro ponto de vista, o quão mais limpo o gás está saindo. Obviamente o objetivo é sempre aliar melhor eficiência com a menor queda de pressão possível. Temos dois tipos de eficiência de coleta, a

global, que leva em consideração toda a carga sólida, e a fracional que leva em consideração a massa de sólidos com determinado tamanho de partícula.

Observando a Figura 2.1 é possível dividir o balanço de massa dos sólidos no ciclone (Equação 2.4) em três seções distintas: a entrada, a saída inferior (onde o sólido é considerado recuperado) e a saída superior (onde o sólido é considerado perdido ou emitido).

$$\dot{m}_{p,entrada} = \dot{m}_{p,coletado} + \dot{m}_{p,emitido} \tag{2.4}$$

E a eficiência global de coleta pode ser calculada de maneiras equivalentes, como demonstrado na Equação 2.5

$$\eta = \frac{\dot{m}_{p,coletado}}{\dot{m}_{p,entrada}} = 1 - \frac{\dot{m}_{p,emitido}}{\dot{m}_{p,entrada}} \tag{2.5}$$

Assim, se todo o sólido sai por baixo a eficiência é de 100%, já se todo ele sai por cima, a eficiência é nula. Analogamente, a eficiência fracional de coleta para um diâmetro de partícula d_p é descrita na Equação 2.6.

$$\eta(d_p) = \frac{\dot{m}(d_p)_{p,coletado}}{\dot{m}(d_p)_{p,entrada}} = 1 - \frac{\dot{m}(d_p)_{p,emitido}}{\dot{m}(d_p)_{p,entrada}}$$
(2.6)

É importante citar que no tratamento de dados deste trabalho admitiu-se a última forma das Equações 2.5 e 2.6

Tendo valores discretos da eficiência fracional de coleta pode-se então traçar uma curva $\eta(d_p)$ versus d_p para se ter uma visão geral e muito acessível do desempenho do equipamento. Tipicamente, ela possui um formato em 'S', ou seja, a separação é muito baixa até um certo diâmetro, onde então aumenta bruscamente atingindo então um novo patamar. Desta curva extraem-se pontos importantes, como o chamado diâmetro de corte, que é o diâmetro para o qual a partícula tem chances iguais de ser capturada ou emitida. Este é um parâmetro de projeto importante em alguns dos modelos clássicos da literatura, dos quais pode-se destacar LAPPLE (1950), BARTH (1956) e LEITH e LICHT (1972).

Uma vez descritas as principais características do separador ciclônico e tendo delineado os mais significativos avanços em seu desenvolvimento empírico e semi-empírico, parte-se para a descrição de trabalhos relevantes na área de fluidodinâmica computacional.

2.3 CFD - Escoamento Monofásico

Por escoamento monofásico entende-se, para este estudo, a consideração apenas da existência da fase gasosa. É um bom ponto de partida para estudos em ciclones tanto para iniciantes na área quanto para usuários experientes que pretendem aplicar novos modelos. É seguro dizer que se uma boa representação do escoamento gasoso não puder ser obtida, o modelo não conseguirá prever o escoamento multifásico, naturalmente mais complexo.

Assim, os primeiros estudos em CFD para ciclones abordavam apenas a fase gás. Destaque merece ser dado ao trabalho pioneiro de BOYSAN et al. (1982). Os autores compararam os modelos de turbulência k-epsilon e um Reynolds Stress Model (RSM) misto (algébrico-diferencial), prontamente constatando que o modelo isotrópico testado não era aplicável para o escoamento vorticial, ao contrário do RSM.

Anos mais tarde, este resultado seria confirmado por diversos pesquisadores, dentre eles HOEKSTRA et al. (1999), que reproduziram perfis de velocidade do equipamento utilizando os modelos k-epsilon tradicional e o com renormalização de grupos (RNG k-epsilon), além do RSM. Novamente este último se mostrou o único adequado, com o RNG mostrando pouca vantagem em relação ao seu modelo tradicional.

GIMBUN et al. (2005) estudaram a influência de parâmetros operacionais (temperatura e velocidade de entrada) na queda de pressão em ciclones utilizando o código comercial FLUENT, e os resultados obtidos com RSM se mostraram muito próximos aos experimentais, de modo que os autores assumiram que tal modelo pode ser usado para condições gerais de operação. O erro com RNG k-epsilon chegou a 20% em alguns casos, mas mesmo assim foi julgado como aceitável pelos pesquisadores devido à grande economia de tempo gerada pela simplificação nos cálculos.

A influência tanto da pressão quanto da temperatura foi tema de estudo para SHI et al. (2006). Neste estudo foi verificado, através da utilização de um fluido fictício, que a influência da viscosidade no campo de pressão é desprezável, ao contrário daquela da densidade. Já para as velocidades tangencial e axial, ambas propriedades se mostraram significativas. Uma correlação foi obtida através dos dados simulados relacionando estas grandezas.

Apesar de apresentarem resultados mais precisos, os modelos RSM são computacionalmente muito custosos. Neste sentido, o trabalho de MEIER e MORI (1999a), referente ao desenvolvimento do código CYCLO, representa um *marco* na literatura: ao utilizar um

modelo de turbulência híbrido de k-epsilon e o comprimento de mistura de Prandtl, os autores conseguiram resultados satisfatórios e uma grande economia de tempo em comparação ao uso do modelo RSM. Este trabalho também foi extendido a escoamentos multifásicos, como veremos na próxima seção.

Outro complicador notado por vários autores é a necessidade do uso de simulações transientes, devido à alta instabilidade do escoamento em separadores ciclônicos. É o que verificaram, por exemplo, MONTAVON et al. (2000), que estudaram o escoamento gasoso em um ciclone e em um hidrociclone. A simulação do tipo estado estacionário apresentou valores de queda de pressão muito abaixo dos experimentais.

Esquemas de interpolação de alta ordem também são necessários para a obtenção de soluções coerentes. PERES (2002) comparou os esquemas *upwind*, *QUICK* e *higher upwind* através da predição da velocidade tangencial, verificando que o primeiro não era aplicável como solução final, enquanto os dois últimos apresentavam bons resultados, com o *higher upwind* predizendo o pico da velocidade tangencial com mais precisão, principalmente para velocidades de entrada mais altas.

Mais um requisito desejável para contornar as dificuldades aqui listadas é a utilização de uma malha numérica hexaédrica, ou, caso seja tetraédrica, com um número suficiente de elementos prismáticos na parede. Este é um fator que pode se mostrar decisivo na qualidade do resultado da simulação, como demonstrado por SILVA et al. (2006), em trabalho que não se limita à abordagem monofásica.

O impacto de algumas variações de geometria também foi tema de alguns trabalhos envolvendo apenas a fase gasosa. SCHMIDT et al. (2004) verificaram o impacto da geometria do tubo de saída de gás com sete configurações diferentes, variando comprimentos e a existência ou não de um cotovelo de noventa graus. Foi verificado que, para *vortex finders* de curto comprimento havia recirculação de fluido para dentro do domínio, o que trazia resultados indesejáveis. A presença do tubo longo, principalmente com o cotovelo, amenizava este problema.

QIAN et al. (2006) fizeram uma comparação semelhante, ao verificar a influência do tubo de saída de sólidos de um ciclone com o código comercial FLUENT. O modelo de turbulência utilizado foi o RSM, e a partir de uma análise da energia cinética turbulenta e do campo de velocidades os autores inferiram comportamentos presentes no escoamento gás-sólido, chegando à conclusão de que haveria um comprimento ótimo para a *dipleg* do separador

ciclônico.

Os autores XIANG e LEE (2005) fizeram observações da velocidade tangencial através da simulação de ciclones de diferentes alturas usando o modelo de turbulência RSM e associaram a alta velocidade tangencial vista em ciclones de corpo cilíndrico curto com seu alto grau de eficiência de coleta. Porém, para ciclones onde esta parte era muito curta, o suficiente para fazer o *vortex finder protuberar* na parte cônica do equipamento, o curto circuito formado prejudicava a separação.

NORILER et al. (2003) propuseram a instalação de um dispositivo espiralado no início do duto de saída de gases que, ao reduzir o pico de velocidade tangencial a partir deste ponto do escoamento, reduzia consigo a queda de pressão do equipamento. O estudo levou em conta o modelo de turbulência RSM, e os autores observaram uma redução em 20% da perda de carga, propondo ainda a expansão do trabalho para um sistema gás-sólido.

Como tendência mais recente, aplicações do modelo Large Eddy Simulation (LES) vêm sendo mostradas. SLACK et al. (2000) apresentaram comparações de simulações RSM e LES. Contradizendo os demais resultados da literatura, conseguiram ótima concordância para o modelo RSM em estado estacionário. O modelo LES, partindo da solução RSM convergida, obteve sucesso equivalente, até superior em alguns pontos experimentais.

SHALABY et al. (2005) também obtiveram resultados interessantes comparando k-epsilon, RSM e LES. Apenas os dois últimos mostraram maior concordância com dados experimentais, sendo que o LES foi mais preciso apenas quando usada uma malha mais refinada. Ao final, os autores declararam o LES como promissor, o que se observa porém é que estudos mais aprofundados sobre os limites de aplicação deste modelo seriam bem-vindos.

2.4 CFD - Escoamento Multifásico

Apesar de existirem diversos trabalhos tratando da complexidade do escoamento vorticial na fase gasosa apenas, deve-se lembrar que o ciclone é um equipamento de separação, e portanto a inclusão da fase particulada é essencial na fluidodinâmica do sistema, além de ser um complicador adicional à modelagem. Basicamente, existem duas abordagens possíveis para a fase particulada: Euleriana ou Lagrangeana.

Na abordagem Euleriana, as fases são tidas como contínuas e interpenetrantes, diferenci-

adas por uma fração volumétrica em cada volume de controle e podendo ou não ter campos de velocidade heterogêneos, obedecendo suas próprias equações de transporte. No caso de ciclones, campos heterogêneos mais termos de troca interfase são o mais comum, no modelo que é conhecido como *modelo de dois fluidos*.

Já na abordagem Lagrangeana as partículas sólidas são tratadas discretamente e seu movimento é rastreado ao longo de todo o fluido, resolvendo para cada uma delas a segunda lei de Newton. Obviamente, rastrear todas as partículas seria uma tarefa ainda impraticável, por isso abordagens estocásticas são levadas em conta, onde cada partícula representa estatisticamente um grupo maior.

Como era de se esperar, as duas abordagens possuem suas vantagens e desvantagens. Para a aplicação de interesse, pode-se dizer que o modelo Euleriano tem como vantagens a aplicabilidade para uma ampla faixa de concentração de sólidos e o oferecimento de informações globais completas para a fase particulada. Já a modelagem Lagrangeana é favorecida por fornecer o comportamento e tempo de residência individual de cada partícula, além da possibilidade de inserir facilmente a informação de distribuição de diâmetros, algo muito desejável na obtenção de uma curva de eficiência de coleta fracional. Isto também pode ser feito na abordagem Euleriana, porém ao preço de um novo conjunto de equações diferenciais para cada diâmetro adicionado. Uma etapa do presente trabalho trata desta configuração Euleriana 'múltipla' assim como da configuração Euleriana tradicional, comparando-as.

A literatura de ciclones dispõe de trabalhos seguindo ambas as linhas, porém pode-se dizer que, de modo geral, a abordagem Lagrangeana está mais difundida. É tratado então de se delinear algumas tendências mostrando trabalhos diversos publicados ao longo dos anos.

O trabalho de AYERS et al. (1985) é a extensão do anteriormente apresentado artigo de BOYSAN et al. (1982), levando em conta o mesmo modelo misto algébrico-diferencial para os tensores de Reynolds, porém adicionando o rastreamento Lagrangeano de partículas. Apesar de se tratar de um trabalho pioneiro, foi obtida boa concordância experimental em relação à eficiência de coleta, perfis de velocidade tangencial e queda de pressão.

MEIER e MORI (1999b) estenderam o trabalho citado na seção anterior para comportar o escoamento de sólidos. Estes são considerados invíscidos e tomados em um referencial Euleriano. Um modelo de força de arraste é utilizado para representar a interação gás-sólido. Os resultados conseguiram predizer a redução da velocidade tangencial devido à presença de sólidos, e por conseguinte a redução da queda de pressão no equipamento.

Como extensão a este trabalho, MEIER e MORI (1998) apresentaram o modelo Euleriano-Euleriano-Lagrangeano, no qual os campos de velocidade, pressão e turbulência obtidos com o modelo anterior eram mantidos constantes, e partículas discretas eram inseridas no domínio, deste modo, obtendo o efeito do diâmetro das partículas de maneira funcional e econômica do ponto de vista computacional. Os autores constataram ainda a necessidade de se considerar o efeito de dispersão turbulenta no cálculo das trajetórias, uma vez que esta exerce grande influência.

Na última iteração deste modelo, VEGINI et al. (2008) conseguiram prever a performance de ciclones industriais conectados em série, sendo que estes possuíam diferentes geometrias e eram operados a alta temperatura e com alta carga de sólidos. Os resultados obtidos mais uma vez corroboram a robustez e eficiência do código. O código foi ainda expandido para aceitar múltiplas fases Eulerianas em uma única simulação.

Uma modelagem Euleriano-Lagrangeano foi construída com sucesso por FRANK (2000), que modificou os códigos Mistral e PartFlow-3D para este fim. Levando em conta um acoplamento de duas vias, ou seja, a fase gasosa interagindo com a fase particulada, o código obteve boa concordância com os dados experimentais, extendidos a várias geometrias. O autor faz ainda uma revisão teórica sobre o equipamento, e dá uma visão geral dos principais mecanismos de separação e sua presença nas simulações.

Um típico ciclone Lapple adotado para a indústria de cimento foi tema de estudo para WANG et al. (2006). O campo de escoamento do gás foi calculado com turbulência RSM, e a ele foram injetadas quinze mil partículas com cinco diâmetros diferentes, rastreadas durante um segundo de tempo real. As trajetórias foram analisadas e alguns fenômenos observados experimentalmente foram reproduzidos, mas a validação foi feita apenas pela comparação com a eficiência global de coleta, para a gual foi obtida boa concordância.

SHI e BAYLESS (2007) estudaram três diferentes condições de contorno para as partículas em um modelo Lagrangeano. Em uma abordagem, as partículas eram tidas como coletadas apenas se atingissem a saída ao fundo, em outra ao atingir o fundo ou a parede do cone e na terceira, denominada tangential lift-off, seu destino era determinado dependendo de um balanço de forças feito na parede, onde se considerou que as componentes das forças de contato partícula-parede determinariam o destino do sólido. Esta condição foi aplicada através de uma subrotina no código FLUENT. Foi observado que ela melhorou significativamente os resultados, sendo que os outros modelos sobreprediziam a eficiência fracional.

DERKSEN (2003) aplicou com sucesso uma abordagem E-L em um ciclone tomando o campo de gás (resolvido através de uma simulação LES via método lattice-Boltzmann bem sucedida) como ponto de partida para a injeção de partículas. O autor tece vários comentários úteis, como ao salientar a necessidade da inclusão da caixa coletora para a obtenção de resultados satisfatórios ou ao alertar sobre o escoamento ser assimétrico e altamente transiente, com o núcleo interno oscilando constantemente e de maneira quase que periódica. Para a modelagem Lagrangeana, o autor considerou um acoplamento de uma via. Notando que a obtenção da eficiência de coleta é um processo demorado, uma vez que algumas partículas possuem alto tempo de residência, três abordagens foram estudadas: *eddy-lifetime* (onde uma contribuição flutuante aleatória era somada a um campo de gás previamente obtido), *frozen fields* (onde campos congelados de velocidade do gás são considerados) e *periodic-flow* (onde um período de fluxo é repetido, com intervalo pré-determinado, na tentativa de representar a oscilação do campo de escoamento). As duas primeiras modelagens mostraram desvios significativos, enquanto a última obteve bons resultados e se mostrou uma alternativa interessante na redução de tempo computacional.

Este último trabalho foi expandido em DERKSEN et al. (2006) e DERKSEN et al. (2008), onde o acoplamento de duas vias foi incluído para agregar a influência de altas cargas de sólido. Os resultados mostraram que esta é bem significativa, e que o principal limitante para a realização deste tipo de simulação é a capacidade computacional.

A utilização de um modelo Euleriano-Euleriano simplificado, o *Algebraic Slip Mixture Model* foi o tema de estudo de QIAN et al. (2007). Este modelo, disponível no código FLUENT, resolve a equação de continuidade e de quantidade de movimento para a mistura e depois, através de uma relação algébrica, determina uma velocidade relativa entre as fases. Além disso, foi incluído um coeficiente de colisão interparticular determinado através de experimentação numérica. A influência da concentração de sólidos foi analisada, através da simulação de quatro valores diferentes. Foram considerados quatro diâmetros de partícula diferentes nas simulações. Apesar de conseguirem qualitativamente prever os comportamentos de eficiência e queda de pressão, os autores admitem que o modelo simplificado adotado ainda necessita de melhorias, principalmente em se tratando dos efeitos de aglomeração a altas concentrações.

HUSSMANN et al. (2007) implementaram um modelo Lagrangeano de colisão partículapartícula para escoamentos densos no código CFX, elevando a modelagem ao chamado acoplamento de quatro vias. Para tanto, uma subrotina é implementada para calcular localmente a freqüência e a probabilidade de colisão. A validação é feita em três geometrias diferentes, e apesar de não incluírem um ciclone, uma delas se trata de um tubo com forte escoamento vorticial, de modo que é apenas uma questão de tempo para que sua aplicação se estenda a este ponto. Espera-se que este modelo esteja disponível comercialmente na versão 12 do software.

Valendo-se da modelagem Euleriana-Lagrangeana, BERNARDO et al. (2006) estudaram a influência da inclinação do ângulo de entrada do ciclone na eficiência de coleta, propondo configurações com inclinação positiva de 30, 45 e 60 graus. O modelo de turbulência utilizado foi o RSM, que teve sua performance aprovada. Foi visto que, para o caso estudado, todas as configurações proporcionavam menor queda de pressão e maior eficiência de coleta, sugerindo ainda a existência de uma inclinação 'ótima'.

ZHAO et al. (2006) propuseram e simularam um ciclone de entrada dupla em espiral, comparando-o ao equipamento convencional. Utilizaram o código FLUENT, com o modelo de turbulência RSM e o rastreamento Lagrangeano de partículas. Boa concordância com dados experimentais foi atingida, sendo que o novo projeto se mostrou superior, ou seja, o aumento da simetria do padrão de escoamento do gás melhorou a performance do equipamento.

Um projeto semelhante foi analisado por WANG e YI (2006), que propôs um ciclone de entrada espiralada, porém com paredes ao longo de toda essa seção, forçando o fluxo através de um canal em caracol. Também foi utilizado turbulência RSM e abordagem E-L. Os autores afirmam que este novo equipamento apresenta perda de carga até cinco vezes menor que o normal.

MARTIGNONI et al. (2007) estudaram a influência de duas configurações alternativas de geometria: uma delas considerava duas entradas tangenciais simétricas (ZHAO et al., 2004), e a outra a substituição dos dutos de entrada e de saída de gases por configurações em voluta. A comparação foi feita com dados da literatura disponíveis para um ciclone tangencial convencional. Além disso, foram comparados os modelos RSM e LES em malhas relativamente refinadas, adotando uma formulação E-E. A conclusão deste trabalho foi que tanto RSM quanto LES obtiveram resultados qualitativamente bons. No entanto, a *Large Eddy Simulation* conseguiu uma melhor previsão para estruturas turbulentas microscópicas, ao custo de maior poder de processamento por requerer malhas mais refinadas. Quanto aos projetos avaliados, ambos apresentaram melhorias na eficiência e na queda de pressão, mas a

entrada dupla obteve o melhor desempenho.

A análise do efeito do diâmetro do cone na performance do equipamento foi o objetivo do estudo de CHUAH et al. (2006). Utilizando o código FLUENT e tratando a fase particulada como discreta, os autores utilizaram os modelos de turbulência RNG k-epsilon e RSM, e mais uma vez os resultados apontaram para a aplicação do segundo, que obteve um desvio máximo de 2,9% em relação aos dados experimentais, enquanto que para o primeiro este foi de 7,5%. Foi sugerido que o pico de velocidade tangencial é diretamente proporcional à eficiência de coleta e à queda de pressão. Ainda, o menor diâmetro de cone estudado obteve o melhor desempenho.

Por sua vez, LEE et al. (2006) estudaram a influência do comprimento do cone, ao propor duplicar este parâmetro em relação a um projeto Stairmand típico. A verificação se deu utilizando o modelo RSM, e o método Lagrangeano via código FLUENT. Infelizmente, o novo projeto mostrou-se pior que o convencional, mas os autores teceram comentários relevantes sobre a causa, sendo a principal o curto-circuito entre o *vortex finder* e a parede do ciclone.

Dez configurações diferentes de *vortex finder* foram simuladas por RAOUFI et al. (2008), com comparações detalhadas de eficiência de coleta obtidas através de uma abordagem E-L e da modelagem diferencial dos tensores de Reynolds. Os autores obtiveram diversas informações sobre a influência deste duto na performance do ciclone, propondo geometrias diferentes, dentre as quais algumas que supostamente melhoram a performance do equipamento.

Através dos trabalhos mostrados nesta seção, fica evidente a idéia de que atualmente a modelagem de ciclones está razoavelmente avançada, e que a fluidodinâmica computacional é importante ferramenta de projeto. Os trabalhos de vanguarda apontam para a inclusão de interações partícula-partícula, inclusão de diversos diâmetros em abordagens E-E e uma modelagem mais rigorosa da turbulência, como no caso da aplicação do LES. Estas novas frentes com certeza irão ampliar as possibilidades de aplicação desta tecnologia, contribuindo para o melhor entendimento dos fenômenos envolvidos.

Capítulo 3

Modelagem Matemática e Métodos Numéricos

A modelagem matemática normalmente contida em um trabalho de fluidodinâmica computacional, apesar de complexa, parte de princípios fundamentais. A seguir, serão utilizados dois deles para iniciar a análise:

- Princípio da conservação de massa: a massa total de um sistema fechado se conserva, independentemente dos processos atuantes dentro dele.
- Segunda lei de Newton: a taxa de variação de quantidade de movimento em um corpo é proporcional à força resultante agindo no corpo e possui a mesma direção que esta.

A lei da conservação de energia não é relevante para este trabalho, já que não é estudada a sua transferência (o sistema é considerado isotérmico).

Neste capítulo, são escritas estas leis em suas formas matemáticas, chegando em algumas das equações fundamentais da mecânica dos fluidos, as chamadas *equações de transporte*. Posteriormente, são considerados os modelos de turbulência que fecham o problema. Por fim, é tratada uma descrição dos códigos e métodos numéricos utilizados para resolver toda a matemática envolvida. Como referência geral do capítulo, toma-se o CFX-11 User's Guide (2006), com referências mais específicas sendo sugeridas durante o desenvolvimento.

3.1 Equações de Transporte

3.1.1 Equação da Conservação de Massa

Considerando um volume de controle genérico em coordenadas cartesianas como o da Figura 3.1, aplica-se o balanço da quantidade de matéria entrando e saindo do volume de controle (VC) em um referencial Euleriano.

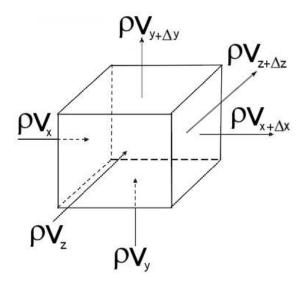


Figura 3.1: Fluxo de massa através de volume de controle

$$\Delta y \Delta z \left[(\rho v_x)|_x - (\rho v_x)|_{x+\Delta x} \right] + \Delta x \Delta z \left[(\rho v_y)|_y - (\rho v_y)|_{y+\Delta y} \right]$$

$$+ \Delta x \Delta y \left[(\rho v_z)|_z - (\rho v_z)|_{z+\Delta z} \right] = \Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial \rho}{\partial t}$$
(3.2)

Dividindo a Equação 3.2 por $\Delta x \Delta y \Delta z = \Delta V$ e fazendo o limite com $\Delta V \rightarrow 0$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{\partial (\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho v_z)}{\partial z} \right] = 0$$
(3.3)

E aplicando a definição do gradiente encontra-se a equação da continuidade em sua forma diferencial para o escoamento monofásico de um componente:

• Equação da continuidade monofásica,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \tag{3.4}$$

Quando se tem duas ou mais fases, como no caso de um sistema gás-particulado, define-se ϵ como a fração volumétrica de cada fase (ϵ_g para o gás e ϵ_p para o particulado) e, seguindo procedimento análogo ao descrito acima, encontram-se as equações da continuidade para cada fase (não considerando que exista reação química ou troca de massa entre as fases):

• Equação da continuidade da fase gás,

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g \vec{v_g}) = 0 \tag{3.5}$$

• Equação da continuidade da fase particulada,

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon_p \rho_p \vec{v_p}) = 0 \tag{3.6}$$

Para a extensão a n fases particuladas basta tomar n equações iguais à Equação 3.6 trocando o subscrito p pelo da fase particulada em questão (p1, p2, etc.).

3.1.2 Equação da Conservação de Quantidade de Movimento

A dedução da equação que define a conservação de quantidade de movimento é deduzida de maneira similar à Equação 3.4, ou seja, partindo-se de um volume de controle genérico como o da Figura 3.2:

$$\left\{ \begin{array}{c} taxa \ de \\ quant \ de \ mov \\ que \ entra \\ no \ VC \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} taxa \ de \\ quant \ de \\ mov \ saindo \\ do \ VC \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} soma \ das \\ forças \\ atuantes \\ no \ VC \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} taxa \ de \\ variação \ de \\ quant \ de \\ mov \ do \ VC \end{array} \right\} (3.7)$$

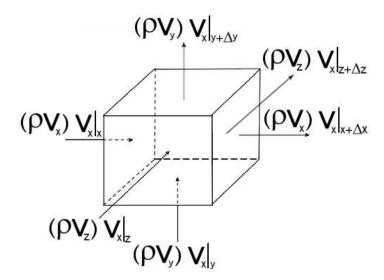


Figura 3.2: Fluxo de quantidade de movimento através de volume de controle

É preciso lembrar que a quantidade de movimento é uma grandeza vetorial, assim tem-se um escalar para cada um dos componentes de velocidade v_x , v_y e v_z . Considerando o primeiro destes:

$$\Delta y \Delta z \left[(\rho v_x) v_x |_x - (\rho v_x) v_x |_{x+\Delta x} \right]$$

$$+ \Delta x \Delta z \left[(\rho v_y) v_x |_y - (\rho v_y) v_x |_{y+\Delta y} \right]$$

$$+ \Delta x \Delta y \left[(\rho v_z) v_x |_z - (\rho v_z) v_x |_{z+\Delta z} \right] + \sum_z F_x = \Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial \rho}{\partial t}$$
(3.8)

Mais uma vez, dividindo a Equação 3.8 por $\Delta x \Delta y \Delta z = \Delta V$ e fazendo o limite com $\Delta V \to 0$ obtém-se:

$$\frac{\partial (\rho v_x)}{\partial t} + \frac{\partial [(\rho v_x) v_x]}{\partial x} + \frac{\partial [(\rho v_y) v_x]}{\partial v} + \frac{\partial [(\rho v_z) v_x]}{\partial z} = \frac{\sum F_x}{dV}$$
(3.9)

Faltando ainda definir o termo da direita, que vem do balanço de forças (ver detalhes na Figura 3.2). Este está colocado já na forma diferencial pela dedução ser semelhante às do balanço de massa e de quantidade de movimento, a fim de evitar a repetição.

$$\frac{\sum F_{x}}{dV} = \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho g_{x}$$
(3.10)

Onde g_x é a aceleração do campo gravitacional na direção x, e τ_{ij} as tensões agindo nos diversos planos na direção x. Para um fluido Newtoniano, τ_{ij} é definido pela equação de Stokes:

$$\tau_{ij} = -P\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial j} + \frac{\partial v_j}{\partial i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \nabla \cdot \vec{v}$$
(3.11)

Sendo P a pressão, δ o delta de Kronecker e μ a viscosidade do fluido. Fazendo uso disto, a forma final para a equação da conservação da quantidade de movimento para um escoamento monofásico é expressa pelas Equações 3.12, 3.13 e 3.14.

• Equação da conservação da quantidade de movimento monofásica, direção x

$$\frac{\partial (\rho v_x)}{\partial t} + \left[\frac{\partial (\rho v_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v_x v_y)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho v_x v_z)}{\partial z} \right] = S^{v_x}$$
(3.12)

$$S^{v_x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) - \frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x$$

• Equação da conservação da quantidade de movimento monofásica, direção y

$$\frac{\partial \left(\rho v_{y}\right)}{\partial t} + \left[\frac{\partial \left(\rho v_{y} v_{x}\right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\rho v_{y}^{2}\right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\rho v_{y} v_{z}\right)}{\partial z}\right] = S^{v_{y}}$$
(3.13)

$$S^{v_y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial y} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) - \frac{\partial P}{\partial y} + \rho g_y$$

• Equação da conservação da quantidade de movimento monofásica, direção z

$$\frac{\partial (\rho v_z)}{\partial t} + \left[\frac{\partial (\rho v_z v_x)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v_z v_y)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho v_z^2)}{\partial z} \right] = S^{v_z}$$
(3.14)

$$S^{v_z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} \right) - \frac{\partial P}{\partial z} + \rho g_z$$

Novamente, estende-se as equações para uma abordagem bifásica fazendo uso das frações volumétricas. Desta vez, porém, com algumas complicações adicionais: deve-se levar em conta a influência do arraste entre as duas fases, o que é feito pela adição de um novo termo com uma nova variável. Trata-se do coeficiente de arraste interfásico (β), que é detalhado nas seções seguintes.

• Equação da conservação da quantidade de movimento para a fase gás, direção x

$$\frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{x,g}\right)}{\partial t} + \left[\frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{x,g}^{2}\right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{x,g} v_{y,g}\right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{x,g} v_{z,g}\right)}{\partial z}\right] = S_{g}^{v_{x}}$$
(3.15)

$$S_{g}^{v_{x}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{g} \mu_{g} \frac{\partial v_{x,g}}{\partial x} - \frac{2}{3} \epsilon_{g} \mu_{g} \nabla \cdot \vec{v_{g}} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon_{g} \mu_{g} \frac{\partial v_{y,g}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_{g} \mu_{g} \frac{\partial v_{z,g}}{\partial x} \right) - \frac{\partial p_{g}}{\partial x} + \rho_{g} g_{x} + \beta \left(v_{x,p} - v_{x,g} \right)$$

• Equação da conservação da quantidade de movimento para a fase gás, direção y

$$\frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{y,g}\right)}{\partial t} + \left[\frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{y,g} v_{x,g}\right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{y,g}^{2}\right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{y,g} v_{z,g}\right)}{\partial z}\right] = S_{g}^{v_{y}}$$
(3.16)

$$S_{g}^{v_{y}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{g} \mu_{g} \frac{\partial v_{x,g}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon_{g} \mu_{g} \frac{\partial v_{y,g}}{\partial y} - \frac{2}{3} \epsilon_{g} \mu_{g} \nabla \cdot \vec{v_{g}} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_{g} \mu_{g} \frac{\partial v_{z,g}}{\partial y} \right) - \frac{\partial p_{g}}{\partial y} + \rho_{g} g_{y} + \beta \left(v_{y,p} - v_{y,g} \right)$$

ullet Equação da conservação da quantidade de movimento para a fase gás, direção z

$$\frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{z,g}\right)}{\partial t} + \left[\frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{z,g} v_{x,g}\right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{z,g} v_{y,g}\right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\epsilon_{g} \rho_{g} v_{z,g}^{2}\right)}{\partial z}\right] = S_{g}^{v_{z}}$$
(3.17)

$$S_{g}^{v_{z}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{g} \mu_{g} \frac{\partial v_{x,g}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon_{g} \mu_{g} \frac{\partial v_{y,g}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_{g} \mu_{g} \frac{\partial v_{z,g}}{\partial z} - \frac{2}{3} \epsilon_{g} \mu_{g} \nabla \cdot \vec{v_{g}} \right)$$
$$- \frac{\partial p_{g}}{\partial z} + \rho_{g} g_{z} + \beta \left(v_{z,p} - v_{z,g} \right)$$

Outra consideração a ser feita é que o termo de pressão é desprezado para a fase particulada, devido à consideração de escoamento disperso.

Equação da conservação da quantidade de movimento para a fase particulada, direção
 x

$$\frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{x,p}\right)}{\partial t} + \left[\frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{x,p}^{2}\right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{x,p}v_{y,p}\right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{x,p}v_{z,p}\right)}{\partial z}\right] = S_{p}^{v_{x}}$$
(3.18)

$$S_{p}^{v_{x}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{p} \mu_{p} \frac{\partial v_{x,p}}{\partial x} - \frac{2}{3} \epsilon_{p} \mu_{p} \nabla \cdot \vec{v_{p}} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon_{p} \mu_{p} \frac{\partial v_{y,p}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_{p} \mu_{p} \frac{\partial v_{z,p}}{\partial x} \right) + \rho_{p} g_{x} + \beta \left(v_{x,q} - v_{x,p} \right)$$

Equação da conservação da quantidade de movimento para a fase particulada, direção
 y

$$\frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{y,p}\right)}{\partial t} + \left[\frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{y,p}v_{x,p}\right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{y,p}^{2}\right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{y,p}v_{z,p}\right)}{\partial z}\right] = S_{p}^{v_{y}}$$
(3.19)

$$S_{p}^{v_{y}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{p} \mu_{p} \frac{\partial v_{x,p}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon_{p} \mu_{p} \frac{\partial v_{y,p}}{\partial y} - \frac{2}{3} \epsilon_{p} \mu_{p} \nabla \cdot \vec{v_{p}} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_{p} \mu_{p} \frac{\partial v_{z,p}}{\partial y} \right) + \rho_{p} g_{y} + \beta \left(v_{y,g} - v_{y,p} \right)$$

Equação da conservação da quantidade de movimento para a fase particulada, direção
 z

$$\frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{z,p}\right)}{\partial t} + \left[\frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{z,p}v_{x,p}\right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{z,p}v_{y,p}\right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\epsilon_{p}\rho_{p}v_{z,p}^{2}\right)}{\partial z}\right] = S_{p}^{v_{z}}$$
(3.20)

$$S_{p}^{v_{z}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{p} \mu_{p} \frac{\partial v_{x,p}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon_{p} \mu_{p} \frac{\partial v_{y,p}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_{p} \mu_{p} \frac{\partial v_{z,p}}{\partial z} - \frac{2}{3} \epsilon_{p} \mu_{p} \nabla \cdot \vec{v_{p}} \right) + \rho_{p} g_{z} + \beta \left(v_{z,g} - v_{z,p} \right)$$

Para a extensão a n fases particuladas basta tomar n conjuntos de equações iguais às Equações 3.18 a 3.20 trocando o subscrito p por um que represente a fase particulada em questão (p1, p2, etc.). Uma vez que neste trabalho não são levadas em conta interações partícula-partícula, não é necessária a adição de nenhum novo termo.

3.2 Equações de Fechamento

3.2.1 Frações volumétricas

As frações volumétricas são calculadas de acordo com as Equações 3.21 e 3.22:

$$\epsilon_g = \frac{V_g}{V_a + V_p} \tag{3.21}$$

$$\epsilon_p = \frac{V_p}{V_q + V_p} \tag{3.22}$$

Deste modo é natural esperar um comportamento como o da Equação 3.23, indicando que a somatória das frações volumétricas deve ser igual à unidade.

$$\sum_{i} \epsilon_{i} = \epsilon_{g} + \epsilon_{p} = 1 \tag{3.23}$$

3.2.2 Coeficiente de arraste interfásico

O arraste é descrito pelo último termo nas Equações 3.15 a 3.20. É necessário portanto modelar o coeficiente de arraste interfásico β . Este dependerá da concentração de sólidos no sistema, que pode ser medida através das frações volumétricas ϵ .

ullet Fase particulada dispersa: $\epsilon_g \geq 0$, 8

$$\beta = \frac{3}{4}Cd\frac{|\vec{v_g} - \vec{v_p}|\,\epsilon_p \rho_g}{\Phi d_p} \tag{3.24}$$

E o valor de Cd varia conforme o número de Reynolds, Re:

$$Cd = \frac{24}{Re}, Re \ll 1 (3.25)$$

$$Cd = \frac{24}{Re} \left(1 + 0, 15Re^{0.687} \right), \qquad 1 \le Re \le 10^3$$
 (3.26)

$$Cd = 0,44,$$
 $10^3 \le Re \le 10^5$ (3.27)

A Equação 3.26 é a correlação de Schiller-Naumann, uma entre diversas disponíveis na literatura.

É interessante notar que esta correlação de arraste apresenta descontinuidades em seu perfil. Apesar de não ser parte deste trabalho, um estudo da influência de diferentes modelos seria muito relevante.

ullet Fase particulada densa: $\epsilon_g < 0$, 8

Utiliza-se a lei de Ergun do escoamento em meios porosos considerando esfericidade igual à unidade:

$$\beta = 150 \frac{\epsilon_p^2 \mu_g}{\epsilon_g (d_p)^2} + \frac{7}{4} \frac{\epsilon_p \rho_g |\vec{v_p} - \vec{v_g}|}{(d_p)}$$
(3.28)

3.3 Turbulência

Na mecânica dos fluidos, a turbulência é um regime de movimento de fluido caracterizado pela flutuação aleatória das variáveis no tempo e no espaço, de modo que valores médios estatisticamente distintos podem ser observados (HINZE, 1975).



Figura 3.3: Escoamento laminar e turbulento ao redor de um objeto liso (Wikimedia Commons, 2008)

O regime normalmente é caracterizado através do número de Reynolds: para valores baixos, as equações de conservação possuem soluções estacionárias e bem-comportadas, sendo que as forças viscosas são predominantes. É o chamado escoamento laminar. À medida que se tem números de Reynolds maiores, a inércia do fluido supera as tensões viscosas, tornando o fluxo instável. Flutuações na pressão e velocidade de caráter tridimensional e transiente passam a ser observadas, caracterizando o regime turbulento. Ambos os regimes estão presentes na 3.3.

A princípio, as equações de conservação são capazes de tratar escoamentos turbulentos sem a necessidade de informação adicional. No entanto, as escalas de comprimento envolvidas trariam a necessidade de malhas numéricas com volumes de controle muito pequenos, tornando o cálculo inviável para os padrões computacionais atuais (este cálculo é conhecido como simulação numérica direta, ou DNS). Assim, na prática faz-se necessário o uso de *modelos de turbulência*.

A modelagem da turbulência é um dos grandes desafios da física, e seu estudo data do Século XIX com pioneiros como Reynolds e Boussinesq. A fluidodinâmica computacional se serviu muito bem dos desenvolvimentos nesta área, de modo que existem diversos modelos implementados na maioria dos códigos numéricos disponíveis. Como já mencionado, a escolha de um bom modelo de turbulência é essencial para a boa representação do escoamento em ciclones, de modo que é sensato testar algumas opções para estabelecer aquela que tem o melhor desempenho e é, ao mesmo tempo, viável do ponto de vista computacional. Nesta seção, são tratados os modelos considerados neste trabalho, salientando suas principais hipóteses, desenvolvimento matemático e eventuais limitações. Para uma descrição completa da turbulência aplicada à CFD, recomenda-se WILCOX (1998).

De modo geral, o tratamento do problema começa com a aplicação da média temporal de Reynolds. Ela consiste em considerar que uma variável, toma-se a velocidade como exemplo, pode ser dividida em duas contribuições, uma média (\overline{v}) e uma flutuante (v'):

$$v = \overline{v} + v' \tag{3.29}$$

Uma vez aplicadas as médias e suas propriedades às equações de conservação de quantidade de movimento (Equações 3.12 a 3.14), tem-se as equações chamadas de *Reynolds Averaged Navier-Stokes* (RANS). A Equação 3.30 exemplifica tal conceito para a fase gás,

numa direção arbitrária i:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_g \rho_g \overline{v_{i,g}} \right) = \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial}{\partial j} \left[\epsilon_g \left(\rho_g \overline{v_{i,g}} \, \overline{v_{j,g}} + \rho_g \overline{v_{i,g}' v_{j,g}'} \right) - \epsilon_g \mu_g \left(\frac{\partial \overline{v_{i,g}}}{\partial j} \right) \right] + S_g^{v_i}$$
(3.30)

Nesta equação, o termo $\rho_g \overline{v'_{i,g} v'_{j,g}}$ dentro do somatório é de especial importância para o fenômeno da turbulência e é conhecido como tensor de Reynolds. A seguir é mostrado como cada abordagem empregada neste trabalho conduz o problema.

3.3.1 Modelo k-epsilon

O modelo k-epsilon cai na classe dos chamados 'modelos de duas equações'. É também o mais amplamente utilizado, pois oferece boa representação de uma ampla gama de fenômenos a baixo custo computacional. O nome 'duas equações' vem do fato das escalas de velocidade e de comprimento assumirem uma equação de transporte cada.

No caso do modelo k-epsilon, são duas as variáveis empregadas: a energia cinética turbulenta (k), que representa a variância das flutuações na velocidade, e a dissipação da energia cinética turbulenta (ε) , que quantifica a taxa à qual se dá a dissipação das flutuações de velocidade. Este modelo faz uso da hipótese da viscosidade turbulenta, que considera que a turbulência pode ser modelada como sendo um aumento na difusividade. Assim, a viscosidade é dividida em duas contribuições, uma laminar e a outra turbulenta.

$$\mu_{ef} = \mu_{lam} + \mu_{turb} \tag{3.31}$$

No modelo k-epsilon, a viscosidade turbulenta é calculada através da seguinte relação:

$$\mu_{turb} = C_{\mu} \rho_g \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{3.32}$$

Onde C_{μ} é uma constante. Uma aproximação para o tensor de Reynolds é então feita, fazendo uso desta viscosidade turbulenta:

$$\rho_{g}\overline{v'_{i,g}v'_{j,g}} = -\mu_{turb}\left(\frac{\partial\overline{v_{i}}}{\partial j} + \frac{\partial\overline{v_{j}}}{\partial i}\right) + \frac{2}{3}\rho_{g}\delta_{ij}k \tag{3.33}$$

Restando apenas o cálculo das variáveis do modelo, o que é feito através de suas próprias equações de transporte:

$$\frac{\partial \left(\rho_{g}k\right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_{g}\vec{v}k\right) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_{lam} + \frac{\mu_{turb}}{\sigma_{k}}\right)\nabla k\right] + P_{k} - \rho_{g}\varepsilon \tag{3.34}$$

$$\frac{(\rho_g \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{v}\varepsilon) = \nabla \cdot \left[\mu_{lam} + \frac{\mu_{turb}}{\sigma_{\varepsilon}} \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} \left(C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho_g \varepsilon \right) \tag{3.35}$$

Onde $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k e σ_{ε} são constantes. P_k é o termo de produção de turbulência devido a forças viscosas, e é modelado da seguinte forma:

$$P_{k} = \mu_{turb} \nabla \vec{v} \cdot \left(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^{T} \right) - \frac{2}{3} \left(3\mu_{turb} \nabla \cdot \vec{v} + \rho_{g} k \right)$$
(3.36)

Os valores empregados pelo código CFX nas constantes do modelo apresentado estão listados a seguir.

$$C_{\mu} = 0,09; C_{\varepsilon 1} = 1,44; C_{\varepsilon 2} = 1,92; \sigma_{k} = 1,0; \sigma_{\epsilon} = 1,3$$
 (3.37)

O modelo k-epsilon apresenta graves limitações quando aplicado a escoamentos vorticiais, sendo a isotropia do tensor de Reynolds a principal delas. Isto reflete nos resultados, como foi observado pelos autores da revisão bibliográfica e é observado no capítulo referente a resultados deste trabalho.

3.3.2 Modelo RNG k-epsilon

O modelo RNG k-epsilon surgiu a partir da análise de renormalização de grupos das equações de conservação. Possui equações de transporte análogas ao modelo k-epsilon convencional, com a troca da constante $C_{\varepsilon 1}$ por uma função, $C_{\varepsilon 1RNG}$. Deste modo, a equação de transporte para a dissipação da energia cinética turbulenta assume a seguinte forma:

$$\frac{\partial (\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_{lam} + \frac{\mu_{turb}}{\sigma_{\varepsilon RNG}} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} \left(C_{\varepsilon 1RNG} P_k - C_{\varepsilon 2RNG} \rho \varepsilon \right)$$
(3.38)

Onde $C_{\varepsilon 1RNG}$ é um coeficiente modelado através das Equações 3.39 a 3.41.

$$C_{\varepsilon 1RNG} = 1,42 - f_{\varphi} \tag{3.39}$$

$$f_{\varphi} = \frac{\varphi \left(1 - \frac{\varphi}{4,38}\right)}{1 + \beta_{RNG} \varphi^3} \tag{3.40}$$

$$\varphi = \sqrt{\frac{P_k}{\rho C_{\mu RNG} \varepsilon}} \tag{3.41}$$

As constantes do modelo RNG k-epsilon também assumem valores diferentes do modelo convencional:

$$C_{\mu RNG} = 0,085; C_{\varepsilon 2RNG} = 1,68; \beta_{RNG} = 0,012; \sigma_{\varepsilon RNG} = 0,7179$$
 (3.42)

Em geral, pouca diferença nos resultados é observado por este modelo em relação ao k-epsilon (CFX-11 User's Guide, 2006).

3.3.3 Modelo 'Reynolds Stress Model' (RSM)

A modelagem RSM não leva em conta a hipótese da viscosidade turbulenta. Ao invés disto, equações de transporte para cada um dos componentes dos tensores de Reynolds e para a taxa de dissipação são atribuídas. Estas equações diferenciais parciais conferem bastante robustez ao cálculo, tornando-o teoricamente mais adequado a escoamentos complexos. Porém, o esforço computacional adicionado é considerável.

Partindo da Equação 3.30, definimos uma equação de transporte para o tensor, aqui demonstrado em notação vetorial:

$$\frac{\partial \rho \overrightarrow{\overrightarrow{v'} \otimes \overrightarrow{v'}}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \overrightarrow{v} \otimes \overrightarrow{\overrightarrow{v'} \otimes \overrightarrow{v'}} \right) = \Psi + \phi - \frac{2}{3} \delta \rho \varepsilon
+ \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{2}{3} c_s \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \right) \nabla \overrightarrow{\overrightarrow{v'} \otimes \overrightarrow{v'}} \right]$$
(3.43)

Analogamente, em notação indicial, esta equação pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial \left(\rho \overline{v_i' v_j'}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(v_k \rho \overline{v_i' v_j'}\right)}{\partial x_k} = \Psi_{ij} + \phi_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho \varepsilon
+ \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + \frac{2}{3} c_s \rho \frac{k^2}{\varepsilon}\right) \frac{\partial \overline{v_i' v_j'}}{\partial x_k} \right]$$
(3.44)

Nestas equações, Ψ é o termo de produção exata, dado pela Equação 3.45.

$$\Psi = -\rho \left[\overrightarrow{v'} \otimes \overrightarrow{v'} \left(\nabla \overrightarrow{v} \right)^T + \left(\nabla \overrightarrow{v} \right) \overrightarrow{v'} \otimes \overrightarrow{v'} \right]$$
(3.45)

Já ϕ corresponde à deformação devido à pressão, um dos termos mais importantes do modelo, sendo definida de forma geral pela Equação 3.46:

$$\phi_{ii} = \phi_{ii1} + \phi_{ii2} \tag{3.46}$$

Sendo que ϕ_{ij1} e ϕ_{ij2} correspondem a:

$$\phi_{ij1} = -\rho\varepsilon \left[C_{s1}\vec{a} + C_{s2} \left(\vec{a}\vec{a} - \frac{1}{3}\vec{a} \cdot \vec{a}\delta \right) \right]$$
(3.47)

$$\phi_{ij2} = -C_{r1}\Psi\vec{a} + C_{r2}\rho k\vec{S}_d - C_{r3}\rho k\vec{S}_d\sqrt{\vec{a}\cdot\vec{a}}$$

$$+C_{r4}\rho k\left(\vec{a}\vec{S}_d^T + \vec{S}_d\vec{a}^T - \frac{2}{3}\vec{a}\cdot\vec{S}_d\delta\right) + C_{r5}\rho k\left(\vec{a}\vec{W}^T + \vec{W}\vec{a}^T\right)$$
(3.48)

Três novos termos apareceram nesta formulação: \vec{a} , o tensor de anisotropia; $\vec{S_d}$, a taxa de deformação e \vec{W} , a vorticidade. Suas definições encontram-se nas Equações 3.49, 3.50 e 3.51, respectivamente.

$$\vec{a} = \frac{\vec{v'} \otimes \vec{v'}}{k} - \frac{2}{3}\delta \tag{3.49}$$

$$\vec{S}_d = \frac{1}{2} \left[\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T \right] \tag{3.50}$$

$$\vec{W} = \frac{1}{2} \left[\nabla \vec{v} - (\nabla \vec{v})^T \right] \tag{3.51}$$

Por fim, tendo em vista que o termo de dissipação da turbulência ainda está contido na formulação, este também deve receber sua equação de transporte que é mostrada em notação indicial na Equação 3.52.

$$\frac{\partial (\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_k \varepsilon)}{\partial x_k} = \frac{\varepsilon}{k} \left(c_{\varepsilon 1} \Psi - c_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + \frac{\mu_{turb}}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} \right]$$
(3.52)

Existem algumas variações de abordagens diferenciais RSM em relação às constantes empregadas. Foi utilizado neste trabalho o modelo Speziale-Sarkar-Gatski ou simplesmente SSG, cujos detalhes foram publicados em SPEZIALE et al. (1991). Este prevê uma relação quadrática para ϕ . Mais uma vez, apesar de isto representar uma complicação adicional, confere robustez ao modelo, sendo especialmente indicado para escoamentos vorticiais (CFX-11 User's Guide, 2006). As constantes deste modelo são dadas a seguir.

$$c_s = 0, 22; C_{\varepsilon 1} = 1, 45; C_{\varepsilon 2} = 1, 83; C_{s1} = 1, 7; C_{s2} = -1, 05; \sigma_{\varepsilon} = 1, 3$$
 (3.53)
 $C_{r1} = 0, 9; C_{r2} = 0, 8; C_{r3} = 0, 65; C_{r4} = 0, 625; C_{r5} = 0, 2$

3.3.4 Modelo 'Large Eddy Simulation' (LES)

A principal hipótese por trás das simulações LES é a de que pode-se classificar e caracterizar os turbilhões de acordo com a sua escala de comprimento. Os maiores são então definidos principalmente pela geometria e condições de contorno, sendo responsáveis pela maior parte dos tensores de Reynolds e por isso são calculados diretamente; já os turbilhões menores são mais fracos e contribuem menos para os tensores, além de serem mais isotrópicos e possuírem características mais universais, deste modo sendo mais propícios a serem modelados.

Esta modelagem requer uma malha numérica relativamente refinada, o que se traduz em maior custo computacional. Esta é uma das grandes restrições de uso, já que as regiões próximas às paredes de um domínio estão repletas de pequenos turbilhões, tornando o esforço proibitivo quando se tem altos números de Reynolds. Deste modo, ainda é difícil encontrar na literatura aplicações rigorosas de LES para geometrias complexas. O presente estudo restringe-se a análises pontuais, apenas para comparar a sua aplicabilidade frente a outros modelos de turbulência.

O primeiro passo para a aplicação do LES é a filtragem da equação de conservação de quantidade de movimento de modo a separar as duas escalas, a resolvida e a não-resolvida (modelada). Partindo então da Equação 3.54:

$$\frac{\partial (\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_i v_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2}$$
(3.54)

A hipótese é a de que qualquer variável χ pode ser decomposta em uma parte de grande escala, χ e outra de pequena escala, χ'' :

$$\chi = \chi + \chi'' \tag{3.55}$$

Ainda, $\underline{\chi}$ é obtida através de uma média volumétrica contendo uma função Gaussiana (G) como filtro.

$$\underline{\chi}(x_i, t) = \int_{Y_0} G(x_i - x_i'') f(x_i', t) dx_i'$$
(3.56)

A aplicação destes princípios à equação de conservação de quantidade de movimento, juntamente com a média volumétrica e a desconsideração de flutuações da densidade leva à Equação 3.57.

$$\frac{\partial \left(\rho \underline{v_i}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho \underline{v_i} \underline{v_j}\right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \underline{P}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 \underline{v_i}}{\partial x_j^2} \tag{3.57}$$

Analogamente aos tensores de Reynolds, Desenvolve-se o termo não-linear $v_i v_j$:

$$\underline{v_i v_j} = \left[\underline{v_i} + (v_i')''\right] \left[\underline{v_j} + (v_j')''\right]$$
(3.58)

$$\underline{v_i v_j} = \underline{\underline{v_i} \underline{v_j}} + \underline{\underline{v_i} \left(v_j'\right)''} + \underline{\underline{v_j} \left(v_i'\right)''} + \underline{\left(v_i'\right)'' \left(v_j'\right)''}$$
(3.59)

Numa média temporal o segundo e terceiro termos da Equação 3.59 desaparecem (o que não é verdade para uma média no volume). Introduz-se então os tensores de escala de sub-malha (sub-grid scales, SGS) τ_{ij} :

$$\tau_{ij} = (v_i')'' \left(v_j'\right)'' - \underline{v_i}\underline{v_j} \tag{3.60}$$

Reescrevendo então a Equação 3.57 com a adição deste termo, chega-se à seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho \underline{v_i}}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho \underline{v_i} \underline{v_j}\right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \underline{P}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 \underline{v_i}}{\partial x_i^2} - \frac{\partial \left(\rho \tau_{ij}\right)}{\partial x_j}$$
(3.61)

Este tensor é então modelado, sendo que o modelo aqui utilizado é o de Smagorinski. Este propõe que os tensores SGS são proporcionais ao módulo do tensor taxa de deformação das variáveis filtradas de grande escala.

$$\tau_{ij} - \frac{\tau_{kk}}{3} = -v_{SGS} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \tag{3.62}$$

Onde v_{SGS} pode ser entendida como uma viscosidade específica do modelo, definida pela Equação 3.63. Isto equivale a dizer que os tensores têm comportamento similar ao de um processo de difusão por gradiente de concentração.

$$v_{SGS} = (C_{sma}I)^2 \left| \frac{\partial \underline{v_i}}{\partial x_i} + \frac{\partial \underline{v_j}}{\partial x_i} \right|$$
 (3.63)

Onde l é o comprimento da malha e C_{sma} é a constante de Smagorinsky. Recomenda-se seu uso entre 0,065 e 0,25. O valor utilizado neste trabalho, e o mais comumente aplicado, é de 0,1.

3.4 Método Numérico: Fluidodinâmica Computacional

Na seção anterior foram apresentados conjuntos de equações diferenciais parciais que, juntamente com sua base teórica, formam a modelagem matemática deste estudo. No entanto, elas não possuem solução analítica conhecida, de modo que é necessária a utilização de um método numérico. Sua aplicação, porém, não é trivial, principalmente em geometrias complexas. Por isso, fez-se uso neste trabalho de códigos computacionais disponíveis comercialmente, o *CFX* e o *ICEM CFD*, ambos distribuídos pela *ANSYS Inc.* e em sua versão 11. Nesta seção, são descritos estes *softwares*, dando maior ênfase à etapa de solução das equações, onde se comenta a respeito do método numérico dos *volumes finitos*.

Como já mencionado, as técnicas de CFD são ferramentas computacionais para simular o comportamento de sistemas envolvendo processos físicos e químicos diversos como transferência de massa, calor e quantidade de movimento. Para tanto, resolvem-se as equações próprias de cada modelo em uma determinada região de interesse onde condições de contorno são conhecidas. Basicamente, pode-se dividir o processo todo em quatro etapas:

• Criação de Geometria e Malha: nesta etapa é criada a geometria do domínio considerado, seja ele bidimensional ou tridimensional, através de ferramentas paramétricas

CAD. Nesta geometria é construída então a malha numérica, que corresponde à divisão do domínio em volumes de controle, nos quais é obtida a solução das equações propostas pelo modelo;

- Pré-Processamento: nesta etapa são escolhidos os modelos, as condições de contorno e os parâmetros para se obter a solução numérica;
- **Solução Numérica**: nesta etapa ocorre a solução numérica em si, sendo um processo não interativo, salvo pela possibilidade de parar as simulações para alterar alguns parâmetros simples e acompanhar pontos de monitoramento pré-definidos;
- **Pós-Processamento**: etapa onde os resultados são analisados através da criação de gráficos cartesianos, campos de variáveis, campos vetoriais, etc.

Passa-se agora a uma descrição mais específica de cada etapa.

3.4.1 Criação de Geometria e Malha

O pacote específico utilizado para esta etapa foi o *ICEM CFD*. Dentre diversos disponíveis, ele se destaca pela sua versatilidade e relativa facilidade de uso. Nele, seguem-se basicamente as seguintes subetapas:

- Definição da geometria de interesse;
- Criação de regiões de escoamento fluido, regiões contínuas e os nomes das superfícies de contorno;
- Ajuste das propriedades da malha.

É interessante descrever estas etapas uma vez que a criação de geometrias e malhas complexas é algo que requer certa experiência.

Criação de Geometria

A geometria pode ser importada de diversos pacotes CADs usando seu formato nativo, ou ainda pode ser criada no próprio *ICEM CFD*. Este conta com diversas opções, que podem ser resumidas em cinco categorias, com suas respectivas possibilidades:

- Criação de pontos: seleção direta de posição na tela, através de coordenadas cartesianas, no centro de três pontos, etc.;
- Criação de curvas: através de pontos, através da interseção de superfícies, etc.;
- Criação de superfícies: através de curvas limitantes, superfícies de revolução, eixo definido, etc.;
- Criação de sólidos: por topologia ou por ponto material;
- Edição de geometrias: conjunto de operações úteis na criação tais como ocultar, revelar, copiar, rotacionar, transladar, espelhar ou excluir elementos previamente criados. É possível ainda agrupar os elementos em 'famílias', o que serve para facilitar o manuseio simultâneo de múltiplas entidades. Além disso, cada superfície de contorno na etapa de pré-processamento deve ter sido classificada como uma família própria aqui.

Cada opção requer do usuário a entrada de parâmetros específicos, conferindo ao programa a robustez e a versatilidade necessária para aplicação em CFD. O arquivo de geometria é por fim criado em formato próprio, chamado de arquivo *tetin*.

Geração de Malha Numérica

Inicialmente, pode-se classificar malhas numéricas em duas categorias: organizadas através de um sistema de coordenadas (malha *estruturada*) ou não (malha *não-estruturada*).

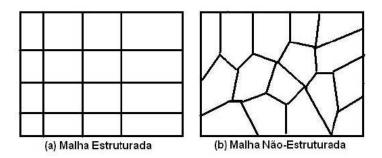


Figura 3.4: Diferentes tipos de malhas numéricas

Percebe-se que na malha estruturada cada volume de controle possui o mesmo número de volumes vizinhos (com exceção daqueles localizados na parede), o que não necessariamente

acontece para o caso não-estruturado. Esta ordenação torna a solução numérica do primeiro caso mais simples. No entanto, é intuitivo notar que a malha não-estruturada apresenta maior adaptabilidade e facilidade de refinamento em regiões específicas, um grande trunfo ao se trabalhar com geometrias complexas. Portanto, este foi o tipo utilizado no presente trabalho.

As malhas não-estruturadas podem ser compostas de volumes de controle de diversas formas: tetraédricos, piramidais, prismáticos ou hexaédricos, sendo que o formato escolhido foi este último, devido à sua robustez. Segue portanto a descrição do módulo *HEXA*, gerador destas malhas. Apesar de não haver um procedimento geral que funciona em qualquer geometria, a descrição a seguir tenta utilizar um caso simples para demonstrar algumas técnicas essenciais de criação que estão presentes na vasta maioria dos casos. Obviamente, o melhor procedimento pode envolver técnicas avançadas, cabendo assim à competência e experiência do usuário.

Parte-se da geometria já pronta. O *HEXA* cria então um bloco hexaédrico único, englobando toda a geometria. Este deve então ser 'moldado' através de cortes em suas arestas de acordo com o problema, conforme mostrado na Figura 3.5.

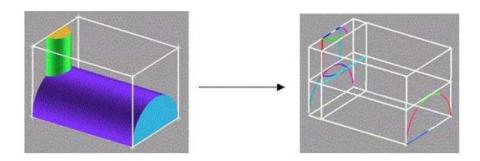


Figura 3.5: Cortes em bloco primordial de uma geometria-exemplo

Um tipo de corte especial útil em diversas situações é o chamado *o-grid*, no qual, uma vez designados os blocos e faces componentes, é feita uma divisão em cinco partes distintas, quatro laterais e uma central, como ilustrado na Figura 3.6.

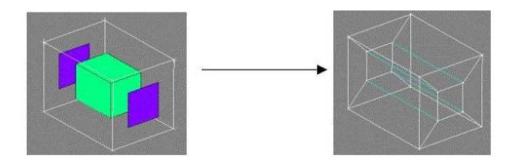


Figura 3.6: Ilustração do corte especial 'o-grid'

A importância do *o-grid* está na qualidade da malha final, principalmente em regiões próximas às paredes de superfícies curvas: nesta região, existe um acúmulo de elementos que este corte especial tende a suavizar. Isto fica claro através da Figura 3.7

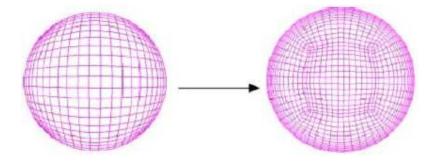


Figura 3.7: efeito do corte especial 'o-grid' na malha numérica

Uma vez tendo as divisões do bloco prontas, pode-se excluir blocos que não são de interesse, e deve-se então projetar as arestas remanescentes a elementos da geometria (pontos, curvas, superfícies) quando possível. As arestas podem então ser reposicionadas manualmente até atingirem a sua localização adequada (Figura 3.8).

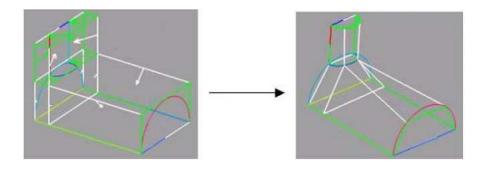


Figura 3.8: Projeção das arestas da malha à geometria

Com os blocos devidamente criados e as arestas projetadas, chega-se à última etapa de criação de geometria e malha.

3.4.2 Refinamento de Malha Numérica

O refinamento consiste em definir a quantidade de elementos (ou nós) ao longo de cada aresta, bem como sua distribuição. É uma etapa importante já que alguns fenômenos só podem ser capturados e alguns modelos só funcionam corretamente se lhes for concedida uma dada concentração de elementos. É possível, com as ferramentas disponíveis, agrupá-los ao longo de regiões mais críticas¹ deixando outras mais esparsas. No entanto a razão de aspecto entre os elementos também é algo com que se preocupar, e portanto no final deve-se estabelecer um compromisso entre tamanho e qualidade da malha.

Apesar de não fazer parte do escopo deste trabalho detalhar as etapas de construção de uma malha numérica para ciclones, a Figura 3.9 mostra alguns passos intermediários desta construção, e aqueles que possuem algum conhecimento no *software* utilizado poderão reconhecer as técnicas empregadas.

¹Estas 'zonas críticas' são dependentes do tipo de problema analisado. Ao estudar a formação da camada limite em uma placa plana, por exemplo, esta zona seria aquela mais próxima à placa.

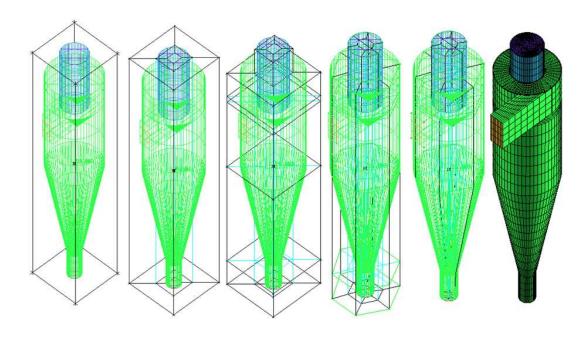


Figura 3.9: Ilustração simplificada do processo típico de geração de malhas para ciclones

3.4.3 Pré-Processamento

O Pré-Processamento se dá no *CFX Pre*, programa incluso no código *CFX*. Como primeiro passo, a malha criada na etapa anterior é carregada, com as diferentes partes do domínio já nela delimitadas. São definidos então:

- Fluidos e sólidos existentes no domínio, bem como suas propriedades;
- Modelos matemáticos a serem empregados (simulação estacionária ou transiente, tipo de tratamento multifásico, modelos de turbulência, reações químicas, modelos de troca de calor, etc.);
- Condições de contorno, às quais devem ser atribuídos o tipo (entrada, saída, parede, etc.) e seus respectivos e possíveis parâmetros para que haja o fechamento do problema;
- Parâmetros a serem utilizados na etapa seguinte, de solução numérica, como coeficientes próprios de cada método, passo de tempo, critérios de convergência, etc.;
- Variáveis e funções extras definidas pelo usuário;
- Freqüência dos arquivos de *backup* e de resultados intermediários.

O produto final é um arquivo de definição do problema que contém todas as informações necessárias para que se prossiga com a sua resolução.

3.4.4 Solução Numérica

O arquivo de definição é carregado no programa *CFX Solver Manager*, onde é definido se a solução partirá dos valores contidos na seção de inicialização deste arquivo ou de algum outro arquivo que contenha resultados prévios. Além disso deve ser determinado se o processamento ocorrerá em série ou em paralelo, neste caso tendo que especificar as máquinas a serem utilizadas e o número de processos em cada uma delas. O particionamento é feito de modo automático. Durante a simulação pode-se acompanhar os resíduos de erro e pontos de monitoramento pré-definidos, e ao final de cada corrida um arquivo de resposta é gerado.

Cabe aqui um parênteses para que se explique como é feita a solução das equações propostas na modelagem. Para isto, entra-se no campo do *Método dos Volumes Finitos*. Existem boas referências na literatura para este método. Como consulta inicial recomenda-se FERZIGER e PERIĆ (1996), MALISKA (2004), PATANKAR (1980) e CFX-11 User's Guide (2006), nos quais baseou-se o texto a seguir.

Como visto, tem-se um domínio dividido em vários elementos. A partir daí deve-se discretizar e linearizar as equações de conservação para que elas possam então ser resolvidas. Partindo então desta equação para um escalar passivo genérico χ :

$$\frac{\partial (\rho \chi)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_l \chi)}{\partial x_l} = \frac{\partial}{\partial x_l} \left[\Gamma \left(\frac{\partial \chi}{\partial x_l} \right) \right] + S_{\chi}$$
(3.64)

Integrando a Equação 3.64 para um volume de controle não-deformável e aplicando o teorema da divergência (que prevê a conversão de integrais de volume em integrais de superfície) obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{d}{dt} \int_{V} \rho \chi dV + \int_{s} \rho v_{l} \chi dn_{l} = \int_{s} \Gamma \left(\frac{\partial \chi}{\partial x_{l}} \right) dn_{l} + \int_{V} S_{\chi} dV$$
(3.65)

É esta equação que passará em seguida por uma discretização e uma linearização, fornecendo assim um conjunto linear de equações algébricas. Para cada elemento assumem-se pontos de integração, divindo-o em setores. Termos referentes a fluxos superficiais são

discretizados pela aproximação destes nos pontos de integração, esta sendo feita em seguida considerando todos os pontos. Analogamente, termos volumétricos são discretizados aproximando valores em cada setor e depois integrando-os ao longo de todos os setores.

Vários esquemas existem para a discretização, podendo ser classificados como de primeira ou segunda ordem². Em geral, termos de alta ordem são mais precisos, porém menos robustos.

$$\frac{V}{\Delta t} \left(\frac{3}{2} \rho \chi - 2\rho^0 \chi^0 + \frac{1}{2} \rho^{00} \chi^{00} \right) + \sum_{p,i} \dot{m}_{p,i} \chi_{p,i} = \sum_{p,i} \left(\Gamma \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \Delta n_j \right) \Big|_{p,i} + \overline{S}_{\chi} V \tag{3.66}$$

Aqui o superescrito 0 se refere a um instante anterior. Para garantir o acoplamento entre a pressão e a velocidade, uma equação especial é aplicada ao cálculo dos fluxos mássicos $(\dot{m}_{p,i})$. O software utilizado aplica um método de RHIE e CHOW (1983) modificado, que não é discutido aqui. Passa-se agora a uma breve explicação da discretização de cada termo.

Para o termo transiente é utilizado o esquema Second Order Backward Euler, que leva em conta dois instantes anteriores ao atual. É portanto um método de segunda ordem, que consegue prever gradientes temporais fortes.

Para o termo difusivo, a derivada calculada nos pontos de integração é obtida através de funções de forma específicas para cada tipo de elemento. Quando o cálculo é feito exatamente no ponto de integração ela é chamada de uma interpolação tri-linear verdadeira (método utilizado). Do contrário é chamada de interpolação linear-linear. Esta é mais robusta, porém menos precisa.

Finalmente, para o termo advectivo, a variável $\chi_{p.i.}$ é calculada levando em conta uma aproximação do nó à montante através da Equação 3.67.

$$\chi_{p.i.} = \chi_{montante} + \alpha \nabla \chi \cdot \Delta \vec{q} \tag{3.67}$$

Onde \vec{q} é o vetor de direção entre o nó à montante e o nó atual. Já α é um coeficiente cujo valor, juntamente com o modo de tratamento de $\nabla \chi$, resultará em esquemas diferentes, a ver:

• Esquema 'upwind' de primeira ordem: α é tido como zero, o que proporciona um esquema robusto mas não muito preciso, principalmente para casos de alto gradiente;

²A 'ordem' do método é determinada pelo maior expoente na série truncada de expansão utilizada na discretização, por exemplo a série de Taylor

- Esquema de correção numérica da advecção: α é um valor entre zero e a unidade, e $\nabla \chi$ é calculado como a média dos gradientes dos nós adjacentes. Este método reduz o problema de altos gradientes, porém introduz oscilações não-físicas à solução;
- Esquema de diferenças centrais: α toma o valor da unidade e $\nabla \chi$ é calculado como o gradiente do elemento local. Possui vantagens e desvantagens semelhantes ao esquema anterior;
- **Esquema de alta resolução**: o valor de α é configurado como o mais próximo à unidade quanto possível (aquele que não introduz oscilações locais), já $\nabla \chi$ é igual ao gradiente tomado no nó à montante. Este esquema garante precisão, apesar de não ser tão robusto quanto o de primeira ordem. É o utilizado neste trabalho.

Uma vez tratada a modelagem inicial e obtido o sistema de equações lineares e algébricas, finalmente passa-se à resolução deste sistema. Para um sistema acoplado de resolução como o utilizado, as equações de massa e quantidade de movimento são resolvidas simultaneamente através de um sistema matricial, dado para cada volume de controle pela Equação 3.68.

$$\sum_{viz} A^{viz} \chi^{viz} = B \tag{3.68}$$

Onde:

$$A^{viz} = \begin{bmatrix} A^{v_x v_x} & A^{v_x v_y} & A^{v_x v_w} & A^{v_x P} \\ A^{v_y v_x} & A^{v_y v_y} & A^{v_y v_w} & A^{v_y P} \\ A^{v_w v_x} & A^{v_w v_y} & A^{v_w v_w} & A^{v_w P} \\ A^{Pv_x} & A^{Pv_y} & A^{Pv_w} & A^{PP} \end{bmatrix}^{viz}$$
(3.69)

$$\chi^{viz} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \\ P \end{bmatrix}^{viz} \tag{3.70}$$

$$B = \begin{bmatrix} B^{v_x} \\ B^{v_y} \\ B^{v_z} \\ B^P \end{bmatrix}$$
(3.71)

Existem vários métodos iterativos para a solução de sistemas lineares, como a eliminação Gaussiana ou a fatorização LU. O CFX utiliza um método conhecido como fatorização multigrid LU incompleta acelerada (Multigrid accelerated Incomplete Lower Upper factorization, ou MG ILU). Este método consiste basicamente em, partindo da Equação 3.68, propor uma solução para o instante seguinte (χ^1) melhorado por uma correção χ^{corr} da seguinte maneira:

$$\chi^1 = \chi + \chi^{corr} \tag{3.72}$$

Sendo que esta correção é dada por:

$$A^{corr}\chi^{corr} = B - A\chi \tag{3.73}$$

O processo iterativo faz com que gradualmente o termo de correção tenda a zero, chegando então a uma solução.

A Figura 3.10 esquematiza o algoritmo de solução usado no processo como um todo, passando por todas as etapas descritas. Já a Figura 3.11 isola apenas aquelas etapas utilizadas no presente trabalho.

Ao final de todo este processo, o *CFX Solver* cria um arquivo de resposta a ser utilizado na próxima etapa, o pós-processamento.

3.4.5 Pós-Processamento

Como mencionado, a solução do problema gera, dependendo de como foi feita a configuração na etapa de pré-processamento, um ou mais arquivos de resposta. Estes contêm informação sobre uma ampla gama de variáveis para cada um dos elementos do domínio. É um relatório completo, praticamente impossível de se obter através de experimento, sendo assim um dos grandes atrativos das técnicas de CFD. Melhor ainda são as possibilidades oferecidas para a apresentação destes resultados: tem-se disponível a criação desde os tradicionais gráficos cartesianos e tabelas até opções muitas vezes mais ilustrativas como campos vetoriais e de variáveis, viáveis em qualquer posição imaginável do domínio. Além disso é possível criar animações, facilitando e enriquecendo o entendimento dos fenômenos estudados. Alguns destes tipos de resultados podem ser observados nos capítulos seguintes.

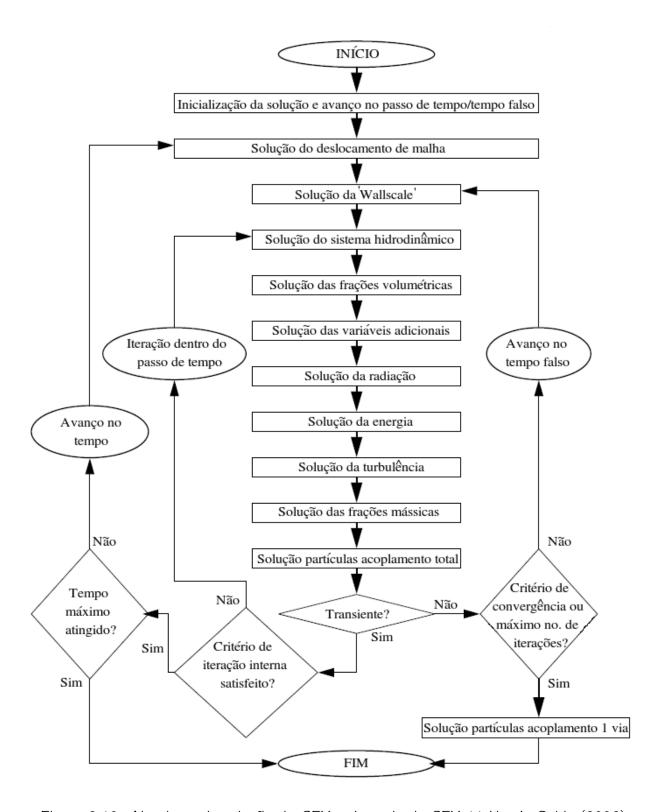


Figura 3.10: Algoritmo de solução do CFX, adaptado de CFX-11 User's Guide (2006)

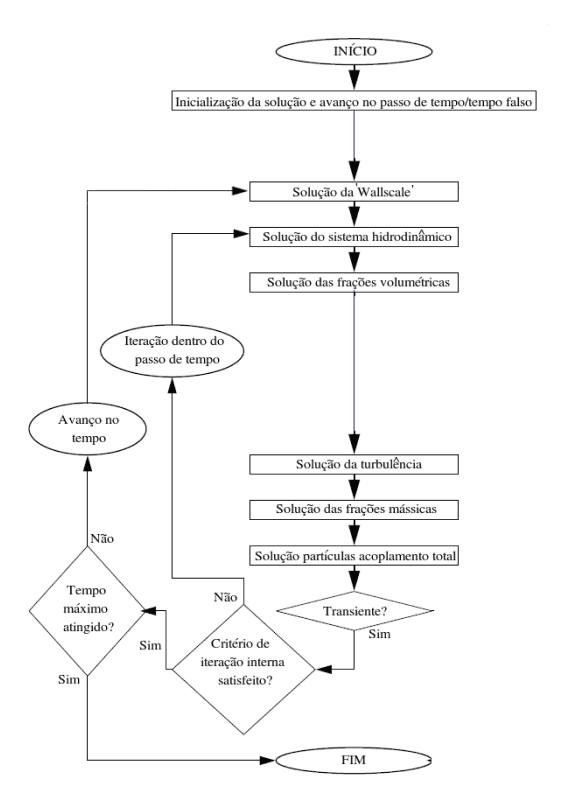


Figura 3.11: Algoritmo de solução do CFX utilizado no presente trabalho, adaptado de CFX-11 User's Guide (2006)

Capítulo 4

Simulações Monofásicas

Como primeira etapa, foi estudado um caso de escoamento gasoso em um ciclone. Esta ordem foi escolhida uma vez que a simulação monofásica é fisica e computacionalmente mais simples, de modo que possibilita o estudo da variação de parâmetros diversos da simulação. Escolhidos para a análise foram o modelo de turbulência e a variação de algumas condições de contorno.

Neste capítulo são descritos o caso e as simulações envolvidas. Os resultados são exibidos e comentados, com as conclusões parciais também apresentadas.

4.1 Descrição do Caso

O caso escolhido é de um ciclone com dados experimentais e estudos previamente reportados em SLACK et al. (2000), BOYSAN et al. (1983) e AYERS et al. (1985). Os dados e condições especificamente usados para este estudo constam na primeira referência. Este artigo fornece dados abundantes de velocidades axial e tangencial, possibilitando um estudo minucioso.

4.1.1 Experimento

Um ciclone com configuração geométrica Stairmand de alta eficiência, de diâmetro d=0,205m e volume $V=0,0203m^3$ foi alimentado com ar $\left(\rho=1,225\frac{kg}{m^3};\mu=1,7894\cdot10^{-5}\frac{kg}{ms}\right)$ a uma taxa de $0,08\frac{m^3}{s}$, o que corresponde a uma velocidade de entrada de $19\frac{m}{s}$. O ciclone é ligado a uma caixa coletora (dust hopper) de dimensões não especificadas.

Foram realizadas medidas dos perfis radiais de velocidade axial e tangencial através da técnica de anemometria Laser-Doppler (*Laser Doppler Anemometry*, LDA), em oito alturas diferentes, consideradas a partir do final da seção cônica do equipamento. A posição detalhada destas tomadas, bem como as cotas das demais dimensões do ciclone (em função do diâmetro) encontram-se na Figura 4.1.

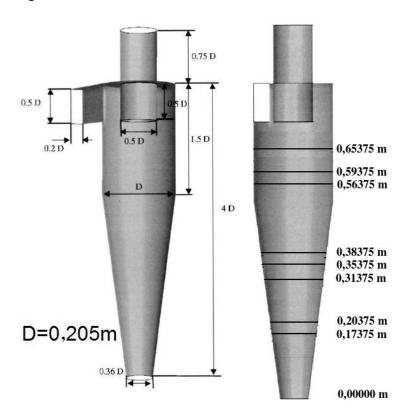


Figura 4.1: Cotas do ciclone tipo Stairmand e posições de tomadas de dados experimentais, SLACK et al. (2000)

4.1.2 Simulação

As geometrias e malhas numéricas foram construídas utilizando o *software* ICEM CFD. São analisadas quatro condições de contorno diferentes para a saída inferior do ciclone, distribuídas em três geometrias distintas, o que está representado na Figura 4.2.

• Saída direta: a geometria termina após o final da seção cônica, e ali é aplicada uma condição de saída com pressão atmosférica.

- Saída com 'dipleg': após a seção cônica existe uma extensão na forma de um longo duto (também chamado por standpipe). Ao final do mesmo, há uma condição de saída com pressão atmosférica.
- Parede direta: semelhante ao primeiro caso, porém com uma condição de parede imposta ao invés de uma saída.
- Caixa coletora: uma caixa coletora (ou *dust hopper*) é adicionada ao final da geometria com condições de parede a ela impostas.

O caso real corresponde à situação 'caixa coletora'. Para esta caixa foi arbitrado um diâmetro igual ao do ciclone (d) e uma altura de três quartos do diâmetro (0,75d). O comprimento do *dipleq* utilizado foi de três vezes o diâmetro (3d).

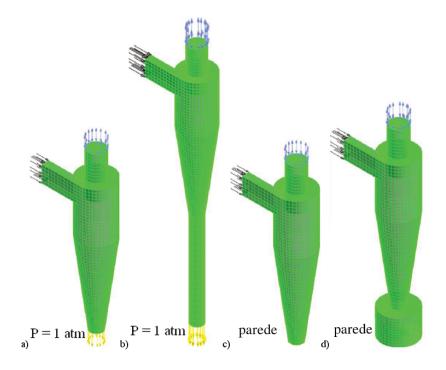


Figura 4.2: Geometrias e condições de contorno para os casos do ciclone monofásico: a)'saída direta' b) 'saída com dipleg' c) 'parede direta' d) 'caixa coletora'

Primeiramente foi feito um teste de malha, utilizando a geometria com a caixa coletora. Foram utilizados três tamanhos, 40.000, 70.000 e 250.000 elementos, tomando como tamanho base os 40.000 elementos propostos por SLACK et al. (2000). Condições básicas como velocidade de entrada de $19\frac{s}{s}$, saída com pressão atmosférica, não-deslizamento nas paredes e

o modelo SSG RSM foram impostas. Como pode ser visto pela Figura 4.3, a partir de 70.000 elementos os resultados para a queda de pressão¹ passam a ser coincidentes. Deste modo, a malha de 70.000 elementos (Figura 4.4) foi julgada como suficiente e escolhida como base para as demais simulações.

A partir dela foram construídas malhas para os demais casos. A caixa coletora representava 9.000 elementos, e o *dipleg* acabou somando 16.000 elementos.

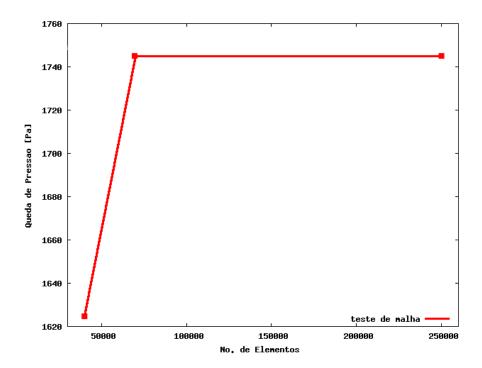


Figura 4.3: Teste de malha para o ciclone estudado no caso monofásico

4.1.3 Condições de Contorno

Enquanto a maioria das condições de contorno foram comuns para todos os casos, uma delas, a saída inferior, teve variação. As Tabelas 4.1 a 4.3 listam estas informações.

Todas as simulações foram consideradas isotérmicas, mantidas a 298K e partiram de uma condição inicial de fluido quase estático (componentes de velocidade definidas como $0,01\frac{m}{s}$ cada). O tempo total simulado (5s) foi considerado diversas vezes o tempo de residência (0,25s), para garantir a estabilização das variáveis.

¹A queda de pressão é obtida através da média na área de entrada e de saída por integração numérica.

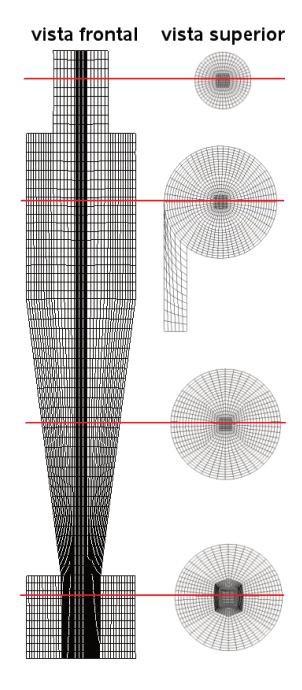


Figura 4.4: Detalhes da malha de 70.000 elementos utilizada para as simulações monofásicas

Tabela 4.1: Condições de contorno da simulação monofásica $19\frac{m}{s}$ entrada velocidade prescrita paredes não-deslizamento saída topo abertura pressão prescrita 1atm saída fundo saída direta saída pressão prescrita 1atm saída com 'dipleg' saída pressão prescrita 1atm parede direta não-deslizamento caixa coletora não-deslizamento

Tabela 4.2: Propriedades físicas do fluido da simulação monofásica

descrição	ar
massa específica	1, $225 \frac{kg}{m^3}$
viscosidade dinâmica	1, $7894.10^{-5} \frac{kg}{ms}$
temperatura	298 K

Tabela 4.3: Condições numéricas da simulação monofásica

passo de tempo	ajuste manual entre 10^{-4} a $5 \cdot 10^{-4}$ s
máximo de <i>loops</i> por iteração	5
critério de convergência	RMS 10 ⁻⁴
tempo total simulado	5 <i>s</i>
tempo de residência	0, 25 <i>s</i>

Com todas estas especificações, restou ainda definir o modelo de turbulência que seria utilizado. Para tanto, foram efetuados testes com quatro diferentes formulações.

4.2 Resultados - Verificação dos Modelos de Turbulência

As quatro formulações testadas foram k-epsilon, RNG k-epsilon, SSG-RSM e LES. Elas serão comparadas aos pares. Os resultados são médias aritméticas dos cinco segundos simulados, e todos nesta seção correspondem à condição de contorno com a caixa coletora, uma vez que esta corresponde à condição real de operação.

4.2.1 k-epsilon e RNG k-epsilon

Os modelos k-epsilon e RNG k-epsilon mostraram-se incapazes de representar o escoamento de gás dentro do ciclone. Isto pode ser notado pelos campos de velocidade em um plano tangencial no centro do ciclone apresentado pelas Figuras 4.7 e 4.8. Apesar de ter-se o gradiente radial de pressão próximo às zonas de entrada e a velocidade tangencial acusar que há um movimento de rotação, ele simplesmente não consegue se sustentar ao longo do domínio devido à inadequação do modelo em prever esta vorticidade.

Tal deficiência se torna mais evidente na comparação com os dados experimentais (Figuras 4.5 e 4.6): o desvio em relação aos dados experimentais é gritante não apenas quantitativamente como também qualitativamente.

No perfil de velocidade axial, por exemplo, não se observa um vale central de velocidade como no experimento, apesar de haver a existência de fluido descendo pelas paredes. Quando analisa-se a região próxima à caixa coletora, esta situação vai ficando mais crítica e passa de uma parábola com um pico para uma de três picos, contrariando completamente o que se espera da prática.

As velocidades tangenciais também mostram um desvio considerável dos dados experimentais em todos os pontos. Mais do que isso, percebe-se que o perfil está mais para aquele da rotação de um corpo sólido (mais achatado na região do pico) do que o esperado para um vórtice de Rankine.

Vale notar ainda que não houve diferença significativa entre o modelo k-epsilon tradicional

e o que considera a renormalização dos grupos. Todas estas considerações vão ao encontro daquelas feitas por diversos estudiosos citados na revisão bibliográfica: estes modelos isotrópicos, amplamente utilizáveis em outros casos diversos, não são capazes de representar adequadamente o escoamento vorticial confinado observado em ciclones.

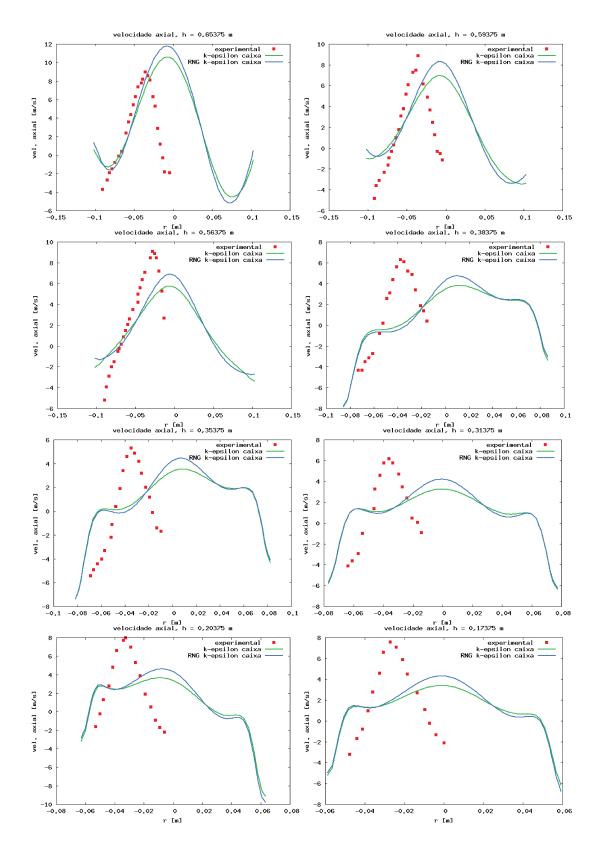


Figura 4.5: Comparação da velocidade axial experimental e simulada para os casos k-epsilon e RNG k-epsilon

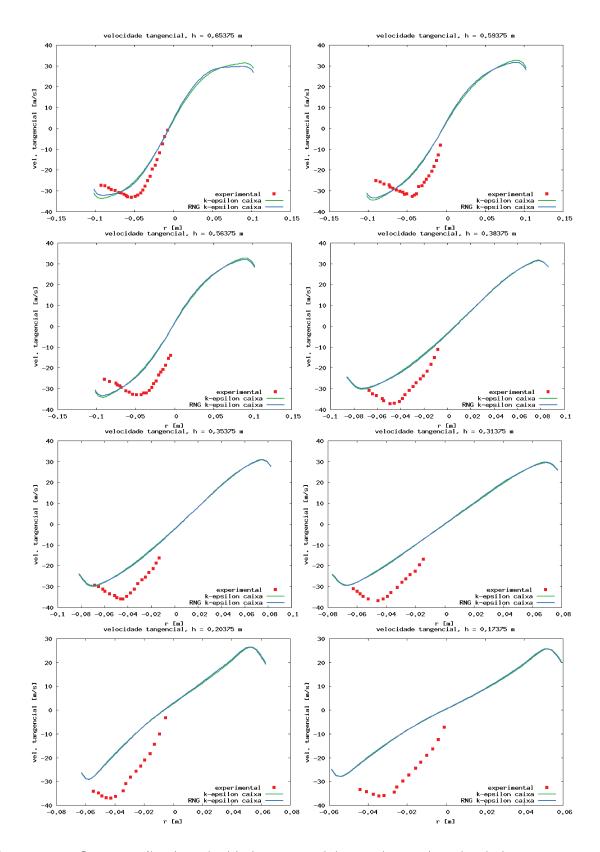


Figura 4.6: Comparação da velocidade tangencial experimental e simulada para os casos k-epsilon e RNG k-epsilon

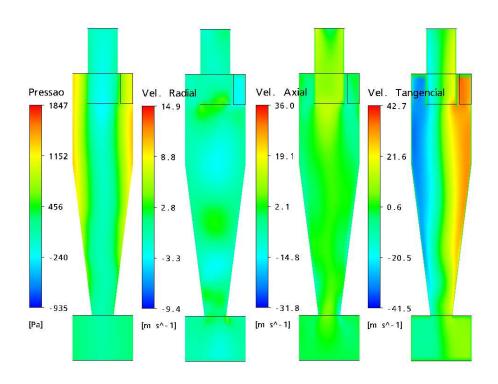


Figura 4.7: Campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o modelo k-epsilon

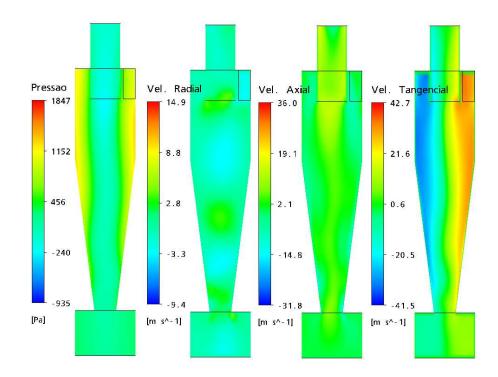


Figura 4.8: Campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o modelo RNG k-epsilon

4.2.2 SSG-RSM e LES

Assim como os resultados apresentados para os modelos k-epsilon e RNG k-epsilon, a comparação entre SSG-RSM e LES também leva em conta a geometria com caixa coletora e média aritmética temporal dos resultados. Apesar de não terem sido feitos gráficos que comparam diretamente as quatro abordagens, a análise das Figuras 4.11 a 4.10 não deixa nenhuma dúvida do melhor desempenho destes dois últimos modelos de turbulência. Resta, portanto, compará-los entre si.

É importante ressaltar que o modelo LES é tido como altamente sensível ao refino de malha. Deste modo, a análise aqui realizada não serve para qualificar ou desqualificar esta abordagem de uma maneira geral, apenas serve para se obter um indicativo do comportamento da simulação LES para uma malha não refinada. Caso contrário, um estudo dedicado e exclusivo ao tema se faria necessário.

A análise dos perfis de escoamento nas Figuras 4.11 e 4.12 já demonstram a superioridade destes modelos em relação ao k-epsilon e RNG k-epsilon para o tipo de aplicação estudada: os perfis mostram a zona central de baixa pressão e o escoamento rotatório (caracterizado pelas velocidades tangenciais positivas e negativas se distribuindo ao longo de todo o corpo do equipamento). Tem-se também o escoamento descendente pelas paredes e ascendente pelo centro para a velocidade axial. A maior diferença que se vê nos perfis é a predição de uma zona de recirculação adicional na caixa coletora para o LES, expressa na velocidade radial. Os gráficos cartesianos salientam mais algumas características importantes.

Da comparação com os dados experimentais pode-se observar uma boa concordância das velocidades tangenciais e axiais quantitativamente e qualitativamente. Mas algumas diferenças existem. Primeiro, percebe-se que para os dois modelos de turbulência o desvio em relação aos dados experimentais parece aumentar à medida que se aproxima da parte inferior do equipamento, onde há o estrangulamento pelo cone. A disparidade maior observada, no entanto, é um deslocamento horizontal das curvas em relação aos pontos experimentais, o que pode ser entendido como conseqüência de uma região de alta instabilidade, onde o vórtice interno do ciclone oscila constantemente (o que acarreta em desvios tanto na simulação quanto no experimento).

Porém, nota-se que mesmo nestas regiões existe boa concordância das magnitudes dos picos e vales de velocidade, indicando que, de forma geral, o escoamento dentro do equipamento está bem representado.

A comparação direta entre SSG-RSM e LES, no entanto, apresenta alguns fatos interessantes. Percebe-se, e isto é mais explícito nos perfis de velocidade axial, que para o tamanho de malha considerado o modelo LES apresentou regiões de picos e vales mais distantes dos resultados experimentais do que o modelo dos tensores de Reynolds. Além disso, nas velocidades axiais, seu perfil se mostrou mais achatado, o que o distanciou qualitativamente dos resultados experimentais, onde se observa um pico mais acentuado.

Estas diferenças, apesar de pequenas, são indicativo de que o LES é capaz de prever os fenômenos em estudo, porém se beneficiaria com uma malha mais refinada, com um estudo rigoroso separado sendo necessário, onde poderia muito bem superar o desempenho do SSG-RSM. Nas condições apresentadas, no entanto, sua aplicação não deve ser considerada.

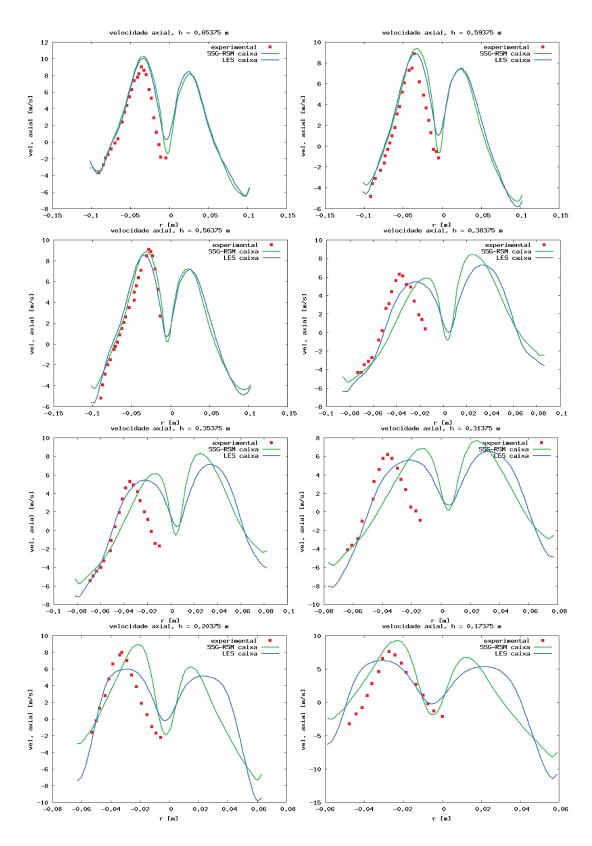


Figura 4.9: Comparação da velocidade axial experimental e simulada para os casos SSG-RSM e LES

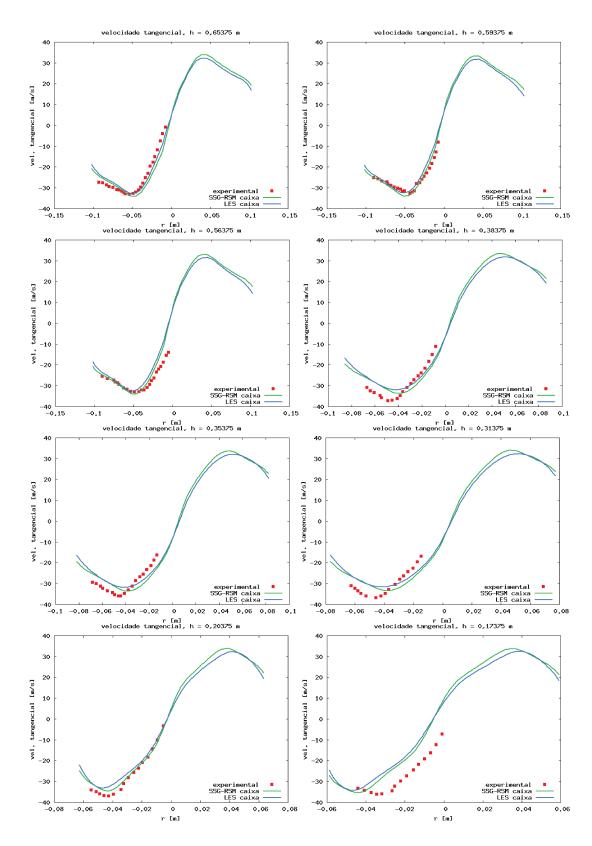


Figura 4.10: Comparação da velocidade tangencial experimental e simulada para os casos SSG-RSM e LES

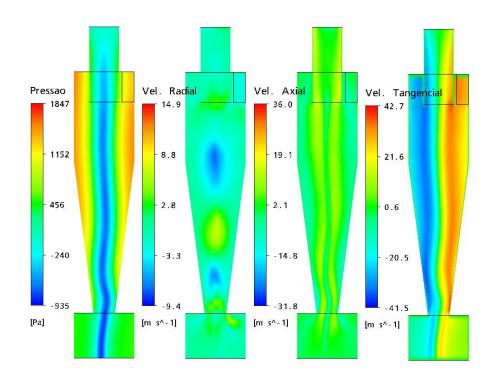


Figura 4.11: Campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o modelo SSG-RSM

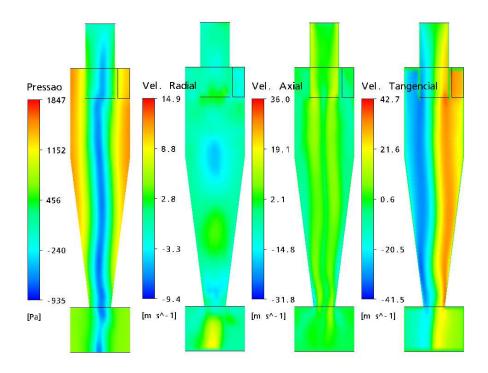


Figura 4.12: Campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o modelo LES

Para certificar-se de que esta dependência da malha do LES nos resultados realmente existe, foi feita uma simulação final com um tamanho de malha arbitrado em aproximadamente um milhão de elementos. O comportamento do escoamento e resultados comparados ao SSG-RSM são os das Figuras 4.15 a 4.14.

Pôde-se observar que estes novos resultados apresentavam características muito mais interessantes que os vistos na malha mais esparsa. Os picos de velocidade axial se aproximaram dos resultados experimentais e, por conseguinte, do SSG-RSM, por vezes até superando este em precisão. A velocidade tangencial também mostrou picos mais acentuados, que em alguns pontos até se mostram superestimados. Isto provou a carência do LES por malhas maiores, o que acaba por dificultar o problema; mas provou também que, se bem planejada, a utilização deste modelo é promissora, podendo levar à boa representação do escoamento ciclônico. Vale salientar que o custo computacional para este caso LES foi cerca de sete vezes maior que o SSG-RSM, fator muitas vezes crítico dependendo da infra-estrutura disponível para a simulação.

No entanto, por o modelo SSG-RSM ter demonstrado resultados condizentes mesmo com a malha mais esparsa, exibindo várias das características esperadas e assim condizendo com sua ampla aplicação pela literatura, foi o escolhido para as análises de variação de condição de contorno, a serem mostradas a seguir, bem como para as aplicações multifásicas.

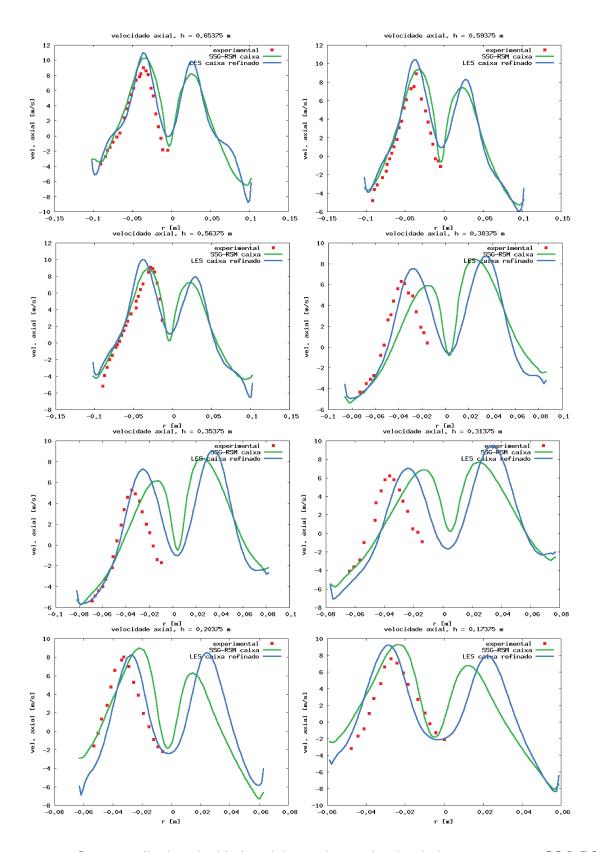


Figura 4.13: Comparação da velocidade axial experimental e simulada para os casos SSG-RSM (em malha esparsa) e LES (em malha de um milhão de elementos)

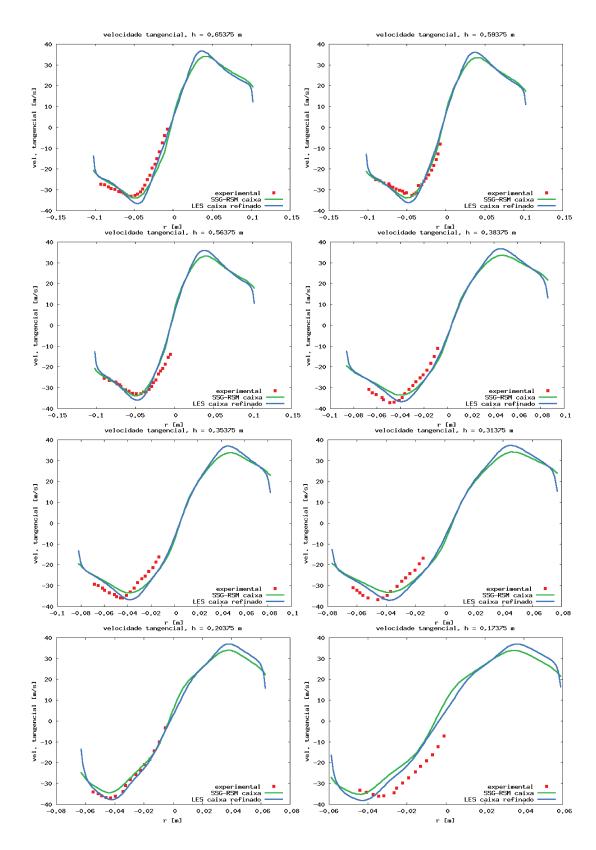


Figura 4.14: Comparação da velocidade tangencial experimental e simulada para os casos SSG-RSM (em malha esparsa) e LES (em malha de um milhão de elementos)

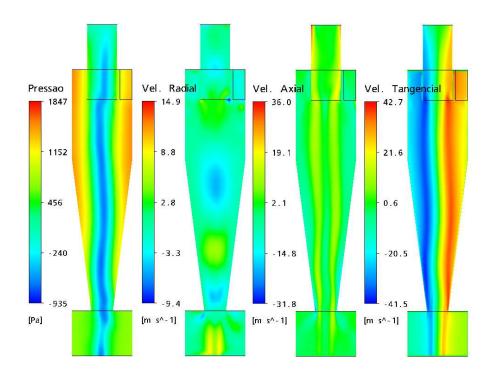


Figura 4.15: Campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o modelo LES em malha de um milhão de elementos

4.3 Resultados - Variação da Condição de Contorno

Esta discussão foi agrupada em duas seções, novamente juntando os casos dois a dois. Primeiro mostra-se o desempenho da "saída direta" e "saída com *dipleg*", que têm em comum o fato de serem casos onde a pressão é prescrita na saída inferior. Já os casos "parede direta" e "caixa coletora", que possuem condição de parede ao invés de uma saída são comparados juntos em secão própria.

Para a análise foi escolhido o modelo de turbulência SSG-RSM, pelo seu desempenho na seção anterior. As diferenças entre cada caso podem ser revistas na Tabela 4.1.

4.3.1 Saída Direta e Saída com 'Dipleg'

A análise dos gráficos cartesianos comparando as simulações com os dados experimentais, mostra que a suposição da pressão prescrita alterou completamente o fluxo dentro do equipamento, com as velocidades axiais da Figura 4.16 formando um perfil de picos triplos que

difere completamente dos resultados experimentais, inclusive em magnitude. No entanto, à medida que se avaliam resultados mais próximos à entrada há uma melhora significativa da comparação, que inclusive retoma o perfil esperado do pico duplo, mas ainda não com a velocidade máxima desejada.

Os resultados com 'dipleg' apresentam picos levemente mais elevados, mostrando que o prolongamento do domínio amenizou um pouco a situação, uma vez que a zona de pressão atmosférica se situa agora a uma distância maior da saída, mas ainda assim a condição de contorno foi o fator predominante e definitivo para o comportamento da simulação: pode-se dizer que o caso aqui criado difere totalmente da realidade experimental.

A velocidade tangencial (Figura 4.17) não chega a apresentar desvios tão gritantes: qualitativamente tem-se o perfil de rotação esperado. Há entretanto deslocamentos horizontais e também verticais em relação à literatura em praticamente todos os resultados.

Tudo isto está refletido nas Figuras 4.18 e 4.19, onde pode-se notar inclusive a formação do perfil de pico triplo da velocidade axial. A Tabela 4.4 permite entender melhor a disparidade entre os casos através do balanço de massa: a saída de material por baixo modifica completamente o problema alterando toda a fluidodinâmica do escoamento.

Tabela 4.4: Balanço de massa no ciclone para as diferentes condições de contorno

caso	entrada [kg/s]	saída superior [kg/s]	saída inferior [kg/s]
saída direta	0,09800	0,05780	0,04020
saída com dipleg	0,09800	0,06435	0,03365
parede direta	0,09800	0,09800	0,00000
caixa coletora	0,09800	0,09800	0,00000

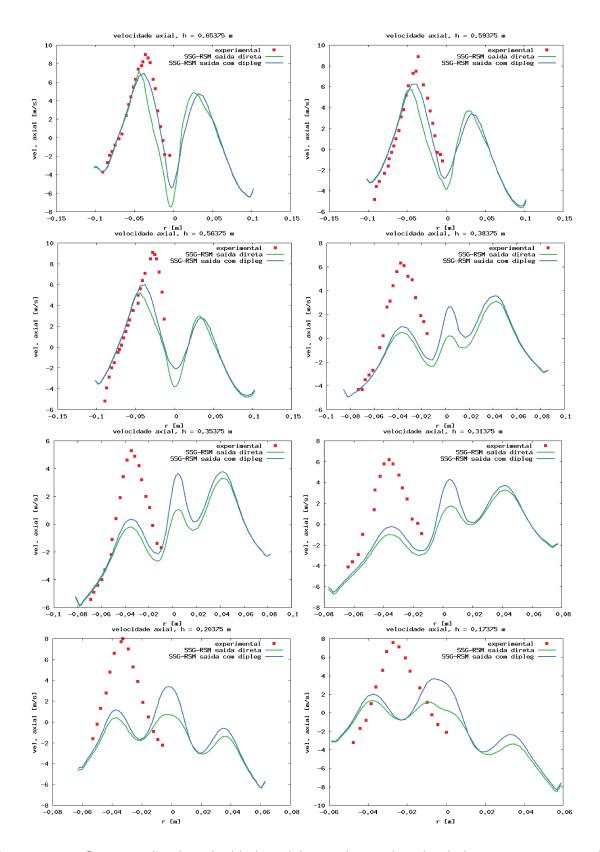


Figura 4.16: Comparação da velocidade axial experimental e simulada para os casos saída direta e saída com dipleg

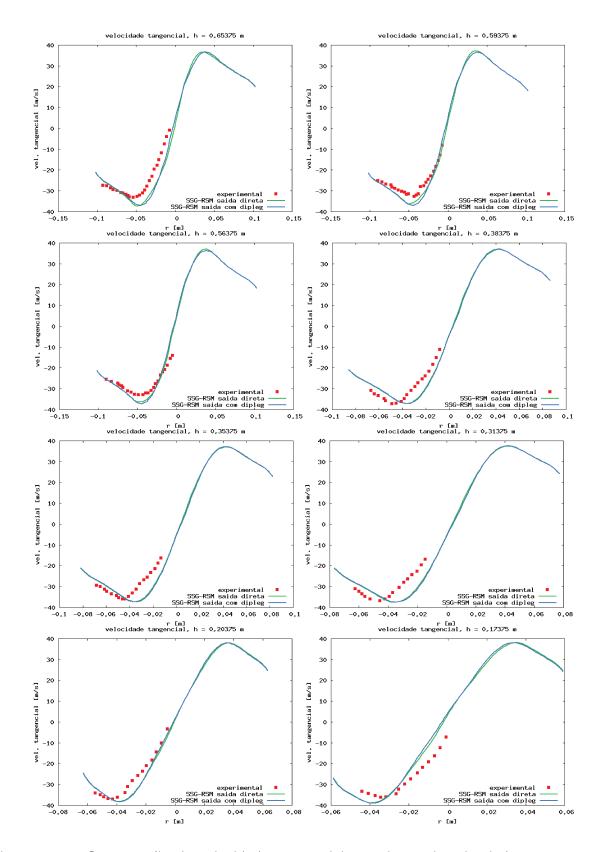


Figura 4.17: Comparação da velocidade tangencial experimental e simulada para os casos saída direta e saída com dipleg

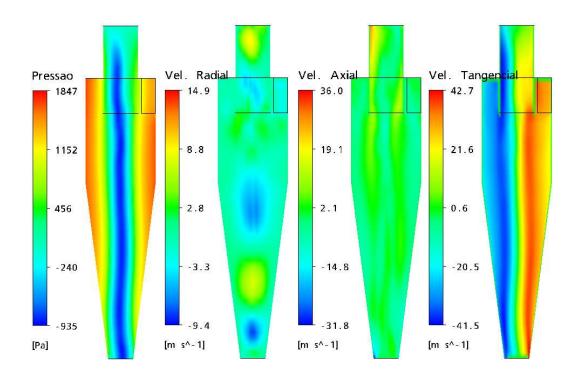


Figura 4.18: Campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o caso saída direta

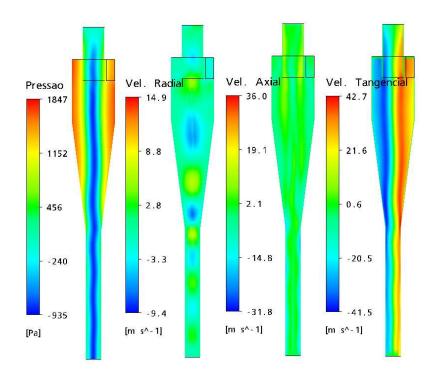


Figura 4.19: Campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o caso saída com dipleg

4.3.2 Parede direta e Caixa coletora

Os gráficos de comparação com dados experimentais das Figuras 4.20 e 4.21 mostram que estas duas configurações foram as que obtiveram os melhores resultados. Enquanto isto era de se esperar para a caixa coletora (tendo em vista que faz parte da configuração real do equipamento), para a 'parede direta' mostra que utilização de uma superfície de parede como substituição ao *dust hopper* é viável, dependendo do rigor da análise a ser feita.

Pelos perfis de velocidade axial percebe-se que, para todas as alturas, a magnitude do pico de velocidade foi melhor aferida pela simulação da caixa coletora. O deslocamento horizontal devido à instabilidade do vórtice, ao contrário do esperado, parece amenizado na situação de parede direta. Considerações semelhantes podem ser feitas a respeito da velocidade tangencial.

Um ponto de interesse é o último gráfico da Figura 4.20, correspondente à altura de 0,17375m, a mais próxima à saída inferior da qual se tem medidas. A curva referente ao caso de parede direta mostra a leve formação de um pico central, provavelmente devido à proximidade da condição de contorno, que para esta situação não tem como prever fenômenos de recirculação.

Por este mesmo motivo vêem-se vales de velocidades axiais muito pronunciados para o caso parede direta, principalmente próximo à entrada, mostrando que a condição de contorno repercute não apenas localmente, mas por todo o domínio, assim como foi nos casos anteriores.

Já as Figuras 4.22 e 4.23 corroboram estas afirmações, mostrando principalmente resultados mais coerentes com a teoria do que os vistos até então.

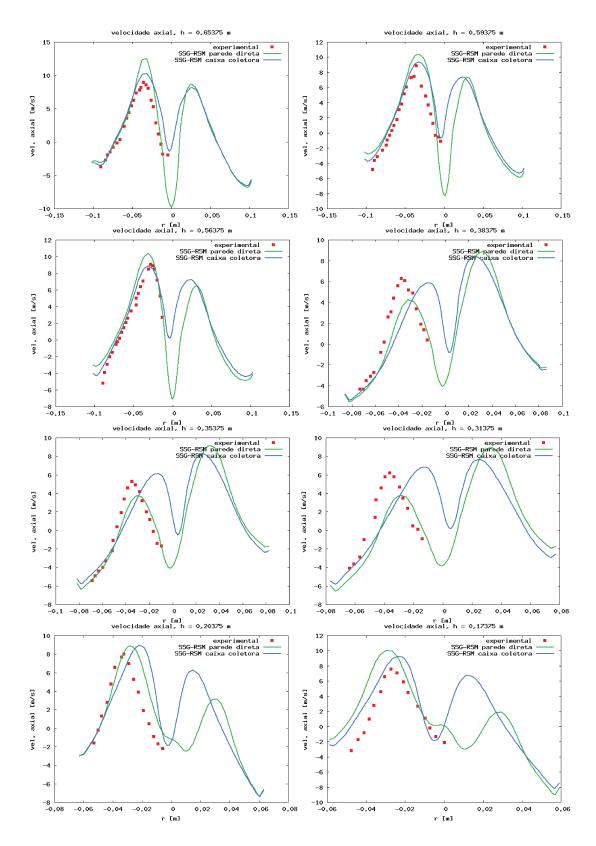


Figura 4.20: Comparação da velocidade axial experimental e simulada para os casos parede direta e caixa coletora

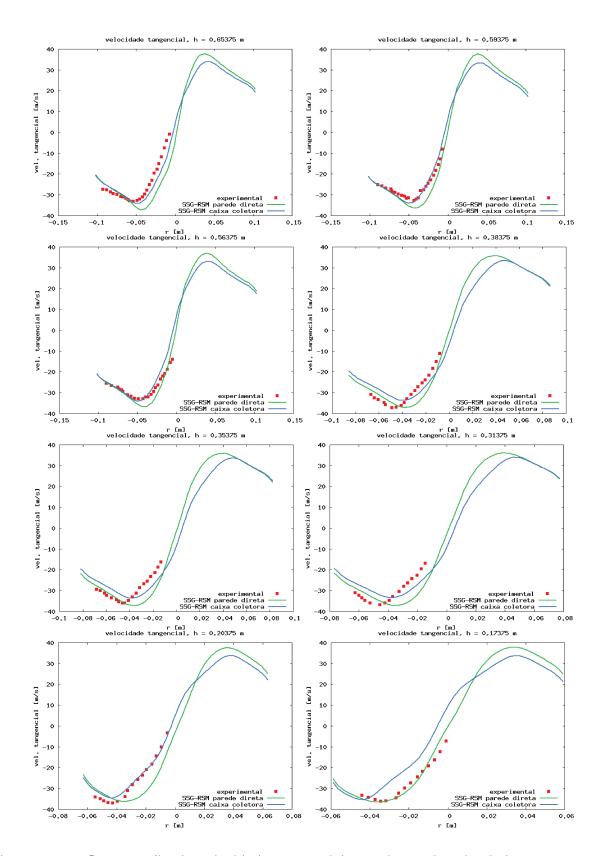


Figura 4.21: Comparação da velocidade tangencial experimental e simulada para os casos parede direta e caixa coletora

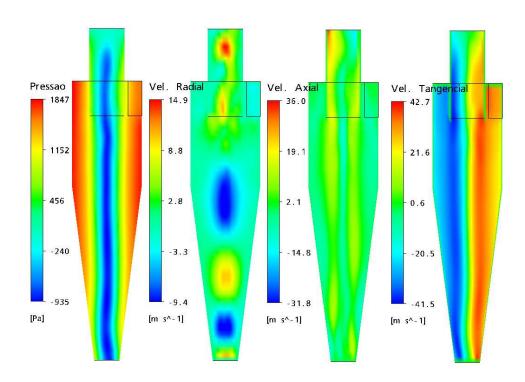


Figura 4.22: campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o caso parede direta

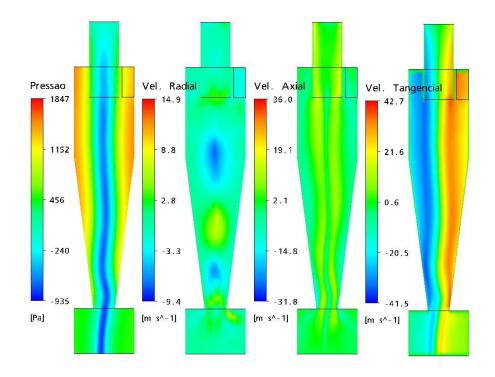


Figura 4.23: Campos de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para o caso caixa coletora

Capítulo 5

Simulações Multifásicas

Uma vez concluída a etapa de estudos do escoamento monofásico, passa-se à inclusão do tratamento da fase sólida no problema. Para isto, o caso escolhido foi o ciclone tangencial Lapple do estudo experimental de ZHAO et al. (2004), posteriormente estudado por ZHAO et al. (2006) e VEGINI (2007).

A proposta de estudo seguida foi aplicar duas diferentes abordagens para a fase particulada e observar sua influência na avaliação da eficiência de separação do sistema quando se deseja obter resultados tanto fracionais quanto globais.

A primeira abordagem consiste no modelo clássico Euleriano-Euleriano (E-E), ou seja, uma fase gasosa naturalmente contínua e *uma* fase particulada (com *um* diâmetro de partícula) também contínuo. Para obter a distribuição da curva fracional de eficiência de coleta nesta metodologia deve-se rodar o caso *n* vezes variando-se o diâmetro. Para o caso deste estudo foram feitas *três* repetições.

A segunda abordagem difere da anterior por prever múltiplas fases particuladas de diferentes diâmetros simultaneamente na mesma simulação $(E-E_n)$. Foram considerados três tamanhos de partícula simultaneamente, e portanto o caso é referido como $E-E_3$. Nota-se que aqui pode-se obter a aproximação da curva fracional de eficiência de coleta em apenas uma simulação, porém cada fase Euleriana adiciona um conjunto de equações diferenciais parciais e de transferência ao sistema, aumentando sua complexidade.

Os resultados são comparados não somente quanto à sua precisão, mas também quanto ao tempo computacional requerido e à escalabilidade do problema, de modo a analisar a viabilidade da metodologia $E-E_n$ frente à *já tradicional* E-E.

5.1 Descrição do Caso

O caso em estudo consiste de um ciclone de entrada tangencial alimentado por sólidos do qual se obteve a eficiência fracional e global de coleta. O detalhamento das condições experimentais encontra-se a seguir.

5.1.1 Experimento

Um ciclone tangencial de diâmetro 300mm, detalhado na Figura 5.1, foi alimentado com ar e partículas (um talco de massa específica $2700\frac{kg}{m^3}$ e distribuição de tamanho do tipo log-normal de diâmetro médio 5, $97\mu m$ e desvio padrão geométrico de 2, $08\mu m$) a uma concentração de 5, $0\frac{g}{m^3}$. Quatro vazões de ar foram empregadas, correspondendo às velocidades de entrada de 11, 99; 16, 04; 20, 18 e 23, $85\frac{m}{s}$.

A eficiência de coleta foi calculada a partir da distribuição de tamanho de partículas através de um analisador de tamanho de micropartículas (SPSI, LKY-2).

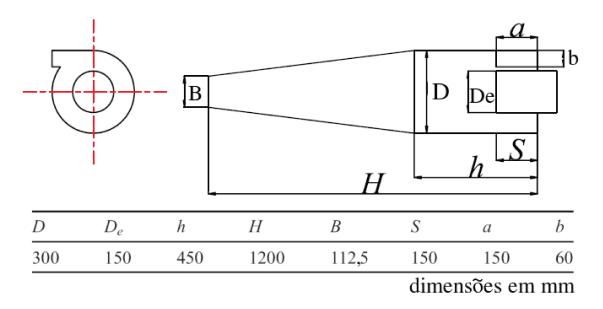


Figura 5.1: Cotas para o ciclone do caso multifásico, adaptado de ZHAO et al. (2004)

5.1.2 Simulação

Primeiramente foram construídas a geometria (Figura 5.2) e a malha computacional (Figura 5.3) referentes ao equipamento. Por não estar especificada, a caixa coletora foi arbitrada com um diâmetro igual ao do ciclone e altura equivalente a cinco sextos do diâmetro.

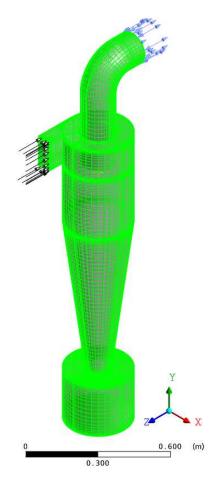


Figura 5.2: Geometria construída para o ciclone estudado no caso multifásico

Como teste de malha foram construídas três malhas de tamanhos distintos (220.000, 350.000 e 530.000 elementos) que passaram por um simples escoamento monofásico com velocidade de entrada $12\frac{m}{s}$, saída com pressão atmosférica, condição de não-deslizamento na parede e modelo de turbulência SSG RSM. A análise da queda de pressão (considerada como a diferença entre a pressão média na área de saída e de entrada) mostrou que a malha de 350.000 elementos já se mostrava numericamente independente, e por isso foi escolhida para as análises.

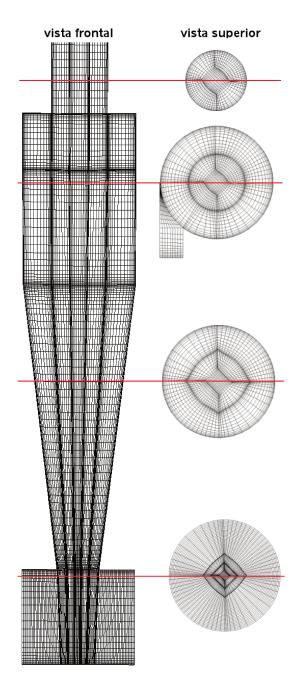


Figura 5.3: Malha de 350.000 elementos construída para o ciclone estudado no caso multifásico

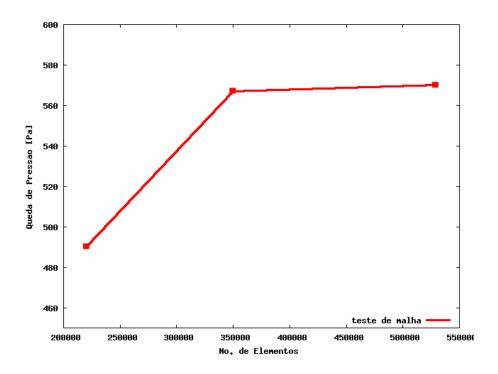


Figura 5.4: Teste de malha para o ciclone estudado no caso multifásico

5.1.3 Condições de Contorno

Foram efetuados conjuntos de simulações E-E e E-E_n para quatro velocidades de entrada diferentes disponíveis nos dados experimentais. As propriedades da simulação comuns para os casos estão listadas nas Tabelas 5.1 a 5.3. Novamente, o tempo simulado é arbitrado de modo a superar o tempo de residência¹.

Tabela 5.1: Condições de Contorno da simulação multifásica

entrada	velocidade prescrita	11, 99; 16, 04; 20, 18 e 23, 85 m/s
paredes		
gás	não-deslizamento	
sólido	deslizamento livre	
saída topo	abertura pressão prescrita	1atm
retorno sólido	zero	

¹Maior tempo de residência dentre os casos simulados, utilizando a menor velocidade, correspondente a 11,99 m/s

Tabela 5.2: Propriedades físicas do fluido da simulação multifásica

descrição	ar	sólido
massa específica	1, 185 kg/m³	$2700 \frac{kg}{m^3}$
viscosidade dinâmica	$1,831\cdot 10^{-5} \frac{kg}{ms}$	$1,831\cdot 10^{-5} \frac{kg}{ms}$

Tabela 5.3: Condições numéricas da simulação multifásica

passo de tempo	ajuste manual entre $5 \cdot 10^{-5}$ a $10^{-4}s$
máximo de <i>loops</i> por iteração	10
critério de convergência	RMS 10 ⁻⁴
tempo total simulado	5 <i>s</i>
tempo de residência	0,77 <i>s</i>

As condições para os diferentes casos sofrem alteração apenas no que diz respeito à entrada da(s) fase(s) particulada(s) (definição das frações volumétricas) e propriedades físicas (definição do diâmetro dos sólidos), explicadas na seção a seguir.

Modelo E-E

Como já mencionado, as simulações E-E contam com a fase gasosa e uma fase particulada de diâmetro definido. Assim, foram considerados três diâmetros diferentes ao longo da curva de distribuição de tamanho de partículas e, em cada simulação, foi atribuído a tal diâmetro a fração volumétrica de entrada correspondente a todo o fluxo de sólidos no sistema $(1,852\cdot10^{-6})$.

Ainda, as partículas do experimento possuíam distribuição de tamanho log-normal de média $5,97\mu m$ e desvio padrão de 2,08. A escolha de quais tamanhos de partícula utilizar foi feita baseada no trabalho de VEGINI (2007), fundamentado por FRARE et al. (2000). Este último apresenta o desvio padrão como as relações entre o diâmetro médio geométrico (dp_{50}) e dois diâmetros representativos, $dp_{15,87}$ e $dp_{84,13}$ (o número em subscrito representa a porcentagem acumulada de partículas com diâmetro menor que este). Esta relação corresponde à Equação 5.1.

$$\sigma = \frac{dp_{50}}{dp_{15.87}} = \frac{dp_{84,13}}{dp_{50}} \tag{5.1}$$

Assim, tendo o diâmetro médio e o desvio padrão geométricos, os dois diâmetros significativos a serem utilizados podem ser calculados.

$$dp_{15,87} = \frac{dp_{50}}{\sigma} = \frac{5,97\mu m}{2,08} = 2,87\mu m \tag{5.2}$$

$$dp_{84,13} = dp_{50}\sigma = (5,97\mu m) 2,08 = 12,42\mu m \tag{5.3}$$

Então foram feitas, para cada uma das quatro velocidades de entrada analisadas, três simulações E-E utilizando estes diâmetros e considerando que eles representavam toda a fase particulada, conforme é mostrado na Tabela 5.4.

Modelo E-E₃

Por coerência, nas simulações E-E₃ são mantidos os mesmos diâmetros de partícula calculados anteriormente. No entanto, como agora as três fases são alimentadas ao ciclone simultaneamente, uma nova fração volumétrica é calculada proporcional à porcentagem de partículas que cada tamanho visa representar. Assim sendo, cada um dos diâmetros de 2,87 μ m e 12,42 μ m correspondem a 15,87% da fração volumétrica total, enquanto 5,97 μ m corresponde aos 68,26% restantes. Isto está esquematizado na Tabela 5.5.

Tabela 5.5: Condições de entrada da fase particulada para as simulações E-E $_3$ número da simulação diâmetro de partícula fração volumétrica na entrada 1 2,87 μ m 0,294·10⁻⁶ 5,97 μ m 1,264·10⁻⁶ 12,42 μ m 0,294·10⁻⁶

Estas simulações também são feitas para as quatro velocidades experimentais: 11,99; 16,04; 20,18 e 23,85 $\frac{m}{s}$.

5.2 Resultados

Antes de exibir os resultados relativos à eficiência, são mostrados os campos de pressão e de velocidade para apenas dois dos casos simulados, de modo a evitar repetição. São eles E-E (velocidade de entrada de 11,99m/s e diâmetro da fase particulada de $5,97\mu m$, Figura 5.5) e E-E₃ (velocidade de entrada de 11,99m/s, Figura 5.6). O escoamento vorticial confinado mais uma vez se mostra bem representado: zonas centrais de baixa pressão, escoamento axial descendente nas paredes e ascendente no centro, velocidade tangencial alternando entre negativo e positivo indicando o escoamento rotatório. As diferenças entre os casos não se mostram significativas. Isto se mostra verdadeiro entre as simulações de outras velocidades também.

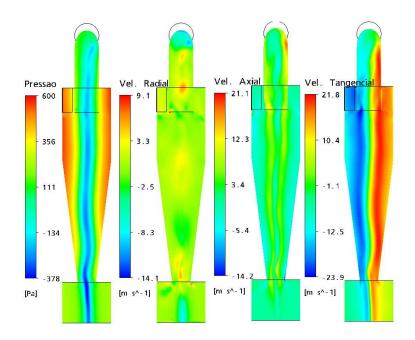


Figura 5.5: Perfis de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para para a fase gás na simulação E-E com velocidade de entrada de 11,99 m/s e diâmetro de 5,97 micra

A validação da simulação foi feita através das eficiências de coleta fracional e global. O cálculo foi feito considerando a unidade menos a razão da massa de particulados que deixa o domínio pelo duto superior e a massa de particulados entrando no sistema (termo da direita nas Equações 2.5 e 2.6). Para isso foram considerados valores médios do fluxo mássico ao final de cada simulação.

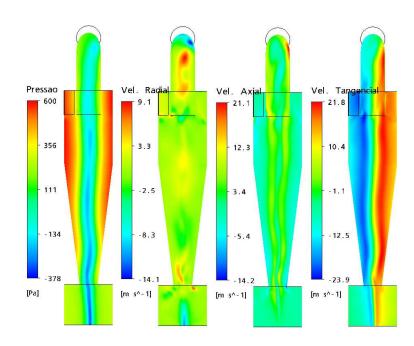


Figura 5.6: Perfis de pressão e velocidades radial, axial e tangencial em um plano central axial para para a fase gás na simulação E-E₃ com velocidade de entrada de 11,99 m/s

Algumas observações interessantes surgem aqui: nota-se que a oscilação dos fluxos de saída ocorria de maneira senoidal, sendo a amplitude de oscilação maior para os diâmetros menores, o que pode ser visualizado na Figura 5.7. As oscilações se mostram bem semelhantes para ambas as metodologias, por isto um gráfico E-E semelhante é omitido.

A Tabela 5.6 sumariza todos os resultados referentes à eficiência de coleta, incluindo os resultados da literatura. As seções seguintes apresentam os gráficos referentes a estes resultados e análises pontuais.

Já a Tabela 5.7 indica os desvios relativos dos resultados, mostrando um menor erro para a velocidade de $16\frac{m}{s}$ e dando uma idéia quantitativa do desempenho de ambos os métodos.

Tabela 5.6: Comparação das eficiências de coleta globais e fracionais obtidas experimentalmente e em simulação

vel. de entrada = 12 m/s				vel. de entrada = 16 m/s			
	exp. [%]	E-E [%]	E-E ₃ [%]		exp. [%]	E-E [%]	E-E ₃ [%]
2,87 μm	70,2	57,6	63,4	2,87 μm	82,8	81,9	80,4
5,97 μm	98,0	99,3	98,8	5,97 μm	98,8	99,5	99,2
12,42 μm	99,7	99,8	99,1	12,42 μm	99,8	99,9	99,3
Global	91,0	92,8	93,3	Global	94,7	96,8	96,2
ν	el. de entra	da = 20 m	/s	ν	el. de entra	da = 24 m	's
ν	el. de entra	da = 20 m $E-E [%]$	/s E-E ₃ [%]	ν	el. de entra	da = 24 m/ $E-E [%]$	E-E ₃ [%]
ν 2,87 μm		I		ν 2,87 μm			
	exp. [%]	E-E [%]	E-E ₃ [%]		exp. [%]	E-E [%]	E-E ₃ [%]
2,87 μm	exp. [%]	E-E [%] 92,4	E-E ₃ [%]	2,87 μm	exp. [%]	E-E [%]	E-E ₃ [%]

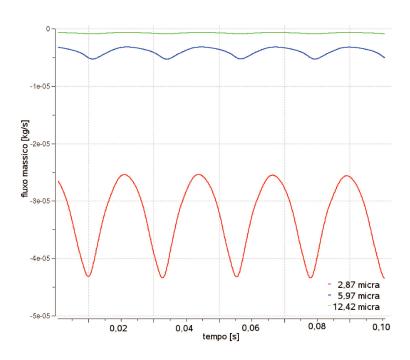


Figura 5.7: fluxo mássico ao longo do tempo para simulação E-E3 já estabilizada comparado para diversos diâmetros

Tabela 5.7: Comparação dos desvios relativos para as eficiências de coleta globais entre os resultados experimentais e simulados

vel. de entrada = 12 m/s				vel. de entrada = 16 m/s			
	exp. [%]	desvio E-E [%]	desvio E-E₃ [%]		exp. [%]	desvio E-E [%]	desvio E-E ₃ [%]
2,87 μm	70,2	17,9	9,7	2,87 μm	82,8	1,1	1,7
5,97 μm	98,0	1,3	0,8	5,97 μm	98,8	0,7	0,4
12,42 μm	99,7	0,1	0,1	12,42 μm	99,8	0,1	0,5
Global	91,0	2,0	2,5	Global	94,7	2,2	1,6
,v	el. de entra	da = 20 m	/s	ν	el. de entra	da = 24 m	's
·ν	el. de entra	da = 20 m/ desvio E-E [%]	/s desvio E-E3 [%]	ν	el. de entra	da = 24 m/ desvio E-E [%]	∕s desvio E-E₃ [%]
2,87 μm		desvio	desvio	ν 2,87 μm		desvio	desvio
	exp. [%]	desvio E-E [%]	desvio E-E ₃ [%]		exp. [%]	desvio E-E [%]	desvio E-E ₃ [%]
2,87 μm	exp. [%]	desvio E-E [%] 4,9	desvio E-E ₃ [%]	2,87 μm	exp. [%]	desvio E-E [%] 3,9	desvio E-E₃ [%] 2,8

5.2.1 Eficiência Fracional de Coleta

A Figura 5.8 mostra as eficiências fracionais das simulações E-E e E- E_3 junto aos resultados experimentais para as quatro velocidades de entrada estudadas. Como primeira análise pode-se dizer que os dois métodos tiveram um bom desempenho e, do ponto de vista desta validação, foram capazes de prever os fenômenos dentro do equipamento qualitativamente, pela curva sigmoidal crescente naturalmente esperada, e quantitativamente, pela proximidade aos pontos experimentais. Algumas observações, no entanto, são pertinentes.

Primeiramente, nota-se que os maiores desvios ocorrem para as partículas de menor diâmetro. Na verdade são aquelas cujo tamanho as situa na assíntota vertical da curva de eficiência fracional. Esta imprecisão é justificada, pois esta é uma região crítica, na qual pequenas variações no tamanho da partícula ocasionam grande alteração na eficiência.

Outra análise mostra que, de modo geral, os desvios apresentados são maiores para as simulações E-E, o que é compreensível, já que instintivamente nota-se que a E-E₃ reproduz mais fielmente o fenômeno verdadeiro. Isto é refletido na ponderação das eficiências fracionais, a eficiência global, apresentada a seguir.

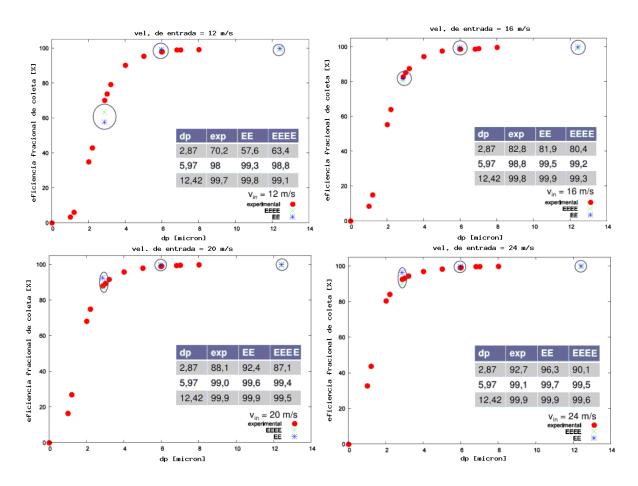


Figura 5.8: Eficiência fracional de coleta comparada para as velocidades de 12, 16, 20 e 24 $\,\mathrm{m/s}$

5.2.2 Eficiência Global de Coleta

A eficiência global de coleta é uma consequência dos resultados de eficiência fracional. E é isto o que pode ser visto na Figura 5.9.

Percebe-se novamente a concordância com a teoria clássica de ciclones em que aumentandose a velocidade de entrada tem-se, até certo ponto, um aumento da eficiência de coleta. Além disso, ambos os métodos utilizados apresentaram uma concordância razoável com o experimento, com desvios que não excederam os 3% para todos os casos. Naturalmente, se fossem utilizados mais diâmetros de partícula, era de se esperar que estes desvios diminuíssem, à custa de maior tempo de processamento.

Nesta variável, no entanto, fica mais aparente a superioridade da abordagem E-E₃. Mesmo no único ponto no qual não ficou mais próximo ao experimento, correspondente à velocidade de entrada de 11,99 m/s, todas suas eficiências fracionais foram mais precisas (vide Tabela 5.6). O método E-E foi favorecido somente por apresentar desvios ora positivos ora negativos, mascarando a real exatidão dos resultados.

Portanto, de modo geral pode-se dizer que o método E-E₃ foi mais preciso e mais exato que o E-E, apesar do bom desempenho de ambos. Resta agora comparar a aplicabilidade de cada método, através da análise de sua demanda computacional.

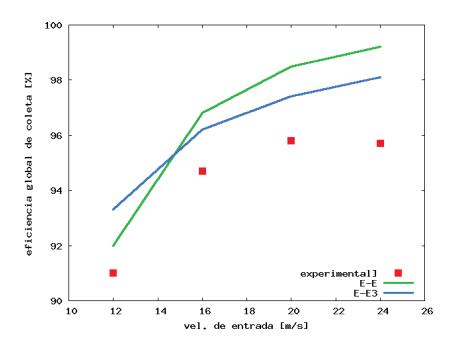


Figura 5.9: Comparação da eficiência global de coleta para os métodos aplicados

5.2.3 Demanda Computacional e Escalabilidade

A análise comparativa de demanda computacional e escalabilidade é feita tendo em mente que o objetivo final é a obtenção da curva fracional de eficiência. Assim sendo, para a análise feita com três diâmetros de partícula, resultados equivalentes são obtidos com a repetição tripla da simulação E-E para cada E-E₃ executada.

Deste modo, a comparação consiste em cronometrar o tempo médio que cada iteração tomava para cada método, mantendo as outras variáveis como velocidade de entrada, passo de tempo, etc. coerentes entre os casos. Para a simulação E-E este resultado tem de ser multiplicado por três, para se igualar ao de uma E-E₃. O resultado apresenta-se na Figura 5.10.

Como pode-se ver, considerando o tempo total combinado, a abordagem E-E₃ apresenta um tempo médio por iteração menor que sua alternativa bifásica. Além disso, sua escalabilidade também se mostra superior, com um decréscimo no esforço necessário mesmo ao ser alocada a dezesseis processos.

Estes desenvolvimentos podem ser explicados por dois motivos. Primeiramente, na abordagem Euleriana-Euleriana convencional se está resolvendo o escoamento da fase gasosa três

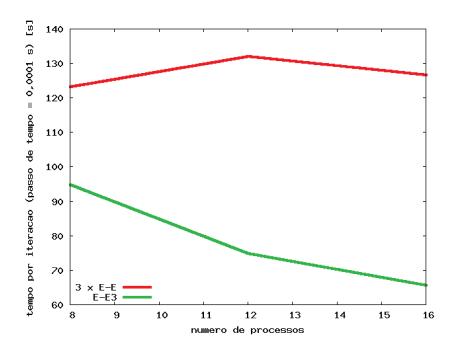


Figura 5.10: tempo de simulação versus número de processos paralelos para os métodos aplicados

vezes separadamente, o que justifica seu maior tempo computacional total. Finalmente, a simulação $E-E_3$ conta com mais fases simultâneas e portanto mais conjuntos de equações diferenciais no problema. Esta complicação adicional faz com que um maior número de processadores seja bem aceito pelo problema.

A conclusão que se faz a respeito dos dois métodos é que, para o caso estudado, a abordagem E-E₃ se mostrou a melhor alternativa, obtendo resultados não apenas mais precisos e mais exatos, como também mais rápidos e escaláveis.

Capítulo 6

Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

O trabalho descrito nesta dissertação foi resultado de dois anos de atividades desempenhadas no estudo da fluidodinâmica de separadores ciclônicos. Muito foi aprendido e diversos obstáculos superados no entendimento e aplicação dos métodos numéricos, ferramentas computacionais e modelos matemáticos envolvidos.

Como resultado, obteve-se um modelo capaz de prever o escoamento multifásico, transiente, tridimensional, confinado, vorticial e turbulento dentro de ciclones. Para tanto foram feitas simulações utilizando os códigos numéricos *ICEM CFD* e *ANSYS CFX*. Elas abrangeram casos monofásicos e multifásicos.

No caso monofásico analisou-se o modelo de turbulência utilizado, bem como condições de contorno referentes à saída inferior do sistema. As principais conclusões a respeito, com base nos resultados obtidos, são apresentadas a seguir, classificadas por tópicos.

Quanto ao modelo de turbulência:

- O modelo de turbulência é uma escolha crucial para a boa determinação do escoamento dentro de ciclones;
- Modelos isotrópicos, como o k-epsilon e RNG k-epsilon geralmente não são aplicáveis para fenômenos desta complexidade, o que foi confirmado pelos resultados insatisfatórios obtidos seguindo estas condições;

- O modelo LES é mais sensível quanto à malha utilizada que o RSM, e requer um refino especial para obter melhor performance. Caso contrário, sua aplicação não é recomendada;
- A abordagem SSG-RSM se mostrou a melhor alternativa para um tamanho de malha razoável, aliando boa concordância com os resultados experimentais e tempos computacionais não excessivos. Ao final, este modelo conseguiu predizer o fenômeno estudado de modo razoável.

Quanto às condições de contorno:

- Como esperado, os melhores resultados são obtidos quando é aplicada a condição mais próxima possível à realidade experimental. Foi o caso da condição de caixa coletora;
- Condições de pressão prescrita arbitradas (sem conhecimento experimental ou embasamento teórico) não são recomendadas, uma vez que o máximo que se pode obter delas é um ajuste dos resultados por experimentação numérica;
- As diferentes condições de contorno analisadas mostraram influência definitiva nos resultados. Isto sugere que o equipamento é amplamente afetado pelas configurações à sua montante e à sua jusante. Assim, elas devem ser levadas em consideração ao planejar a instalação de um ciclone, não bastando apenas o projeto do equipamento em si.

Além de terem dado fruto a estas idéias, as simulações monofásicas serviram de base para fundamentar e definir a expansão do modelo para o caso multifásico. Nele, foram estudadas duas diferentes abordagens para a fase sólida na tentativa de obter as curvas de eficiência de coleta global: uma, a repetição de simulações seguindo o modelo Euleriano-Euleriano clássico variando o diâmetro de partícula; a outra uma única simulação E-E_n, com *n* fases particuladas Eulerianas, de diferentes diâmetros, simultaneamente representadas. As análises incluíram três tamanhos distintos, assim as abordagens ficaram conhecidas como E-E e E-E₃, respectivamente. Algumas conclusões puderam ser consideradas:

• Ambos os modelos foram capazes de prever o escoamento e os fenômenos de separação no ciclone, com boa concordância com os dados experimentais:

- No entanto, o método E-E₃ mostrou maior precisão e exatidão, provavelmente devido a sua maior aproximação à situação real do experimento;
- Além disso, considerando o total das simulações, a metodologia E-E, para o caso estudado, mostrou-se mais lenta e com pior escalabilidade quando aplicada a um grande número de processos paralelos;
- Para a baixa concentração de sólidos considerada, a ausência de interações partículapartícula não se mostrou essencial, uma vez que os resultados apresentaram precisão razoável. Mas a influência destas interações ainda seriam uma comparação interessante.

Assim, para o caso estudado o modelo E-E₃ se mostrou bastante promissor. Porém, como não pode deixar de ser para uma área de estudo tão ampla e relativamente jovem, algumas sugestões para trabalhos futuros são pertinentes.

Trabalhos que não se limitem a mostrar bons resultados obtidos com o LES, mas que detalhem procedimentos e metodologias para se chegar a uma malha adequada, não necessariamente se restringindo a ciclones, são essenciais: a escalada de recursos computacionais aponta para um futuro onde este modelo poderá ser mais amplamente utilizado. Isto diminuiria seu uso indiscriminado.

Do ponto de vista das condições de contorno, estudos expandindo o domínio de simulação de ciclones a regiões antes e depois da saída, com variações de configuração, seriam muito úteis do ponto de vista de projeto industrial, além de ajudar pesquisadores teóricos a entender quais aproximações feitas aos seus sistemas no intuito de simplificar problemas são razoáveis e quais não são.

A comparação de outras abordagens para o tratamento de sólidos, como Euleriano-Lagrangeano e Euleriano-Euleriano-Lagrangeano (e outras configurações que possam vir a surgir) também seriam interessantes, na tentativa de delinear a viabilidade de modelos a princípio para situações específicas e depois expandir esta noção para casos mais gerais.

Por fim, a expansão do modelo E-E₃ para casos mais diversificados e complexos como altas concentrações de sólidos seriam de extremo interesse. Mas para isso, dois outros estudos se fazem necessários: a construção de modelos de interação partícula-partícula (seja através de métodos teóricos, empíricos ou experimentação numérica) e a publicação de resultados experimentais detalhados e confiáveis, ainda escassos na literatura para as condições descritas.

Também são de interesse estudos que levem em conta a influência da variação do coeficiente de arraste interfásico, tentando aplicar modelos que não apresentem descontinuidades como o utilizado neste trabalho.

Espera-se assim que este trabalho e futuros trabalhos nesta linha contribuam para difundir a fluidodinâmica computacional como ferramenta de pesquisa, projeto e avaliação de equipamentos de processos químicos.

Referências Bibliográficas

- ALEXANDER, R. M. Fundamentals of Cyclone Design and Operation. *Proc. Aust. Inst. Min. Metal. (New Series)*, pp. 202-228, 1949.
- AYERS, W. H., BOYSAN, F., SWITHENBANK, J., EWAN, B. C. R. Theoretical Modelling of Cyclone Performance. *Filtration & Separation*, vol. 22, pp. 39-43, 1985.
- BARTH, W. Berechnung und Auslegung von Zyklonabscheidern aufgrund neuer Untersuchungen. *Brennst-Waerme-Kraft*, pp. 1-9, 1956.
- BERNARDO, S., MORI, M., PERES, A. P., DIONÍSIO, R. P. 3-D Computational Fluid Dynamics for Gas and Gas-Particle Flows in a Cyclone With Different Inlet Section Angles. *Powder Technology*, vol. 162, pp. 190-200, 2006.
- BOYSAN, F., AYERS, W. H., SWITHENBANK, J. A Fundamental Mathematical Modeling Approach to Cyclone Design. *Trans. Inst. Chem. Engrs.*, vol. 60, pp. 222-230, 1982.
- BOYSAN, F., AYERS, W. H., SWITHENBANK J. Experimental and Theoretical Studies of Cyclone Separator Aerodynamics *IChemE Symp. Series*, vol. 69, pp. 305-320, 1983.
- CASAL, J., MARTINEZ-BENET, J. M. A Better Way to Calculate Cyclone Pressure Drop. *Chemical Engineering*, vol. 90, pp. 99-100, 1983.
- ANSYS, INC. CFX-11 User's Guide, 2006
- CHUAH, T. G., GIMBUN, J., CHOONG, T. S. Y. A CFD Study of the Effect of Cone Dimensions on Sampling Aerocyclones Performance and Hydrodynamics. *Powder Technology*, vol. 162, pp. 126-132, 2006.
- DERKSEN, J. J. Separation Performance Predictions of a Stairmand High-Efficiency Cyclone. *AIChE Journal*, vol. 49, pp. 1359-1371, 2003.

- DERKSEN, J. J., SUNDARESAN, S., van den AKKER, H.E.A. Simulation of Mass-Loading Effects in Gas-Solid Cyclone Separators. *Powder Technology*, vol. 163, pp. 59-68, 2006.
- DERKSEN, J. J., van den AKKER, H.E.A, SUNDARESAN, S.. Two-Way Coupled Large-Eddy Simulations of the Gas-Solid Flow in Cyclone Separators. *AIChE Journal*, vol. 54, pp. 872-885, 2008.
- DIRGO, J., LEITH, D. *Encyclopedia of Fluid Mechanics, vol. 4 Gas-Solid Flows.* Houston, EUA; Gulf Publishing Company, 1986.
- FERZIGER, J. H., PERIĆ, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Berlim, Alemanha; Springer, 1996.
- FRANK, T. Application of Eulerian-Lagrangian Prediction of Gas-Particle Flows to Cyclone Separators. *VKI Lecture Series Programme*, Bruxelas, Bélgica, 2000.
- FRARE, L. M., GIMENES, M. L., PEREIRA, N. C., MENDES, E. S. Linearização do Modelo Log-Normal para Distribuição de Tamanho de Partículas. *Acta Scientiarum*, vol. 22, pp.1235-1239, 2000.
- GIMBUN, J., CHUAH, T. G., FAKHRU'L-RAZI, A., CHOONG, T. S. Y. The Influence of Temperature and Inlet Velocity On Cyclone Pressure Drop: a CFD Study. *Chemical Engineering and Processing*, vol. 44, pp. 7-12, 2005.
- HINZE, J. O. Turbulence Nova lorgue, EUA; McGraw-Hill, 1975.
- HOEKSTRA, A. J., DERKSEN, J.J., van den Akker, H. E. A. An Experimental and Numerical Study of Turbulent Swirling Flow in Gas Cyclones. *Chemical Engineering Science*, vol. 54, pp.2055-2065, 1999.
- HOFFMANN, A. C., STEIN, L.E. *Gas Cyclones and Swirl Tubes: Principles, Design and Operation.* Berlim, Alemanha; Springer, 2002.
- HUSSMANN, B., PFITZNER, M., ESCH, T., FRANK, T. A Stochastic Particle-Particle Collision Model for Dense Gas-Particle Flows Implemented in the Lagrangian Solver of ANSYS CFX and its Validation. 6^t h International Conference on Multiphase Flow, Leipzig, Alemanha, 2007.

- LAPPLE, C. E. Gravity and Centrifugal Separation. *American Industrial Hygiene Association Quarterly*, vol. 11, pp. 40-47, 1950.
- LEE, J. W., YANG, H. J., LEE, D. Y. Effect of the Cylinder Shape of a Long-Coned Cyclone on the Stable Flow-Field Establishment. *Powder Technology*, vol. 165, pp. 30-38, 2006.
- LEITH, D., LICHT, W. The Collection Efficiency of Cyclone Type Particle Collectors A New Theoretical Approach. *AIChE Symp. Ser.*, vol. 68, pp. 196-206, 1972.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.* Rio de Janeiro, Brasil: 2ª Edição, LTC Editora, 2004.
- MARTIGNONI, W. P., BERNARDO, S., QUINTANI, C. L. Evaluation of Cyclone Geometry and its Influence on Performance Parameters by Computational Fluid Dynamics (CFD). *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, vol.24, pp.83-94, 2007.
- MEIER, H. F., MORI, M. The Eulerian-Eulerian-Lagrangian Model for Cyclone Simulation *ECCOMAS 98*, pp. 1206-1211, 1998.
- MEIER, H. F., MORI, M. Anisotropic Behavior of the Reynolds Stress in Gas and Gas-Solid Flows in Cyclones. *Powder Technology*, vol. 101, pp. 108-119, 1999a.
- MEIER, H. F., MORI, M. Gas-Solid Flow in Cyclones: The Eulerian-Eulerian Approach. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 22, pp. 641-644, 1999b.
- MONTAVON, C. A., GROTJANS, H., HAMILL, I. S., PHILLIPS, H. W., JONES, I. P. Mathematical Modelling and Experimental Validation of Flow in a Cyclone. *BHR Conference on Cyclone Technologies*, Warwick, Inglaterra, 2000.
- MUSCHELKNAUTZ, E. Die Berechnung von Zyklonabscheidern für Gase *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 44, pp. 63-71, 1972.
- NORILER, D., VEGINI, A. A., SOARES, C., BARROS, A. A. C., MEIER, H. F., MORI, M. A New Role for Reduction in Pressure Drop in Cyclones Using Computational Fluid Dynamics Techniques. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, vol. 21, pp. 93-101, 2004.
- OGAWA, A. Separation of Particles from Air and Gases. Boca Raton, EUA; CRC Press Inc., 1984.

- PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Nova Iorque, EUA; McGraw-Hill, 1984.
- PERES, A. P. *Técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD) Aplicadas a Escoamentos em Ciclones*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2002, 167 p. Tese de Doutorado
- QIAN, F., HUANG, Z., CHEN, G., ZHANG, M. Numerical Study of the Separation Characteristics in a Cyclone of Different Inlet Particle Concentrations. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 31, pp. 1111-1122, 2007.
- QIAN, F., ZHANG, J., ZHANG, M. Effects of the Prolonged Vertical Tube on the Separation Performance of a Cyclone. *Journal of Hazardous Materials*, vol. B136, pp. 822-829, 2006.
- RAOUFI, A., SHAMS, M., FARZANEH, M., EBRAHIMI, R. Numerical Simulation and Optimization of Fluid Flow in Cyclone Vortex Finder. *Chemical Engineering and Processing*, vol. 47, pp. 128-137, 2008.
- RHIE, C. M., CHOW, W. L. A Numerical Study on the Turbulent Flow Past an Isolated Airfoil With Trailing-Edge Separation *AIAA J.*, vol. 21, pp. 1525-1532, 1983.
- SHALABY, H., PACHLER, K., WOZNIAK, K., WOZNIAK, G. Comparative Study of the Continuous Phase Flow in a Cyclone Separator Using Different Turbulence Models. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 48, 1175-1197, 2005.
- SCHMIDT, S., BLACKBURN, H. M., RUDMAN, M. Impact of Outlet Boundary Conditions on the Flow Properties Within a Cyclone. *15th Australasian Fluid Mechanics Conference*, Sydney, Austrália, 2004.
- SHEPHERD, C. B., LAPPLE, C. E. Flow Pattern and Pressure Drop in Cyclone Dust Collectors. *Industrial and Engineering Chemistry*, vol. 31, pp. 212-222, 1939.
- SHI, L., BAYLESS, D. J., KREMER, G., STUART, B. CFD Simulation of the Influence of Temperature and Pressure on the Flow Pattern in Cyclones. *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 45, pp. 7667-7672, 2006.
- SHI, L., BAYLESS, D. J. Comparison of Boundary Conditions for Predicting the Collection Efficiency of Cyclones. *Powder Technology*, vol. 173, pp. 29-37, 2007.

- SILVA, M. K., BRANDOLT, H. G., CLAUMANN, C. A., MACHADO, R. A. F., QUADRI, M. B. Estudo de Refinamento de Malha na Simulação de um Ciclone. *XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, Santos, Brasil, 2006.
- SLACK, M. D., PRASAD, R. O., BAKKER, A, BOYSAN, F. Advances in Cyclone Modelling Using Unstructured Grids. *Trans. IChemE*, vol. 78, Part A, pp. 1098-1104, November, 2000.
- SPEZIALE, C. G., SARKAR, S., GATSKI, T. B. Modeling the Pressure-Strain Correlation of Turbulence An Invariant Dynamical Systems Approach *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 277, pp. 245-272, 1991.
- STAIRMAND, C. J. Pressure Drop in Cyclone Separators. *Engineering*, vol. 168, pp. 409-412, 1949.
- VEGINI, A. A. *Modelagem Multifásica Euleriana-Euleriana Para Simulação Numérica de Ciclones*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2007, 128 p. Tese de Doutorado
- VEGINI, A. A., MEIER, H. F., IESS, J. J., MORI, M. Computational Fluid Dynamics (CFD) Analysis of Cyclone Separators Connected in Series *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 47, pp. 192-200, 2008.
- WANG, B., XU, D. L., CHU, K. W., YU, A. B. Numerical Study of Gas-Solid Flow in a Cyclone Separator. *Applied Mathematical Modelling*, vol. 30, pp. 1326-1342, 2006.
- WANG, C., Y., L. Numerical Simulation of Three Dimensional Gas-Particle Flow in a Spiral Cyclone. *Applied Mathematics and Mechanics*, vol. 27, pp. 247-253, 2006.
- Wikimedia Commons (diversos autores). http://commons.wikimedia.org, arquivos online.
- WILCOX, D. C. Turbulence Modeling for CFD. La Cañada, EUA; DCW Industries, Inc., 1998.
- XIANG, R. B., LEE, K. W. Numerical Study of Flow Field in Cyclones of Different Height. *Chemical Engineering and Processing*, vol. 44, pp.877-883, 2005.
- ZHAO, B., SHEN, H., KANG, Y. Development of a Symmetrical Spiral Inlet to Improve Cyclone Separator Performance. *Powder Technology*, vol. 145, pp. 47-50, 2004.

ZHAO, B., SU, Y., ZHANG, J. Simulation of Gas Flow Pattern and Separation Efficiency in Cyclone With Conventional Single and Spiral Double Inlet Configuration. *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 84, pp. 1158-1165, 2006.