

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS**

**INTRODUÇÃO À MODELAGEM EM 3D PARA REATORES
AIR-LIFT EMPREGANDO O “MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS”
NA RESOLUÇÃO DA FLUIDODINÂMICA (*CFD*)**

Autor : Mardonny Nazareno Barreira

Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

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

Campinas – São Paulo

Maio – 2003

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

B274i Barreira, Mardonny Nazareno
Introdução à modelagem em 3d para reatores *air-lift* empregando o “método dos volumes finitos” na resolução da fluidodinâmica (CFD) / Mardonny Nazareno Barreira.--Campinas, SP: [s.n.], 2003.

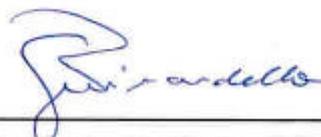
Orientador: Rubens Maciel Filho.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Método dos volumes finitos. 2. Simulação (Computadores). 3. Dinâmica dos fluidos. I. Maciel Filho, Rubens. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Dissertação de Mestrado defendida por Mardonny Nazareno Barreira e aprovada em 14 de maio de 2003 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Rubens Maciel Filho – Orientador



Prof. Dr. Reginaldo Guirardello



Dr(a). Maria das Graças Enrique Silva

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida por Mardonny Nazareno Barreira e aprovada em 14 de maio de 2003.

A handwritten signature in black ink, reading "Rubens Maciel Filho". The signature is written in a cursive style with a large initial 'R'.

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho – Orientador

EPIGRAFES

“No princípio era o Verbo, e o

Verbo estava em DEUS, e o Verbo era DEUS.

Ele estava no princípio com o DEUS

Todas as coisas foram feitas por ele, e

sem ele nada do que foi feito se fez.

Nele estava a vida, e a vida era a luz dos homens.

E a luz resplandece nas trevas, e as trevas não a compreenderam.”

(João 1:1-5)

&

“Quem procura DEUS, encontra-O.

Quem O encontra, conhece-Lhe.

Quem O conhece, amo-O.

Quem O ama, é amado por Ele.

Aqueles que não são amados por DEUS

são mais suscetíveis à destruição.”

(“Khalil Al-Mukafa”)

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a Santíssima Trindade: Deus Pais Todo-Poderoso, Criador do Céu e da Terra; Jesus Cristo, seu único Filho e nosso Senhor e o Divino Espírito Santo; como forma de reconhecimento, devoção, gratidão e amor. Agradecendo ao Dom da Vida, a saúde, a inspiração e a perseverança; fatores sem os quais não teria levado a cabo a empreitada que foi a elaboração desta dissertação. Peço a Santíssima Trindade serenidade frente às derrotas, pois querendo ou não um dia hão de ocorrer, e humildade perante as vitórias, pois quem é humilde no mundo dos homens é engrandecido no Mundo de Deus.

Ofereço este trabalho aos engenheiros e/ou estudantes que porventura venham a encontrar um pouco de luz nos problemas associados à modelagem da fluidodinâmica dos *Bubble Column Reactor*, especialmente a subclasse dos Reatores *Air-Lift*, bem como o entendimento e aplicação do Método dos Volumes Finitos.

AGRADECIMENTOS

À DEUS, pela Vida e a Família que tenho.

À minha família, especialmente à minha Mãe Judite Nazareno Ribeiro por ser um exemplo de determinação e coragem na minha Vida.

Ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho por ter me apresentado ao Mundo da Modelagem dos Reatores *Air-Lift*, sem deixar de citar o apoio e a orientação.

À CAPES pelo financiamento da bolsa de mestrado, sem a qual este trabalho não seria realizado.

Ao Prof. Dr. Carolos Alberto Carrasco Altemani por ter desmistificado o Método dos Volumes Finitos.

Ao Prof. Dr. Milton Mori por gentilmente disponibilizado o acesso ao código CFX, ferramenta sem a qual este trabalho não poderia atingir os objetivos almejados.

Aos amigos e colegas do LOPCA/LDPS em especial: Rogério Favinha, Augusto Meleiro, D. Coselli, D. Nagel, D. Agremis, Dona Ana Paula, Jefferson, Edvaldo, Adriano, Marcos e D. Sebastião.

Aos amigos Francisleo, Wagner Pimentel e Sérgio Bernardo pelo apoio a minha chegada em Campinas e na minha trajetória ao longo do Mestrado.

Aos colegas e amigos Wanda, Felipe, Édler, Elaine, D. Rogério e Karolline Ropelato pelas conversas agradáveis e construtivas que amenizam as dificuldades do dia-a-dia.

A todos aqueles que direto ou indiretamente contribuíram com idéias ou criando um ambiente salutar de modo a permitir o desenvolvimento e a finalização deste trabalho. Especialmente a equipe do LMSPQ pelas imensas ajudas com o CFX, destacando-se Daniel, Kasper e Leonardo.

RESUMO

O objetivo deste trabalho foi um estudo das metodologias Euler-Euler e Euler-Lagrange e a conseqüente modelagem da fluidodinâmica dos Reatores *Air-Lift* em conjunção com a resolução numérica das equações resultantes. Pesquisou-se a aplicação da *Computational Fluid Dynamics-CFD* nos campos da Engenharia Química dando ênfase aos escoamentos multifásicos, devido a ocorrência dos mesmos em Reatores *Air-Lift*, percebendo-se uma deficiência na literatura no que se refere a aplicação das ferramentas associadas à *CFD* na modelagem da fluidodinâmica de tais sistemas.

Estudou-se os fenômenos físicos preponderantes nos Reatores *Air-Lift* e as principais inter-relações, buscando um melhor entendimento do processo real, incluindo possíveis simplificações na modelagem matemática, no intuito de torná-la mais tratável do ponto de vista numérico, sem que haja perdas na descrição dos principais fenômenos físicos de interesse. Efetuou-se uma revisão da literatura listando os tipos de Reatores *Air-Lift*, condições de operação, vantagens e desvantagens, bem como as principais dificuldades na modelagem visando o projeto e análise de tais reatores.

Fez-se uma exegese do Método dos Volumes Finitos que constitui o alicerce dos métodos numéricos empregados na solução das equações diferenciais parciais que descrevem a Fluidodinâmica. Empregou-se as ferramentas associadas à Fluidodinâmica Computacional, através do uso do *software* CFX versão 5.5.1, obtendo-se resultados numéricos para escoamentos no *External-Loop Air-Lift Reactor*, empregado como estudo de caso.

As simulações de escoamentos monofásicos apresentaram convergência dentro do critério trabalhado, fornecendo resultados dotados de realismo físico. Percebeu-se dificuldades consideráveis no que tange a solução numérica de escoamentos bifásicos em Reatores *Air-Lift* que foram discutidas tendo o embasamento oriundo do estudo do Método dos Volumes Finitos em conjunção com a literatura referente a aplicação da *CFD* na modelagem da fluidodinâmica dos *Bubble Column Reactors*, utilizando como agente intercambiador o estudo dos Manuais e Tutoriais fornecidos pelos desenvolvedores do código CFX, versão 5.5.

ABSTRACT

The objective of this work was a study of the methodologies Euler-Euler and Euler-Lagrange and the consequent modeling of the fluid dynamics of the Air-Lift Reactors in conjunction with the numerical resolution of the resultant equations. It was searched application of the Computational Fluid Dynamics-CFD in the fields of Chemical Engineering giving emphasis to the multiphase flows, had the occurrence of same in Air-Lift Reactors perceiving itself a deficiency in literature as for application of the tools associates to the *CFD* in the modeling of the fluid dynamic of such systems.

One studied the preponderant physical phenomena in the Air-Lift Reactors and the main interrelationships, searching one better agreement of the real process, including possible simplifications in the mathematical modeling, in the intention of will become it more treatable of the numerical point of view, without that it has losses in the description of the main physical phenomena of interest. A revision of literature was effected listing the types of Air-Lift Reactors, conditions of operations, advantages and disadvantages, as well as the main difficulties in the modeling aiming at the project and analysis of such Reactors.

One became exegesis of the Method of the Finite Volumes that constitutes the foundation of the used numerical methods in the solution of partial the distinguishing equations that describe the fluid dynamics. One used the tools associates to CFD, through the use of software CFX version 5.5.1, getting itself resulted numerical for flows in the External-Loop Air-Lift Reactor, used as case study.

The simulations of single-phase flows had presented convergence of the worked criterion inside, supplying resulted endowed with physical realism. One perceived considerable difficulties in that it refers to the numerical solution of two-phase flows in Air-Lift Reactor that had been argued having the deriving basement of the study of the Method of the Finite Volumes in conjunction with referring literature the application of the CFD in the modeling of the fluid dynamics of the Bubble Column Reactors using as one interchanges agent the study of Tutorial Manuals and supplied by the developers of code CFX, version 5.5.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

1.1 Organização da Tese	1-3
1.2 Introdução Geral	3-5
1.3 Aplicações da <i>CFD</i> no campo da Engenharia Química	5
1.3.1 <i>Modelagem de reatores de tanque agitado e tanque de mistura</i>	5-6
1.3.2 <i>Escoamento de polímero</i>	7
1.3.3 <i>Modelagem da interação turbulência-reação química</i>	7-8
1.3.4 <i>Modelagem de escoamentos multifásicos</i>	8-9
1.4 Motivação e Objetivos Gerais	9-11

2 SISTEMA EM ESTUDO

2.1 Importância dos reatores num processo global	13-14
2.2 Classificação dos reatores trifásicos (gás-líquido-sólido)	14-15
2.3 <i>Bubble Columns Reactors</i>	15-18
2.4 Operação dos <i>Bubble Columns Reactors</i>	18-20
2.5 <i>Bubble Columns Reactors</i> modificados	20-21
2.6 Bioprocessos e os <i>Bubble Column Reactors</i>	22-25
2.7 Comparações entre os Reatores <i>Air-Lift</i> e os <i>Bubble Column Reactors</i>	25-26
2.8 Fluidodinâmica gás-líquido	26-27
2.9 Características e classificações dos Reatores <i>Air-Lift</i>	27-28
2.10 Classificações dos Reatores <i>Air-Lift</i>	28
2.11 Distribuição da fase gás	28-30
2.12 <i>Bubble Column Reactors</i> versus Reatores <i>Air-Lift</i>	30-31

2.13 Aplicabilidade industrial de reações envolvendo sistemas trifásicos:	
gás-líquido-sólido	32
2.14 Problemas gerais no projeto e análise dos <i>Bubble Columns Reactors</i>	32-33
2.15 Parâmetros fluidodinâmicos e parâmetros específicos da reação	33-35
2.16 Aplicações de <i>CFD</i> para Reatores Multifásicos	
2.16.1 <i>Introdução</i>	35-38
2.16.2 <i>Principais Trabalhos a cerca da descrição dos fenômenos físicos e químicos relevantes nos Reatores Air-Lift e aplicações de CFD para Reatores Multifásicos</i>	38-75
2.17 Conclusões	75-76
3 METODOLOGIAS E MODELAGEM	
3.1 Modelagem básica empregada empregada em escoamentos multifásicos	77
3.2 Metodologia Eule-Euler	77-78
3.2.1 <i>Equação da Continuidade</i>	78
3.2.2 <i>Balço de Momentum</i>	78-79
3.2.3 <i>Termo das forças entre as fases</i>	79
3.2.3.1 <i>Friction Force</i>	80
3.2.3.2 <i>Added Mass Force</i>	80-81
3.2.3.3 <i>Lift Force (Magnus Force)</i>	81
3.3 Metodologia Euler-Lagrange	81-82
3.3.1 <i>Equações do modelo</i>	82
3.3.2 <i>Descrição do movimento das bolhas</i>	82-84
3.4 Comentários gerais acerca da modelagem, dos resultados (possíveis e “desejados”) e dos métodos numéricos sugeridos	85-87
3.5 Conclusões	88

4 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

4.1 Introdução	89-90
4.2 Geração da Malha Numérica	90-92
4.3 Problema em 2D, regime estacionário, puramente difusivo e com termo fonte	92-97
4.4 Obtenção de G_f na interface	97
4.5 Realismo físico da solução de ϕ calculada nos pontos nodais da malha numérico	98-99
4.6 Não-linearidade	99-100
4.7 Linearização do termo fonte	100-102
4.8 Tratamento das condições de contorno	102
4.8.1 <i>Fronteira de Primeira Espécie</i>	103-104
4.8.2 <i>Fronteira de Segunda Espécie</i>	105-106
4.8.3 <i>Fronteira de Terceira Espécie</i>	106-109
4.9 Aplicação do tratamento das condições de contorno para um caso genérica em 2D	109-112
4.10 Solução dos sistema de equações algébricas obtidas pela discretização da Equação Geral de Transporte (<i>Partial Differential Equation-PDE</i>)	
4.10.1 <i>Comentários Gerais</i>	112
4.10.2 <i>Método Gauss-Seidel ponto-a-ponto</i>	113
4.10.3 <i>TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algoritmo) linha-a-linha</i>	113-114
4.11 Problemas em 2D, regime transiente, puramente difusivo e com termo fonte	114-115
4.11.1 <i>Tratamento do termo transiente</i>	115
4.11.2 <i>Tratamento do termo difusivo nas direções x e y</i>	115-116

4.11.3 <i>Tratamento do termo fonte</i>	116-118
4.11.4 <i>Discretização das contribuições associadas ao regime transiente</i>	119-121
4.12 Discretização do termo transiente empregando o Esquema Totalmente Implícito	122-123
4.13 Sub-Relaxação e Sobre-Relaxação	123-126
4.14 Problemas com termos difusivos e convectivos	126
4.15 Problema em 1D, regime estacionário, sem termo fonte, com termos convectivo e difusivo	127-128
4.15.1 <i>Formulação preliminar (Diferenças-Centrais)</i>	128-130
4.15.2 <i>Esquema Upwind</i>	131-133
4.15.3 <i>“Solução Exata”</i>	133-137
4.15.4 <i>Esquema Exponencial</i>	137-141
4.15.5 <i>Esquema Híbrido</i>	141-145
4.15.6 <i>Formulação Generalizada</i>	145-151
4.16 Derivação da equação discretizada em 2D para problemas convectivos-difusivos	152-158
4.17 Método dos Volumes Finitos para problemas convectivos-difusivos numa configuração tridimensional (3D)	159-161
4.18 Esquema de Alta-Ordem	162
4.18.1 <i>Esquema Upwind de Alta-Ordem (2ª ordem) (HUW: Higher-Order Upwind Differencing)</i>	163-164
4.18.2 <i>Formulação dos esquemas TVD (Total Variation Dominishing)</i>	165-168
4.18.3 <i>Aplicação dos esquemas TVD na discretização dos termos convectivos presentes nas equações diferenciais parciais associadas à modelagem da fluidodinâmica dos Bubble Columns Reactors</i>	168-170
4.19 Problemas em que o campo de escoamento é desconhecido.	171-172

4.20 Dificuldades que surgem no emprego de métodos iterativos diretos para o cálculo do campo de pressão	173-177
4.21 Malha numérica alternada ou deslocada	178-180
4.22 Equações do Momentum	181-182
4.23 Correções da Pressão e Velocidade	182-184
4.24 Algoritmo <i>SIMPLE</i> (<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i>)	185
4.24.1 <i>Equação da Correção da Pressão</i>	186-188
4.24.2 <i>Seqüência de operações do algoritmo <i>SIMPLE</i></i>	189-190
4.24.3 <i>Comentários sobre a Equação de Correção da Pressão</i>	191
4.25 Condições de contorno da Equação de Correção da Pressão	192-193
4.26 A natureza relativa da pressão	193
4.27 Algoritmo <i>SIMPLER</i> (<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Revised</i>)	194
4.27.1 <i>Equação da Pressão</i>	195-197
4.27.2 <i>Seqüências de operações do algoritmo <i>SIMPLER</i></i>	197-198
4.28 Comentários gerais a respeito do <i>SIMPLE</i> e do <i>SIMPLER</i>	198-199
4.29 Algoritmo <i>SIMPLEC</i> (<i>SIMPLE Consistent</i>)	
4.29.1 <i>Comentários Gerais</i>	199-202
4.29.2 <i>Seqüência de operações do algoritmo <i>SIMPLEC</i></i>	202-203
4.30 Comentários gerais a respeito dos algoritmos <i>SIMPLE</i>, <i>SIMPLER</i> e <i>SIMPLEC</i>	203-205
4.31 Procedimento de solução de problemas em regime estacionário, tendo como incógnita o campo de escoamento (acoplamento pressão e velocidade)	205-212
4.32 Procedimento de solução de problemas em regime transiente, tendo como incógnita o campo de escoamento (acoplamento pressão e velocidade)	212-213

4.33 Geometrias Complexas	
4.33.1 Comentários Gerais	214-217
4.33.2 Método dos Volumes Finitos baseado nos Elementos Finitos	217-220
4.34 Conclusões	221
5 PROCEDIMENTOS, RESULTADOS E COMENTÁRIOS	
5.1 Procedimentos Gerais	223-225
5.1.1 Construção da Geometria e Geração da Malha Numérica	225-227
5.1.2 Simulações	228
5.1.3 Condições de Contorno	
5.1.3.1 <i>Escoamento Monofásico, Modelo Laminar e Regime Estacionário</i>	228-229
5.1.3.2 <i>Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e Regime Estacionário</i>	229
5.1.3.3 <i>Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e Regime Transiente</i>	230
5.1.3.4 <i>Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento e Regime Estacionário</i>	230-232
5.1.4 Convergência	232
5.2 Resultados e Comentários	
5.2.1 Escoamento Monofásico, Modelo Laminar e Regime Estacionário	233
5.2.2 Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e Regime Estacionário	234-235
5.2.3 Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e Regime Transiente	236-240
5.2.4 Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento e Regime Estacionário	241-244
5.3 Conclusões	245
6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES	
6.1 Conclusões	247-248
6.2 Sugestões	248-249

7 BIBLIOGRAFIA

7.1 Bibliografia e Referências	251-255
---------------------------------------	---------

8 ANEXO

8.1 Resultados das simulações visualizados no plano $Z = 3, 45$ m.	
8.1.1 <i>Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e Regime Estacionário</i>	257
8.1.2 <i>Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e Regime Transiente</i>	258-260
8.2 Configuração da geometria empregada no estudo de caso	261-263

NOMENCLATURA

Notação referente ao Capítulo 3:

C_a : constante da *Added Mass Force*, adimensional.

C_D : coeficiente da *Drag Force*, adimensional.

C_L : coeficiente da *Lift Force*, adimensional.

C_m : constante da *Magnus Force*, adimensional.

C_{VM} : coeficiente da *Virtual Mass Force*, adimensional.

C_w : coeficiente de fricção, $\text{Kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$.

\vec{F}_a : *Added Mass Forces*, N.m^3 .

\vec{F}_{total} : somatório das forças externas , relevantes, que atuam na bolha, N.

\vec{F}_G : força que atua na bolha devido a gravidade, N.

\vec{F}_L : *Lift Force*, N.

\vec{F}_P : força que atua na bolha devido o gradiente de pressão, N.

\vec{F}_m : *Lift Force (Magnus Force)*, N.m^3 .

\vec{F}_s : *Friction Force*, N.m^3 .

\vec{F}_{VM} : *Virtual Mass Force*, N.

\vec{F}_w : forças que atuam entre fases, N.m^{-3} .

\vec{g} : aceleração da gravidade, m.s^{-2} .

\vec{I} : coeficiente dada *Virtual Mass Force*, adimensional.

m_b : massa da bolha, Kg.

R_b : Raio da bolha, m.

t : tempo ,s.

$\bar{\mathbf{u}}$: velocidade da fase líquida, seção 3.3.2, m.s^{-1} .

$\bar{\mathbf{u}}_{\mathbf{g}}$: vetor velocidade da fase gás, m.s^{-1} .

$\bar{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}}$: vetor velocidade da fase k, seção 3.2.2, m.s^{-1} .

$\bar{\mathbf{u}}_{\mathbf{l}}$: vetor velocidade da fase líquida, m.s^{-1} .

$\bar{\mathbf{v}}$: velocidade da bolha, m.s^{-1} .

$\bar{\mathbf{g}}$: aceleração da gravidade, m.s^{-2}

\bar{v} : velocidade da bolha, m.s^{-1} .

V_b : volume de uma bolha, m^3 .

Letras gregas

Δt : passo de integração, s.

ϵ_g : *gas hold-up*, adimensional.

ϵ_k : *hold-up* da fase k, adimensional.

ϵ_l : fração do volume da célula computacional ocupada por líquido.

ρ_g : densidade da fase gás, Kg.m^{-3} .

ρ_k : densidade da fase k, seção 3.2.2, Kg.m^{-3} .

ρ_l : densidade da fase líquida, Kg.m^{-3} .

μ_k : viscosidade da fase k, $\text{Kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$.

$\tilde{\tau}_k$: tensor tensão da fase k, N.m^{-2} .

Ω : vorticidade na fase líquida, s^{-1}

∇ : operador vetorial e diferencial.

∇P : gradiente de pressão, N.m^{-3}

Notação referente ao Capítulo 4:

a : Coeficiente das equações discretizadas; coeficiente de x na distribuição $\phi(x,y)$, seção 4.33.2.

a_B : Coeficiente da variável dependente genérica ϕ associada a um ponto nodal de fronteira, seção 4.8

A : Coeficiente associado ponto nodal “ $i+1$ ”, seção 4.15.6; coeficiente independente na distribuição $\phi(X,Y)$, seção 4.33.2.

A_b : Área normal à direção do transporte da variável genérica dependente ϕ , avaliada na interface que delimita a fronteira, seção .(m²)

A_k : Área, finita, normal à direção do transporte da variável ϕ , avaliada na interface “ k ”.(m²)

A_{nx} : Área normal à direção x .(m²)

A_{ny} : Área normal à direção y . (m²)

b : Termo constante nas equações discretizadas; coeficiente de y na distribuição $\phi(x,y)$, seção 4.33.2.

B : Coeficiente associado ponto nodal “ i ”, seção 4.15.6; coeficiente do termo exponencial na distribuição $\phi(X,Y)$, seção 4.33.2.

c : Coeficiente independente na distribuição $\phi(x,y)$, seção 4.33.2.

C : Coeficiente de Y na distribuição $\phi(X,Y)$, seção 4.33.2.

d : Coeficiente do termo da diferença de pressão

dA_{nx} : Área infinitesimal e normal à direção x .(m²)

dA_{ny} : Área infinitesimal e normal à direção y .(m²)

dV : Volume infinitesimal.(m³)

D : Condutância difusiva.(Kg.s⁻¹)

f : Fator de interpolação.

f_e : Razão entre os segmentos $\delta_{x_{cE}}$ e $\delta_{x_{DE}}$

f_n : Razão entre os segmentos $\delta_{y_{nN}}$ e $\delta_{y_{PN}}$

F : Taxa mássica através da interface entre dois V.C. adjacentes.(Kg.s⁻¹)

$\text{grad } \phi$: Gradiente da variável genérica ϕ , no caso uma grandeza escalar ($\text{grad } \phi = \nabla \cdot \phi$)

h : Coeficiente de transferência convectiva da variável genérica dependente ϕ

J : Fluxo da variável ϕ

J_b : Fluxo da variável ϕ na fronteira, seção 4.8

J^* : Fluxo normalizado da variável genérica ϕ .

L : Comprimento do domínio de solução.(m)

P : Pressão.(Pa)

P^* : Estimativa do campo de pressão.(Pa)

P' : Correção da pressão.(Pa)

P : Número de Peclet

$R_{\phi, \text{conv}}$: Resistência convectiva

$R_{\phi, \text{difus}}$: Resistência condutiva

S_ϕ : Termo fonte para a variável genérica ϕ

S_c : Parte constante na linearização do termo fonte

S_P : Coeficiente de ϕ_P na linearização do termo fonte

S_{cA} : Parcela adicional, associada às condições de fronteira, da parte constante na linearização do termo fonte.

S_{PA} : Parcela adicional, associada às condições de fronteira, do coeficiente de ϕ_P na linearização do termo fonte.

S_{c_u} : Parte constante na linearização do termo fonte referente a Equação do Momentum na direção x.

S_{c_v} : Parte constante na linearização do termo fonte referente a Equação do Momentum na direção y.

S_{c_w} : Parte constante na linearização do termo fonte referente a Equação do Momentum na direção z.

S_{p_u} : Coeficiente de ϕ_p na linearização do termo fonte referente a Equação do Momentum na direção x.

S_{p_v} : Coeficiente de ϕ_p na linearização do termo fonte referente a Equação do Momentum na direção y.

S_{p_w} : Coeficiente de ϕ_p na linearização do termo fonte referente a Equação do Momentum na direção z.

t : Tempo (s)

u : Componente da velocidade na direção x.(m.s⁻¹)

v : Componente da velocidade na direção y.(m.s⁻¹)

w : Componente da velocidade na direção z. (m.s⁻¹)

u' : Correção da componente da velocidade na direção x.(m.s⁻¹)

v' : Correção da componente da velocidade na direção y.(m.s⁻¹)

w' : Correção da componente da velocidade na direção z.(m.s⁻¹)

u* : Componente, na direção x, do campo imperfeito de velocidade baseado numa estimativa do campo de pressão.(m.s⁻¹)

v* : Componente, na direção y, do campo imperfeito de velocidade baseado numa estimativa do campo de pressão. (m.s⁻¹)

w* : Componente, na direção z, do campo imperfeito de velocidade baseado numa estimativa do campo de pressão. (m.s⁻¹)

\hat{u} : Componente da pseudovelocidade na direção x.(m.s⁻¹)

\hat{v} : Componente da pseudovelocidade na direção y.(m.s⁻¹)

\hat{w} : Componente da pseudovelocidade na direção z.(m.s⁻¹)

U : Velocidade resultante, seção 4.33.2.(m.s⁻¹)

\bar{v} : Vetor velocidade (m.s⁻¹)

x,y,z : Coordenadas espaciais (m)

Letras gregas

α : Fator de relaxação, seção 4.13; Coeficiente adimensional, que depende do número de Peclet, empregado na expressão de J^* , seção 4.15.6; fator de relaxação aplicado nas componentes da velocidade, seção 4.24.3

α_p : Fator de relaxação para pressão

β : Coeficiente adimensional, que depende do número de Peclet, empregado na expressão de J^* .

Γ_ϕ : Coeficiente do termo difusivo para uma variável genérica ϕ .

δ : Distância entre dois pontos nodais subsequentes, numa direção genérica.

ΔV : Volume, finito, de um Volume de Controle genérico.(m³)

Δx : Largura do volume de controle (profundidade do V.C. na direção x) (m)

$\delta_{x_{KL}}$: Distância , na direção x, entre o ponto nodal genérico “K” e o ponto nodal genérico “L” (m)

$\delta_{x_{kl}}$: Distância, na direção x, entre a interface genérica “k” e o ponto nodal genérico “L” (m)

$\delta_{x_{KI}}$: distância, na direção x, entre o ponto nodal “K”e a interface genérica “I” (m)

$\delta_{x_{kl}}$: Distância, na direção x, entre a interface genérica “k” e a interface subsequente e genérica “l”.(m)

Δy : Altura do volume de controle (profundidade do V.C. na direção y).(m)

$\delta_{y_{KL}}$: Distância , na direção y, entre o ponto nodal genérico “K” e o ponto nodal genérico “L”.(m)

$\delta_{y_{kl}}$: distância, na direção y, entre o ponto nodal genérico “K” e a interface genérica “l”.(m)

$\delta_{y_{kL}}$: Distância, na direção y, entre a interface genérica “k” e o ponto nodal genérico “L”.
(m)

$\delta_{y_{kl}}$: Distância, na direção y, entre a interface genérica “k” e a interface subsequente e genérica “l”.(m)

Δz : Espessura do volume de controle (profundidade do V.C. na direção z).(m)

$\delta_{z_{KL}}$: Distância, na direção z, entre o ponto nodal genérico “K” e o ponto nodal genérico “L”.(m)

$\delta_{z_{kl}}$: Distância, na direção x, entre o ponto nodal genérico “K” e a interface genérica “l”.(m)

$\delta_{z_{kL}}$: Distância, na direção x, entre a interface genérica “k” e o ponto nodal genérico “L”.(m)

$\delta_{z_{kl}}$: Distância, na direção x, entre a interface genérica “k” e a interface subsequente e genérica “l”.(m)

θ : Coeficiente adimensional em termo do qual o limitador associado ao fluxo é expresso

μ : Viscosidade dinâmica.(Kg.m⁻¹.s⁻¹)

ρ : Massa específica (Kg.m⁻³)

ΣR_{ϕ} : Somatório das resistências ao transporte da variável genérica dependente ϕ

ϕ : Variável genérica dependente

ϕ_B : Valor da variável dependente genérica numa das fronteira

ϕ_f : Variável dependente genérica dependente ϕ avaliada num fluido escoando e em contato com uma das fronteiras.

Φ : Limitador associado ao fluxo.

∇ : Operador vetorial e diferencial

Sobrescrito:

* : Valor da variável dependente genérica ϕ na iteração anterior, e o campo imperfeito de velocidade baseado numa estimativa do campo de pressão

o : Valor antigo (no instante t) da variável

Subescrito:

B : Vizinho na direção z, situado abaixo do ponto nodal genérico P, seção 4.19; ponto nodal de fronteira (“Boundary”) seção 4.8.

b : Interface, que delimita dois V.C. subsequentes, situada entre os pontos nodais B e P, seção 4.19; interface que delimita a fronteira, 4.8

E : Vizinho na direção x, situado a leste do ponto nodal genérico P.

EE : Segundo vizinho, na direção x, situado a leste, do ponto nodal genérico P.

e : Interface, que delimita dois V.C. subsequentes, situada entre os pontos nodais P e E.

N : Vizinho na direção y, situado ao norte do ponto nodal genérico P.

n : Interface, que delimita dois V.C. subsequentes, situada entre os pontos nodais P e N.

P : Ponto nodal genérico considerado na formulação das expressões

S : Vizinho na direção y, situado ao sul do ponto nodal genérico P.

s : Interface, que delimita dois V.C. subsequentes, situada entre os pontos nodais S e P.

T : Vizinho na direção z, situado acima do ponto nodal genérico P.

t : Interface, que delimita dois V.C. subsequentes, situada entre os pontos nodais P e T.

W : Vizinho na direção x, situado a oeste do ponto nodal genérico P.

WW : Segundo vizinho, na direção x, situado a oeste do ponto nodal genérico P.

w : Interface, que delimita dois V.C. subsequentes, situada entre os pontos nodais W e P.

viz : Pontos nodais vizinhos ao ponto nodal genérico P.

Notação referente ao Capítulo 9:

d_1 : Diâmetro da maior região do *Downcomer*.(m)

d_2 : Diâmetro da menor região do *Downcomer*.(m)

d_G : Diâmetro da alimentação da fase gás.(m)

d_L : Diâmetro da alimentação de líquido.(m)

D_L : Diâmetro da saída lateral no separador.(m)

D_R : Diâmetro do *Riser*.(m)

D_S : Diâmetro do separador .(m)

h_1 : Altura da região do *Downcomer* que apresenta diâmetro d_1 .(m)

h_2 : Altura da região do *Riser* que apresenta diâmetro d_2 .(m)

h_G : Altura entre a base do *Riser* e o centro da alimentação da fase , parte externa e lateral, da fase gás.(m)

h_L : Altera entre a base *Riser* e o centro da alimentação da fase líquida.(m)

H_R : Altura do *Riser*.(m)

H_S : Altura do separador.(m)

h_{Lout} : Altura entre a base do separador e o centro da saída lateral de líquido no Separador.(m)

L_{out} : Velocidade superficial do líquido saída lateral do Separador, m/s

t : Parâmetro empregado na localização das conexões do *Riser* e do *Downcomer* na base do Separador.(m)

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1: Representação, empregando “Diagrama de Blocos”, das limitações associadas aos modelos geralmente empregados na modelagem de Reatores <i>Air-Lift</i> .	10
Figura 1.2: Representação, empregando Diagrama de Blocos, dos objetivos gerais vislumbrados ao se empregar uma modelagem mais detalhada.	11
Figura 2.1: Hierarquia do projeto de um Processo .	13
Figura 2.2: Fatores a serem levados em consideração no projeto de reatores.	14
Figura 2.3: Representação da classificação dos Reatores <i>Air-Lift</i> no universo dos reatores trifásicos.	15
Figura 2.4: Caso simples dos <i>Bubble Column Reactors</i> .	16
Figura 2.5: Esquema da circulação do líquido.	19
Figura 2.6: Condições de operação dos <i>Bubble Column Reactors</i> .	20
Figura 2.7: Alguns tipos de Reatores <i>Air-Lift</i> : a) <i>Internal-Loop Air-Lift Reactor</i> com circulação externa de líquido; b) <i>Internal-Loop Air-Lift Reactor</i> com circulação interna de líquido; c) <i>External-Loop Air-Lift Reactor</i> .	21
Figura 2.8: Representação em diagrama de blocos das influências da circulação do líquido nos Biorreatores <i>Air-Lift</i> .	27
Fig 2.9: Alguns exemplos de distribuidores estáticos da fase gás.	29
Fig 2.10: Alguns exemplos de distribuidores dinâmicos da fase gás.	30
Figura 2.11: Regiões de operação dos Reatores <i>Air-Lift</i> e dos <i>Bubble Column Reactors</i> .	31
Figura 2.12: Fluxograma do procedimento básico para análises quantitativa de um processo físico empregando modelagem e simulações.	37
Figura 3.1: Fluxograma dos níveis de modelagem passíveis de serem empregados na descrição da Fluidodinâmica dos <i>Bubble Column Reactors</i> e dos Reatores <i>Air-Lift</i> , bem como os “resultados desejados”.	85
Figura 3.2: Soluções numéricas dotadas e desprovidas de realismo físico.	87
Figura 4.1: Representação de um Volume de Controle Finito genérico, numa configuração em 2D.	90

Figura 4.2: a) Perfil em degrau e b) Perfil linear por partes.	94
Figura 4.3: Malha numérica genérica para uma configuração bidimensional (2D).	96
Figura 4.4: Linearização do termo fonte no ponto nodal P empregando a Série de Taylor truncada no 2ª termo.	101
Figura 4.5: Representação de uma fronteira de Primeira Espécie para problemas em 1D.	103
Figura 4.6: Representação de uma fronteira de Segunda Espécie para problemas em 1D.	105
Figura 4.7: Representação de uma fronteira de Terceira Espécie para problemas em 1D.	106
Figura 4.8: Malha numérica numa configuração bidimensional, que apresenta todas as 3 espécies de condições de fronteira.	109
Figura 4.9: Variação da variável ϕ com o tempo para os diferentes esquemas de discretização aplicados nas contribuições associadas ao regime transiente.	119
Figura 4.10: Volume de Controle genérico que apresenta transporte convectivo, da variável dependente ϕ , nas interfaces.	127
Figura 4.11: Perfil linear por partes empregado na avaliação de ϕ nas interfaces.	128
Figura 4.12: Representação do Esquema <i>Upwind</i> .	131
Figura 4.13: Solução exata para o problemas unidimensionais com convecção-difusão e que apresentam $\Gamma_\phi = \text{cte}$.	136
Figura 4.14: Três pontos nodais consecutivos numa malha numérica unidimensional.	138
Figura 4.15: Variação do coeficiente a_E , numa forma adimensional (a_E/D_e) com o número de Peclet.	142
Figura 4.16: Fluxo total J_ϕ entre 2 pontos nodais.	145
Figura 4.17: Variação de A e B com o número de Peclet.	147

Figura 4.18 : Função $A(P)$ para vários esquemas de discretização dos termos convectivos.	151
Figura 4.19: Volume de Controle Finito para uma configuração bidimensional, retratando os fluxos totais da variável dependente ϕ nas interfaces.	153
Figura 4.20: Configuração, em três dimensões (3D), de um ponto nodal genérico P e seus vizinhos.	159
Figura 4.21: Representação de um ponto nodal genérico P e des seus vizinhos: 2 a direita e 2 a esquerda; numa malha numérica unidimensional.	163
Figuras 4.22: Três pontos nodais consecutivos numa malha numérica unidimensional.	173
Figura 4.23: Campo de pressão periódico.	175
Figura 4.24: Campo de pressão periódico em 2D.	175
Figuras 4.25: Três pontos nodais consecutivos numa malha numérica unidimensional.	176
Figura 4.26: Campo periódico de velocidade em 1D.	177
Figura 4.27: Volume de Controle, associado a malha secundária, para a avaliação da componente “u” da velocidade num ponto nodal genérico (malha secundária) e seus vizinhos.	179
Figura 4.28: Volume de Controle, associado a malha secundária, para a avaliação da componente “v” da velocidade num ponto nodal genérico (malha secundária) e seus vizinhos .	180
Figura 4.29: Volume de Controle genérico para um configuração bidimensional.	186
Figura 4.30: Condição de contorno num Volume de Controle de fronteira para a Equação da Continuidade.	192
Figura 4.31: Malha genérica em 2D mostrando um ponto nodal P da malha principal e seus vizinhos, bem como pontos nodais da malha deslocada (malha secundária).	204
Figura 4.32: Diagrama do Algoritmo <i>SIMPLE</i> aplicado a problemas em regime estacionário.	207
Figura 4.33: Diagrama do Algoritmo <i>SIMPLER</i> , aplicado a problemas em regime Estacionário.	209-210

Figura 4.34: Diagrama do Algoritmo <i>SIMPLEC</i> , aplicada a problemas em regime estacionário.	211-212
Figura 4.35: Diagrama do Algoritmo de solução de problemas em regime transientes, tendo como incógnita o campo de escoamento (acoplamento pressão e velocidade).	213
Figura 4.36: exemplos (figuras:4.36a e 4.36b) de discretização de domínios de solução associados a geometrias irregulares, empregando elementos triangulares.	215
Figura 4.37: Princípio do Método dos Volumes Finitos baseado nos Elementos Finitos.	218
Figura 4.38: Macrotriângulos e subtriângulos.	220
Figura 5.1: Geometria do estudo de caso (Reator <i>Air-Lift</i>).	225
Figura 5.2: Malha numérica (em 3D) da superfície que delimita o domínio de solução.	226
Figura 5.3: Gráfico dos <i>RMSs</i> das variáveis dependentes modeladas na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Laminar e em Regime Estacionário.	233
Figura 5.4: Gráfico dos <i>RMSs</i> das variáveis dependentes modeladas na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e em Regime Estacionário.	234
Figura 5.5: Gráfico dos <i>RMSs</i> associados as grandezas utilizadas na quantificação da turbulência na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e em Regime Estacionário.	235
Figura 5.6: (a) Vetores velocidade representando o campo de velocidade ($m.s^{-1}$) no plano $Y = 0$ e (b) Valores do módulo do vetor velocidade ($m.s^{-1}$) no plano $Y = 0$.	235
Figura 5.7: Gráfico dos <i>RMSs</i> das variáveis dependentes modeladas na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e em Regime Transiente.	236
Figura 5.8: Gráfico dos <i>RMSs</i> associados as grandezas utilizadas na quantificação da turbulência na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e em Regime Transiente.	237
Figura 5.9: Valores do módulo dos vetores velocidade ($m.s^{-1}$) no plano $Y = 0$ a diferentes tempos (tempo real) : (a) $t = 2,5$ s; (b) $t = 15,0$ s; (c) $t = 30,0$ s e (d) $t = 50,0$ s.	238
Figura 5.10: (a) valores do módulo dos vetores velocidade ($m.s^{-1}$) no plano $Y = 0$ obtidos diretamente a partir da consideração do Regime Estacionário e (b) valores do módulo dos	

vetores velocidade (m.s^{-1}), no plano $Y = 0$, obtidos empregando um tempo suficientemente grande no Problema Transiente. 239

Figura 5.11: (a) Vetores velocidade representando o campo de velocidade (m.s^{-1}) no plano $Y = 0$ obtidos diretamente a partir da consideração do Regime Estacionário e (b) Vetores velocidade representando o campo de velocidade (m.s^{-1}) no plano $Y = 0$ obtidos empregando um tempo suficientemente grande no Problema Transiente. 240

Figura 5.12: Gráfico dos *RMSs* das variáveis dependentes modeladas na simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento e em Regime Estacionário; empregando o Esquema *Upwind* na discretização dos termos convectivos. 241

Figura 5.13: Gráfico dos *RMSs* associados as grandezas utilizadas na quantificação da turbulência na simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento e em Regime Estacionário. 242

Figura 5.14: Gráfico dos *RMSs* das variáveis dependentes modeladas na simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento e em Regime Estacionário; empregando o Esquema *Upwind* de Alta-Ordem na discretização dos termos convectivos. 243

Figura 5.15: Gráfico dos *RMSs* associados as grandezas utilizadas na quantificação da turbulência na simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário. 244

Figura A.1: (a) Vetores velocidade representando o campo de velocidade (m.s^{-1}) no plano $Z = 3,45$ m e (b) Valores do módulo dos vetores velocidade (m.s^{-1}) no plano $Z = 3,45$ m. 257

Figura A.2: Vetores velocidade representando o campo de velocidade (m.s^{-1}) no plano $Z = 3,45$ m a diferentes tempos (tempo real): (a) $t = 2,5$ s; (b) $t = 15,0$ s; (c) $t = 30,0$ s e (d) $t = 50,0$ s. 258

Figura A.3: (a) Vetores velocidade representando o campo de velocidade (m.s^{-1}) no plano $Z = 3,45$ m obtidos diretamente a partir da consideração do Regime Estacionário e (b) Vetores velocidade representando o campo de velocidade (m.s^{-1}) no plano $Z = 3,45$ m obtidos empregando um tempo suficientemente grande na simulação considerando o Regime Transiente. 259

Figura A.4: (a) Valores do módulo dos vetores velocidade (m.s^{-1}) no plano $Z = 3,45$ m) obtidos diretamente a partir da consideração do Regime Estacionário e (b) Valores do

módulo dos vetores velocidade (m.s^{-1}) no plano $Z = 3,45$ m obtidos empregando um tempo suficientemente grande na simulação considerando o Regime Transiente. 260

Figura A.5: Configuração da geometria do estudo de caso empregado neste trabalho. 261

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Forças que atuam em uma bolha não-deformável e esférica ascendendo em regime transiente num escoamento não-uniforme de líquido. 83

Tabela 4.1: Equação diferencial parcial discretizada sem e com o emprego de um fator de relaxação. 125

Tabela 4.2: Expressões para a função $A(|P|)$ para os diferentes esquemas de discretização empregados nos termos convectivos. 150

Tabela 4.3: Expressões para os coeficientes das equações algébricas aplicando a formulação generalizada. 160

Tabela 4.4: Expressões de F , D e P avaliados nas faces de um V.C. para várias configurações. 161

Tabela 4.5: Expressões para os Volumes de Controles (em Coordenadas Cartesianas) e para as áreas normais às direções de transporte da variável ϕ , para várias configurações. 161

Tabela 5.1: Características da malha numérica (em 3D), na qual o domínio de solução foi dividido, associada a figura 6.2 (malha numérica (em 3D) da superfície que delimita o domínio de solução) 227

Tabela 5.2: Características da malha numérica (em 3D), na qual o domínio de solução foi dividido, empregada nas simulações. 227

Tabela 5.3: Dados empregados nas simulações dos Escoamentos Monofásicos. 228

Tabela 5.4: Comparações entre as simulações. 244

1 INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

“Os sábios criaram os livros para que outros sábios se criassem.”

(Autor desconhecido)

1.1 Organização da Tese

No Capítulo 1 faz-se uma breve colocação das vantagens dos Reatores *Air-Lift*, citando algumas características e peculiaridades dos *Bubble Column Reactors*, classe em que estão inseridos os reatores *Air-Lift*. Efetivou-se uma contextualização global das aplicações da Fluidodinâmica Computacional, ou *Computational Fluid Dynamics-CFD* como é largamente conhecida na área, em vários problemas pertencentes ao campo da Engenharia Química. Cita-se as motivações que levaram a esta empreitada, bem como os possíveis objetivos vislumbrados.

No Capítulo 2 listou-se a importância da modelagem de Reatores, efetuando uma explanação sobre os tipos de Reatores *Air-Lift*, vantagens e desvantagens em relação a outros reatores multifásicos. Percebeu-se uma grande carência na literatura no que tange a aplicação da *CFD* na modelagem da fluidodinâmica dos reatores *Air-Lift*. Visando contornar tal dificuldade fez-se um estudo dos *Bubble Column Reactors* citando: condições de operação, peculiaridades no tocante à construção e as principais dificuldades na modelagem, visando o projeto e análise de tais reatores, haja visto que os Reatores *Air-Lift* são uma subclasse menos estudada que os *Bubble Column Reactors*.

No que tange ao Estado da Arte da modelagem dos Reatores *Air-Lift* empregando as ferramentas associadas a *CFD*, fez-se um revisão da literatura referente ao emprego das referidas ferramentas nos *Bubble Column Reactors*, nos últimos 10 anos, pois há uma deficiência significativa de trabalhos desta natureza aplicados aos Reatores *Air-Lift*, o que pode ser percebido pela ocorrência de um único trabalho em que a *CFD* foi aplicada num *External-Loop Air-Lift*.

No Capítulo 3 efetuou-se uma breve colocação e explanação das metodologias Euler-Euler e Euler-Lagrange, aplicadas na modelagem básica da fluidodinâmica de escoamentos multifásicos, buscando listar as principais hipóteses e os modelos matemáticos (determinísticos) resultantes.

A partir do conjunto de equações resultante de cada metodologia, fez-se uma contextualização dos resultados possíveis e desejados de acordo com a capacidade de processamento das máquinas atuais. Em função da classificação do conjunto de equações diferenciais que descrevem a Fluidodinâmica de escoamentos multifásicos, cita-se os principais métodos numéricos aplicáveis e as peculiaridades do Método dos Volumes Finitos, devido a sua maior aplicação nas resoluções numéricas de sistemas de equações diferenciais parciais, ou *System of Partial Differential Equations-PDEs* como é largamente conhecido na área, presentes nos modelos associados à fluidodinâmica dos *Bubble Column Reactors*, preponderantemente e em menor grau nos Reatores *Air-Lift*.

No Capítulo 4, faz-se uma fundamentação do Método dos Volumes Finitos com uma posterior derivação das equações genéricas associadas ao mesmo, para os principais problemas passíveis de serem resolvidos pela referida técnica, onde cada termo foi discretizado de acordo com as suas particularidades.

Cita-se as limitações do Método dos Volumes Finitos quando aplicado a problemas cuja geometria caracteriza-se como complexa, efetuando a fundamentação do Método dos Volumes Finitos baseado nos Elementos Finitos como estratégia empregado para contornar tal dificuldade.

No Capítulo 5 faz-se uma colocação dos procedimentos aplicados na modelagem em 3D para *External-Loop Air-Lift Reactors* listando as limitações e dificuldades encontradas. Mostra-se a geometria e a malha empregada nas simulações efetuadas, bem como os resultados obtidos. Vale ressaltar que para as simulações apresentadas é realizada uma breve fundamentação associada às condições de contorno e posteriores comentários a respeito da satisfação ou não do critério de convergência.

No Capítulo 6 efetua-se a explanação dos objetivos iniciais desta Tese em conjunção como os resultados obtidos, discutindo o emprego de artifícios numéricos e matemáticos no que tange à superação das dificuldades encontradas.

Abre-se um leque de sugestões de abordagens alternativas e mais recomendadas no que se refere à modelagem da fluidodinâmica dos *External-Loop Air-Lift Reactors* empregando as ferramentas da *CFD* encerradas nos códigos comerciais, em função dos dados disponíveis na literatura e da natureza da complexidade de tais sistemas.

O Capítulo 7 encerra a bibliografia e as referências consultadas e/ou empregadas na elaboração deste trabalho.

No Anexo encontram-se os resultados das simulações visualizadas num plano $Z = 3,45$ m e da configuração da geometria empregada como estudo de caso, citando as modificações aplicadas de modo a tornar as simulações mais genéricas.

Sugere-se àqueles que não conhecem a fundamentação e derivação do Método dos Volumes Finitos nem as peculiaridades e dificuldades associadas à modelagem dos Reatores *Air-Lift*, principalmente no que tange a descrição em 3D da Fluidodinâmica, a seguinte ordem de leitura dos capítulos e seções que constituem esta Dissertação:

1º) Capítulo 1

2º) Capítulo 2: seções 2.1 a 2.15

3º) Capítulo 3

4º) Capítulo 4

5º) Capítulo 2: seção 2.16

6º) Capítulo 5 e Anexo

7º) Capítulo 6

1.2 Introdução geral

A larga aplicação de Reatores *Air-Lift* nas indústrias química, bioquímica e petroquímica ocorre devido as suas vantagens em relação a outros reatores multifásicos, tais como: apresentam uma excelente transferência de calor (tal característica permite um melhor controle da temperatura que é uma relevante variável de processo), possibilita manter a atividade catalítica global num patamar desejado pela injeção contínua de pequenas quantidades de catalisador, baixos custos de operação e construção. Portanto, uma modelagem mais detalhada agregará mais conhecimento sobre o comportamento destes reatores, permitindo melhores projetos de tais sistemas e uma maior compreensão de sua dinâmica, o que melhorará a operação, pois melhores simulações e estratégias de controle mais robustas poderão ser desenvolvidas.

Os modelos detalhados de *Bubble Column Reactors*, classe onde estão inseridos os reatores *Air-Lift*, levam em consideração várias interações entre fenômenos físico-químicos em diferentes tempos e posições do sistema, entre eles o escoamento dinâmico de duas fases que apresenta como potencial motriz da fase gasosa forças relacionadas com o empuxo, que dependem do *gas hold-up* local. A transferência de massa e a reação química dependem da concentração local e da interface local gás/líquido, as quais são resultados do *gas hold-up* local e da distribuição do tamanho das bolhas ao longo do reator; ambos fatores são fortemente influenciado pela fluidodinâmica (BAUER e EIGENBERGER, 1999).

O agente motriz na classe de Reatores *Air-Lift* é a injeção de gás, a qual ocasiona a circulação do líquido, que influencia o tempo médio de residência, por isso é importante um bom entendimento dos parâmetros fluidodinâmicos que controlam a distribuição da fase gasosa e consequentemente o campo de velocidades do líquido (COCKX *et al*, 1997).

Grande parte dos modelos empregados na descrição do escoamento bifásico (gás - líquido) num *Bubble Column Reactor* com recirculação interna de líquido são em 1D, nível de modelagem mais geral onde correlações globais são obtidas, ou 2D que são mais detalhados e simulam na geometria circular, aproveitando a simetria, não sendo porém capazes de representar características importantes das forças de empuxo que influenciam preponderantemente o escoamento das bolhas numa extensão razoável. No entanto, os *Bubble Column Reactors*, e principalmente os da subclasse dos Reatores *Air-Lift*, somente são razoavelmente simulados, no que tange à modelagem da fluidodinâmica, se um modelo dinâmico tridimensional (3D) for empregado (BAUER e EIGENBERGER, 1999).

Termos de reação e transferência de massa são comumente inclusos em modelos simplificados (por exemplo, *cell models with back mixing*) ou nos modelos unidimensionais (1D), fornecendo informações a cerca da descrição da transferência de massa entre as fases (gás-líquido) no Reator *Air-Lift* (BAUER e EIGENBERGER, 1999).

É comentado nos artigos mais recentes que as correlações globais, disponíveis na literatura, empregadas no projeto e *scale-up* de Reatores *Air-Lift* são restritas a uma geometria específica. Portanto, não é aconselhável sua extrapolação para diferentes geometrias, oferecendo dificuldades para suas aplicações em projetos de novos reatores ou expansões dos existentes em operação, por isso, a nível global, os Reatores *Air-Lift* são

considerados caixas-pretas, havendo a possibilidade de estimativa de suas principais características a partir de correlações (COCKX *et al.*, 1997).

1.3 Aplicações da *CFD* no campo da Engenharia Química

A Fluidodinâmica Computacional envolve a solução numérica das equações de conservação (massa, momentum, energia, concentração e etc). A aplicação de tal ferramenta na modelagem de reatores químicos pode melhorar a descrição do escoamento, o qual, à luz da engenharia das reações químicas, geralmente, é tratado empregando uma combinação de modelos altamente idealizados (por exemplo: *Plug-Flow Reactor-PFR* e *Continuous-Stirred Tank Reactor-CSTR*) (HARRIS *et al.*, 1996). Na maioria dos casos, uma otimização do campo de escoamento pode resultar num aumento de 1 ou 2 por cento na seletividade, porém, devido à escala de produção industrial, isto pode representar um enorme aumento na lucratividade. Pode-se citar algumas das aplicações da *CFD* no campo da Engenharia Química, a seguir:

1.3.1 Modelagem de reatores de tanque agitado e tanques de mistura

A Fluidodinâmica Computacional é aplicada na modelagem de escoamento em reatores de tanque agitado desde os últimos anos da década de 70 (do século XX). As simulações do campo de escoamento de reatores de tanque agitado não-ideais podem fornecer informações suplementares aplicáveis aos deficientes critérios de *scale-up*, até então, estabelecidos e que são tradicionalmente usados nos projetos de tais reatores, em conjunção com os resultados de laboratório ou testes em escala piloto. Tais critérios podem apresentar validação duvidosa ou até mesmo contraditória em alguns casos, e envolvem quantidades globais tais como: potência por unidade de massa, número de Reynolds para agitadores e velocidade na extremidade dos agitadores; enquanto as variáveis de escoamento, que apresentam variação espacial, particularmente as quantidades que retratam a turbulência, podendo variar de 2 a 3 ordens de grandeza no interior do domínio de solução do escoamento, podem ter um impacto crucial no desempenho do reator.

O emprego das ferramentas da *CFD* nas simulações de escoamentos turbulentos monofásicos em reatores agitados não-ideais com o objetivo básico de predizer o desempenho de tais sistemas, usualmente requer aproximações na modelagem

fenomenológica, sustentadas por uma extensiva validação experimental, apesar de que algumas simulações de escoamentos multifásicos usando a *CFD* em reatores de tanque agitado não-ideais tem sido conduzidas desde meados da década de 90 (HARRIS *et al.*, 1996).

Há vários *softwares* que modelam o escoamento em tanques de mistura. Eles permitem a predição do padrão de escoamento baseado em certas condições de fronteira. Os modelos mais confiáveis usam dados gerados pela Mecânica dos Fluidos para os agitadores em questão, e um razoável número de células (modelagem empregando células) podem fornecer um padrão global de escoamento no tanque. Estes padrões de escoamento, por sua vez, podem fornecer o campo de velocidades, linhas de corrente e valores localizados de energia cinética para um sistema. Seu principal uso visa fornecer *insights* dos efeitos de variações produzidas nas variáveis (associadas ao processo de mistura) baseado em certas características do processo de mistura. Os referidos programas podem modelar velocidade, taxa de deformação e energia cinética; porém não estavam adaptados, até meados da década de 90, a considerar a difusão ou o transporte convectivo de massa nos processos industriais.

Estudos realizados nos relativamente simples tanques transparentes, empregando um fluido traçador ou partículas, podem fornecer uma idéia a respeito do padrão global de escoamento. É importante um cuidadoso balanço entre o tempo consumido e o esforço computacional associados à obtenção dos padrões de escoamento empregando a *CFD*, comparado com as suas aplicabilidades nos processos industriais. O futuro da *CFD* na modelagem de processos industriais parece muito encorajador e uma razoável quantidade de tempo e esforços no avanço de tal ferramenta poderá produzir resultados imediatos bem como uma potencial avaliação futura de processos (PERRY *et al.*, 1997).

O campo de escoamento fornecido pela Fluidodinâmica Computacional, devidamente validado, pode ser empregado para estimar o tempo de mistura para diferentes projetos de agitadores, substituindo o método clássico e experimental, fundamentado na injeção de um traçador numa determinada localização do vaso, seguida da monitoração da variação da concentração com o tempo numa outra localização específica do equipamento. O processo de mistura pode ser modelado pela resolução da equação da conservação para o traçador (SAHU *et al.*, 1999).

1.3.2 Escoamento de polímero

O projeto de extrusoras em escala comercial é frequentemente baseada na experiência de construção de tais equipamentos. Embora essa experiência seja muito importante, ela não é suficiente para o *scale-up* das extrusoras existentes para máquinas de grande porte. Experiências são também frequentemente relacionadas a um certo de tipo de polímero, o que produz dificuldades para o uso das mesmas no projeto de elaboração de novos produtos, totalmente diferente dos anteriores. Para obter mais *insight* dos fenômenos físicos ocorrendo numa extrusoras, medições detalhadas podem ser muito úteis. Entretanto, os resultados das medições podem nem sempre ser suficiente para explicar totalmente os fenômenos observados. Neste caso, as informações adicionais, como por exemplo: simulações de escoamentos não-newtoniano e não-isotérmico numa extrusora, podem ser úteis. A principal característica do referido escoamento é o fato da viscosidade do fluido, o qual sendo um novo tipo de polímero, pode exibir uma dependência combinada da taxa de deformação e da temperatura, assim como o fato do fluido estar escoando numa geometria complexa.

O emprego da *CFD* na modelagem de escoamento de polímeros pode ser útil no entendimento da função dos perfis de temperatura e da distribuição do tempo de residência na determinação da qualidade do produto, o que afeta o desempenho no uso final do polímero. Logo, as aplicações da modelagem associada à *CFD* podem auxiliar na otimização do referido processo pela melhoria da distribuição do tempo de residência do fluido de modo a evitar pontos quentes (*hot spots*) os quais causam degradação do polímero. As simulações oriundas da Fluidodinâmica Computacional podem fornecer um elo entre o modelo reológico e os resultados experimentais, possibilitando a melhoria dos modelos. Nesta área de aplicação, as limitações no que se refere a capacidade de processamento dos computadores e a validação de modelos reológicos são de relevante importância (HARRIS *et al.*, 1996).

1.3.3 Modelagem da interação turbulência-reação química

Reações paralelas e consecutivas em sistemas gasosos submetidos a escoamentos turbulentos são comuns nos processos industriais. Separadamente da necessidade de taxas cinéticas acuradas, o principal problema da modelagem do sistema supracitado é a escolha

de uma ótima aproximação para os termos fontes referentes à reação química nas equações de transporte, expressa em termos de valores médios, para a fração das espécies químicas. O principal problema físico é considerar a influência do transporte turbulento no avanço da reação química, embora existam vários modelos que buscam retratar as interações turbulência-reação química implementados em códigos comerciais (de *CFD*) disponíveis, e validados com dados de plantas, suas aplicações são limitadas pelos recursos computacionais, por isso até meados da década de 90 os modelos mais sofisticados são aplicáveis as configurações em 2D. No entanto, tal fato não descarta a possibilidade dos cálculos associados aos modelos considerados na Fluidodinâmica Computacional contribuírem para melhores projetos de reatores (HARRIS *et al.*, 1996).

1.3.4 Modelagem de escoamentos multifásicos

Em muitos tipos de reatores há a presença de partículas de catalisadores e/ou bolhas de gás num meio fluido (meio contínuo). Dois tipos de reatores que apresentam importância considerável nas indústrias são:

- a) Reatores que apresentam *Riser* : possuem uma região onde gás é borbulhado no meio líquido.
- b) Reatores de lama (*Slurry Reactors*), caso mais geral que pode englobar os reatores que apresentam *Riser*: apresentam partículas em suspensão no meio líquido em paralelo com a injeção de gás (borbulhamento), caracterizando um sistema trifásico.

A implementação comercial dos dois tipos de reatores, anteriormente citados, implica em dificuldades no que tange a vencer os notórios problemas de *scale-up* (HARRIS *et al.*, 1996).

As simulações oriundas da *CFD* constituem uma alternativa para a representação dinâmica das partículas ou bolhas, tratando-as como objetos sem estrutura; experimentando uma variedade de forças, das quais as mais importantes são: “gravidade”/empuxo e arraste fluidodinâmico. Para *hold-ups* da fase dispersa, suficientemente baixas, a influência das partículas ou bolhas na fase fluida contínua e, as interações entre elas (interações: bolha-bolha, bolha-partícula e partícula-partícula) podem ser negligenciadas. Nestes casos, o campo de velocidade e propriedades associadas à turbulência da fase contínua podem ser primeiramente obtidos pela resolução das equações que descrevem o movimento do fluido,

para a referida fase na ausência de partículas ou bolhas, e então resolve-se posterior e individualmente a fase dispersa no domínio de solução com a distribuição espacial de velocidade apropriada ao processo de interesse. Entretanto, muitos dos processos de interesse, incluindo os tipos de reatores anteriormente citados, apresentam uma densa dispersão de partículas e/ou bolhas. Logo, as interações entre as bolhas e partículas no fluido devem ser quantificadas, aumentando consideravelmente o esforço computacional devido a resolução das equações que descrevem o campo de escoamento na presença de forças que representam as interações fluidodinâmica entre fase dispersa e fase contínua. Várias metodologias podem ser empregadas no tratamento das interações partícula-partícula, provavelmente a mais simples seja a que consiste numa modificação do termo referente ao arraste fluidodinâmico de modo a incluir uma dependência da *solids hold-up* de sólidos. No caso das interações bolha-bolha, *break-up* e coalescência constituem fenômenos adicionais a serem tratados. Além disso, para bolhas grandes que surgem em leitos fluidizados e *Bubble Column Reactors*, é mostrado que a dinâmica detalhada do formato da bolha exerce um função crucial na fluidodinâmica do sistema como um todo (HARRIS *et al.*, 1996).

A aproximação denominada Euler-Euler aplicável à modelagem de escoamentos multifásicos, constitui uma alternativa atrativa para o caso de escoamentos multifásicos que apresentam uma densa fase dispersa, em detrimento da aproximação denominada Euler-Lagrange que foi implicitamente esboçada no parágrafo anterior, em função da primeira ser computacionalmente mais eficiente. No entanto, permanecem sérios problemas a respeito da interpretação física de uma fase dispersa sendo modelada como uma fase contínua análoga, bem como as apropriadas relações para transferir às propriedades efetivas as contribuições referentes à fase dispersa, tais como a viscosidade (HARRIS *et al.*, 1996).

1.4 Motivação e Objetivos Gerais

Este trabalho tem como objetivo preliminar avaliar as abordagens Eule-Euler e Euler-Lagrange, empregadas no desenvolvimento da modelagem baseada nos conceitos da Fluidodinâmica Computacional, para os reatores do tipo *Air-Lift*.

A motivação desta empreitada foi preponderantemente fundamentada em dois fatores:

1) Grande parte dos modelos, empregados atualmente são unidimensionais (1D); tal nível de modelagem é mais geral, onde correlações globais são obtidas a partir de dados experimentais (COCKX *et al.*, 1997). As simulações empregando modelos bidimensionais (2D) não são capazes de representar características essenciais dos potenciais motrizes associados ao empuxo, nos escoamento bifásicos presentes nos *Bubble Column Reactors* e nos Reatores *Air-Lift* (BAUER e EIGENBERGER, 1999). Devido a tais fatos, surgem certas dificuldades em algumas aplicações dos modelos supracitados, que são sucintamente mostradas na figura 1.1:

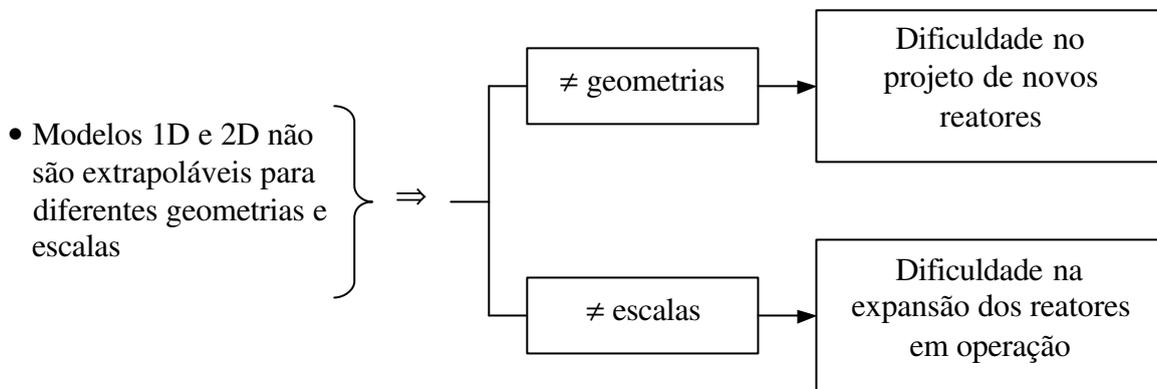


Figura 1.1: Representação, empregando “Diagrama de Blocos”, das limitações associadas aos modelos geralmente empregados na modelagem de Reatores *Air-Lift*.

2) A modelagem em 3D empregando conceitos da *CFD* apresenta algumas características de interesse:

- a) Simula o escoamento em 3D, levando em conta a geometria, o que pode reduzir os problemas de *scale-up* e projetos.
- b) Pode contornar o problema oriundo do fato de que o mecanismo dominante no escoamento é diferente para diferentes escalas, afetando o *scale-up* (LAPIN e LÜBBERT, 1994), por exemplo :

Grande Escala: a estrutura do escoamento turbulento seria determinada pelas dimensões do equipamento.

Média Escala: a estrutura do escoamento turbulento seria determinada pela taxa de dissipação da energia cinética de turbulência.

Pequena Escala: os efeitos viscosos e tensão superficial tornam-se decisivos.

- c) Retrata a influência do movimento das bolhas na variação da massa específica local, pois a massa específica média das duas fases é principalmente determinada pelo *gas hold-up*, que apresenta variação espacial, considerando-se os problemas em que a fase contínua é alimentada em batelada e a fase dispersa continuamente.

A modelagem 3D usando os conceitos da *CFD* é uma ferramenta no estudo dos *Bubble Column Reactors*, fornecendo valiosas informações a respeito das distribuições temporal e espacial do escoamento. Isto possibilita simular o comportamento 3D para qualquer espécie de geometria reduzindo os problemas de *scale-up*. Entretanto, esta abordagem pode consumir uma maior quantidade de esforços e tempo, e alguns fenômenos físicos locais podem permanecer não compreendidos totalmente (COCKX *et al.*, 1997)

Num primeiro contato com uma modelagem mais detalhada, principalmente da fluidodinâmica, empregando ferramentas associadas a *CFD*, pode-se vislumbrar objetivos gerais que são retratados pela figura 1.2:

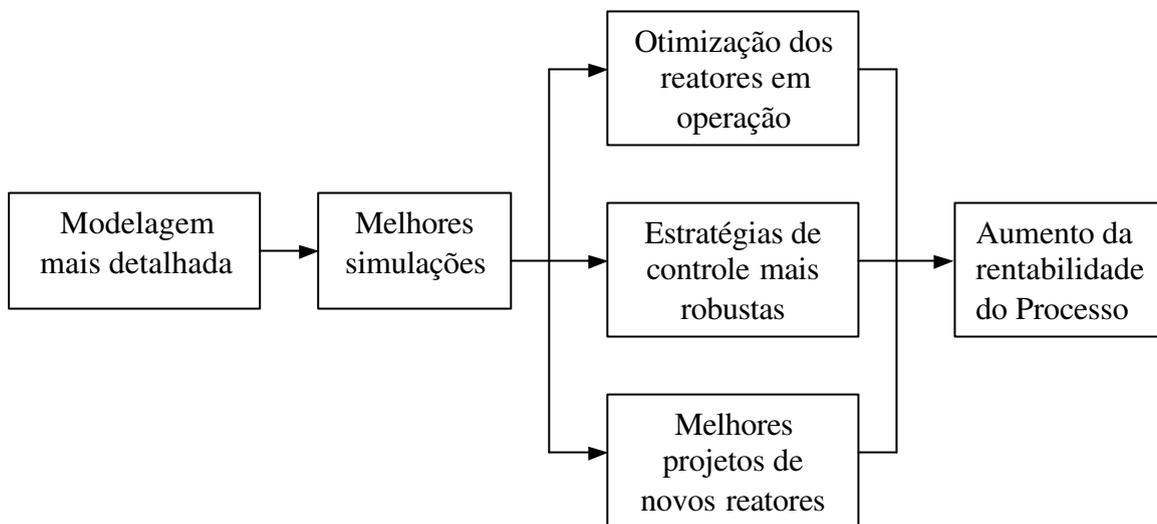


Figura 1.2: Representação, empregando Diagrama de Blocos, dos objetivos gerais vislumbrados ao se empregar uma modelagem mais detalhada.

2 SISTEMA EM ESTUDO

“- Dois que nunca se saciam: o que acumula dinheiro e o que acumula saber.”

(Calila e Dimna, Ibn Al-Mukafa)

2.1 Importância dos reatores num processo global

O centro dos processos químicos e bioquímicos é o reator em torno do qual são projetadas as operações de separação e purificação, incluindo o tratamento de efluentes. Um sistema de troca de calor, sistema de utilidades e uma rede de controle, completam o processo. Logo, a importância do reator para o projeto bem sucedido, o desenvolvimento e a operação de uma unidade de produção é claramente mostrada na figura 2.1:

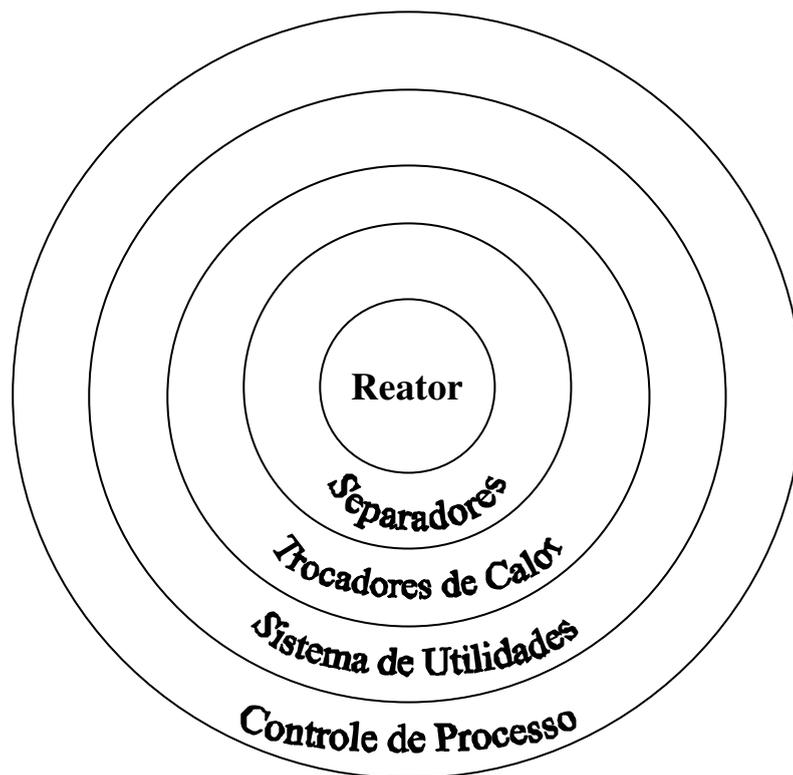


Figura 2.1: Hierarquia do projeto de um Processo .(Fonte: adaptada a partir de CHISTI, 1989, pág. 2)

Entretanto, a figura 2.1 não sugere os distintos, não relacionados e estritamente seqüenciados, estágios do projeto, fornecendo apenas um esquema da demarcação geral do método de projeto de um processo global. O projeto de um reator envolve várias considerações, muitas das quais são retratadas pela figura 2.2. Cinética de reação, fenômenos de transporte, considerações operacionais e estruturais influenciam o projeto (CHISTI, 1989).

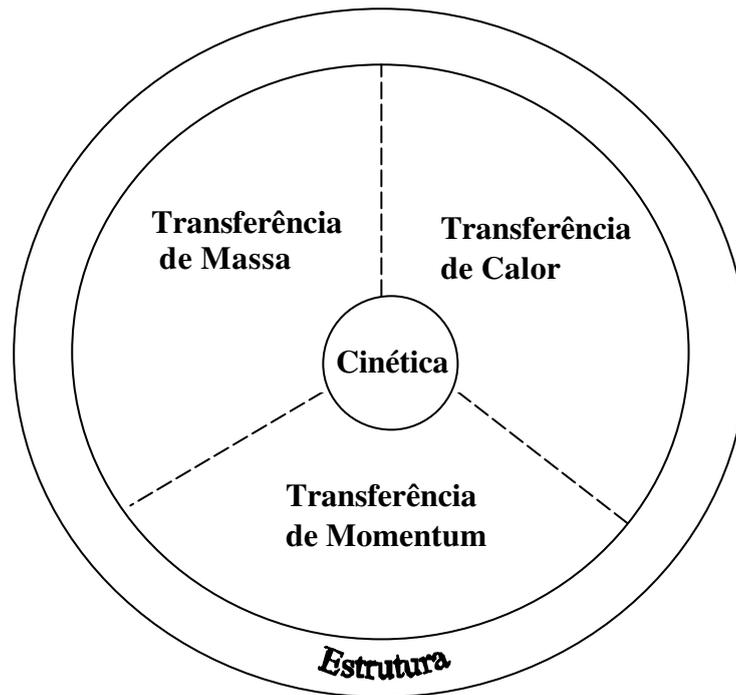


Figura 2.2: Fatores a serem levados em consideração no projeto de reatores.(Fonte: adaptada a partir de CHISTI, 1989, pág. 3)

2.2 Classificação dos reatores trifásicos (gás-líquido-sólido)

Os Reatores *Air-Lift* são tipos peculiares pertencentes a uma subclasse (*Bubble Column Reactors*) dos reatores de lama (*Slurry Reactors*), conforme mostrado na figura 2.3, que por sua vez caracterizam-se como multifásicos devido à presença de partículas de catalisadores em suspensão num líquido, enquanto o gás que é borbulhado atravessa a suspensão (sólido + líquido) (DECKWER, 1992).

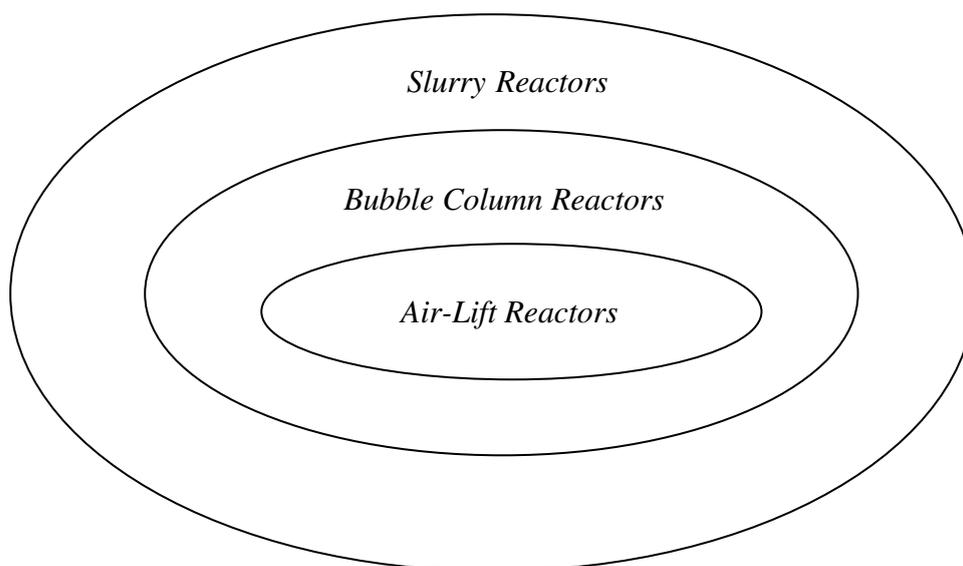


Figura 2.3: Representação da classificação dos Reatores *Air-Lift* no universo dos reatores trifásicos.

Vale ressaltar que os *Slurry Reactors*, e por sua vez os Reatores *Air-Lift*, podem operar em semibatelada (gás sendo alimentado continuamente para uma determinada carga de líquido) ou continuamente. Em muitos casos, a fase líquida constitui um meio inerte para o contato entre o gás e a partícula de catalisador; tal configuração surge em função de reações altamente exotérmicas que caracterizam-se pela presença de uma intensa liberação de calor, o que pode desativar o catalisador mais rapidamente (FOGLER, 1992). Percebe-se pela figura 2.3, que muitas das considerações associadas aos *Bubble Column Reactors* podem ser estendidas aos Reatores *Air-Lift*; já a recíproca pode não ser verdadeira.

2.3 *Bubble Column Reactors*

Os *Bubble Column Reactors* são aparelhos empregados para conduzir reações e transferência de massa, nos quais um ou vários gases são postos em contato e reagem com a fase líquida ou com um componente que encontra-se dissolvido ou em suspensão. A transferência de massa em certas condições pode determinar a taxa na qual o processo é conduzido, a qual pode acontecer antes e depois da reação química. Por isso, um grande esforço é dedicado na manutenção das condições que asseguram uma alta taxa de transferência de massa, isto é, uma grande área interfacial e altos níveis de turbulência (DECKWER, 1992).

O aumento do interesse pelos *Bubble Column Reactors* ocorreu em meados da década de 70 , em função dos seguintes fatores:

- 1)Um reconhecimento geral das vantagens fundamentais dos *Bubble Column Reactors*: estruturalmente simples, nenhuma parte mecânica móvel, boas propriedades de transferência de massa e calor, alta estabilidade térmica, etc.
- 2)O surgimento de novos campos de aplicações, especialmente na biotecnologia, tais como: tratamento de efluentes, produção de proteínas a partir de células vivas, fermentação para a produção de antibióticos, etc.
- 3)O ressurgimento do interesse da liquefação de carvão e síntese Fisher-Tropsch em *Slurry Reactors*, ambos processos são extremamente confiáveis na tecnologia dos *Bubble Column Reactors*.

A forma mais simples dos *Bubble Column Reactors* é um cilindro vertical como mostrado na figura 2.4:

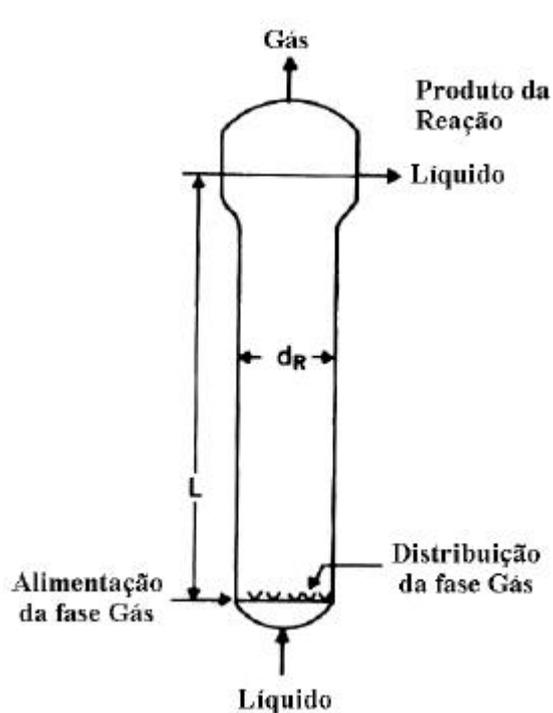


Figura 2.4: Caso simples dos *Bubble Column Reactors*.(Fonte: adaptada a partir de DECKWER, 1992, pág. 2)

Nos *Bubble Column Reactors* a fase gás é alimentada pelo fundo através de um distribuidor, o qual pode variar no projeto. A fase líquida pode ser alimentada em batelada

ou continuamente como a fase gás. Em contraste com muitas operações de transferência de massa, a alimentação em contracorrente não oferece nenhuma vantagem significativa. Ênfase especial tem sido dada aos parâmetros não-ajustados nos *Bubble Column Reactors* com e sem catalisador em suspensão, isto é, *hold-up* das fases, coeficiente de dispersão, propriedade de transferência de massa e calor (DECKWER, 1992).

O topo dos *Bubble Column Reactors* é freqüentemente alargado para facilitar a separação do gás. Os *Bubble Column Reactors* são caracterizados pela falta de quaisquer agitação mecânica, desde que o gás é mais regularmente distribuído na fase líquida. A *Aspect Ratio* (L/d_R), isto é a razão entre comprimento e diâmetro pode variar enormemente. *Aspect Ratios* entre 3 e 6 são comuns e $L/d_R \cong 10,0$ não é infreqüente. O tamanho dos *Bubble Column Reactors* varia de acordo com o uso pretendido e a taxa de produção desejada (DECKWER, 1992).

A construção simples e ausência de qualquer parte mecanicamente operada são duas características importante dos *Bubble Column Reactors*. Em geral, tais tipos de reatores são adaptáveis e apresentam preços razoáveis, podendo ser construídos em dimensões relativamente grandes. Eles caracterizam-se, também, por apresentarem elevados coeficientes de transferência de calor, portanto, encerram temperaturas uniformes ao longo da mistura reacional, até mesmo quando são aplicados em casos que envolvam reações fortemente exotérmicas. Isto é de significativa importância quando são empregados na condução de reações cuja seletividade é altamente dependente da temperatura envolvida. Os *Bubble Column Reactors* trabalham igualmente bem quando submetidos a altas vazões de gás na alimentação e, até mesmo no caso simples mostrado na figura 2.4, a alta taxa de circulação do líquido (devido a ascensão das bolhas de gás no meio reacional) assegura que quaisquer sólidos envolvidos, tais como catalisador, reagente ou biomassa, sejam uniformemente distribuídos. Por outro lado, a circulação tem o efeito adverso devido ao aumento da *back-mixing* e, se as conversões desejadas são elevadas, o volume do reator aumenta consideravelmente. O tempo de residência relativamente curto da fase gás, determinado unicamente pela velocidade de ascensão da bolha, é uma adicional desvantagem (DECKWER, 1992).

Entretanto, enfatiza-se que o fato da simples configuração dos *Bubble Column Reactors*, com ausência de componentes e partes mecânicas e suas baixas exigências de

energia (somente a dispersão da fase gás), fornecem um ambiente para interações fluidodinâmicas extremamente complexas. Isto se manifesta pela extrema sensibilidade mostrada pelos parâmetros fluidodinâmicos, tais como: *gas hold-up* e as propriedades de transferência de massa, produzindo dificuldades de correlacioná-los com um grau desejável de certeza (DECKWER, 1992).

2.4 Operação dos *Bubble Column Reactors*

A fase líquida apresenta massa específica significativamente maior que a da fase gás, e a vazão de líquido através do *Bubble Column Reactors* é baixa. A velocidade superficial da fase gás (U_G) é o mais importante parâmetro e juntamente com a coalescência das bolhas presentes na fase líquida determinam a área interfacial para a transferência de massa. O gás apresenta movimento ascendente ao longo do reator, na forma de bolhas que atravessam o líquido, o qual prossegue a movimentar-se no sentido descendente, conforme mostrado na figura 2.5. Como as bolhas adicionadas no líquido tendem a subir ao longo do centro do reator e as grandes bolhas, em particular, tendem a situar-se preponderantemente nesta área resultando em perfis radiais da *gas hold-up* e de velocidade axial, apesar de que uma inicial distribuição uniforme de gás na seção transversal do reator seja percebida. O líquido próximo da parede move-se em sentido descendente, transportando pequenas bolhas consigo, até uma certa distância da parede. Como mostrado na figura 2.5, uma transferência em sentido contrário e radial de elementos fluidos é superposta no modelo axial de circulação, daí decorre uma alta intermistura de modo que praticamente nenhum gradiente de concentração na fase líquida pode ser encontrado na direção radial (DECKWER, 1992).

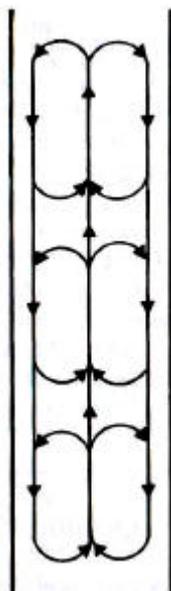


Figura 2.5: Esquema da circulação do líquido. (Fonte: DECKWER, 1992, pág. 4)

As bolhas são uniformemente distribuídas no líquido quando a velocidade superficial do gás é baixa. A distribuição do tamanho das bolhas é relativamente definido e as mesmas sobem uniformemente através da coluna de líquido. A esta condição denomina-se regime homogêneo. Entretanto, este estado não é mantido quando o gás passa a mover-se mais rapidamente através da coluna de líquido, pois agregados de bolhas e grandes bolhas são formadas e estas, por sua vez, sobem mais rapidamente que as bolhas pequenas. Esta condição é denominada regime heterogêneo, sendo freqüentemente comum como um resultado das altas velocidades superficiais do gás, freqüentemente adotadas nas indústrias. Na situação anteriormente comentada, parte do gás, a quantidade que aumentou em função da velocidade superficial do gás, é transportada através do reator na forma de grandes bolhas que ascendem rapidamente. O coeficiente de transferência de massa é maior no caso das bolhas grandes, porém a área interfacial não aumenta, e não é proporcional à vazão da fase gás. Portanto, a conversão do reagente da fase gás obtida no regime heterogêneo é quase sempre abaixo das observadas na região dos regimes homogêneos. A alimentação de gás na qual o regime homogêneo (escoamento quase-laminar) é convertido para o regime heterogêneo (escoamento turbulento) é uma função das propriedades associadas a coalescência do meio e do tipo de distribuidor (DECKWER, 1992).

Um caso especial surge quando *Bubble Column Reactors* de diâmetros relativamente pequenos são usados, caso geralmente empregado em trabalhos de laboratório: as grandes bolhas que surgem no regime heterogêneo são estabilizadas pelas paredes do tubo e movem-se em sentido ascendente ao longo da coluna, de modo empistonado. Estas bolhas alongadas, conhecidas como *Slugs*, mostrado na figura 2.6, preenchem praticamente quase toda a seção transversal e continuam crescendo pelo ajuntamento contínuo de pequenas bolhas durante seu percurso ascendente. Tal situação é conhecida como escoamento *Slug* e ocorrem em aplicações com colunas que apresentam diâmetro em torno de 20 cm ou menos. Taxas de conversão e a capacidade do reator são muito baixas e não podem ser transferidas para um equipamento de grande diâmetro. Escoamentos *Slug* devem ser estritamente evitados tanto em laboratório quanto em plantas pilotos, pois os resultados dos testes são de pouco valor prático (DECKWER, 1992).

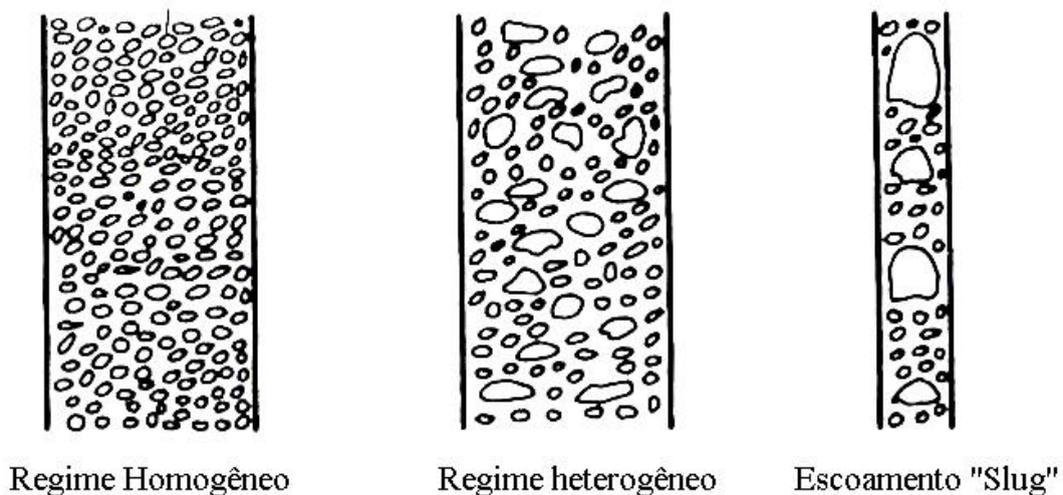


Figura 2.6: Condições de operação dos *Bubble Column Reactors*.(Fonte: adaptada a partir de DECKWER, 1992, pág. 4)

2.5 *Bubble Column Reactors* modificados

Há muitas variações do tipo simples dos *Bubble Column Reactors* mostrado na figura 2.4; muitos tipos oferecem circulação direcional de fluido. O caso mais empregado usa o importante efeito resultante do arraste das bolhas e a diferença na massa específica entre a fase dispersa (gás) e a fase contínua (líquido); a circulação é estabilizada mediante a inserção de um *Loop*. Isto elimina a transferência radial sobre toda a área da seção

transversal. Os *Loop Reactors* de grande porte podem ser projetados com uma linha externa ou interna para retirada de líquido, dependendo da configuração da remoção do gás. Uma linha separada pode ser adicionada para recirculação. Estes reatores são usados em biotecnologia como fermentadores *Air-Lift*. *Loop Reactors* permitem o processamento de grandes quantidades de gás e fornecem uma zona de regime homogêneo. A alta taxa de circulação significa diminuir o tempo de mistura e portanto a ausência de quaisquer gradiente de concentração. Isto é de especial vantagem para processos biotecnológicos nos quais é importante que a biomassa seja circundada por um material de composição constante. Vale ressaltar que o tempo de residência num *Bubble Column Reactor* é uma função do comprimento do reator e da velocidade de ascensão das bolhas (DECKWER, 1992).

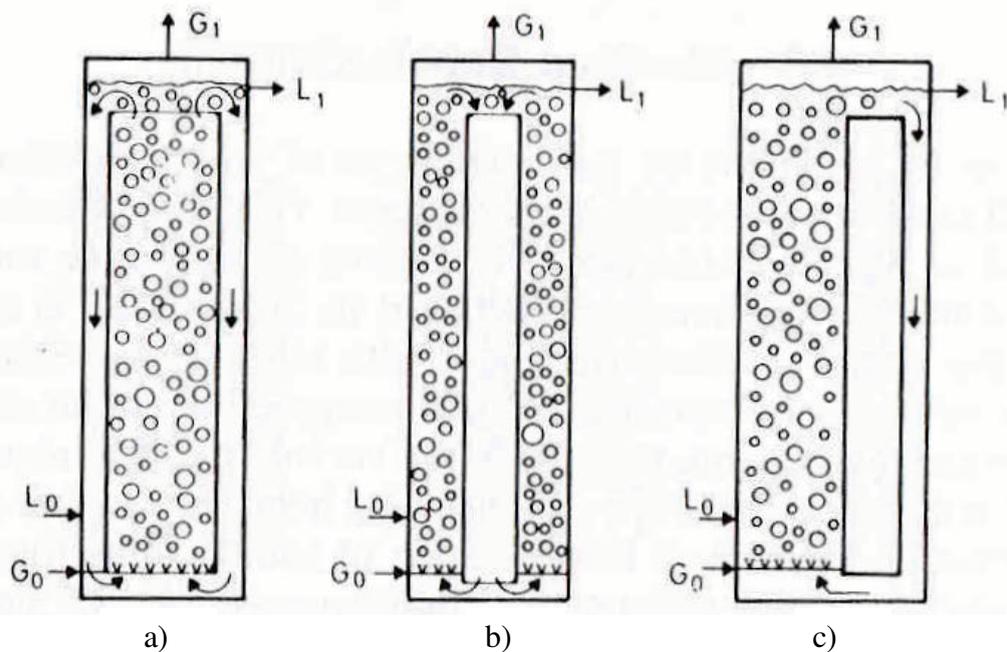


Figura 2.7: Alguns tipos de Reatores *Air-Lift*: a) *Internal-Loop Air-Lift Reactor* com circulação externa de líquido; b) *Internal-Loop Air-Lift Reactor* com circulação interna de líquido; c) *External-Loop Air-Lift Reactor*. (Fonte: DECKWER, 1992, pág. 6)

2.6 Bioprocessos e os *Bubble Column Reactors*

Devido ao crescimento da biotecnologia, pesquisas nos meios industrial e acadêmico têm produzido grandes avanços neste campo. As investigações e desenvolvimento de novas biotransformações e bioquímicas – enzimas, corantes, fragrâncias, hormônio, anticorpos e antibióticos- continuam, apesar de que a atividade associada a utilização comercial do potencial da biotecnologia moderna permanece limitada. Há insuficiência de conhecimentos associados a engenharia de bioprocessos, constituindo um dos vários gargalos para os bem sucedidos projetos e *scale-up* de bioprocessos (CHISTI, 1989).

A manufatura comercial de produtos tais como:

- Fármacos (Ex.: penicilina);
- Enzimas;
- Compostos químicos de interesse comercial (Ex.: ácido cítrico, etanol);
- Alimentos (Ex.: vinagre, iogurte, queijo, cerveja, molho de soja, etc);
- Complementos alimentares;

é dependente de biotransformações catalisadas por microorganismos vivos. Em adição, o tratamento de efluentes é fundamentado, principalmente, no emprego de populações de microorganismos (CHISTI, 1989).

O emprego de microorganismos na produção industrial exige o fornecimento do oxigênio molecular (O_2) para a respiração. Para um determinado modo de crescimento e/ou a produção de um produto desejado numa taxa apropriada, os microorganismos – bactérias, fungos e leveduras – dependem da quantidade de oxigênio dissolvido na fase líquida, a partir da alimentação da fase gás (oxigênio ou ar), logo caracteriza-se um problema de transferência de massa. Os processos multifásicos gás-líquido-sólido aeróbicos estão longe de serem comuns na indústria bioquímica, sendo que os biorreatores, destacando-se os reatores *Air-Lift*, constituem invariavelmente a parte central de tais processos. Vale ressaltar que além da fermentação aeróbica, outros processos industriais, são conduzidas em reatores multifásicos gás-líquido-sólido (CHISTI, 1989).

As reações processadas nos *Bubble Column Reactors* envolvem um sistema gás-líquido no qual uma fase sólida pode estar em suspensão. Tais reatores são amplamente usados nas indústrias em processos convencionais como:

- Oxidação;
- Hidrogenação;
- Cloração;
- Limpeza de gases.

O tipo mais comum de reator químico usado é o tanque agitado que tem sido empregado com muita frequência nos biorreatores para fermentação aeróbica. Os dados de projeto dos reatores de tanque agitado, comuns na indústria química, foram rapidamente adaptados a partir de meados da década de 40, período que abrange a 2ª Guerra Mundial, para o uso na primeira moderna fermentação comercial – a produção do antibiótico penicilina (CHISTI, 1989).

Nos processos envolvendo a fermentação aeróbica, em geral, todos os nutrientes são fornecidos, sendo o oxigênio o menos solúvel e frequentemente tornar-se o nutriente limitante. Há uma concentração crítica de oxigênio caracterizando a quantidade na fase líquida abaixo da qual o crescimento dos microorganismos é limitado pelo fornecimento de oxigênio. Logo, uma rápida taxa de consumo deve ser menor que a taxa de fornecimento de oxigênio, caso deseja-se manter uma determinada produtividade. Em muitos casos até mesmo uma momentânea interrupção no fornecimento de oxigênio conduziria a uma anóxia a qual resultaria em mudanças metabólicas nos microorganismos, implicando na produção de substâncias sem interesse comercial, ou conduziria a alguns outros danos reversíveis ou irreversíveis, como a morte dos microorganismos (CHISTI, 1989).

De antemão percebe-se que a transferência de oxigênio molecular da fase gás para a fase líquida deve ser conduzida de tal maneira nos biorreatores, classe onde se destacam os *Bubble Column Reactors* e os Reatores *Air-Lift*, que uma boa mistura seja alcançada de modo a se obter uma distribuição homogênea da transferência de oxigênio (e outros nutrientes) no biofluido reacional de maneira que as zonas mortas, onde uma possível anóxia possa surgir, sejam evitadas. A fluidodinâmica dos reatores supracitados também

afeta os parâmetros de performance, tais como: transferência de massa, calor e momentum e a intensidade da turbulência no reator (CHISTI, 1989).

Uma restrição ao processo de mistura e a transferência de massa nos reatores aplicados a sistemas biológicos é imposta pelo nível de tensões cisalhantes que os microorganismos podem tolerar. Campos de tensões cisalhantes relativamente altas podem danificar a estrutura dos microorganismos, logo certos níveis permissíveis de tensões cisalhantes tornam-se restrições. Tal fato constitui uma das causas dos avanços na tecnologia de reatores, em função do aumento do uso de cultura de células animais e vegetais, as quais são mecanicamente menos robustas, em processos industriais. O emprego proveitoso destas novas tecnologias demanda melhores projetos de biorreatores e condições de operação mais adequadas. A magnitude das tensões cisalhantes podem alterar o bioprocessamento através de modificações na morfologia dos microorganismos, pois quando submetidos a determinados níveis de tensões os microorganismos deixam de apresentar crescimento através de estruturas livres no meio reacional, passando a apresentar um crescimento em forma de *pellets*, o que intensifica as limitações associadas à transferência de oxigênio em função do surgimento da transferência de oxigênio intrapartícula (CHISTI, 1989).

Embora o mais comum biorreator industrial para fermentações aeróbicas, seja o tanque agitado com a injeção de gás, o mesmo não é o melhor projeto para o cultivo de microorganismos. Primeiramente, porque o gás atravessando o tanque é limitado pelo critério de transbordamento associado a presença de agitadores; segundo, o grau de agitação exigido para obter a transferência de massa desejada do oxigênio molecular, em muitos casos, pode causar danos aos microorganismos que passam na zona de alta tensões cisalhantes, próximas aos agitadores. Além disso, a energia mecânica fornecida ao meio reacional para se alcançar a transferência de massa adequada e a mistura desejada não é somente muito alta, o que implica em perdas no que se refere a economia de energia, como também, a energia mecânica adicionada, a qual é dissipada na forma de calor no biofluido, será removida pelo controle de temperatura. Um outra importante consideração para a maioria dos bioprocessos é a necessidade de operações de limpeza e assepsias, o que constitui uma dificuldade para manter longos períodos de operação (importantes para a produção contínua), quando se empregam os reatores com configuração de tanques agitados onde os agitadores inevitavelmente devem mover-se no interior do vaso. A mecânica

relativamente complexa ratifica as dificuldades de manter a prevenção de contaminação, essencial para um bom funcionamento do reator por espécies indesejadas de microorganismos. Devido sua complexidade, os vasos agitados são mais caros e menos robustos que os vários outros tipos possíveis de biorreatores. Para finalizar, fluidos muito viscosos e não-newtoniano, quando alimentados em tanques agitados, propiciam o surgimento de zonas de aeração confinada às regiões próximas dos agitadores e ocorrem canalizações de gás nestas zonas; enquanto isso, a maioria do resto do volume reacional contida no vaso permanece quase estagnada. Vale ressaltar que grande parte das misturas reacionais contendo bactérias e leveduras apresentam-se como uma suspensão newtoniana que apresenta a viscosidade muito próxima da viscosidade da água, porém alguns sistemas fermentativos contendo bactérias ou leveduras podem apresentar-se altamente viscosos e não-newtoniano (CHISTI, 1989).

O reconhecimento das deficiências dos biorreatores agitados tem estimulado as investigações de outros possíveis projetos. Destes, destacam-se os *Bubble Column Reactors* e suas várias configurações, tendo os reatores *Air-Lift* como os que provavelmente apresentam um notável potencial (CHISTI, 1989).

2.7 Comparação entre os reatores *Air-Lift* e os *Bubble Column Reactors*

A principal vantagem dos reatores *Air-Lift* em relação aos *Bubble Column Reactors* é a ocorrência de misturas e maiores coeficientes de transferência de massa, sendo a última consequência da possibilidade de utilização de elevadas velocidades superficiais do gás nos reatores *Air-Lift*. Vale ressaltar que os reatores *Air-Lift* apresentam a estrutura do escoamento da fase líquida mais definida que os *Bubble Column Reactors* (CHISTI, 1989), o que não significa menos complexos do ponto de vista da modelagem.

Os *Bubble Column Reactors* de geometria circular são os mais meticulosamente estudados no universo dos biorreatores, até mesmo os dados disponíveis para a classe de reatores supracitada foram obtidos empregando água ou soluções; líquidos que muitas vezes não simulam a complexidade dos sistemas empregados na fermentação, particularmente para biofluidos contendo microorganismos que apresentam estruturas filamentosas (CHISTI, 1989).

Os dados disponíveis para os biorreatores do tipo *Air-Lift* são muito limitados e algumas configurações desta subclasse de reatores quase não têm recebido a devida atenção nos trabalhos publicados. Esta deficiência de conhecimento dos vários tipos de *Bubble Column Reactors* e Reatores *Air-Lift*, dados em várias escalas e fluidos que apresentam comportamento semelhante aos sistemas reais de fermentação, é provavelmente o principal fator que dificulta o uso mais amplo destes tipos de reatores na indústria. Dos biorreatores aerados empregados na indústria cerca de 93% são variedades dos tradicionais tanques agitados, enquanto que em torno de 7% são os não-mecanicamente agitados, isto é *Bubble Column Reactors* e Reatores *Air-Lift*. As percentagens anteriormente citadas referem-se aos valores dos produtos produzidos nos respectivos tipos de reatores comentados (CHISTI, 1989).

2.8 Fluidodinâmica gás-líquido

Alguns dos parâmetros fluidodinâmicos de interesse no projeto de reatores são:

- *Gas hold-up* no *Riser* e no *Downcomer*;
- Magnitude da recirculação de líquido (circulação induzida de líquida);
- Coeficientes de dispersão na fase líquida.

O *gas hold-up* apresenta múltipla importância, tendo em vista que o mesmo determina o tempo de residência do gás no líquido, em combinação com o tamanho das bolhas, influenciando ainda a interface gás-líquido disponível para a transferência de massa (CHISTI, 1989).

A circulação de líquido nos Reatores *Air-Lift* é originada a partir da diferença entre as massas específicas globais, que dependem da *gas hold-up*, dos fluidos presentes no *Riser* e no *Downcomer*.

A velocidade de recirculação do líquido é controlada pelo *gas hold-up* no *Riser* e no *Downcomer*; a mesma afetará os referidos *gas hold-up* através do aumento ou diminuição na velocidade de ascensão das bolhas. Em adição, a recirculação de líquido afeta: a turbulência, o coeficiente de transferência de calor na parede fluido-reator, a transferência de massa entre as fases gás-líquido, e as forças cisalhantes para quais os microorganismos serão expostos (CHISTI, 1989). Estas complexas interrelações são melhores retratadas pela figura 2.3:

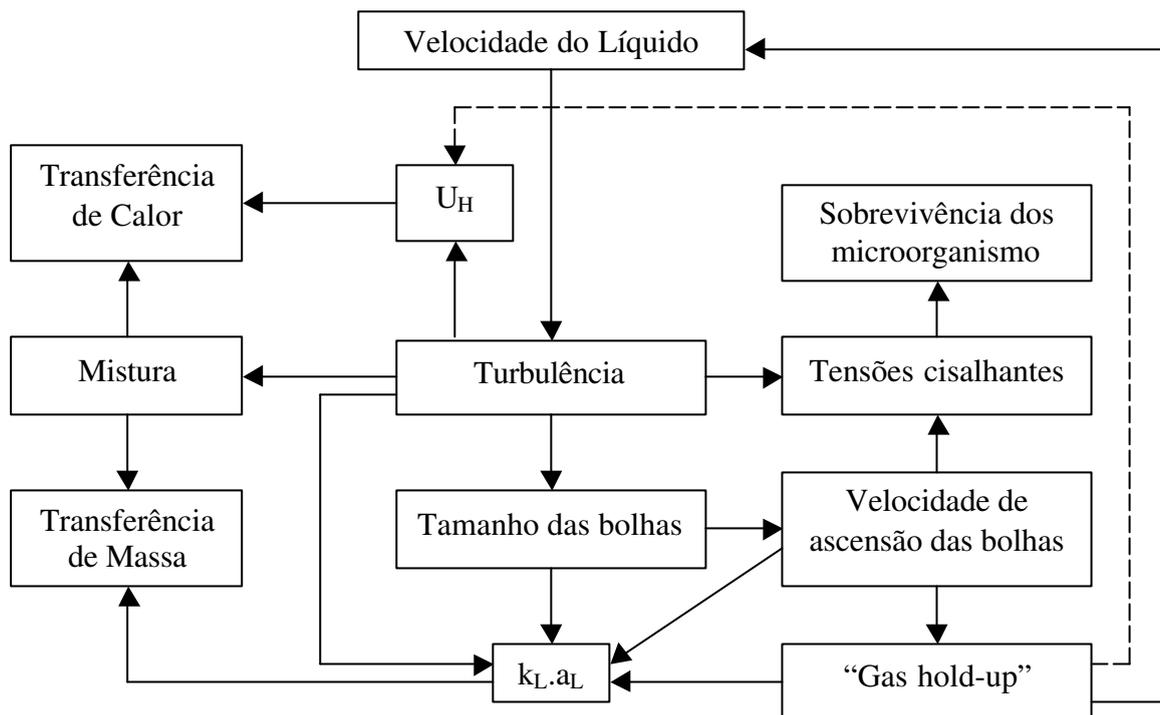


Figura 2.8: Representação em diagrama de blocos das influências da circulação do líquido nos biorreatores *Air-Lift*. (Fonte: adaptada a partir CHISTI, 1989, pág. 26)

2.9 Características e classificação dos Reactores *Air-Lift*

Os Reactores *Air-Lift* são sistemas constituídos por duas regiões distintas onde somente em uma é alimentada a fase gás. A diferença do *gas hold-up* entre estas duas regiões resulta em massas específicas globais distintas para o fluido contido nas mesmas, causando uma circulação do fluido no reator. A parte do reator que contém gás-líquido em movimento preponderantemente ascendente é o *Riser* e a região contendo o fluido em movimento preponderantemente descendente é conhecido como *Downcomer* (CHISTI, 1989).

Teoricamente, os Reatores *Air-Lift* podem ser empregados em quaisquer processos envolvendo gás-líquido ou gás-suspensão. No entanto, a aplicação prática desta classe de reatores depende da capacidade de se obter as taxas de transferência de massa, momentum e calor, desejadas dentro de custos capitais e operacionais aceitáveis. A viabilidade técnica e econômica do emprego dos Reatores *Air-Lift* pode ser estabelecida pelo número de processos e o aumento da utilização destes reatores nas fermentações aeróbicas, no tratamento de efluentes e outras operações similares (CHISTI, 1989).

2.10 Classificações dos Reatores *Air-Lift*

Uma grande variedade de configurações de Reatores *Air-Lift* tem sido investigada e ocasionalmente é encontrada na literatura uma confusão na terminologia. Duas subclasses de Reatores *Air-Lift* podem ser distinguidas:

- 1) *Internal-Loop Air-Lift Reactors*: os quais podem ser visto como *Bubble Column Reactors* que apresentam um anteparo interno separando o *Riser* e o *Downcomer*.
- 2) *External-Loop Air-Lift Reactors* ou *Outer-Loop Air-Lift Reactors*: as regiões do *Riser* e *Downcomer* são dois tubos totalmente separados, conectados por seções horizontais próxima do topo e da base. *Internal-Loop* e *External-Loop Reactors* podem ser adicionalmente subdivididos dependendo de suas peculiaridades.

Reatores *Internal-Loop Air-Lift* e *External-Loop Air-Lift* usualmente apresentam seção transversal circular, porém seções retangulares e quadradas as quais tem aplicações práticas na indústria são também opções decisivas e apresentam a necessidade de serem estudadas (CHISTI, 1989).

2.11 Distribuição da fase gás

A seleção e o projeto do distribuidor de gás é um aspecto particularmente importante para todos os *Bubble Column Reactors*. A distribuição das bolhas e a construção do distribuidor de gás usado tem uma influência decisiva no *hold-up*, área interfacial e no nível de transferência de massa em todos os *Bubble Column Reactors*, incluindo aqueles no quais as bolhas tem um longo caminho a percorrer em contato com a fase líquida. Isto aplica-se a misturas onde a coalescência é desprezível e até mesmo nos casos onde a

coalescência é alta; altos níveis de intensidade turbulenta são registrados durante a dispersão da fase gás, especialmente na região do distribuidor, de modo que uma considerável transferência de massa acontece na referida região (DECKWER, 1992).

O gás pode ser distribuído através de poros ou furos, como mostrado na figura 2.9. Tais aplicações na dispersão da fase gás são também conhecidos como distribuidores estáticos da fase gás, mostrados na figura 2.9, em contraste com os distribuidores dinâmicos nos quais o gás é distribuído pela energia cinética gerada pela força do líquido (DECKWER, 1992), mostrados na figura 2.10.

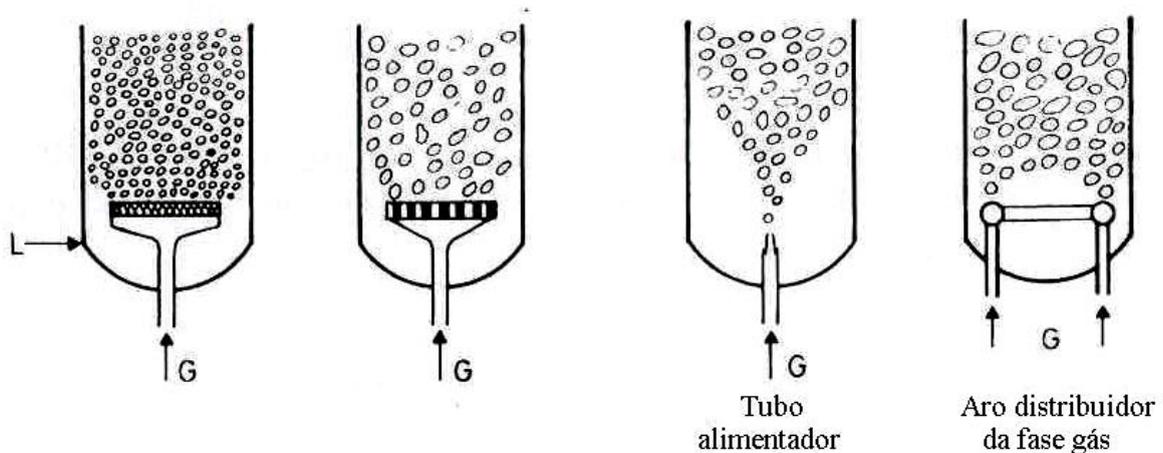


Fig 2.9: Alguns exemplos de distribuidores estáticos da fase gás.(Fonte: adaptada a partir de DECKWER, 1992, pág. 10)

Os tipos de distribuidores, ambas as classes, estáticos e dinâmicos, e suas localizações no *Riser* e/ou *Downcomer* podem ser alteradas para obter-se diferentes performances visando diferentes propósitos. Em adição, o *Riser* e/ou *Downcomer* podem conter estruturas tais como:

- . pratos perfurados;
- .misturadores estáticos;
- .Chicanas projetadas a partir da parede.

Percebe-se de antemão que há inúmeras variações possíveis e aplicáveis no projeto dos Reatores *Air-Lift* básicos e que podem ser utilizadas de modo vantajoso para diferentes aplicações (CHISTI, 1989).

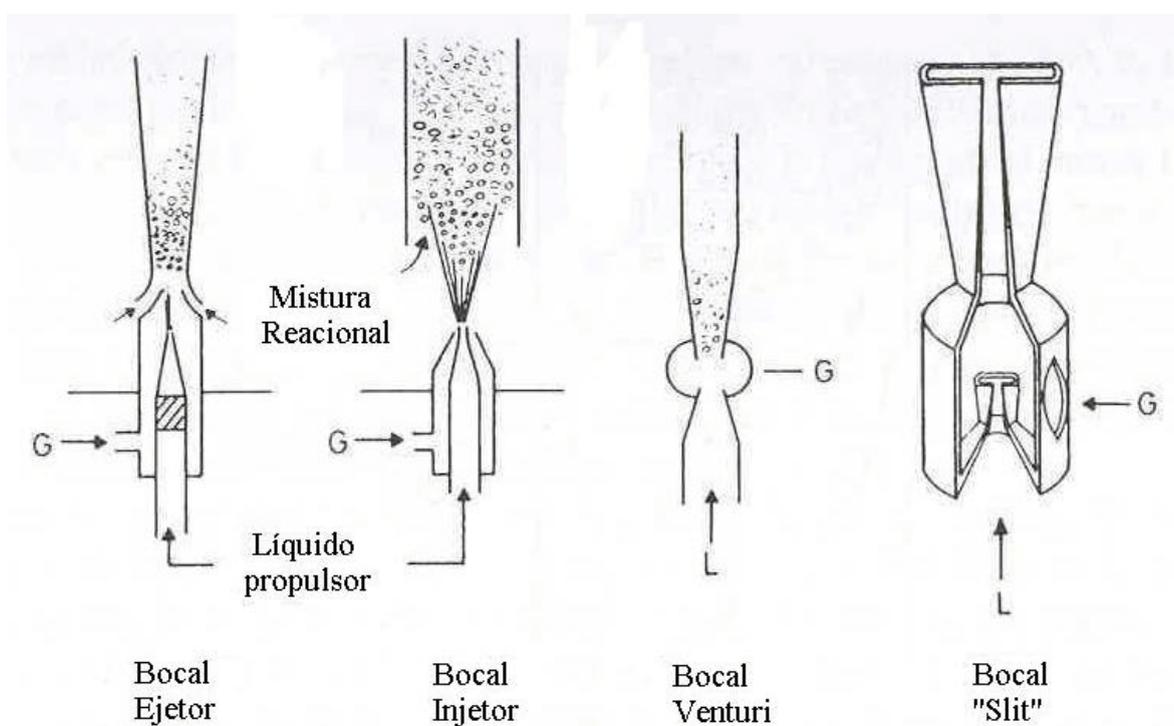


Fig 2.10: Alguns exemplos de distribuidores dinâmicos da fase gás.(Fonte: adaptada a partir de DECKWER, 1992, pág. 12)

2.12 *Bubble Column Reactors* versus Reatores *Air-Lift*

O comportamento fluidodinâmico dos *Bubble Column Reactors* e dos Reatores *Air-Lift* é bastante diferente. A principal distinção é que nos Reatores *Air-Lift* a vazão de recirculação do líquido depende, e é determinada, pela vazão de gás escoando, o que não ocorre nos *Bubble Column Reactors*. Devido ao longo tempo de residência tipicamente exigidos pelos bioprocessos, o emprego de grandes quantidades da fase líquida atravessando o reator não são possíveis nos *Bubble Column Reactors* sem uma significativa vazão de reciclo. Nos Reatores *Air-Lift*, por outro lado, velocidades lineares do líquido bastante altas podem ser geradas sem a necessidade do emprego de quaisquer mecanismos externos de recirculação. A conseqüente turbulência presente nos Reatores *Air-Lift* adia um incipiente ariete associado as altas velocidades da fase gás, o que é usual nos *Bubble Column*

Reactors. Também, as velocidades de gás para a condição de arraste de líquido na parte do separador (formação de *spray*) são menores nos *Bubble Column Reactors* que nos Reatores *Air-Lift*. Como um resultado destes efeitos as regiões de operação dos Reatores *Air-Lift* em termos das variações possíveis das velocidades superficiais da fase gás e do líquido são mais amplas (CHISTI, 1989), conforme mostrado na figura 2.11:

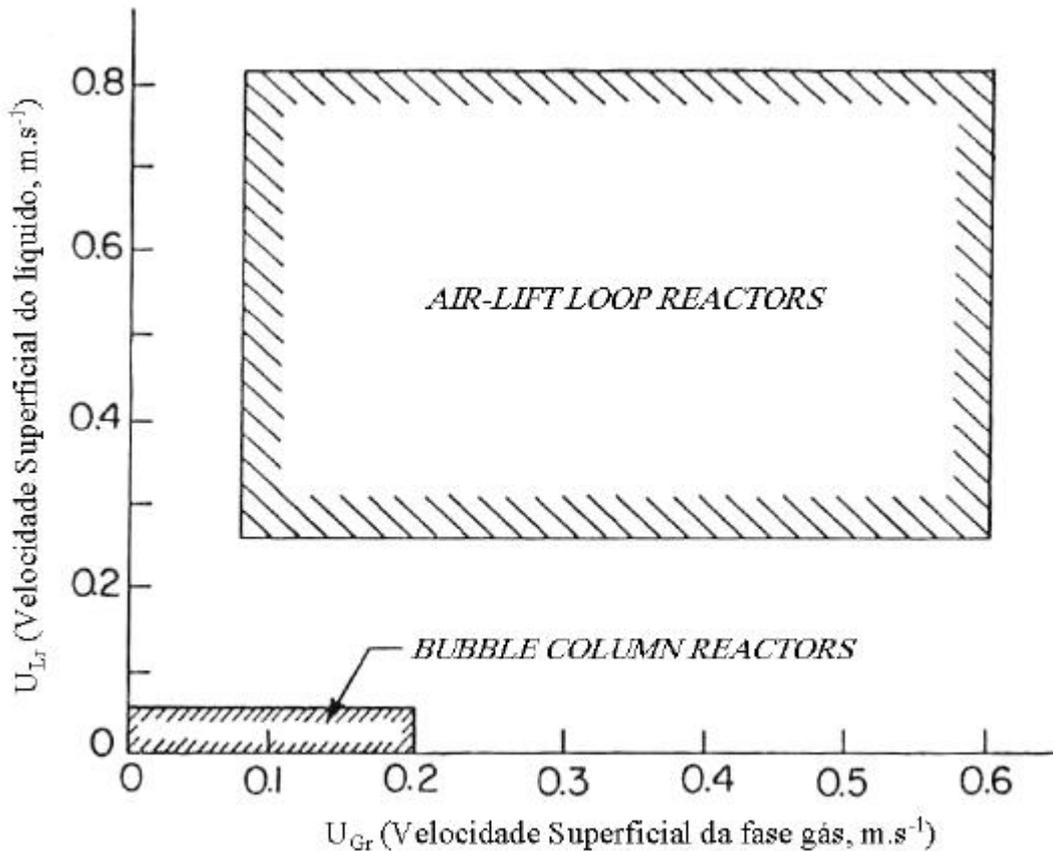


Figura 2.11: Regiões de operação dos Reatores *Air-Lift* e dos *Bubble Column Reactors*.(Fonte: adaptada a partir de CHISTI, 1989, pág. 41)

2.13 Aplicabilidade industrial de reações envolvendo sistemas trifásicos: gás – líquido – sólido

Reações envolvendo três fases são muito comuns na indústria química, tendo na aplicação, desde processos em bateladas usando pequenas unidades, até a grande capacidade de processos contínuos. No entanto, a produção de vários polímeros pela reação de polimerização, que apresenta o catalisador Ziegler-Natta em suspensão, não são freqüentemente efetuadas nos *Bubble Column Reactors* (DECKWER, 1992).

Devido aos numerosos processos empregados na produção de proteínas a partir de células-vivas, metabólitos primários e secundários, bem como no tratamento de efluente utilizando *Bubble Column Reactors* e Reatores *Air-Lift*, tal aplicação merece uma menção especial. A biomassa não representa somente um sólido em suspensão, mas pode reagir com o substrato, com o produto ou até mesmo com ambos ao mesmo tempo, porém proporciona o meio no qual os processos catalisados por enzimas ocorrem. *Bubble Columns* ou outras configurações, tais como *Loop Reactors*, as quais são baseadas nos mesmos princípios, são cada vez mais usadas para processos biotecnológicos, pois suas propriedades fluidodinâmicas são particularmente vantajosas e a vazão de alimentação da fase gás pode ser alta (DECKWER, 1992).

2.14 Problemas gerais no projeto e análise dos *Bubble Column Reactors*

Muitos dos problemas que surgem no projeto e análise dos reatores são resultados de complexas interações entre fenômenos físicos e químicos, os quais podem dificultar a determinação de dados a respeito da cinética de reação. Há ainda, complexas relações entre fatores fluidodinâmicos e as dimensões do reator, geometria, distribuição da fase gás, condições de operação e propriedades físicas; que dificultam a análise de dados e produzem dificuldades no *scale-up* (DECKWER, 1992).

A seleção de um modelo, conjunto de equações algébricas e diferenciais capaz de descrever o comportamento do sistema físico real dentro de uma margem aceitável de desvio, adequado para os *Bubble Column Reactors* é um aspecto importante, pois o mesmo tem que fornecer descrições práticas do que ocorre no sistema, e são encontrados como uma combinação de experiência, leis físicas e químicas e resultados experimentais. As Leis da Conservação formam a base de todos os modelos usados no campo da tecnologia de

reatores. As soluções dos modelos empregados, até mesmo nos casos mais simples dos *Bubble Column Reactors* são relativamente complexas e a resolução de muitas equações envolvem o uso de computadores, razão pela qual as soluções numéricas são preferidas na maioria dos casos, pois são mais suscetíveis à programação e podem ser usadas para uma larga variação de aplicações (DECKWER, 1992).

Os modelos podem ser usados para análise dos reatores. Dados de conversão e valores bem conhecidos para certos parâmetros que aparecem nas equações do modelo podem ser usados como um ponto de partida para pesquisar os valores desconhecidos de outros parâmetros (DECKWER, 1992).

A estimação de parâmetros representa um importante campo de aplicação para a modelagem de reatores, pois envolvem simulações numéricas baseadas em modelos que apresentam diferentes complexidade, fornecendo informações valiosas sobre quais parâmetros são responsáveis por uma particular sensibilidade nas variáveis de saída do reator ou outros valores de interesse. Por isso, há necessidade de buscar determinações acuradas; testes em experimentos de laboratório podem ser importantes para distinguir a importância entre diferentes modelos, bem como a importância dos parâmetros. Portanto, os cálculos associados aos modelos não devem ser considerados como uma substituição aos experimentos, porém como um método de observância dos experimentos nos limites aplicáveis, pelo fornecimento de estruturação para testes específicos, e portanto acrescentando outros. Daí, a combinação dos resultados dos modelos e dos experimentos, em conjunção com a verificação de ambos para diferentes estágios do processo, forma a base da bem sucedida análise de processo e do projeto de reatores (DECKWER, 1992).

2.15 Parâmetros fluidodinâmicos e parâmetros específicos da reação

As equações que constituem o modelo contém numerosos e freqüentemente incertos parâmetros, os quais devem ser conhecidos antes que qualquer solução seja possível. Parâmetros de processos e específicos da reação abrangem dados termodinâmicos e da cinética de reação, coeficientes de difusão e propriedades físicas. Estes dados, em conjunção com as dimensões geométricas dos *Bubble Column Reactors*, fornecem a base para a especificação inicial das condições ajustáveis de operação, isto é, tempo de residência, pressão, temperatura, etc. Apesar das interrelações, alguns parâmetros

específicos e de processos podem ser livremente escolhidos ou especificados dentro de certos limites (DECKWER, 1992).

O mesmo não ocorre com os parâmetros fluidodinâmicos, os quais são uma função complexa da escala, da geometria, do tipo de distribuidor, das condições ajustáveis de operação e dos dados do processo (particularmente propriedades físicas). Parâmetros fluidodinâmicos incorporam as *hold-ups* das fases, área interfacial, coeficientes de dispersão e dos coeficientes de transferência de massa e calor, bem como o diâmetro da bolha e a velocidade de ascensão das bolhas. Para um dado processo todos estes fatores podem variar de modo não muito significativo. Por outro lado, as quantidades limitantes e as relações matemáticas, as quais formam a base de especificação das condições fluidodinâmicas de operação, não são totalmente entendidas e podem variar entre diferentes tipos de sistemas gás-líquido. Um exemplo disto é o diâmetro da bolha num agregado de bolhas, o qual pode ser uma função particular do tipo de distribuidor de gás e propriedades físicas, porém pode , também, ser afetado pelo comprimento do reator como um resultado dos processos de coalescência e/ou *break-up* que acontecem.

Na prática, medições e correlações empíricas para os parâmetros fluidodinâmicos são essenciais para o projeto dos *Bubble Column Reactors* e interpretação dos dados de reação. No entanto, apesar de sua importância, grande cautela deve ser empregada no uso de tais correlações com respeito as plantas de escala industrial. Enquanto que correlações aparentemente confiáveis são disponíveis para a mistura da fase líquida e o coeficiente de transferência de calor nos *Bubble Column Reactors*, há restrições no uso de correlações no que tange fatores vitais como o *gas hold-up*, área interfacial e o coeficiente de transferência de massa.

As seguintes razões demonstram porque o uso de correlações empíricas no projeto dos *Bubble Column Reactors* deve ser abordado com cautela e atenção:

- a) Material usado: dados usados para as correlações são principalmente coletados a partir de medições empregando água, soluções aquosas ou líquidos orgânicos puros, abrangendo a condição normal de pressão. Os *Bubble Column Reactors* em escala industrial envolvem outras condições de operação e a composição das fases podem variar como um resultado da reação.

- b) Escala: maioria das correlações são baseadas em dados obtidos em *Bubble Column Reactors* em escala de laboratório e os efeitos registrados podem não ser todos observáveis nos reatores em grande escala e vice-versa.
- c) Variação local: dados de correlações representam valores integrais, enquanto que em determinados casos um grande número de parâmetros apresentam uma pronunciada tendência para variações locais, os quais podem modificar consideravelmente as variáveis de saída do modelo do reator.
- d) Reatividade: o fato de que os dados medidos são geralmente baseados em sistemas “mortos”, isto é, as medições serem realizadas em *Bubble Column Reactors* onde não há nenhuma outra atividade do que o gás em movimento ascendente através do reator e mistura da fase líquida, é uma desvantagem particular. O fluxo molar da fase gás permanece constante, no entanto a principal razão para o uso dos *Bubble Column Reactors* na indústria química é promover a maior variação possível no fluxo molar; ao mesmo tempo, a velocidade do gás, a qual é um dos mais importantes parâmetros de correlação, não é constante.
- e) Hipóteses assumidas no modelo: uma adicional limitação no uso das correlações surge quando os valores dos parâmetros, somente podem ser determinados de modo acurado quando se possui um conhecimento da distribuição do tempo de residência da fase alimentada continuamente (mistura).

2.16 Aplicações de CFD para Reatores Multifásicos

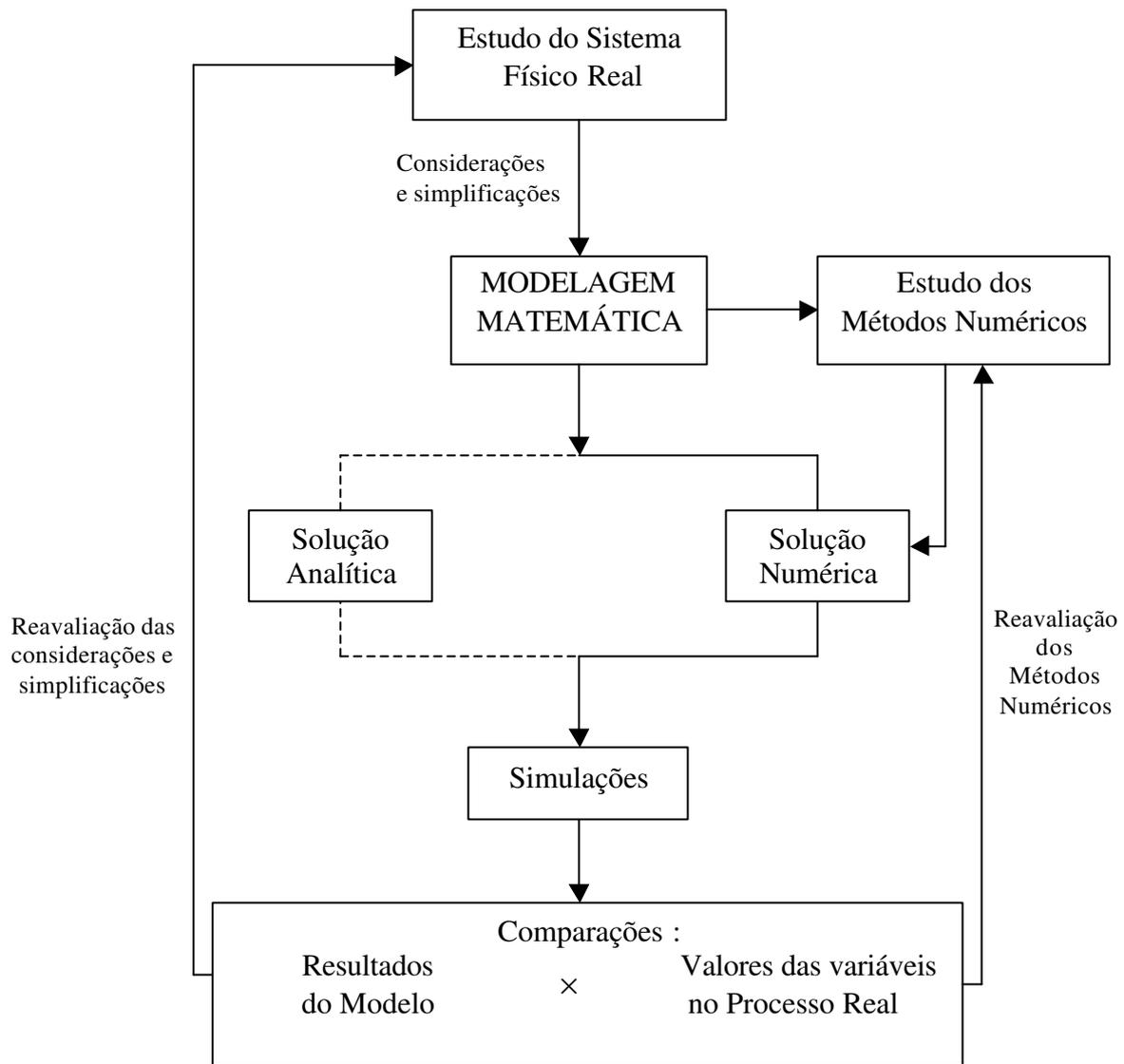
2.16.1 Introdução

A Fluidodinâmica Computacional consiste na resolução da Equação Geral de Transporte empregando métodos numéricos, primordialmente o Método dos Volumes Finitos e o Método dos Elementos Finitos, visando obter campos de velocidades, temperatura, etc, possibilitando avaliar o transporte de uma propriedade de interesse. Tal ferramenta apresenta grande interesse do ponto de vista da Engenharia Química, pois em muitos reatores a fluidodinâmica influencia significativamente a reação química, por isso modelos mais simples (1D e 2D) não são capazes de fornecer o grau de detalhamento necessário. Tal fato é justificado pela dependência da transferência de massa e reação química com a concentração local e as superfícies de transferência locais, interfaces

gás/líquido, as quais são resultados da *gas hold-up* e da distribuição do tamanho das bolhas (BAUER e EIGENBERGER, 1999).

A necessidade do conhecimento detalhado da fluidodinâmica em certos tipos de reatores pode ser fundamentada nas premissas encerradas no seguinte comentário: “A partir do ponto de vista da engenharia das reações químicas, modelos fluidodinâmicos são exigidos para uma apropriada descrição da mistura dos fluidos e formas de contato, isto é, eles modelam o caminho pelo qual os materiais escoam através do reator e entram em contato de modo a reagirem quimicamente.”(SOKOLICHIN *et al.*, 1997)

A revisão da literatura constitui a primeira etapa da abordagem de resolução do modelagem de um processo e visa buscar informações a respeito de trabalhos anteriores no intuito de realizar um estudo preliminar acerca dos sistema físico real e suas características , bem como das várias metodologias empregadas na resolução da modelagem matemática e simulações; conforme mostrado na figura 2.12:



--- : Menor probabilidade de ocorrência

Figura 2.12: Fluxograma do procedimento básico para análises quantitativa de um processo físico empregando modelagem e simulações.

Vale ressaltar que as soluções analíticas são usualmente idealizadas e nem sempre são relevantes; em muitos casos as mesmas não são possíveis. Já os métodos numéricos permitem a resolução de problemas mais complexos e o procedimento da solução numérica fornece uma melhor contextualização física dos fatores dominantes num problema (RIGGS, 1994)

A partir da análise das ferramentas empregadas (considerações aplicadas e métodos numéricos utilizados) e dos resultados obtidos, seleciona-se a linha de ação

adequada ao caso em questão. Vários trabalhos contribuíram substancialmente, até o presente momento, fornecendo valiosas informações a cerca da nova ferramenta e da linha de ação necessária a sua aplicação.

2.16.2 Principais Trabalhos a cerca da descrição dos fenômenos físicos relevantes nos reatores Air-Lift e aplicações da CFD para Reatores Multifásicos

MERCHUK (1984) fez um estudo da *gas hold-up* e da velocidade de circulação em Reatores *Air-Lift* em duas dimensões ; fez-se uma comparação entre a operação de um *Bubble Column Reactor* e um Reator *Air-Lift*. Foram estudados quatro tipos diferentes de distribuidores e empregou-se diferentes gases: He, CO₂, Ar e Freon 114; como fase gás. Nenhuma influência nas variáveis medidas foi atribuída a distribuição da fase gás. Já a natureza do gás teve uma forte influência no caso da operação do *Bubble Column Reactor*.

O autor frisa os estudos extensivamente desenvolvidos em cima das características dos *Bubble Column Reactor*, citando referências que abrangem desde a segunda metade da década de 70 até o meados da década de 80; o que inclui dados a respeito da influência das propriedades do líquido, da distribuição da fase gás e vazão volumétrica da fase gás, na taxa de transferência de massa, bem como na *gas hold-up*.

O trabalho já cita o Reator *Air-Lift* como o mais promissor equipamento para a transferência de massa gás-líquido, e sua aplicabilidade preferencial para processos de fermentação. Cita-se que a principal característica que distingue os Reatores *Air-Lift* dos *Bubble Column Reactor* é a recirculação de líquido através do *Dowcomer* após a total, ou parcial, liberação da fase gás no topo da coluna.

Os dados experimentais foram obtidos num reator de seção retangular: 0,15 cm (largura), 0,015 cm (profundidade) e 2,5 m (altura); podendo ser operado com e sem recirculação de líquido, mediante o emprego de uma válvula na região do *Downcomer*. Com vários pontos de medição de pressão na região do *Riser* o que permitiu avaliar a *gas hold-up*.

Percebeu-se que o padrão de escoamento ajuda a entender as variações na *gas hold-up* com a variação na razão volumétrica da fase gás. Operando-se com a válvula fechada (*Bubble Column Reactor*) percebeu-se que à baixas velocidades de gás, as bolhas ascendem seguindo linhas retas, especialmente na metade inferior da coluna. Na metade

superior, as bolhas começam a apresentar oscilações nas trajetórias, aparentemente justificadas pelo aumento de diâmetro da bolha causado pelo decréscimo da pressão estática e algum grau de coalescência. No entanto, um segundo aumento na velocidade superficial do gás teve como consequência aumentos nas amplitudes das oscilações nas trajetórias das bolhas e uma corrente principal foi observada, caracterizada pela alta velocidade local e grandes bolhas. Houve o aparecimento de células de recirculação, nos lados da coluna, contendo pequenas bolhas, que oscilavam de acordo com as linhas de corrente da corrente principal. Com um posterior aumento na velocidade do gás, as frequências das oscilações aumentaram consideravelmente enquanto as amplitudes permaneceram constantes ou aumentaram de modo insignificante. Tal configuração conduz a um aumento considerável na turbulência. O escoamento associado às células laterais de recirculação aumenta na parte central, a qual consiste de grandes bolhas presentes no sistema.

A estrutura do escoamento é fortemente influenciada pelo movimento ascendente das bolhas ao longo da região central do reator e para valores muito elevados da velocidade superficial do gás tal contribuição tende a aumentar. As amplitudes das oscilações decrescem e maior parte das bolhas passam rapidamente através da região central da coluna, enquanto as recirculações laterais tornam-se mais turbulentas, e o escoamento descendente associado à recirculação de líquido foi claramente visualizada em ambos os lados do equipamento.

O padrão de escoamento observado com a válvula, presente no *Downcomer*, completamente aberta foi substancialmente diferente do observado no *Bubble Column Reactor*, especialmente quando foram aplicadas altas velocidades superficiais da fase gás. Em geral, as bolhas ascendiam em linhas retas e as oscilações descritas nos *Bubble Columns* foram observadas a altas velocidades de gás e acima do meio da coluna. O movimento do líquido apresentou menor turbulência. Duas bolhas podiam subir lado-a-lado por uma longa distância sem que uma toca-se a outra, logo a componente lateral do vetor velocidade é muito pequena. Portanto, menos coalescência foi observada. A forma das bolhas é arredondada sugerindo que a velocidade relativa gás-líquido (velocidade *slip*) é baixa.

Quando a válvula foi gradualmente fechada, os padrões de escoamento variaram na direção de altas turbulências no líquido e perda do organizado escoamento de bolhas através da coluna. Em geral, o autor assume que a recirculação de líquido atrasa o então

chamado regime de transição. Somente a altas velocidades de gás as nuvens de bolhas iniciam movimentos sinuosos, porém a recirculação local não foi detectada.

No que tange a *gas hold-up*, percebeu-se que para o reator em estudo:

- a) Apresentou menor valor no Reator *Air-Lift* que no *Bubble Column Reactor*;
- b) Apresentou uma máxima *gas hold-up*, a qual caracteriza o comportamento do reator em estudo, próximo da velocidade superficial crítica e tal peculiaridade não apareceu nos dados experimentais obtidos no *Air-Lift*. Tal fato foi associado ao efeito da velocidade do líquido, o qual retarda o fenômeno da recirculação interna. A altas velocidades do líquido percebeu-se um aumento da distância entre as bolhas e, portanto, decréscimos na frequência associada a coalescência. Também, devido a distribuição mais uniforme das bolhas através da seção transversal no Reator *Air-Lift*, há uma redução na coalescência.

Equações semi-empíricas são empregadas na análise quantitativa, usando dados experimentais. É enfatizado a dificuldade em correlacionar dados de *gas hold-up* para diferentes geometrias de Reatores *Air-Lift*, obtidos na literatura, devido a forte influência da configuração da geometria do sistema. O projeto do separador de gás no topo do reator pode determinar se o gás é ou não recirculado no *Downcomer*. Isto afeta a velocidade de recirculação do líquido, a qual afeta a *gas hold-up*. Logo, sugere-se que as correlações para *gas hold-up* em Reatores *Air-Lift* devem levar em conta todos os fatores que afetam a velocidade do líquido.

Não foi percebido nenhuma forte influência da presença de solutos, na *gas hold-up*, própria dos *Bubble Columns*, nas operações dos Reatores *Air-Lift*. O que foi explanado em termos do efeito retardante que alguns solutos exercem na coalescência de bolhas e que tal fenômeno conduz a altas *gas hold-up* e um valor máximo durante o regime de transição no *Bubble Column*, porém nenhuma influência significativa foi observada no Reator *Air-Lift*. Tal fato pode ser decorrente do padrão de escoamento mais ordenado que ocorre nos Reatores *Air-Lift* e as raras colisões entre as bolhas. Portanto, a coalescência não foi um fenômeno que ocorreu numa extensão considerável, até mesmo para líquidos coalescente como água pura.

O pesquisador chega a um consenso que a *gas hold-up* num *Bubble Column Reactor* retangular é maior que no mesmo equipamento operando como Reator *Air-Lift*. As observações visuais do padrão de escoamento indicaram que o regime de transição não

apareceu no Reator *Air-Lift*. O que foi associado a velocidade de recirculação da fase líquida, a qual retarda o fenômeno de recirculação interna comumente observada nos *Bubbles Columns*.

Quatro diferentes distribuidores de gás foram usados, porém não foi encontrado nenhuma influência considerável na *gas hold-up*, nem na velocidade do líquido. Dos vários gases empregados somente no hélio (He) foi observada uma grande diferença, no caso da operações do *Bubble Column*, o que foi associado a tendência das bolhas de hélio (He) em coalescer, quando comparado com outros gases. Tal fato não foi percebido no Reator *Air-Lift*.

Os dados quantificados pelo autor concordam com os dados da literatura, com exceção do valor máximo da *gas hold-up* no regime de transição (operando com o *Bubble Column*) para a mesma geometria aplicada em diferentes escalas. Logo, o reator retangular estudado mostrou-se como sendo um apropriado sistema para pesquisa e desenvolvimento; e o autor, comenta que a observação dos padrões de escoamento são cruciais para o projeto e *scale-up* de reatores.

TORVIK e SVENDSEN (1990) são os pioneiros na modelagem dos *Slurry Bubble Column Reactors* reatores contendo fase sólida em suspensão na fase líquida, em conjunção com a injeção de gás), empregando os Princípios Físicos retratados pela equações da conservação (Equação Geral de Transporte) cuja resolução numérica constitui a essência da *CFD*. Os autores justificam tal abordagem na necessidade de obtermos modelos mais seguros para *scale-up* e projetos de reatores, pois a maioria dos modelos usados na época eram fortemente dependentes de informações empíricas obtidas a partir de experimentos em escala piloto, dificultando o seu emprego no projeto de novos reatores e expansão dos reatores já existentes.

Os pesquisadores empregam um modelo pseudo-homogêneo, pois a fase sólida é considerada na suspensão que retrataria a fase líquida. A modelagem proposta possibilita descrições locais das variáveis fluidodinâmica fornecendo ,portanto, um melhor entendimento da estrutura do escoamento no interior do reator. As equações que retratam a “Lei da Conservação” aplicada as variáveis de interesse (massa, momento axial, momento radial, turbulência e fração de um componente de interesse) são discretizadas usando o Método dos Volumes Finitos empregando uma malha deslocada para o cálculo das

grandezas vetoriais (campo de velocidade) e a uma malha principal para as grandezas escalares. Utilizaram o Esquema *Upwind* na discretização da Equação da Continuidade e o Esquema Híbrido na discretização das Equações do Momentum e demais equações. Tais abordagens são apresentadas, discutidas e justificadas em PATANKAR (1980). Empregou-se uma variação do *SIMPLE* para realizar o acoplamento pressão e velocidade.

Vale ressaltar, a contribuição referente a descrição das forças relevantes entre as fases, que constituem os termos responsáveis pela transferência de momentum entre as mesmas, implicando num acoplamento. O programa foi implementado em C devido a referida linguagem permitir alocação dinâmica das “matrizes” o que é de suma importância na etapa do estudo de independência das soluções com a malha, sem comprometer a memória disponível, o que não ocorreria caso empregassem matrizes demasiadamente grandes. É mencionada a possibilidade de modelos empregando dados da cinética intrínseca e dados de transferência de massa (cinética física) medidos em laboratórios em conjunto com a fluidodinâmica (componentes da velocidade, *gas hold-up* e turbulência) como um modo seguro e mais acurado de realizarmos *scale-up*.

Os resultados das simulações, utilizando uma malha de 16×16 , que descrevem um reator de dimensões consideráveis: H= 4,52 m (altura) e R= 0,145 m (raio), implicando numa análise que retrata dimensões condizentes com as encontradas nas indústrias, concordam com os dados experimentais, embora nas proximidades da parede os dados experimentais não são suficientes para confirmar a concordância da variável velocidade axial. A predição da *gas hold-up* apresenta concordância do ponto de vista qualitativo, com as medidas experimentais. O tempo de processamento varia de 2 a aproximadamente 30 horas, a depender da complexidade do problema, grau de refinamento da malha, tempo de residência do reator, número de equações diferenciais parciais a serem resolvidas, bem como o uso dos coeficientes de sub-relaxação escolhidos.

Os pesquisadores chegam a um consenso que a modelagem desenvolvida para escoamento bifásicos em *Bubble Column Slurry Reactors* é capaz de prever os perfis de velocidades axial do gás e do líquido no reator em concordância com os dados experimentais. Já a predição do *gas hold-up* apresenta concordância apenas qualitativa com os dados medidos. Os testes considerando a reação de síntese de metanol apresentou valores próximos dos obtidos com o modelo de dispersão unidimensional, porém a hipótese usual que resulta no emprego de um coeficiente de dispersão constante é verificada como

não correta. Percebeu-se que o efeito do diâmetro da coluna é menos significativo que o estimado por modelos de dispersão e que o perfil radial de conversão apresentou a forma esperada com altas conversões nas proximidades das paredes. Ressaltou-se a possibilidade do estudo de geometrias alternativas empregando a abordagem desenvolvida.

GRIENBERGER e HOFFMANN (1992) modelaram a Fluidodinâmica de duas fases, considerando o escoamento em 2D e empregando o modelo $k-\epsilon_{\text{diss}}$ de turbulência, tal procedimento visa obter valores locais de velocidade, *gas hold-up* e viscosidade efetiva. Esta última é o parâmetro que encerra a contribuição devido a turbulência, de ambas as fases. A aplicação de uma modelagem mais refinada e portanto mais dispendiosa, no que tange a resolução das equações presentes na modelagem proposta é justificada pelo melhor entendimento do aspecto complexo do escoamento bifásico. Os autores enfatizam a impossibilidade de uma completa descrição do escoamento turbulento gás-líquido, no entanto, várias simplificações e aproximações são feitas buscando não comprometer a descrição dos fenômenos físicos de maior interesse.

A discretização das equações diferenciais parciais que descrevem os fenômenos de interesse, muitas das quais foram obtidas a partir do trabalho de TORVIK e SVENDSEN (1990), foi realizada empregando o Método dos Volumes Finitos. Um tópico importante neste estudo, foi o fato dos modelos de turbulência terem sido primordialmente desenvolvidos para escoamentos monofásicos. No entanto, a viscosidade turbulenta da fase gás foi determinada empregando um fator, adequadamente definido em termos das flutuações das velocidades de ambas as fases e passível de medição (apresentando faixa de valores em função da velocidade superficial do gás), que a relaciona com a viscosidade da fase líquida.

Os pesquisadores propõe um C_w (*Constante of Interfacial Drag Force*) como função da posição radial, pois tal fator é usado na descrição da *Interfacial Drag Force*, termo bastante relevante na transferência de momentum entre as fases (na direção axial), pois os mesmos suspeitaram que os resultados de TORVIK e SVENDSEN (1990) apresentaram uma menor concordância com os dados experimentais nas proximidades das paredes em decorrência de C_w ter sido considerado constante.

Os resultados mostraram que os perfis das velocidades axiais do líquido e do gás, bem como o perfil do *gas hold-up* concordaram muito bem com os valores medidos. No

entanto, percebeu-se que a distribuição da viscosidade efetiva do líquido é menor que os dados experimentais, embora os valores centrais possam ser razoavelmente preditos. Os autores sugerem a obtenção de uma expressão de C_w que seja não só função da posição radial, mas da *gas hold-up* e da viscosidade efetiva.

SVENDESEN *et al.* (1992) comentam que as tradicionais simulações dos *Bubble Column Reactors* e *Internal Loop Reactors* são baseadas em modelos de dispersão e modelos tipo célula. No entanto, tais níveis de modelagem não são adequados para projetos e/ou *scale-up*, sendo necessários modelos mais detalhados no que tange a descrição da estrutura do escoamento no interior dos reatores .

Visando melhores simulações dos tipos de reatores anteriormente citados, os autores propõe e implementam modelos oriundos de aproximações nos Princípios da Conservação em conjunção com o modelo k- ϵ para descrição da turbulência. No entanto, em função do referido modelo de turbulência ter sido deduzido para uma única fase (fase contínua) os pesquisadores aplicaram modificações no mesmo, visando quantificar a energia cinética turbulenta e a dissipação da mesma, oriundas das interações entre a fase gás. A validação da modelagem é feita empregando dados experimentais da *gas hold-up* local medidos em cinco pontos e empregando o método da condutividade. O sistema foi água/ar, aplicado tanto num *Bubble Column Reactor* como num *Internal Loop Reactor*, que apresentavam o mesmo diâmetro. Além disso os resultados da modelagem para a intensidade turbulenta do líquido na direção axial, bem como o perfil radial da velocidade axial do líquido são comparados com os dados disponíveis na literatura para um *Bubble Column Reactor* simples.

Os autores frisam que a circulação de líquido nos *Bubble Column Reactors* pode ser bastante intensa de modo a resultar num comportamento de mistura mais próximo dos tanques agitados do que dos reatores tubulares. Enfatizam, também, as vantagens dos *Bubble Column Reactors*: a) simples construção; b) vantagens operacionais (consumo de energia e confiabilidade). Destacando a preferência pela referida classe de reatores em aplicações que exijam uma mistura eficiente das espécies reagentes e grande áreas interfacial gás-líquido para a transferência de massa. Entretanto, em muitos processos de mistura surge a necessidade de estabilizar o escoamento pelo emprego de um anteparo (*Draft-Tube* central) que origine um *Internal Loop* de modo a criar um padrão na circulação do líquido. As bolhas sobem através da região interna ao *Draft-Tube* sendo liberadas no

topo e uma fração é arrastada à região do *Downcomer* (região externa ao *Draft-Tube*) pelo líquido recirculando, resultando numa eficiente redispersão da fase gás na fase líquida durante a recirculação. Na biotecnologia, tais reatores podem ser comparados a um tanque agitado, tendo a vantagem de apresentar menores tensões cisalhantes, diminuindo a probabilidade de danificação das estruturas dos microorganismos em culturas mais sensíveis às referidas tensões.

Os autores mencionam que os modelos de dispersão tradicionalmente usados na modelagem dos *Bubble Column Reactors* são satisfatórios para os propósitos de predição de respostas *input-output*. Entretanto, há a necessidade de ferramentas mais confiáveis e melhores projetos de tais reatores, para isto seria vital uma boa descrição da estrutura local no escoamento bifásico.

O referido trabalho comenta a necessidade de perfis radiais da velocidade axial, distribuição lateral e movimento da fase gás (o que é um dos mais importantes fatores na operação dos *Bubble Column Reactors* e *Internal Loop Reactors*), perfis radiais da *gas hold-up* (os quais dependem da configuração da entrada e particularmente das propriedades químicas e físicas do sistema), velocidades radiais e axiais para as bolhas. Vale ressaltar que os autores citam inúmeras fontes de dados experimentais obtidos em *Column Bubble Reactors* e em menor grau para *Internal Loop Reactor*.

Segundo os pesquisadores, há dificuldades de superpor todas as informações anteriormente citadas num modelo de dispersão. Entretanto, um conhecimento a priori de todos os perfis, anteriormente citados, para uma dada geometria seria necessário para fins de projetos e *scale-up*, portanto, tais modelos tornam-se inadequados para os referidos propósitos. Os modelos da Fluidodinâmica baseados nas aproximações de Princípios Gerais constituem uma alternativa.

O modelo básico utilizado no trabalho é baseado no empregado por TORVIK e SVENDSEN (1990). Entretanto, há alterações buscando incluir as interações entre a pressão e as flutuações na *gas hold-up*. As variáveis conservadas, médias no tempo, calculadas pelo modelo são: *hold-up* das fases, velocidades vertical e horizontal de ambas as fases, energia cinética turbulenta, dissipação da energia cinética turbulenta e pressão. As equações são discretizadas em coordenadas cilíndricas.

Os pesquisadores explanam o significado físico da *Lateral Forces* associadas à sua modelagem e suas dependências com outras variáveis, propriedades e suas limitações. A *Interfacial Drag Force* que seria a outra parcela que estaria contida nos termos fontes das equações do momentum, apresenta uma formulação simples que no entanto, é estritamente válida para bolhas (*single*) separadas.

Vale ressaltar que *Bubble Column Reactors* empregados nos experimentos apresentam dimensões ($H = 4,25$ m e $D = 0,288$ m) comparáveis com as aplicadas nas indústrias. Analisou-se as capacidades e limitações da modelagem para *scale-up* de um *Bubble Column Reactor* simples. A modelagem representou razoavelmente os dados experimentais medidos, bem como os encontrados na literatura para diferentes reatores com diferentes diâmetros ($D = 0,60$ m) para o sistema parcialmente coalescente (ar/água) empregado, e operando no regime heterogêneo, o qual é preponderante nos casos industriais. Tal fato indicou que a *Lateral Forces* agindo nas bolhas não variam drasticamente com o aumento do diâmetro do reator. Os dados experimentais da *gas hold-up* apresentaram concordância com os valores encontrados na literatura e os valores preditos pela modelagem, os quais apresentaram valores superiores aos citados na literatura. Entretanto, para um sistema não-coalescente (ar/propanol/água) os desvios foram mais acentuados e tal fato fundamenta-se na influência do papel da distribuição do tamanho das bolhas na determinação da *gas hold-up* e dos perfis de velocidade, já que a modelagem empregada era restrita a um único tamanho de bolha. Segundo os autores, tais limitações podem ser amenizadas pelo emprego de um conjunto de equações da continuidade e momentum para cada classe de tamanho de bolhas, ou pelo emprego de uma função que retrate a distribuição do tamanho das bolhas como uma variável conservada em conjunção com um modelo para a coalescência. No entanto, uma distribuição do tamanho das bolhas seria de pouco valia, se a formulação da *Interface Drag Force* não for melhorada.

Visando confirmar a influência do tamanho das bolhas na predição da *gas hold-up*, os pesquisadores compararam os perfis simulados e experimentais para diferentes velocidades de gás na alimentação, de modo a operar na região de transição entre os regimes homogêneo e heterogêneo; e no regime heterogêneo propriamente dito, pois é verificado experimentalmente a ocorrência de variações consideráveis na distribuição do tamanho das bolhas no intervalo de variação da velocidade associados as condições de

operação supracitadas. Percebeu-se que na velocidade superficial do gás associada ao regime heterogêneo, há concordâncias qualitativas e quantitativas dos valores preditos com os perfis medidos. Já na região de transição a concordância é preponderantemente qualitativa e os valores preditos são menores que os medidos. Tais desvios eram esperados devido os efeitos da distribuição do tamanho das bolhas e a *gas hold-up* na *Interface Drag Force* e na *Lift Force* transversal, explanadas pelos autores.

Os valores simulados para a intensidade turbulenta axial no líquido são concordantes razoavelmente do ponto de vista quantitativo com os valores medidos, as comparações foram realizadas a diferentes alturas no reator, confirmando assim a capacidade do modelo turbulento k- ϵ modificado em produzir a viscosidade turbulenta para *Bubble Column Reactors* simples. No entanto, os pesquisadores comentam que a hipótese de isotropismo aplicada à turbulência no *Bubble Column Reactor* é questionável. O uso do parâmetro viscosidade turbulenta é conveniente do ponto de vista matemático, pois preserva a mesma forma de equação para os escoamentos turbulento e laminar, desse modo permite o uso do mesmo procedimento de solução em ambos os casos. Logo, o modelo turbulento empregado é considerado satisfatório na descrição da viscosidade turbulenta, desde que a viscosidade turbulenta é um parâmetro ajustado sem significado físico real, apesar de que a acuracidade seja fortemente dependente do nível de difusão numérica, de modo a concluir-se que a viscosidade turbulenta deva ser tão baixa quanto possível para assegurar uma solução acurada.

O emprego do modelo no *Internal Loop Reactor*, presença do *Draft-Tube*, mostrou uma boa concordância do ponto de vista qualitativo para o perfil do *gas hold-up* na região interior ao *Draft-Tube (Riser)* o formato pontiguado do perfil no centro foi atribuída à simetria axial e as deficiências nas simetrias das condições de fronteira. A principal causa da discrepância entre os valores preditos e experimentais foi atribuída à baixa *gas hold-up* na região do *Downcomer* o que conduz a um menor escoamento total de gás no *Draft-Tube*, pois no *Downcomer* os desvios foram mais intensos. A principal razão para tal fato foi fundamentada na formulação simplificada da *Internal Drag Force*, que empregou um valor constante de velocidade *slip* e , portanto, evitando efetivamente a recirculação de bolhas, decrescendo a velocidade axial do líquido de modo a torná-la inferior ao valor utilizada como a velocidade *slip*. Tal fato foi apoiado nas medidas dos valores do diâmetro médio de Sauter que apresentou variações na região interna do *Draft-Tube* enquanto o mesmo é

aproximadamente constante sobre quase toda a secção transversal, na região do *Downcomer*; houve ainda o agravante de muito pouca coalescência ocorrer no *Downcomer* e nesta região o escoamento é quase homogêneo. As observações dos campos de velocidade mostraram que a recirculação no reator contendo *Draft-Tube* é global (topo/fundo) enquanto que no *Bubble Column Reactor* simples, apresenta um caráter mais local, houve uma concordância razoável entre a recirculação de líquido com uma baixa *gas hold-up* apresentando um perfil muito mais aguçado no centro do que o perfil experimental .

Os autores concluem que a modelagem desenvolvida apresentou-se como aplicável a projetos e *scale-up* de *Bubble Column Reactors* comuns, usando o mesmo sistema químico e as mesmas condições de operação. Entretanto, o efeito demonstrado da distribuição do tamanho das bolhas, justifica a necessidade de um modelo de coalescência e *break-up* para as bolhas, de modo a tornar a modelagem mais flexível e ,portanto, mais aplicável a diferentes sistemas e a variações no regime de escoamento. A concordância qualitativa entre valores preditos e experimentais para os perfis de velocidade e *gas hold-up* que foram obtidos para o *Internal Loop Reactor*, com exceção da predição da *gas hold-up* na região do *Downcomer*, o que indica a necessidade de melhoria na formulação da *Interface Drag Force*.

LAPIN e LÜBBERT (1994) comentam a larga aplicabilidade dos *Bubble Column Reactors*, justificada por suas vantagens. Em seguida comentam o estado da arte da modelagem de tais equipamentos, chegando a um consenso que o estudo dos mesmos exige modelos transientes devido ao fato das estruturas de recirculação no escoamento não serem estacionárias, apresentando variações de localização, tamanho e até mesmo do número de células de recirculação. Citam que apesar de tais sistemas serem estudados há muitos anos, não é possível o *scale-up* a partir das abordagens clássicas empregadas, desde que a sua Fluidodinâmica é muito complexa.

Os pesquisadores aplicaram uma modelagem em escala macroscópica, onde o escoamento bifásico gás-líquido é retratado por um sistema de equações Navier-Stokes as quais descrevem uma representação Euleriana do escoamento. Os autores também aplicam a abordagem Lagrangiana à fase gasosa, de modo que a fase gás é modelada numa escalar menor, onde as bolhas separadas ou grupos de bolhas atravessam o líquido (fase contínua).

A primeira abordagem tratada é a Euler-Euler, onde os dois fluidos são considerados quase-contínuos, sendo as equações de ambos resolvidas simultaneamente. Apesar do não completo entendimento dos mecanismos essenciais, os autores já reconhecem a *CFD* como uma ferramenta efetiva no caminho do estudo de processos com Fluidodinâmica complexa e ressalvam que muitas das maiores companhias na indústria química tem investido em simuladores *CFD*. No entanto, enfatizam a necessidade de dados experimentais para validar os modelos e somente após eles terem sido confirmados como fidedignos serão empregados na descrição de campos de velocidade de um sistema particular.

No trabalho é citada a limitação da modelagem mais detalhada, caracterizada pelas equações gerais que governam o escoamento do fluido, devido ao esforço computacional e restrição de memória nos computadores da época. Tais problemas são contornados aplicando simplificações nos modelos dinâmicos de modo que o sistema físico de interesse seja suficientemente representado, mantendo o realismo. Uma ressalva interessante é feita no que tange a relação existente entre a escala do sistema e o mecanismo dominante no escoamento bifásico, bem como o concatenamento entre as variáveis de interesse e seus efeitos.

Os autores concluem que os pacotes para simulação numérica da Fluidodinâmica podem ser usados para investigar a fluidodinâmica do escoamento bifásico considerando mais detalhes que os modelos anteriormente usados. Ressaltam o fato da abordagem Euler-Euler apresentar desvantagem, oriunda da difusão numérica ocasionada pela resolução da malha numérica tratada pelos computadores da época. Tal problema não ocorre na abordagem Lagrangiana, embora tal procedimento exija uma capacidade de memória proporcional ao número de bolhas considerado, dificultando sua aplicação em escalas maiores, próprias da indústria. Uma vez que a simulação numérica seja validada para um dado sistema, a mesma poderá ser tranqüilamente empregada para *scale-up* de reatores, podendo quantificar a influência de diferentes tamanhos de bolhas na estrutura do escoamento bifásico, a influência da geometria pode ser investigada em detalhes. Após validarem o modelo perceberam que fenômenos descritos quantitativamente pela modelagem anteriormente aplicada não eram tão intensos quanto mencionado por autores citados.

SOKOLICHIN e EIGENBERGER (1994) comentam o estado da arte da modelagem do escoamento gás-líquido nos *Bubble Column Reactors* e *Loop Reactors*, citando os mais recentes resultados associados à modelagem multidimensionais.

Os pesquisadores discutiram, e compararam, as hipóteses e simplificações; vantagens e desvantagens das metodologias Euler-Euler e Euler-Lagrange, quanto a aplicação dos métodos numéricos, pois uma das diferenças básicas das abordagens supracitadas encontra-se nos procedimentos da solução numérica.

Os autores constataram que o esforço computacional depende do número e da complexidade dos diferentes termos das equações presentes na modelagem, bem como da taxa de convergência das iterações, a qual depende do número e característica dos termos acoplados nas equações do modelo. Vale ressaltar que comparam resultados de modelos dinâmicos e estacionários para a modelagem de escoamentos bifásicos em *Bubble Column Reactors* e *Loop Reactors*, utilizando as hipóteses geralmente assumidas:

- Estado estacionário; escoamento turbulento;
- Condições isotérmicas;
- Fase gás quase-contínua, usualmente incompressível;
- Uma classe de bolhas.

Os pesquisadores constataram que o método Euler-Euler requer uma memória no computador proporcional ao número de elementos finitos de volume considerados e não ao número de bolhas. A necessidade de resolver as equações de balanços acopladas das fases gás e líquido simultaneamente é solucionada utilizando uma técnica numérica eficiente desenvolvida por PATANKAR (1980). É avaliada a característica da convergência em função do passo de integração fixo ou variável e sugerem simulações dinâmicas com controle automático do passo de integração e o limite mínimo do número de pontos da malha para a obtenção do escoamento transiente.

Dos resultados obtidos, constatou-se a modelagem multidimensional para escoamentos bifásicos gás-líquido nos *Bubble Columns Reactors* apresentou bons resultados qualitativos com as observações experimentais, até mesmo se somente a interação retratada pela *Friction Force* for considerada entre as fases, e a viscosidade laminar for usada na fase líquido. Percebeu-se que a formulação Euler-Euler apresentou

vantagens na simulação dinâmica em geometria de grande escala, própria de reatores reais, porém a inclusão de interações gás-gás e gás-líquido parece ser mais direta na metodologia Euler-Lagrange. Em alguns casos somente as simulações dinâmicas apresentaram convergência, principalmente nos *Bubble Column Reactors* uniformemente aerados operando abaixo de uma velocidade superficial de gás mínima, na alimentação .

BECKER *et al.*(1994) comparam os dados experimentais detalhados com as simulações do escoamento, propostas pela modelagem discutida por SOKOLICHIN e EIGENBERGER (1994), utilizando um *Bubble Column Reactor* de secção transversal retangular caracterizado por seu escoamento essencialmente bidimensional, também foram realizados experimentos utilizando como sistema de estudo um Reator *Air-Lift*.

Os dados experimentais consistiam de observações visuais da estrutura do escoamento e documentação em forma de fotografia da distribuição das bolhas, bem como medidas detalhadas do escoamento característico das 2 fases a diferentes alturas na coluna. No que tange as simulações, os modelos empregados foram essencialmente 2D, aplicando uma abordagem Euler-Euler no escoamento bifásico e supondo uma dinâmica laminar; tanto estados estacionários como transientes foram descritos pela resolução do conjunto de equações diferenciais parciais que primordialmente caracterizam o modelo.

Os autores aplicam a equação de Navier-Stoker e a equação da continuidade em ambas as fases, efetivando o acoplamento entre as mesmas através do termo que retrata as forças de interação, as quais são proporcionais a velocidade *slip*; a viscosidade laminar é assumida constante e como sendo a da fase líquida; fenômenos como: coalescência e *break-up* são negligenciados . As equações diferenciais que retratam o sistema real são integradas implicitamente e em seguida discretizadas aplicando o Método do Volumes Finitos. O acoplamento velocidade e pressão é realizado através de uma modificação especial no algoritmo *SIMPLER* (PATANKAR, 1980) permitindo uma maior eficiência na solução iterativa para cada incremento de tempo.

No referido trabalho, foram listadas as técnicas de medições empregadas nas medidas locais dos parâmetros associados a Fluidodinâmica: velocidade do líquido, velocidade das bolhas, *gas hold-up* e tamanho das bolhas. Para efeito de comparação os valores locais dos parâmetros supracitados são automaticamente convertidos em valores médios no tempo. Foram citadas as limitações de casa técnica.

Um ponto importante, mencionado pelos autores, é a necessidade de modelar várias classes de bolhas aplicando a Equação da Continuidade e o Balanço de Momentum em cada classe, aumentando a complexidade da resolução. No entanto, os pesquisadores aplicam um artifício que consiste no emprego do diâmetro médio de Sauter, parâmetro que representa uma medida da distribuição das bolhas, reduzindo assim a complexidade. CAMARASA (2000) mostra as dificuldades na obtenção das informações para realizar uma modelagem das bolhas no sistema *Air-Lift*.

No que tange ao Reator *Air -Lift* os autores mencionam o fato do mesmo apresentar uma estrutura de escoamento mais definida que o *Bubble Column Reactor*, devido a separação entre o *Riser e Downcomer*, ou seja, a presença da recirculação externa. No entanto, justificam o emprego da *CFD* em função da dependência da Fluidodinâmica da recirculação, ser influenciada por peculiaridades da geometria. O distribuidor e a alimentação de gás, bem como o escoamento próximo dos cantos superiores e inferiores presentes na geometria do tubo, influenciam a estrutura do escoamento no *Riser* e no *Downcomer*, podendo causar má distribuição e recirculação da fase gás.

Os experimentos comprovam que as simulações levando, em conta a não coalescência da bolhas, descrevendo um escoamento 2D e com uma viscosidade constante descreve razoavelmente os comportamentos dos estados estacionários quanto do transiente, no que se refere ao *Bubble Column Reactor*. No entanto, nos casos onde somente parte da secção transversal é aerada, a viscosidade turbulenta deve ser quantificada, bons resultados foram obtido aumentando a viscosidade laminar por um fator de 100. Um ponto interessante é a comparação do escoamento no Reator *Air-Lift* obtido com o código construído pelos autores com o *software* comercial FLUENT, que emprega um modelo de turbulência ($k-\epsilon_{dissp}$) e onde a fluidodinâmica das duas fases é simulada no estado estacionário, que apresentou concordância entre as simulações, embora a viscosidade turbulenta obtida pelo modelo seja superestimada implicando na supressão de vórtices em determinadas regiões do reator, observados no experimento e não simulados no modelo contido no pacote comercial.

Os pesquisadores chegam a um consenso que uma malha suficientemente refinada são necessárias nas simulações dinâmicas para se obter uma solução que apresente concordância com as observações experimentais. Os experimentais, bem como os resultados das simulações corroboraram a forte influência dos detalhes a respeito do

distribuidor da fase gás, para uma mesma velocidade superficial do gás e o mesmo diâmetro médio das bolhas. Ressaltou-se, que a questão do emprego de um modelo apropriado para a turbulência no escoamento gás-líquido não ficou muito clara; pois os resultados mostraram, na maioria dos casos, boa concordância do ponto de vista qualitativo se somente a viscosidade laminar fosse assumida. Foi sugerida uma busca visando elucidar a influência dos outros termos associados as forças atuando entre as fases, além da *Friction Force* empregada, pois a *Added Mass Force* é importante no fim dos *Loop Reactors* e no caso em haja a presença de vórtices. Sugere-se, também, a verificação das hipóteses que simplificam as equações do balanço da fase gás; principalmente no que tange a negligenciada variação temporal e espacial da *gas hold-up*, o que possibilitou simplificações substanciais no procedimento de solução.

HILLMER *et al.*(1994) sugerem o uso de modelos com turbulência inclusa para descrever *Slurry Bubble Column Reactors* visando o estudo da influência mútua entre fluidodinâmica e reação química, nestes reatores. Saliendam que modelos clássicos numa dimensão como *Plug Flow* associados a modelos de dispersão não retratam tais sistemas.

As medições foram realizadas em dois *Slurry Bubble Column Reactors* com os respectivos diâmetros internos: $D_1 = 0,19$ m e $D_2 = 0,29$ m, e as seguintes alturas: $H_1 = 2,8$ m e $H_2 = 4,5$ m. Diferentes distribuidores foram empregados, sendo que as investigações foram realizadas nas operações em semibatelada, quanto no modo contínuo.

O artigo sugere o estudo detalhado da fluidodinâmica como uma ferramenta que conduzirá a cálculos de *scale-up* mais precisos e fundamenta tais indicações no crescimento da velocidade e capacidade de memória dos computadores nos últimos anos, porém é enfático que cada etapa da modelagem deve ser validada com investigações experimentais visando verificar a validade das hipóteses assumidas na modelagem com a descrição dos fenômenos que ocorrem no processo real.

Os resultados são comparativos entre vários tipos de modelagem: *Plug Flow*, *Plug Flow* com modelo de dispersão e modelos com fluidodinâmica. Os resultados são comparados com dados experimentais que vieram a confirmar a superioridade da modelagem considerando a fluidodinâmica. Verificou-se que o aumento do tamanho das partículas sólidas, tende a aumentar a coalescência do sistema, o que implicará: bolhas maiores, aumento da velocidade de ascensão das bolhas e numa diminuição da *gas hold-*

up. Percebeu-se que em tal situação há uma maior influência do distribuidor na fluidodinâmica.

Os autores concluem que no caso de reatores industriais, onde ocorrem regimes heterogêneos intensos, há gradientes radiais de *gas hold-up* locais. Portanto um modelo para descrever estes efeitos no mínimo deve ser 2D e que melhores correlações para o diâmetro inicial das bolhas criadas por um distribuidor de gás específico e sua variação axial e radial, causando diferentes *gas hold-up*, são necessárias para um melhor projeto de reatores. Comentam a necessidade de melhores modelos de turbulência e um aprofundamento dos *insights* a respeito das transferência de momentum entre as fases, que são exigidos antes que a modelagem proposta para os *Bubble Column Slurry Reactor* seja assumida como completa. Apesar de que o modelo bidimensional pseudobifásico, baseado nas equações fundamentais da Mecânica dos Fluidos, empregando uma viscosidade turbulenta associada a suspensão e obtida a partir do modelo k- ϵ , apresentou resultados satisfatórios, até mesmo para o caso em que a equação do balanço material envolvendo reação química foi resolvida simultaneamente com todas as outras equações. Logo, tal abordagem é capaz de calcular a influência da Fluidodinâmica em propriedades importantes, tais como conversão e seletividade em sistemas complexo de reações, até mesmo para cinéticas não-lineares. Ressaltou-se a possibilidade de ocorrerem casos, nos quais haja um significativo consumo de gás, em que a reação química influencia fortemente a Fluidodinâmica.

HJERTAGER e MORUD(1995) apresentaram modelos multidimensionais para escoamentos em bioprocessos, enfatizando modelos associados a escoamentos bifásicos. São listadas as limitações e dificuldades associadas ao projeto e *scale-up* de biorreatores.

Os pesquisadores comentam que a maioria dos modelos aplicados aos biorreatores são limitados a modelos de ordem-zero no que tange as dimensões; nos quais balanços totais ou balanços de um espécie química são considerados empregando o volume do reator como uma superfície de controle. Tais balanços incluem termos de acúmulo, transferência líquida nas fronteiras e taxa de geração de espécies. No entanto, a principal hipóteses nos referidos modelos é que não há gradientes das variáveis dependentes (por exemplo: Concentração). Nenhum balanço de momentum é necessário para este nível de modelagem.

Somente na década de 90 que os modelos 2D e 3D têm sido desenvolvidos para os fins citados no trabalho. Estes modelos multidimensionais são constituídos de equações de balanço para subdomínios (Volumes de Controle) no volume do reator. Tal como o modelo zero-dimensional; balanços totais e por espécies são efetuados para cada sub-domínio. Em adição, o fluxo entrando e deixando o subdomínio deve ser, também, calculado. A resolução dos balanços de momentum torna-se necessária em cada direção para quantificar os fluxos da variável dependente. Na modelagem do transporte devido a difusão o coeficiente associado ao gradiente de transporte é assumido como sendo um coeficiente efetivo, caso o escoamento seja turbulento, necessitando assim resolver equações que retratam a conservação de grandezas que quantificam a turbulência. O modelo mais popular é o k- ϵ , a partir do qual os coeficientes efetivos de transporte podem ser obtidos. A principal característica dos modelos multidimensionais é necessidade de resolução de um conjunto de equações diferenciais parciais.

Os pesquisadores mencionam as 2 diferentes aproximações disponíveis para relacionar as equações que governam o escoamento bifásico nos biorreatores: Eule-Euler e Euler-Lagrange. Esboçam um sumário do procedimento numérico empregado na resolução das equações diferenciais parciais que caracterizam os modelos multidimensionais, listando as referências.

No trabalho simulou-se um *Bubble Column Reactor* empregando o sistema ar/água, de dimensões compatíveis com as empregados nos laboratórios ($H= 2,0$ m e $D=0,15$ m). Onde medidas experimentais foram obtidos empregando *LDA (Laser Doppler Anemometer)*; variou-se a velocidade de alimentação de gás, percebeu-se que a concordância entre valores preditos e experimentais é maior para as altas velocidades superficiais da fase gás na alimentação. O perfil da *gas hold-up*, foram comparados com os valores obtidos na literatura e percebeu-se que os valores calculados eram menos discrepantes para dados envolvendo sistemas não-coalescentes. Vale ressaltar que dos dados disponíveis para a *gas hold-up* na literatura usam sistemas coalescentes e não-coalescentes.

Simulou-se , também, um fermentar que emprega leveduras e que apresentava escala industrial ($H = 17,5$ m e $D = 4,0$ m) o volume inicial do líquido é de 90 m^3 ; sendo que o ar era alimentado pelo fundo do reator. São fornecidas as condições de operação de tal sistema, ressaltando que o tempo de processamento era de 10 h. Obteve-se o padrão do

escoamento no reator supracitado, levando-se em conta a biocinética de reação. Os resultados das simulações foram comparadas com a concentração medida em 3 posições distintas ao longo do reator.

Os pesquisadores concluem enfatizando a necessidade de produzir-se mais dados experimentais, para a contínua melhoria dos modelos trabalhados e possibilitando a verificação dos resultados simulados confrontando-os com os dados experimentais, e sugerem a extensão do modelo biocinético de modo a incluir os efeitos da limitação de oxigênio na taxa de reação e a quantificar a distribuição do oxigênio dissolvido. Mencionam a necessidade de estender o modelo de escoamento de modo a incluir os fluidos não-newtonianos.

COCKX *et al.* (1997) compararam os resultados obtidos com um modelo 1D, que envolve muitas correlações que são restritas a uma geometria específica com os resultados numa abordagem 3D utilizando simulações numéricas empregando o *Computational Fluid Dynamics software ASTRID* desenvolvido por Edf (Chatou, França). As simulações numéricas foram validadas com dados experimentais extraídos de uma planta piloto no laboratório. O *Internal Loop Air-Lift Reactor* empregado apresentava as seguintes dimensões: $H = 3,0$ m e $W = 0,5$ m de profundidade, sendo que uma parede vertical foi colocada no plano de simetria.

A modelagem 3D foi baseada na resolução local e transiente da equação euleriana de Reynolds em duas fases escoando. Um dos objetivos principais do estudo é obter uma compreensão, a partir do conhecimento local de fenômenos, a respeito da intensidade da influência da fluidodinâmica no controle da distribuição de ambas as fases e da transferência de massa na interface gás-líquido.

Como os parâmetros fluidodinâmicos controlam a distribuição da fase gás e conseqüentemente o campo de velocidade do líquido , pois nos Reatores *Air-Lift* a recirculação de líquido é induzida pela distribuição da fase gás, foram feitas análises de sensibilidade para diferentes valores de coeficientes presentes no modelo 1D, bem como a sensibilidade dos resultados com a geometria.

As simulações foram realizadas utilizando um diâmetro de bolha constante, o qual corresponde ao diâmetro médio obtido experimentalmente. Os resultados numéricos apresentam valores que concordam com os dados experimentais, a estimativa dos

parâmetros para os quais o modelo 1D apresenta grande sensibilidade pode ser feita utilizando os resultados numéricos empregando *CFD*.

Os resultados confirmaram que uma boa estimativa da distribuição da fase gás conduz a uma boa estimativa da recirculação do líquido e mostram a sensibilidade dos mesmos com a geometria. Os autores sugerem que o modelo 1D seja empregado com o auxílio dos parâmetros obtidos empregando *CFD*, como o caminho para projetar Reatores *Air-Lift* de porte industrial, pois a modelagem é mais geral que as correlações empíricas e de mais fácil utilização que a modelagem 3D (*CFD*). Tal procedimento será interessante para entender a modelagem dos Reatores *Air-Lift*, até então considerados caixas-pretas para problemas de *scale-up*.

SOKOLICHIN *e al.*(1997) analisam os pontos positivos e negativos da abordagem Euler-Euler, onde ambas as fases são modeladas em 3D como contínuas empregando a equação de Navier-Stokes e da abordagem Euler-Lagrange onde a fase gás é tratada como um sistema discreto, cada bolha individualmente. Para isso, compara os resultados de cada metodologia com os resultados experimentais, através de análises qualitativa e quantitativas.

É citada as consideráveis dificuldades no que tange a validação direta, desde que as técnicas de medidas necessárias para fornecer dados que possibilitem a compreensão de escoamentos turbulentos, regime que prevalece nos reatores químicos reais, não são suficientemente desenvolvidas, impossibilitando a validação direta do escoamento transiente em *Bubble Column Reactor*.

Para a abordagem Euler-Euler foram empregadas dois esquemas numéricos distintos no tratamento dos termos convectivos:

- 1) *Upwind* : discretização de 1º ordem;
- 2) *TVD*: discretização de 2º ordem.

O Esquema *Upwind* apresenta difusão numérica que são reduzidas à medida se que aumenta o número de elementos finitos de volumes considerados. Enquanto que o Esquema *TVD* aplicado nas equações do modelo conduz a um sistema de equações não-lineares; as quais são linearizadas e resolvidas iterativamente.

A metodologia Euler-Lagrange quando o número de partículas dispersa (fase gás) não for relativamente grande, pode causar descontinuidade no perfil da *gas hold-up*, podendo produzir problemas de convergência na solução da equação de Navier-Stokes, aplicada à fase líquida.

Os resultados foram comparados com dados experimentais obtidos num reator retangular de escalas próprias para bancada (altura: 150 cm, largura : 50 cm e comprimento : 8 cm) com paredes de vidro que permite a documentação por fotografia do escoamento multifásico, possibilitando uma comparação qualitativa com os resultados numéricos. As soluções numéricas obtidas com um Esquema *TVD* apresentam maior semelhança com o resultado atingido com a metodologia Euler-Lagrange em função da difusão numérica associada ao Esquema *Upwind*. Comparando com o resultado experimental as metodologias Euler-Euler , empregando o Esquema *TVD*, e Euler-Lagrange são aceitáveis .Os resultados utilizando o método *Upwind* podem ser melhorados quando aumenta-se o número de elementos finitos de volume, entretanto tal procedimento foi limitado pela velocidade e capacidade de memória dos computadores da época. Salienta-se que a metodologia Euler-Lagrange pode torna-se lenta se o número de bolhas considerado for muito grande.

Os pesquisadores chegam a um consenso que as soluções numéricas empregando o Esquema *Upwind* clássico pode conduzir a resultados inaceitáveis, quando aplicado na discretização dos termos convectivos associados ao escoamento bifásico. O que pode ser contornado se uma malha suficientemente refinada for empregada, o que pode ser impossibilitado pela capacidade de processamento das máquinas empregadas na época. Já o esquema *TVD* apresentou-se como a alternativa viável, pois propiciou resultados com a mesma ordem de acuracidade que os obtidos empregando a metodologia Euler-Lagrange, que não é tão afetada pela difusão numérica. Constatou-se que a implementação das metodologias Euler-Euler, empregando o Esquema *TVD*, e Euler-Lagrange diferem consideravelmente no que tange ao tempo de processamento. A abordagem Euler-Lagrange é consideravelmente mais rápida que a metodologia Euler-Euler, empregando o Esquema *TVD*, desde que por razões de estabilidade o referido esquema de discretização exige um menor incremento de tempo para a integração da equação associada a *gas hold-up* que a abordagem Euler-Lagrange.

Nos casos onde a *gas hold-up* é maior que 10%, nenhum das presentes técnicas fornece resultados confiáveis, desde que as interações bolha-bolha devem ser quantificadas. Até a época da publicação do artigo, não havia modelos fisicamente razoáveis para retratar tal fenômeno.

SOKOLICHIN e EIGENBERGER (1999), parte I, comparam os resultados das simulações realizadas visando descrever a fluidodinâmica de um *Bubble Column Reactor* localmente aerado que apresenta geometria retangular com as seguintes dimensões : W = 50 cm (largura) , D= 8 cm (profundidade) e H= 200 cm (altura), preenchido de água até a altura de 150 cm; teste caso descrito em detalhes em BECKER *et al.* (1994). Utilizaram a abordagem Euler-Euler em 2D e 3D alterando a resolução espacial, refinamento da malha, e empregando modelos laminar e turbulento. Foram negligenciados fenômenos tais como: coalescência e *break-up* das bolhas, os autores afirmam que tais simplificações condizem com as características das condições de operações dos *Bubble Column Reactors* de porte industrial operados com elevadas pressões sobre .

A proposta do referido trabalho é chegar a um consenso a respeito da modelagem da turbulência na fase contínua, tendo em vista que na maioria das publicações numéricas descrevem o estado estacionário considerando o escoamento de 2 fases , empregando o modelo padrão $k-\epsilon_{dissp}$, o qual foi desenvolvido para escoamentos monofásicos. Logo a aplicabilidade do referido modelo em escoamentos bifásico é questionável e apresenta o agravante das observações feitas no reator em estudo: várias células de circulação de líquido foram observadas e suas posições variam bem como o número de células; sendo os grupos de bolhas influenciados por estes vórtices. Uma estrutura dinâmica similar, que consiste em uma larga-escala de vórtices apresentando variações contínuas de suas localizações com o tempo, é típica de *Bubble Column Reactor* e Reatores *Air-Lift* em escala industrial, sendo esta dinâmica global do comportamento do escoamento bifásico o fator determinante no processo de mistura de ambas as fases. Logo a descrição realista da dinâmica em grande escala é de suma importância para modelos mais confiáveis no que tange os reatores gás – líquido.

As equações diferenciais parciais que constituem o modelo foram resolvidas numericamente em 3D utilizando o Método dos Volumes Finitos, sendo o termo transiente discretizado empregando o esquema totalmente implícito (PATANKAR, 1980) , os termos referente a difusão foram discretizados empregando o esquema de diferenças centrais de 2ª

ordem, já os termos convectivo, os mais difíceis de serem discretizado de modo a fornecerem resultados que encerrem o realismo físico (PATANKAR, 1980), foram aproximados em todas as equações diferenciais usando o Esquema TVD de 2ª ordem que apresenta maior acuracidade e foi discutido por SOKOLICHIN *et al.* (1997). O acoplamento pressão e velocidade foi implementado através do método *SIMPLER* (PATANKAR, 1980) com algumas modificações.

Os pesquisadores perceberam que o modelo 2D e laminar fornece resultados que dependem fortemente da resolução da malha. Já o modelo 2D em conjunto com o modelo de turbulência ($k-\epsilon_{\text{dissp}}$), produz uma viscosidade superestimado em 1 ordem de grandeza, implicando na supressão de características transientes do escoamento. Os resultados do modelo 3D mostraram a incapacidade do modelo 2D turbulento em reproduzir a dinâmica característica do escoamento, os autores justificam tal observação baseados no fato da pequena profundidade do *Bubble Column Reactor* suprimir a intensidade turbulenta o que implica num decréscimo da viscosidade efetiva.

Os resultados obtidos com a configuração em 3D empregando o modelo $k-\epsilon$ foram surpreendentemente superiores do ponto de vista qualitativo e apresentaram boa concordância com os resultados experimentais, apesar do fato que foi aplicada a aproximação que considerava a velocidade *slip* constante em detrimento ao completo balanço de momentum da fase gás. Verificou-se que ambas situações : modelo laminar e turbulento, aplicadas numa configuração em 2D, presentes na metodologia Eule-Euler foram concordantes com os resultados obtidos, divulgados previamente por outros autores, empregando a metodologia Euler-Lagrange. Nenhuma simulações em 3D com modelo turbulento e aplicando a metodologia Euler-Lagrange não tinham sido desenvolvidas até a época da publicação do referido trabalho. No entanto, os autores supõem que as simulações em 3D com modelo turbulento e aplicando a metodologia Euler-Lagrange conduzirá a resultados concordantes com os dados experimentais, pois ambas as formulações: Euler-Euler, empregando o Esquema *TVD*, e Euler-Lagrange conduziram a resultados idênticos, para os casos comparados, quando uma malha suficientemente refinada foi empregada em ambas formulações.

BORCHERS *et al.* (1999), parte II, realizam experimentos num *Bubble Column Reactor* localmente aerado com um distribuidor *frit* localizado no fundo de um reator de secção transversal retangular. A validação foi realizada com dados quantitativos

empregando o modelo 3D com turbulência nas simulações, pois na Parte I verificou-se que somente o referido modelo apresenta boa concordância com os dados experimentais, que consistiam, primordialmente, de uma análise quantitativa a partir das fotografias do reator, pois o mesmo apresentava paredes transientes.

Os dados experimentais quantitativos foram obtidos através do emprego da documentação fotográfica da distribuição das bolhas (processamento de imagens) e com o emprego da técnica de *LDA (Laser Doppler Anemometer)* para medir a velocidade do líquido. Os resultados das medições foram comparados com os resultados fornecidos pelas simulações.

Os pesquisadores mencionaram que a estrutura do escoamento no *Bubble Column Reactor* de geometria retangular é determinada pela taxa de alimentação do gás, pelo modo de aeração e a altura preenchida pelo líquido. O efeito da *Column Aspect Ratio* (Altura/Largura) foi estudada numa vazão de gás fixa, percebeu-se que para valores pequenos de tal parâmetro ocorre a presença de escoamentos essencialmente estacionários ($H/D=1$), quando os valores aumentam as estruturas próprias de escoamentos transientes surgem e vão se intensificando. Os experimentos foram conduzidos no mesmo reator empregado nas simulações por SOKOLICHIN e EIGENBERGER (1999), parte I.

Os autores confirmaram a validade do modelo físico proposto na parte I (SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1999) do ponto de vista quantitativo empregando os dados experimentais. Os resultados das simulações numéricas, tanto para o modo estacionário como o transiente, apresentaram boa concordância com os dados experimentais.

DELNOIJ *et al.* (1999) realizaram um estudo 3D da fluidodinâmica para *gas-liquid bubble column* empregando o modelo Euler-Lagrange visando obter a dependência temporal e o movimento em 3D de pequenas bolhas esféricas num líquido. A fluidodinâmica da fase líquida é descrita usando as equações de Navier-Stokes, enquanto a fase gás é modelada utilizando as leis de Newton para o movimento. Portanto um tratamento próprio de sistemas discretos é aplicado à fase gás, pois as bolhas são estudadas individualmente.

No referido trabalho não houve a quantificação das interações bolha-bolha, no entanto, comentou-se a existência de modelos que quantificam as colisões entre bolhas e

entre as bolhas e as paredes do reator. Assumiu-se a ausência de coalescência, *break-up* e no que se refere ao tamanho das bolhas, adotou-se uma distribuição log-normal de diâmetro das bolhas empregando-se um diâmetro médio de 10^{-3} m, não varia com a movimento ascendente das mesmas ao longo do reator; as bolhas foram assumidas como incompressíveis. O reator empregado nos experimentos apresentava as seguintes dimensões: H = 1,3475 m (altura), L=0,175 largura e W = 0,175 m (profundidade); o que exigiu $6,16 \times 10^4$ pontos nodais e $7,0 \times 10^4$ bolhas, no que tange as simulações numéricas.

Os autores obtiveram o campo de velocidade e a posição das bolhas em um volume retangular do espaço com dimensões comparáveis a de reatores de bancada, gastando aproximadamente 300 h para a obtenção das soluções, pois empregou-se várias *aspect ratio* no *Bubble Column Reactor* estudado; a qual afeta o padrão global de circulação do líquido. O modelo permite determinar claramente a mudança de regime fluidodinâmico e possibilita a visualização do campo de velocidade oriundo do escoamento da fase líquida e da interação desta com a fase gás, bem como as estruturas dos turbilhões desenvolvidos na fase líquida.

BAUER e EIGENBERGER (1999) propuseram a modelagem multiescalar para *Bubble Column Reactors* e Reatores *Air-Lift*, onde um “modelo de zonas”, essencialmente 1D, que encerra os balanços de massa das fases gás e líquido, bem como as equações de balanço necessárias para a descrição da variação do diâmetro médio da bolhas que apresentam uma distribuição de tamanho, sendo possível adicionar o balanço de energia. As detalhadas informações do escoamento bifásico é fornecido ao “modelo de zonas” pelo modelo fluidodinâmico, embora este exija informações sobre o tamanho local da bolha e a transferência de massa entre as fases.

Os autores justificam a proposta no fato da reação química e a transferência de massa dependerem da concentração e interface gás/líquido, que por sua vez dependem da *gas hold-up* local e da distribuição do tamanho das bolhas; sendo esta última fortemente influenciada pelos seguintes fatores:

- tipo e localização do distribuidor;
- coalescência local , que depende das propriedades do fluido;
- fenômeno de redispersão.

Os dados experimentais foram obtidos empregando um reator com as seguintes dimensões: $H = 5,0$ m (altura), $L = 0,5$ m (largura) e $W = 0,5$ m (profundidade). Já a solução numérica foi obtida, para o referido caso em estudo, através do *Loop* de informações entre as diferentes escalas do nível de modelagem. Primeiramente a fluidodinâmica sem reação e transferência de massa é simulada e os resultados são alimentados no “modelo de zonas”, as informações sobre o tamanho das bolhas e o fluxo de massa na interface são realimentadas no modelo fluidodinâmico. Após 4 iterações, o resultado converge; a conversão que inicialmente foi calculada em 86 %, pelo “modelo de zonas”, é reduzida a 79%, logo a modelagem da fluidodinâmica em conjunto com a reação é importante devido à mútua influência entre tais fenômenos. Percebeu-se que o campo de escoamento do líquido variou significativamente.

Os pesquisadores apontam a abordagem multiescalar como a alternativa mais viável para modelarmos as informações da fluidodinâmica transiente em conjunto com a transferência de massa e reação química. Tendo em vista que nos modelos simplificados a transferência de massa, reação e parâmetros de interação entre as bolhas são quantificadas usando muitas correlações empíricas que permitem avaliar: a *gas hold-up*, valores dos coeficientes de transferência de massa e parâmetros de mistura, como sendo funções da velocidade superficial do gás, no entanto, a validade destas correlações para diferentes geometrias, viscosidade das fases e o gás reativo; são frequentemente questionáveis. Embora a fluidodinâmica detalhada encerre informações a respeito da geometria do sistema, a implementação de tal ferramenta levando em conta balanços de espécies, energia e interações entre as bolhas é impossibilitado de ser conduzida nas *workstations* com as capacidades de processamento da época.

WEIDENBACH *et al.* (1999) citam a *CFD* como uma ferramenta que pode tornar um processo químico mais competitivo, pois tal objetivo requer habilidades técnicas e ferramentas que otimizem as condições de operação de uma unidade de produção. No referido trabalho, empregou-se a *CFD* em conjunção com as reações químicas e processos de absorção num reator tubular empregado na produção de óxido de propileno, visando o aumento da capacidade de produção.

A abordagem proposta é justificada na necessidade de análises mais sofisticadas dos processos e otimizações, em função das exigências de maior flexibilidade em função das variações na demanda e pressões ambientais, no que tange a efluentes. Devido as

limitações no fator tempo, estudos experimentais extensos na indústria química são frequentemente proibitivos e o emprego de computadores desempenha um papel importante na substituição dos testes de laboratórios visando otimizar a performance da planta.

O trabalho aborda a produção de óxido de propileno, capacidade de produção em âmbito mundial de $3,9 \cdot 10^6$ t/ ano em 1991, a qual apresenta mais de 55% seguindo a rota propileno-cloridrina, sendo a mesma de grande relevância industrial, pois muitas melhorias têm sido implementadas visando a minimização de sub-produtos; isto é alcanos clorados e éteres e redução de efluentes.

Os pesquisadores introduziram o uso da *CFD* na otimização de um reator tubular que é empregado na produção de propileno-cloridrina, um precursor para o óxido de propileno. Alimenta-se no reator uma mistura gasosa de cloro, propileno, gás inerte e água. Durante o curso da reação, cloro e propileno são absorvidos simultaneamente a partir da fase gás para a água, onde a reação ocorre; o conjunto de reações consiste de vários equilíbrios, reações consecutivas e paralelas de ordem diferente. A fração mássica do gás inerte é pequena, tal que com o andamento da absorção de propileno e cloro, a fração volumétrica total dos gás diminui consideravelmente, por isso há mudanças no regime do escoamento. A geometria do reator e altas taxas de absorção causam pronunciados gradientes de velocidade e pressão ao longo do reator. Devido a rápida reação química na fase líquida, a etapa determinante é a transferência de massa na interface gás/líquido.

Os autores comparam 2 modelos que apresentam diferentes grau de complexidade e que são aplicados na quantificação da transferência de massa, calor e momentum. Um modelo unidimensional (1D) é usado para prever a distribuição dos produtos, velocidade das fases, frações de volume, temperatura e pressão no reator. A modelagem empregando *CFD* permitiria uma rigorosa predição da fluidodinâmica baseada nas equações de Navier-Stokes. Ambos modelos macroscópicos são suplementados por um modelo microscópico de transferência de massa, permitindo a simulação do escoamento envolvendo a absorção simultânea de propileno e cloro, bem como as rápidas reações químicas na fase líquida, simultaneamente.

O complexo sistema de equações, a geometria do reator e a mútua dependência da fluidodinâmica e seletividade, tornam o processo propileno-cloridrina num caso onde a *CFD* poder ser aplicada.

A modelagem 1D, empregou um programa comercial que dispõe de vários esquemas numéricos para integração de sistemas *Stiff* de equações diferenciais, subconjunto onde enquadram-se as equações que caracterizam o modelo 1D empregado. A Fluidodinâmica foi simulada empregando o pacote comercial CFX versão 4.2, as várias restrições associadas ao emprego do referido código no cálculo de escoamento bifásicos com transferência de massa, transferência de espécies químicas e reações químicas na fase líquida, foram contornadas pela especificação adicional de rotinas via FORTRAN disponíveis no código.

Ambas as modelagens: 1D e 3D, empregando a *CFD* foram , foram usadas para otimizar o reator para produção propileno-cloridrina, na planta de óxido de propileno. Os resultados foram comparados e os mesmos foram concordantes. Em particular, as mais importantes variáveis de saída: produção e composição do produto; apresentam previsões quase iguais e até as variações associadas a fluidodinâmicas: pressão, temperatura e velocidade axial apresenta boa concordância. Tal fato mostra que nos casos de simples geometria o modelo em 1D é suficientes para descrever o processo.

Os autores concluem que o uso da *CFD* combinado com a transferência interfacial de massa e as reações químicas na fase líquida, pode fornecer informações que possibilitem melhores condições de operação e performances de um reator tubular de escala industrial para a produção de óxido de propileno. Os resultados das simulações sugeriram que certas geometrias do reator permitiriam um aumento na capacidade hidráulica e ,portanto, na taxa de produção, bem como minimizar a produção de subprodutos. O esforço computacional para as simulações poder ser reduzidas, nos casos onde a geometria for simples , pela aplicação do modelo unidimensional, pois em tais casos as previsões do modelo 1D coincidem com a modelagem mais elaborada associada a *CFD*. Para geometrias mais complexas, os valores preditos pelo modelo 1D apresentam concordância apenas qualitativa, as quais podem ser usadas como uma estimativa inicial para simulações empregando *CFD*.

PFLEGER *et al.*(1999) empregaram a metodologia Euler-Euler na modelagem da Fluidodinâmica do escoamento bifásico num *Bubble Column Reactor* que apresentava dimensões próprias para escala de laboratório, operando a baixas *gas hold-up*.

Os autores frisam a ocorrência de escoamentos bifásicos em numerosos processos presentes na indústria química e a carência de conhecimento detalhados da Fluidodinâmica de reatores químicos, embora tais informações sejam importantes para melhorias na eficiência do processo. Daí, propõe a Fluidodinâmica Computacional como um método para obter-se um maior conhecimento e um detalhado entendimento físico de tais sistemas. São enfáticos ao citar a maior facilidade do emprego da *CFD* em problemas envolvendo escoamento monofásicos. No entanto, mencionam as dificuldades encontradas no emprego da referida ferramenta na modelagem de escoamentos bifásicos, como resultado das influências de complexas interações entre as fases no tocante à transferência de massa, momentum e energia; sendo que alguns fenômenos não são bem entendidos até o presente momento.

Na modelagem da Fluidodinâmica foi empregados os modelos contidos no código comercial CFX versão 4.2, o qual foi aplicado na resolução das equações associadas a Fluidodinâmica Computacional. A base do código é o Método dos Volumes Finitos aplicado em conjunção com a metodologia Euler-Euler. No referido trabalho, há comentários sobre as equações dos modelos empregados no código comercial: equação da conservação da massa, equação da transferência de momentum, expressões e correlações para *Drag Force* e equações do modelo de turbulência : $k-\epsilon$, modificado de modo a retratar o escoamento bifásicos.

Os autores investigam as influências das aproximações aplicadas no modelo de turbulência sobre os resultados da Fluidodinâmica, pois o modelo $k-\epsilon$ originalmente foi desenvolvido para escoamentos monofásicos e posteriormente foi adaptado para escoamentos bifásicos, supondo que a energia devido ao movimento das bolhas ao longo do reator é parcialmente convertida em energia cinética turbulenta, pois tal efeito foi quantificados por uma produção adicional de turbulência a qual foi definida como *BIT* (*Bubble Induced Turbulence*).

Os experimentos foram realizados num *Bubble Column Reactor* retangular que apresentava as seguintes dimensões: $H = 45$ cm , $L = 20$ cm e $W = 5$ cm; operando com o sistema ar/água à temperatura ambiente e considerando o sistema isotérmico e saturado. Os dados experimentais foram obtidos empregando *LDA* (*Laser Doppler Anemometry*) e métodos de processamento de imagem. Os resultados foram empregados na validação dos

valores preditos pela modelagem associada à *CFD*. Nas simulações às transferências de massa e calor foram desprezados.

Foram conduzidas simulações em 2D e 3D empregando uma malha numérica padrão constituída de aproximadamente 40.000 células. Na discretização dos termos convectivos empregou-se o esquema de ordem superior denominado *TVD (Total Variation Diminishing)* conforme sugerido por SOKOLICHIN *et al.* (1997), e um incremento de tempo de 0.1 s, pois maiores incrementos de tempo poderia reproduzir resultados que não retratassem fielmente o comportamento transiente, pois simulou-se regimes transientes equivalente a 400 s tempo real, gastando para isso 94 h de processamento e empregando uma malha padrão.

A força de Empuxo e a *Drag Force* foram considerados na modelagem, sendo que um parâmetro essencial para a força resultante por balanço num elemento (Volume de Controle) é a *gas hold-up* local, pois a quantidade local de gás influencia a massa específica média e, portanto, os efeitos de Empuxo. Sendo que o movimento da fase contínua é um resultado da ação da *Drag Force* no elemento fluido.

Percebeu-se que muitas características do escoamento observadas experimentalmente não são mostradas pelas simulações em 2D, pois as referidas simulações fornecem resultados próprios de regimes estacionários e que foram justificados pelo alto valor da viscosidade turbulenta na fase contínua, o que suprimiu parcialmente o movimento das bolhas. Vale ressaltar que os valores da viscosidade em 2D foram de 5-10 vezes maiores que os valores obtidos para os casos em 3D. Os autores comentam que a partir dos perfis oriundos das simulações em 3D, percebeu-se que a energia turbulenta é máxima no plano central do reator e se reduz na direção das paredes, e o perfil varia sensivelmente com o refinamento da malha numérica. Várias variações nos experimentos foram realizadas de modo a concluir que a intensidade turbulenta é o fator determinante para o comportamento dinâmico. Logo, para simular corretamente o comportamento físico real dos *Bubble Column Reactor* recomenda-se o uso de modelagem citada, aplicada a configuração em 3D.

Comparou-se os modelos laminar, modelo k- ϵ e o k- ϵ com dispersão; os quais apresentaram resultados razoáveis do ponto de vista qualitativo. No entanto, houve uma predominância tanto qualitativa como quantitativa dos resultados obtidos empregando o

modelo turbulento sem dispersão. Os perfis da velocidade axial do líquido foram traçados em vários níveis ao longo do reator e em todos os casos o modelo k-ε sem qualquer termo adicional de dispersão apresentou melhores resultados, percebeu-se que o modelo k-ε com dispersão resulta em simulações que decrescem a velocidade do líquido, achatando o perfil em todas as alturas do reator.

Os pesquisadores concluem que a modelagem de um *Bubble Column Reactor* simples, pode ser efetuada empregando um código comercial que resolva a *CFD*, sendo necessário a configuração em 3D, usando o modelo k-ε para a fase contínua e uma malha numérica suficientemente fina de modo a descrever as informações associadas a energia turbulenta do fluido. Comenta-se, ainda, que as complexas correlações dos termos adicionais relacionados com a transferência de momentum ou com a turbulência induzida pelas bolhas não eram bem compreendidas até a presente época. Além disso, pesquisas na área da modelagem da *CFD* de escoamentos bifásicos (gás – líquido) são fortemente dependentes do entendimento detalhado dos fenômenos físicos do complexo comportamento dinâmico.

LÜBBERT *et al.* (2001) comentam que os modelos de processos químicos e bioquímicos são dedicados a modelagem cinética ou da Fluidodinâmica, sendo que a maioria dos trabalhos são fundamentados na hipótese de ocorrência de condições idealizadas, pois quando a reação química é levada em conta o reator é assumido como um caso ideal (Ex.: tanques agitados ideais), quando a Fluidodinâmica é considerada de modo mais próximo do real, a transferência de massa e a reação química são omitidas. No entanto, a fundamentação dos processos químicos e bioquímicos seria o estudo das interações entre ambos aspectos: Fluidodinâmica, transferência de massa e reação química. Tal abordagem está tornando-se viável em função do progresso na *CFD*, permitindo simular a Fluidodinâmica gás-líquido com bastante acuracidade, em função, também, do aumento na capacidade de processamento das modernas *Workstations*. Tal conjuntura possibilitaria a modelagem da transferência de massa entre diferentes fases e reações químicas entre vários componentes na fase líquida, consistindo na resolução simultânea das equações do momentum, transferência de massa e calor, equação de mistura e reações químicas.

Os autores investigam a possibilidade de predição dos efeitos combinados da conversão química, transferência de massa, calor e momentum de modo a projetar e

otimizar a produção de reatores. O estudo de caso é um reator industrial em operação, por isso informações quantitativa sobre o sistema reacional e condições de operação foram omitidas. O reator consiste num *Bubble Column Reactor* contendo na parte superior pratos com furos concêntricos no centro.

Os dados experimentais a respeito do escoamento do fluido foram obtidos durante o ciclo de produção, em vários pontos do reator, sendo que a distribuição da velocidade das bolhas foi medida com o método *Ultrasound-Pulsed Doppler*, os pesquisadores citam as vantagens e limitações da referida técnica, bem como a faixa dos valores das variáveis dependentes em que a mesma pode ser aplicada.

Foram realizadas medições de temperatura em vários pontos ao longo do reator, a taxa de calor removida foi determinada empregando um balanço de energia térmica, pois a temperatura e as vazões do fluido refrigerante (circulando na jaqueta de resfriamento) eram conhecidas. As concentrações do componente empregado na inferência foram medidas na entrada e na saída.

A modelagem da fluidodinâmica foi uma extensão da explanada por LAPIN e LÜBBERT (1994). Aplicou-se uma abordagem Euler-Lagrange, aproximadamente 200.000 bolhas são tratadas como sistemas discretos nas sua trajetórias ao longo do reator. Aplicou-se Balanço de Energia para a mistura reacional e Balanço Material em termos de concentração para o gás, dissolvido na fase líquida, e para a fase líquida, levando-se em conta a reação química e a transferência de massa.

As equações do modelo foram resolvidas simultaneamente numa malha numérica, em todas as direções (problema tratado em 3D), empregando um software baseado nas idéias de LAPIN e LÜBBERT (1994), bem como SOKOLICHIN *et al.* (1997).

Percebeu-se pela análise do campo de velocidade simulado que as bolhas em movimento ascendente induzem a turbulência no reator, produzindo, portanto, um campo de escoamento altamente transiente, não-simétrico e caótico. Foram obtidos campos de velocidade, valores médios no tempo, para simulações que retratavam 1h de operação no tempo real.

Os dados experimentais consistem na avaliação de flutuações randômicas nas propriedades do escoamento, portanto as medições foram integradas a cada 10 min, sendo que as medições foram conduzidas durante o processo de produção regular. A concordância

entre as medições e os valores preditos é bastante alta, exceto em poucos pontos próximos da parede; todos os dados mostram as mesmas tendências que valores simulados.

Nos resultados da *gas hold-up* local, percebeu-se pequenas áreas abaixo dos pratos que indicavam a presença de camadas homogêneas de gás. Entretanto, desde que não foi empregado modelo na quantificação da coalescência, tal peculiaridade foi descrita como áreas onde encontram-se grande número de bolhas de igual tamanho e uma pequena quantidade de líquido. Tal fenômeno local, necessitaria de experimentos conduzidos em laboratórios visando um melhor fundamentação, segundo os pesquisadores.

A concentração dos componentes no *Bubble Column Reactor* apresentou não-homogeneidade na parte do reator onde foi observado o escoamento turbulento totalmente desenvolvido, tal característica não foi percebida na distribuição de temperatura ao longo do reator. Tanto no regime transiente como nos valores médios no tempo, nenhum gradiente acentuado no perfil de temperatura foi observado na parte inferior do reator, confirmando a característica conhecida dos *Bubble Column Reactor*, que seria a excelente transferência de calor. As diferenças de temperatura nos pequenos segmentos da parte superior do reator são consideradas pequenas, o que não foi bem compreendido, pois apesar da reação ser menos intensa e o processo de mistura ser mais intenso, a transferência de calor foi avaliada como pequena.

Os pesquisadores chegaram ao consenso que os resultados da *CFD* permite novos *insights* dos fenômenos locais dos reatores gás-líquido. Em particular, gradientes locais de concentração podem ser cruciais para um aumento da produção do reator químico, ou pontos locais de elevada temperatura (*hot spots*) podem ser combatidos, pois os mesmos podem conduzir a falhas no processo de produção. As características essenciais dos padrões de escoamento e concentração nos *Bubble Column Reactors* de escala industrial e em operação, podem ser reconhecidas e validadas pelo resultados das simulações, pois boa concordância foi obtida entre os resultados preditos e os valores medidos no reator investigado.

Os cinco pratos que subdividem a parte superior fornecem concentrações do componente empregado na inferência, que não excede o valor predefinido (baixo) e medido na saída do reator. A parte inferior ao primeiro prato poderia ser considerada como um típico *Bubble Column Reactor*.

Os cálculos obtidos formam uma base sólida para projetos, *scale-up* e otimização de processos. Os autores frisam que o referido trabalho consiste na primeira parte de uma típica otimização de reator, pois após a modelagem empregando *CFD* ser rigorosamente testada com dados experimentais, a mesma pode ajudar a modificar o processo original de modo a melhorar a quantidade ou a qualidade do produto de interesse, ou quantificar as variações no processo de produção que venham a ocorrer.

BAUER e EIGENBERGER (2001) aplicam o conceito de modelagem multiescala num estudo de caso que consiste num *Bubble Column Reactor* visando a descrição do comportamento do mesmo, para a condição não isotérmica, com reações paralelas e consecutivas, com e sem evaporação dos produtos. Tal abordagem é baseada na observação de que a maioria das reações de síntese com sistemas gás-líquido, são lentas quando comparadas com as rápidas e locais flutuações da fluidodinâmica gás/líquido. No entanto, são suficientemente rápidas de modo a serem consideradas em média e grande escala pelo processo de mistura nos *Bubble Column Reactors* de escala industrial. À luz de tais considerações os pesquisadores empregaram um modelo unidimensional consistindo de zonas em estado estacionário, sendo que o escoamento e os parâmetros de mistura, são fornecidos a partir de um modelo fluidodinâmico detalhado, multidimensional e transiente; o modelo mais simples é usado para calcular os balanços de massa, energia e distribuição do tamanho de bolhas. Os tamanhos locais das bolhas e os fluxos totais de massa entre as fases gás e líquido são realimentados a partir do modelo simplificado no modelo associado a detalhada fluidodinâmica até que a convergência entre os dois níveis de modelagem seja atingida.

Na detalhada fluidodinâmica empregou-se simulações transientes em 3D usando um modelo turbulento apropriado e buscou-se obter soluções independentes da malha, pois as mesmas apresentam boas concordâncias com os resultados experimentais, segundo SOKOLICHIN e EIGENBERGER (1999).

Os autores comentaram que tradicionalmente um diâmetro médio de bolhas tem sido usado para calcular a área superficial específica para a transferência de massa nos modelos mais simplificados. Isto negligencia a influência das variações no diâmetro de bolha devido a transferência de massa e devido as interações bolha-bolha (coalescência e *break-up*). Uma apropriada inclusão da influência de uma variação na distribuição do tamanho das bolhas requer balanços populacionais, os quais introduzem uma coordenada

independente adicional para cada espécie variando na fase gás. Visando a descrição apropriada dos *Bubble Column Reactors* os autores combinaram um submodelo para a distribuição do tamanho das bolhas (variação do diâmetro médio) com a detalhada fluidodinâmica, transferência de massa com reação química e interações bolha-bolha; no modelo global do reator.

É mencionado no trabalho que os *Bubble Column Reactors* com reações multietapas têm sido modelados aplicando-se muitas simplificações no modelo do escoamento. O que seria apropriados se um escoamento com estrutura estável prevalece-se nos *Bubble Column Loop Reactors*, com recirculação interna e externa, e se as variações do diâmetro médio das bolhas e no *gas hold-up* local pudessem ser negligenciados. No entanto, há ocorrência de vários contra-exemplos, principalmente nos *Bubble Column Reactors* simples (sem *Draft-Tubes*), pois os mesmos são caracterizados por intensas flutuações no padrão do escoamento, o qual depende do projeto da coluna, detalhes específicos do distribuidor e sua localização, consumo de gás devido a reação ou evaporação. À luz de tais considerações, nenhuma das tradicionais simplificações (modelos empregando células ou modelos com circulação no escoamento) são capazes de descrever a influência do padrão de escoamento na presença de reação, com o grau de detalhamento necessário. Já a apropriada modelagem 3D, transiente para a fluidodinâmica, demanda elevado esforço computacional para solução, tornando-se inviável sua aplicação de modo a encerrar a detalhada cinética de reação. Percebeu-se que em muitos casos não há necessidade de aplicar o mesmo incremento de tempo e um maior refinamento na malha (resolução espacial) aplicada na fluidodinâmica, pois a cinética da reação da maioria das reações de síntese envolvendo gás/líquido aplicada nas indústrias são relativamente lentas quando comparadas com a fluidodinâmica, o que justifica o emprego da modelagem multi-escalar.

A partir das muitas situações simuladas, percebeu-se mudanças na fluidodinâmica devido a reação química e a evaporação que vão desde o comportamento de mistura próprio de tanques em série até a um único tanque agitado. Em determinados casos as variações da fluidodinâmica afetaram a seletividade para um determinado produto que inicialmente era 86% caindo para 71%.

Os pesquisadores concluíram que o conceito de modelagem multiescala a partir da aplicação em 3 diferentes situações, que mostraram resultados substancialmente diferentes

entre as simulações iniciais e as soluções convergidas (modelagem multiescala). Baseados nos casos estudados: 3 diferentes exemplos para uma reação paralela/consecutiva, os quais incluem evaporação de um dos produtos formados bem como a influência da localização e projeto do distribuidor no comportamento do reator. Chegou-se a um consenso que a modelagem multiescala forma uma base razoável para um racional projeto e *scale-up* de *Bubble Column Reactor* envolvendo escoamento gás/líquido.

BECKER e PFLEGER (2001) empregaram a metodologia Euler-Euler numa configuração em 3D, na modelagem da Fluidodinâmica de um *Bubble Column Reactor* operando em regime homogêneo. A turbulência foi quantificada empregando o modelo k- ϵ padrão, fez-se um estudo a partir dos resultados numéricos visando investigar a influência de uma produção adicional de turbulência devido a presença da fase gás (fase dispersa). Efeitos de coalescência e *break-up* de bolhas foram negligenciadas, pois os pesquisadores afirmaram que o impacto de tais fenômenos para a configuração dos caso teste e condições de operação apresentavam-se como desprezíveis.

Os resultados numéricos, valores médios no tempo e comportamento transiente do campo de escoamento, foram validados empregando dados experimentais, medições de velocidade local e da *gas hold-up*, obtidos a partir do *Column Bubble Reactor* cilíndrico. Os autores comentam que na última década a maioria dos estudos em regime transiente empregando a *CFD* foram realizados em *Bubble Column Reactors* retangulares devido a estruturas dos escoamentos em tais equipamento serem menos complexas. Sendo que a maioria das publicações a respeito da Fluidodinâmica dos *Bubble Column Reactors* é focada na obtenção de valores médios no tempo. O escoamento dinâmico que domina a mistura da fase líquida e interage com a transferência de massa e reação, não é usualmente considerada.

Aplicou-se o *LDA (Laser Doppler Anemometry)* nas medições das velocidades instantâneas, os autores citam as limitações da referida técnica, o que definiu o diâmetro do reator empregado no estudo ($H= 2,6$ m e $D=0,288$ m). Os tamanhos das bolhas foram medidos empregando uma técnica fotográfica que mostrou a mesma faixa de diâmetro equivalente, a qual depende da vazão volumétrica do gás na alimentação, foi obtida para os dois tipos de distribuidores empregados no estudo. A coleta de informações a respeito da campo de velocidade foram mais intensas nas regiões próximas às paredes. A *gas hold-up* local foi medida com uma sonda empregando condutividade elétrica.

Há uma descrição sobre o tratamento dos dados experimentais, como o emprego de filtros digitais (*FIR: Filter Impulse Respost*). Os modelos básicos da Fluidodinâmica empregados consistem nos que estão contidos no código comercial aplicado na resolução numérica, no caso o CFX versão 4.3. O referido *software* apresenta uma metodologia Euler-Euler para descrição de escoamentos bifásicos; sendo que as equações são discretizadas empregando uma técnica baseada no Método dos Volumes Finitos. No termo fonte das equações do momentum, somente a *Drag Force* foi inclusa.

As investigações a respeito da turbulência induzida devido ao escoamento gás-líquido é realizada pela implementação de uma produção adicional de turbulência nas equações do modelo k- ϵ . A produção de turbulência no modelo k- ϵ em função das forças cisalhantes locais na fase contínua, apresenta uma contribuição devido as tensões cisalhantes adicionais (as quais são quantificadas pelo modelo *BIT*) devido ao movimento ascendente das bolhas ao longo do reator, o qual influencia a intensidade da turbulência.

Empregou-se inicialmente malhas “grosseiras” e em seguida refinando-as visando avaliar a exatidão das simulações e o tempo de processamento da *CPU*, exigido. Empregou-se o *SIMPLEC* na resolução do acoplamento pressão velocidade. Na discretização dos termos convectivos empregou-se um esquema de alta ordem denominado *TVD (Total Variation Diminishing)* para assegurar a acuracidade da solução na modelagem de escoamentos multifásicos, seguindo a recomendação de SOKOLICHIN e EIGENBERGER (1999).

A simulação de 1 min no tempo real exigiu 120 min do tempo de *CPU* nas *Workstation* empregadas. Por isso, as simulações visando a obtenção de valores médios no tempo para um tempo real de 1400s, exigiram um tempo de processamento da ordem de 48 h, empregando uma malha relativamente grosseira.

Os perfis radiais da velocidade axial apresentaram boa concordância com os dados experimentais, predizendo os valores máximos e a mudança de sinal nas proximidades da parede. Os valores máximos que ocorrem no centro da coluna , não foram medidos com muita exatidão pelo *LDA* devido a elevada *gas hold-up* e a longa profundidade de penetração exigida para o feixe de luz; limitações da técnica, o que justificaria a maior discrepância entre os valores preditos e medidos nos valores máximos do perfil. Os mesmos

perfis de velocidade apresentaram um desvio a partir da simetria, o qual foi resultado do emprego de malhas grosseiros.

O perfil da *gas hold-up* experimentais e simulados concordaram razoavelmente para todos as alturas da coluna. No entanto, uma melhor predição da *gas hold-up* exige um modelo mais detalhado para os distribuidores, que considera o processo de formação de bolhas e suas interações com a circulação da fase líquida, pois o mesmo foi modelados pela simples condição de fronteira (entrada da fase dispersa) para a velocidade superficial de gás constante e a razão entre a área do *Bubble Column* cilíndrico e a área da entrada.

Os autores confirmam o emprego do código comercial usado na modelagem associada a *CFD*, na simulação da Fluidodinâmica do escoamento bifásico aplicando a metodologia Euler-Euler para um *Bubble Column Reactor* cilíndrico apresentando escala de laboratório e operando em regime homogêneo. Enfatizam que na escala usada a reprodução do comportamento dinâmico, que é dominado pelo movimento irregular das plumas de bolhas, é encorajador. A inclusão dos modelos k- ϵ padrão é benéfica, pois permite a descrição instantânea de vórtices que surgem na estrutura do escoamento: a incorporação de um modelo adicional para a turbulência induzida devido as bolhas (modelo *BIT*), mostra um impacto positivo na predição dos perfis radiais da velocidade axial e deteriora a predição da *gas hold-up* local e global. O detalhado entendimento da influência do modelo *BIT* requer o emprego de malhas numéricas refinadas no caso teste.

Comenta-se que as simulações dinâmicas da Fluidodinâmica dos *Bubble Column Reactors* exigem um grande esforço computacional para se obter resultados bons do ponto de vista quantitativo. Logo, a aplicação de tal ferramenta nos *Bubble Column Reactors* de escala industrial é vista como inviável; no entanto, melhorias no *software* (Método Numérico) e *hardware* são as chaves para as simulações de reatores envolvendo escoamentos gás-líquido em escala industrial.

2.17 Conclusões

Os tópicos apresentadas neste Capítulo apontam para as dificuldades na modelagem do tipo de sistema considerado. As complexas interações entre os fenômenos físicos e químicos, normalmente presentes causam uma dificuldade adicional na determinação dos dados cinéticos da reação. Devendo ser destacada a importância de

correlações empíricas para a determinação dos parâmetros fluidodinâmicos que são fundamentais para o projeto dos reatores multifásicos. Neste capítulo também retratou-se os principais trabalhos relacionados com a aplicação de *CFD* para reatores multifásicos com ênfase nos *Bubble Column Reactor*, classe em que estão inseridos os Reatores *Air-Lift*, em função da carência percebida na literatura no que se refere a aplicação da *CFD* na modelagem da fluidodinâmica dos Reatores *Air-Lift*. Nota-se que não existe um consenso definitivo sobre qual metodologia é mais adequada (Euler-Euler e Euler-Lagrange), pois ambas apresentam vantagens e limitações, mas de forma geral se constituem em importantes ferramentas na predição do comportamento da Fluidodinâmica dos reatores multifásicos.

No Capítulo seguinte são apresentadas as metodologias e modelagem aplicáveis para escoamentos multifásicos.

3 METODOLOGIAS E MODELAGEM

“Mestre não é quem sempre ensina, mas quem de repente aprende.”

(Grande Sertão: Veredas, João Guimarães Rosa)

3.1 Modelagem básica empregada em escoamentos multifásicos

Os modelos multidimensionais básicos empregados na descrição de escoamentos bifásicos (gás-líquido) podem ser divididos em duas classes:

.Euler-Euler

.Euler-Lagrange

3.2 Metodologia Euler-Euler

A fase dispersa (gás) é tratada como pseudocontínua, sendo que cada elemento finito de volume em que o sistema foi dividido contém uma respectiva fração da fase contínua e da fase dispersa.

As equações de balanço das fases gás e líquido são resolvidas simultaneamente numa mesma malha. Tal metodologia demanda uma grande memória no computador, que pode aumentar consideravelmente o tempo de resposta, e o esforço computacional depende do número de elementos de volume considerado. A dificuldade em resolver equações de balanços acopladas (gás e líquido) simultaneamente é contornada por uma eficiente técnica de solução iterativa (PATANKAR, 1980).

As equações são derivadas a partir da conservação da massa e do momentum, aplicadas a cada elemento de volume da formulação Euler-Euler, consistindo nas equações da Continuidade e de Navier-Stokes para fase gás (índice g) e líquida (índice l), onde as seguintes hipóteses são assumidas (SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1994):

- Escoamento isotérmico;
- Densidade da fase líquida, ρ_l , é constante;
- Densidade da fase gás, ρ_g , numa pressão local é que descrita pela Lei do Gás Ideal;
- Não há turbulência;

- Todas as bolhas são geradas com massa constante no distribuidor e permanecem com a mesma dimensão ao longo do comprimento do reator;
- A coalescência e a redispersão das bolhas são negligenciadas;
- O acoplamento entre as duas fases será descrito pelo termo \vec{F}_w que retrata as forças de interação.

3.2.1 Equação da Continuidade

Se a troca de massa entre as fases (gás e líquido) é negligenciada a equação da continuidade pode ser formulada independentemente para ambas as fases sem termo de troca:

$$\frac{\partial(\varepsilon_k \cdot \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_k \cdot \rho_k \cdot \vec{u}_k) = 0 \quad ; \quad \text{onde } k = l, g \quad (3.1)$$

Sendo:

ε_k : *hold-up* da fase k, adimensional

ρ_k : densidade da fase k, Kg.m⁻³.

∇ : operador vetorial e diferencial.

\vec{u}_k : vetor velocidade da fase k, m.s⁻¹.

t : tempo ,s

3.2.2 Balanço de Momentum

$$\frac{\partial(\varepsilon_k \cdot \rho_k \cdot \vec{u}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_k \cdot \rho_k \cdot \vec{u}_k \cdot \vec{u}_k) = \varepsilon_k \cdot \nabla \vec{\tau}_k - \varepsilon_k \cdot \rho_k \cdot \vec{g} \pm \vec{F}_w \quad ; \quad \text{onde } k = l, g \quad (3.2)$$

Sendo:

ε_k : *hold-up* da fase k, adimensional.

ρ_k : densidade da fase k, Kg.m⁻³.

\vec{u}_k : vetor velocidade da fase k, m.s⁻¹.

t : tempo ,s.

∇ : operador vetorial e diferencial.

$\bar{\mathbf{g}}$: aceleração da gravidade, m.s^{-2} .

$\bar{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{k}}$: tensor tensão da fase k , N.m^{-3} .

$\bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{w}}$: forças que atuam entre fases, N.m^{-3} .

onde o sinal do termo das forças $\bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{w}}$ é positivo para uma das fases e negativo para a outra. Como o escoamento é laminar:

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{k}} = \mu_{\mathbf{k}} \cdot (\nabla \bar{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}} + \nabla \bar{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}}^t) \quad (3.3)$$

Sendo:

$\mu_{\mathbf{k}}$: viscosidade da fase k , $\text{Kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$.

A diferença entre as massas específicas ρ_l e ρ_g causa efeitos de empuxo que originam o movimento ascendente das bolhas na fase líquida.

3.2.3 Termo das forças entre as fases

O termo $\bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{w}}$ retrata as forças de contato entre as fases gás-líquido. Tal termo é geralmente descrito por 3 diferentes contribuições:

$$\bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{w}} = \bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{s}} + \bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{a}} + \bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{m}} \quad (3.4)$$

Onde: $\bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{s}}$ é a *Friction Force*, $\bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{a}}$ é a *Added Mass Forces* e $\bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{m}}$ é a *Lift Force (Magnus Force)*.

3.2.3.1 Friction Force

É a contribuição dominante no valor de \vec{F}_w , sendo geralmente descrito por:

$$\vec{F}_s = -\varepsilon_g \cdot C_w \cdot (\vec{u}_g - \vec{u}_l) \quad (3.5)$$

Sendo:

ε_g : *gas hold-up*, adimensional.

C_w : coeficiente de fricção, $\text{Kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

\vec{u}_g : vetor velocidade da fase gás, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

\vec{u}_l : vetor velocidade da fase líquida, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

O termo C_w apresenta um grande número de correlações na literatura, dependendo se há uma bolha ou um grupo de bolhas em movimento num líquido em repouso ou em movimento (SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1994).

3.2.3.2 Added Mass Forces

Tal termo é resultado das forças de interação entre o líquido e as bolhas num escoamento uniforme sem condições de aceleração. No entanto, se as bolhas apresentam aceleração em relação ao líquido, o líquido nas vizinhanças da bolhas apresentará uma aceleração, ocasionando uma força adicional :

$$\vec{F}_a = -\varepsilon_g \cdot C_a \cdot \rho_l \cdot \frac{D \cdot (\vec{u}_g - \vec{u}_l)}{Dt} \quad (3.6)$$

Sendo:

ε_g : *gas hold-up*, adimensional.

C_a : constante da *Added Mass Force*, adimensional.

ρ_l : densidade da fase líquida, $\text{Kg} \cdot \text{m}^{-3}$.

\vec{u}_g : vetor velocidade do fase gás, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

\vec{u}_l : vetor velocidade da fase líquida, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

t : tempo, s.

onde o coeficiente C_a corresponde a fração que é acelerado devido o movimento das bolhas.(SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1994).

3.2.3.3 Lift Forces (Magnus Force)

Esta força é produzida a partir do movimento de uma partícula com superfície rígida num escoamento não-uniforme. O escoamento do líquido pode produzir a rotação da partícula o que causará uma força interação adicional. A *Lift Force* frequentemente é conhecida como *Magnus Force* e pode ser aproximada para o caso de um escoamento potencial (SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1994):

$$\vec{F}_m = -\varepsilon_g \cdot C_m \cdot \rho_l \cdot (\vec{u}_g - \vec{u}_l) \times (\nabla \times \vec{u}_l) \quad (3.7)$$

Sendo:

ε_g : *gas hold-up*, adimensional.

C_m : constante da *Magnus Force*, adimensional.

ρ_l : densidade da fase líquida , Kg.m^{-3} .

\vec{u}_g : vetor velocidade da fase gás, m.s^{-1} .

\vec{u}_l : vetor velocidade da fase líquida, m.s^{-1} .

∇ : operador vetorial e diferencial.

3.3 Metodologia Euler-Lagrange

A fase gás (bolhas) é tratada como dispersa e a trajetória de todas as bolhas, individualmente, que estão em movimento na fase contínua é obtido resolvendo a equação do movimento (2º Lei de Newton) para cada bolha. A vantagem da formulação Euler-Lagrange é consequência da modelagem, individual, de cada bolha ao longo da coluna de líquido. Tal descrição permite considerar os efeitos das interações bolha-bolha e bolha-líquido. Um modelo de transferência de massa com, ou sem reação química, coalescência e redispersão, numa primeira análise, podem ser adicionados diretamente. Uma outra vantagem, é o fato que nenhuma difusão numérica é introduzida na fase dispersa, desde que

o trajeto de cada bolha pode ser calculado com precisão num dado elemento de volume (EIGENBERGER, 1994).

3.3.1 Equações do modelo

A fase contínua (líquido) é descrita pelas equações de Navier-Stokes considerando as hipóteses necessárias às suas aplicações. A grande diferença aparece na fase gás onde as bolhas (fase dispersa) são descritas por um modelo discreto, porque o comportamento individual de cada bolha é acompanhado utilizando a equação de Newton para descrever o movimento de partículas empregando expressões apropriadas para as forças relevantes que atuam na bolha (DELNOIJ *et al.*, 1999). As referidas expressões serão mostradas nas seções a seguir:

3.3.2 Descrição do movimento da bolha

A nova posição de cada bolha é calculada a partir da velocidade e posição no tempo atual. A velocidade é calculada utilizando a seguinte fórmula:

$$\bar{v}^{n+1} = \bar{v}^n + \left(\frac{d\bar{v}}{dt} \right)^n \cdot \Delta t \quad (3.8)$$

onde:

\bar{v} : velocidade da bolha, $m.s^{-1}$.

Δt : passo de integração, s.

A aceleração da bolha é obtida pelo balanço de forças:

$$m_b \cdot \frac{d\bar{v}}{dt} = \bar{F}_{total} \quad (3.9)$$

onde:

m_b : massa da bolha, Kg.

\bar{F}_{total} : somatório das forças externas relevantes que atuam na bolha, N.

Tabela 3.1: Forças que atuam em uma bolha não-deformável e esférica ascendendo em regime transiente num escoamento não-uniforme de líquido

Força	Expressão
<i>Gravity and Far-Field Fressure</i>	$\vec{\mathbf{F}}_{\mathbf{G}} + \vec{\mathbf{F}}_{\mathbf{P}} = \rho_{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{b}} \cdot \vec{\mathbf{g}} - \mathbf{V}_{\mathbf{b}} \cdot \nabla \mathbf{P}$ (3.10)
<i>Drag Force</i>	$\vec{\mathbf{F}}_{\mathbf{D}} = -\frac{1}{2} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{D}} \cdot \rho_{\mathbf{l}} \cdot \pi \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{b}}^2 \cdot \vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}} \cdot (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}})$ (3.11)
<i>Lift Force</i>	$\vec{\mathbf{F}}_{\mathbf{L}} = -\mathbf{C}_{\mathbf{L}} \cdot \rho_{\mathbf{l}} \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{b}} \cdot (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) \times \Omega$ (3.12)
	$\Omega = \nabla \times \vec{\mathbf{u}}$ (3.13)
	$C_{\mathbf{L}}=0,53$
<i>Virtual Mass Force</i>	$\vec{\mathbf{F}}_{\mathbf{VM}} = -\left(\frac{\mathbf{D}\vec{\mathbf{I}}}{\mathbf{D}t}\right) + \vec{\mathbf{I}} \cdot \nabla \vec{\mathbf{u}}$ (3.14)
	$\vec{\mathbf{I}} = \mathbf{C}'_{\mathbf{VM}} \cdot \rho_{\mathbf{l}} \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{b}} \cdot (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}})$ (3.15)
	$\mathbf{C}'_{\mathbf{VM}} = \mathbf{C}_{\mathbf{VM}} \cdot (\mathbf{1} + 2,78 \cdot (\mathbf{1} - \epsilon_1))$ (3.16)
	$C_{\mathbf{VM}}=0,5$

(Fonte: DELNOIJ *et al.*, 1999)

Onde:

 $\vec{\mathbf{F}}_{\mathbf{G}}$: força que atua na bolha devido a gravidade, N. $\vec{\mathbf{F}}_{\mathbf{P}}$: força que atua na bolha devido o gradiente de pressão, N. $\vec{\mathbf{F}}_{\mathbf{L}}$: *Lift Force*, N. $\vec{\mathbf{F}}_{\mathbf{VM}}$: *Virtual Mass Force*, N. $\rho_{\mathbf{g}}$: densidade da fase gás, $\text{Kg} \cdot \text{m}^{-3}$. $\rho_{\mathbf{l}}$: densidade da fase líquida, $\text{Kg} \cdot \text{m}^{-3}$. $\mathbf{R}_{\mathbf{b}}$: Raio da bolha, m. $\mathbf{V}_{\mathbf{b}}$: volume de uma bolha, m^3 .

$\bar{\mathbf{g}}$: aceleração da gravidade, m.s^{-2}

∇P : gradiente de pressão, N.m^{-3}

Ω : vorticidade na fase líquida, s^{-1}

$\bar{\mathbf{u}}$: velocidade da fase líquida, m.s^{-1} .

$\bar{\mathbf{v}}$: velocidade da bolha, m.s^{-1} .

C_L : coeficiente da *Lift Force*, adimensional.

C_D : coeficiente da *Drag Force*, adimensional.

C_{VM} : coeficiente da *Virtual Mass Force*, adimensional.

$\bar{\mathbf{I}}$: coeficiente da *Virtual Mass Force*, adimensional.

ε_1 : fração do volume da célula computacional ocupada por líquido.

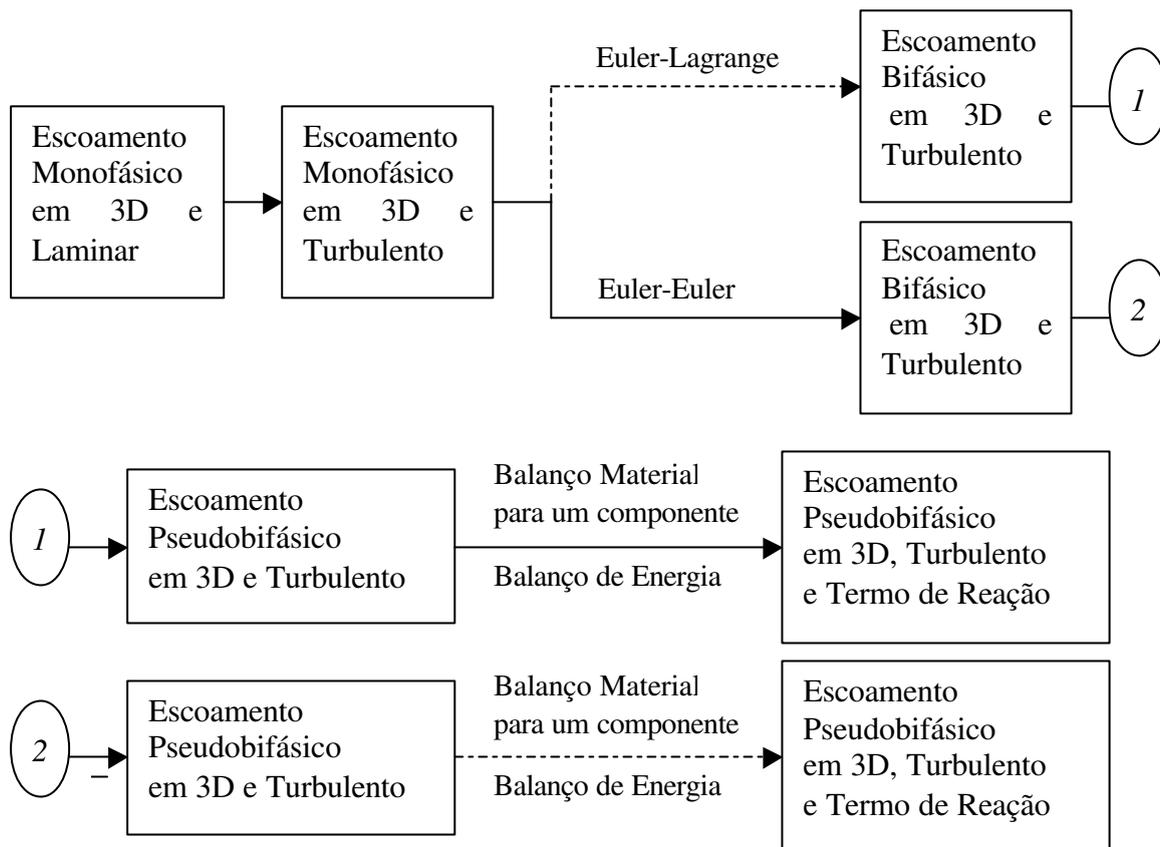
A acoplagem entre as duas partes que constituem o modelo na abordagem Euler-Lagrange é feita através da fração de líquido no volume finito e através de um termo na equação do Balanço de Momentum aplicado à fase líquida para quantificar a transferência de momentum das bolhas para o líquido (DELNOIJ *et al.*, 1999).

A literatura sugere (SOKOLINCHIN e EIGENBERGER, 1997) que a metodologia Euler-Lagrange torna-se menos efetiva se os efeitos da dispersão são modelados por uma equação contínua com difusão e o método pode tornar-se lento quando um grande número de bolhas é considerado. A abordagem Euler-Euler pode ser utilizada em conjunto com um modelo simplificado do reator que possua termos convectivos e de mistura, possibilitando a representações da transferência de massa e reação química, bem como as interações bolha-bolha com um suficiente grau de precisão (EIGENBERGER *et al.*, 1999).

Neste trabalho optou-se pela Metodologia Euler-Euler em função da escala do sistema em estudo (escala de planta-piloto) e do interesse de aplicar às ferramentas associadas à *CFD* em problemas de grande escala, próprios de reatores industriais. Pois na referida abordagem, a memória requerida é proporcional ao número de elementos finitos de volume nos quais o domínio de solução foi dividido e não ao número de bolhas a terem suas trajetórias determinadas ao longo da fase líquida, que às vezes pode ser dezenas de milhares de bolhas, como ocorre na Metodologia Euler-Lagrange, tornando-se impraticável para a capacidade de processamento das máquinas atuais.

3.4 Comentários gerais acerca da modelagem, dos resultados (possíveis e “desejados”) e dos métodos numéricos sugeridos

A partir da análise das metodologias e dos modelos empregados na elaboração da modelagem matemática visando a descrição da fluidodinâmica dos *Bubble Column Reactors* e dos Reatores *Air-Lift*, empregando a *CFD*, pode-se vislumbrar os níveis de modelagem a serem desenvolvidos, bem como os “resultados desejados”, conforme mostrado na figura 3.1:



----- : a capacidade de processamento das máquinas atuais, constitui o fator proibitivo.

Figura 3.1: Fluxograma dos níveis de modelagem passíveis de serem empregados na descrição da fluidodinâmica dos *Bubble Column Reactors* e dos Reatores *Air-Lift*, bem como os “resultados desejados”.

O desenvolvimento da Fluidodinâmica Computacional está atrelado ao desenvolvimento da capacidade de processamento das máquinas. Por isso, todos os desenvolvedores de códigos comerciais associados a *CFD*, já possuem ou estão em processo de desenvolvimento das versões paralelizadas de seus *softwares* que sejam

aplicáveis em *clusters* de estações de trabalho como memória compartilhada ou não. Muitas das grandes organizações industriais já possuem tais *clusters* e o futuro parece indicar um grande aumento no uso da *CFD* paralela na resolução de problemas industriais (HARRIS *et al.*, 1996).

Percebe-se que as equações presentes na metodologia Euler-Euler, e parte das presentes na metodologia Euler-Lagrange, caracterizam-se como Equações Diferenciais Parciais *PEDs*, sendo que os 2 principais métodos numéricos aplicáveis a tais equações são: Método dos Elementos Finitos e o Método dos Volumes Finitos.

Vale ressaltar que a literatura consultada neste trabalho, emprega preponderantemente o Método dos Volumes Finitos na resolução numérica de sistemas de equações parciais diferenciais, ou *System of Partial Differential Equations-PDEs* como é largamente conhecido na área, presentes nos modelos associados à hidrodinâmica dos *Bubble Column Reactors* e dos Reatores *Air-Lift*. Tal fato pode ser justificado pela peculiaridades do Método dos Volumes Finitos em fornecer resultados providos de realismo físico, caso a convergência seja atingida, até mesmo nas situações onde são empregadas malhas numéricas “grosseiras” (pouco refinadas). Tal característica é retratada na figura 3.2:

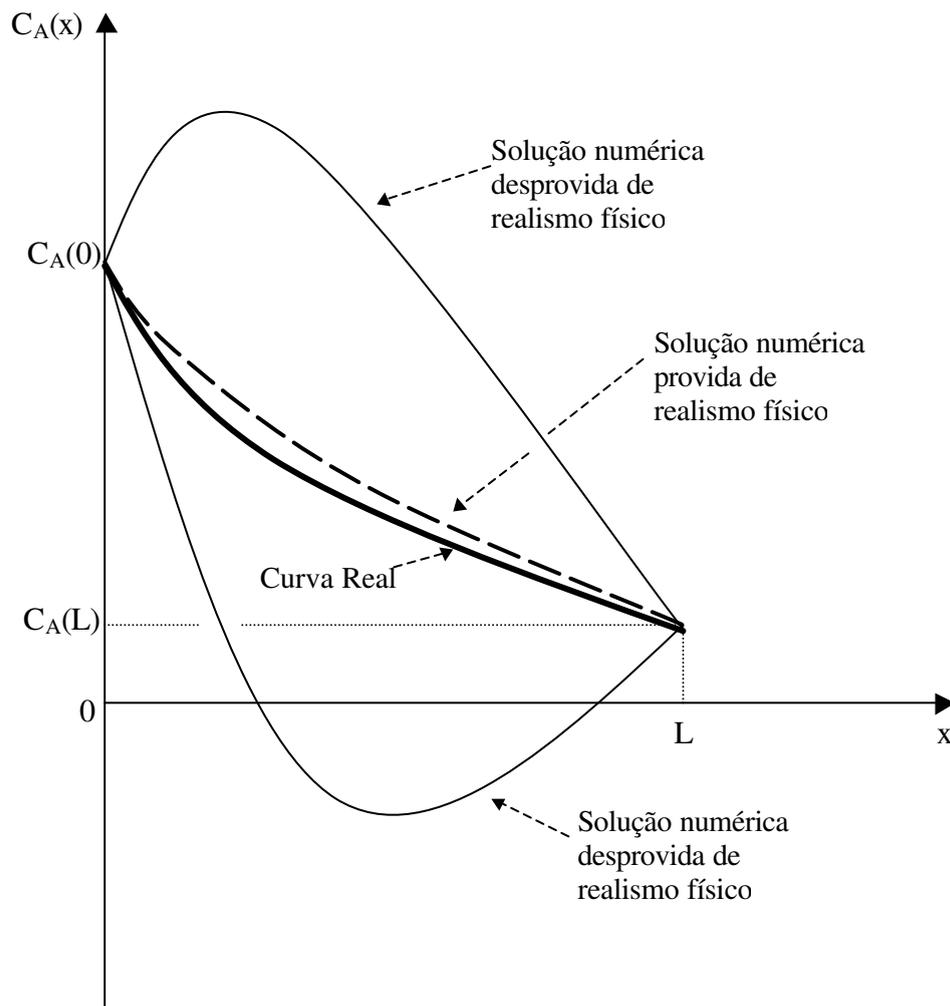


Figura 3.2: Soluções numéricas dotadas e desprovidas de realismo físico. (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 34)

Supondo um problema unidimensional que consista no balanço de um reagente “A” num reator tubular modelado empregando o modelo *Plug-Flow Reactor-PFR*, sabe-se que a concentração do mesmo diminuirá ao longo do reator; de modo análogo à curva real (solução exata) mostrada na figura 3.2, que retrata três soluções numéricas que satisfazem as condições de contorno: $C_A(0)=C_{A0}$ e $C_A(L)=C_{Af}$, embora nem todas apresentem realismo físico, após a convergência. O Método dos Volumes Finitos, quando converge, fornece resultados dotados de realismo físico, o que não quer dizer que os mesmos sejam acurados: a solução numérica se aproxima da solução exata dentro de uma exatidão desejada, pois os resultados das simulações fornecem o comportamento do modelo, o qual depende das simplificações e considerações feitas visando retratar os fenômenos mais relevantes no

sistema real e tornar as equação mais manuseáveis, bem como da acurácia dos parâmetros envolvidos.

3.5 Conclusões

Neste Capítulo foram apresentadas e discutidas de forma não exaustiva, mas considerando os pontos mais relevantes nas principais abordagens consideradas na modelagem es escoamentos multifásicos. A figura 3.1 sumariza os possíveis níveis de detalhamento que a modelagem pode atingir. Associada a descrição matemática conveniente está também a escolha do método numérico adequado à solução, assunto que é tratado no próximo capítulo.

4 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

“Dois são os adjetivos que, segundo Poincaré, caracterizam o raciocínio matemático: rigoroso e fecundo.” (Louis Johannot)

4.1 Introdução

O Método dos Volumes Finitos é uma técnica numérica capaz de resolver equações diferenciais parciais, ou *Partial Differential Equations-PDEs* como é largamente conhecido na área, as quais são comuns no campo da Engenharia Química, desde que sejam oriundas do balanço infinitesimal de uma propriedade ϕ (por exemplo: massa, quantidade de movimento, energia, etc); representando, portanto, o Princípio Físico da Conservação da referida propriedade.

Equação Geral de Transporte (Conservação da Propriedade ϕ):

$$\frac{\partial(\rho.\phi)}{\partial t} + \nabla.\left(\rho.\vec{v}.\phi\right) = \nabla.\left(\Gamma_{\phi}.\text{grad}\phi\right) + S_{\phi} \quad (4.1)$$

Termo referente a taxa de acúmulo de ϕ num elemento infinitesimal	Termo referente a taxa líquida de ϕ deixando o volume infinitesimal por convecção	Termo referente a taxa de aumento de ϕ devido à difusão	Termo referente a taxa de ϕ devido às fontes (ou sorvedouros)
--	--	--	--

A forma da Equação Geral de Transporte, mostrada acima é denominada forma conservativa ou forma divergente e caracteriza-se pela presença dos termos relativos aos fluxos convectivos da variável ϕ ($\rho.u.\phi$, $\rho.v.\phi$ e $\rho.w.\phi$) dentro das derivadas em relação às coordenadas espaciais, quaisquer outras formas são ditas não-conservativas. A forma conservativa é obtida diretamente através da aplicação do Princípio da Conservação na variável dependente de interesse, num volume infinitesimal, sendo a mesma utilizada na derivação do Método dos Volumes Finitos.

- 1) Como as demais técnicas numéricas empregadas na resolução de *PDEs*, o Método dos Volumes Finitos transfere informações das fronteiras, condições de contorno, que são especificadas para o interior do domínio de solução, obtendo a distribuição espacial e temporal ($\phi = \phi(x,y,z,t)$) da variável dependente em pontos discretos. Numa visão simplificada o mesmo consiste de 4 etapas:

- 1) Divisão do domínio de solução em volumes de controle finitos;
- 2) Integração da equação diferencial parcial nos volumes de controle finitos, nos quais foi dividido o domínio de solução;
- 3) Discretização de cada termo da *PDE* de modo a convertê-la num conjunto de equações algébricas;
- 4) Solução do sistema de equações algébricas resultante, empregando métodos iterativos.

Visando um melhor entendimento do Método e da linguagem associada ao mesmo, far-se-á uma introdução empregando o Sistema de Coordenadas Cartesianas e a abordagem em 2D, tendo em vista a facilidade da obtenção por analogia da abordagem em 3D.

4.2 Geração da Malha Numérica

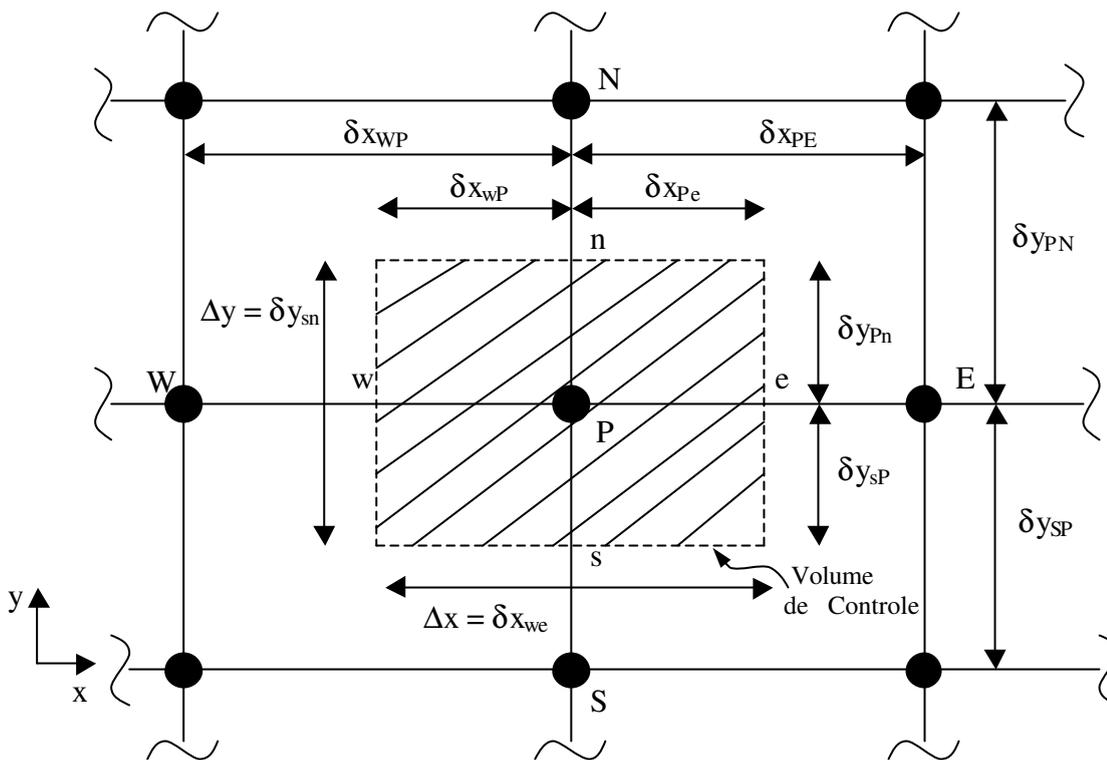


Figura 4.1: Representação de um Volume de Controle Finito genérico, numa configuração bidimensional (2D).

Onde:

δx_{WP} : distância entre o ponto nodal W e o ponto nodal P ;

δx_{PE} : distância entre o ponto nodal P e o ponto nodal E ;

$\delta_{x_{WP}}$: distância entre a interface “w” e o ponto nodal P;

$\delta_{x_{Pe}}$: distância entre o ponto nodal P a interface “e”;

$\delta_{y_{SP}}$: distância entre o ponto nodal S e pontos nodal P;

$\delta_{y_{PN}}$: distância entre o ponto nodal P e o ponto nodal N;

$\delta_{y_{sP}}$: distância entre a interface “s” o ponto nodal P;

$\delta_{y_{Pn}}$: distância entre o ponto nodal P e a interface “n”.

$\Delta x = \delta_{x_{we}}$: largura do volume de controle finito;

$\Delta y = \delta_{y_{sn}}$: altura do volume de controle finito.

Quando $\delta_{x_{WP}} = \delta_{x_{Pe}}$ e $\delta_{y_{SP}} = \delta_{y_{PN}}$ a malha é dita uniforme. O emprego de malhas não-uniforme é freqüentemente desejável e recomendável. Tendo em vista que a acuracidade da solução aumenta com o refinamento da malha, supondo que a convergência seja obtida, implicando num aumento do esforço computacional até alcançar o limite da capacidade de processamento; o emprego de malhas não-uniformes é capaz de utilizar efetivamente a capacidade de processamento disponível. As melhores malhas devem ser mais refinadas nas regiões onde há grande variações da variável dependente (ϕ) e das propriedades físicas (ρ , μ , c_p e etc), e “grosseiras” nas regiões que apresentam variações relativamente pequenas. Muitos programas refinam automaticamente a malha nas áreas onde ocorrem variações acentuadas nas variáveis de interesse (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

Desde que a distribuição $\phi(x,y,z)$ não é conhecida no domínio de cálculo, espera-se que o engenheiro tenha conhecimento acerca do sistema a ser modelado de modo a prever qualitativamente um comportamento da variável dependente, o qual pode ser empregado no refinamento da malha. Sugere-se que primeiramente obtenha-se soluções empregando malhas “grosseiras” (pouco refinadas) de modo a obter *insights* sobre as variações de ϕ ; a partir dos quais, a malha não-uniforme possa ser construída. Isto é uma das razões porque os autores insistem que o método numérico deva fornecer soluções dotadas de realismo físico até mesmo nos casos empregando malhas grosseiras. As análises das soluções obtidas a partir de malhas grosseiras não são úteis se o método só fornece

soluções que apresentam realismo físico para malhas suficientemente refinadas (PATANKAR, 1980).

O número de pontos da malha numérica necessários para fornecer uma solução acurada e a maneira que os mesmos se distribuem no domínio de cálculo são questões que dependem da natureza do problema a ser resolvido. Estudos usando uma malha com poucos pontos nodais consistem num conveniente modo de compreender-se a natureza da solução. Tal procedimento é comumente empregado nos experimentos em laboratório, pois experimentos preliminares são conduzidos e as informações resultantes são usadas para decidir o número e a localização dos pontos de medição a serem instalados no experimento final (PATANKAR, 1980).

4.3 Problema em 2D, regime estacionário, puramente difusivo e com termo fonte: presença de termos difusivos e termos fonte na equação diferencial.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_{\phi} = 0 \quad (4.2)$$

Como citado anteriormente , ao contrário de outras técnicas numéricas o Método dos Volumes Finitos discretiza a Equação Geral de Transporte na forma integrada, o volume de controle finito mostrado na figura 4.1 fornecerá os limites de integração da equação (4.2):

$$\int_{v.c.} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV + \int_{v.c.} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dV + \int_{v.c.} S_{\phi} \cdot dV = 0 \quad (4.3)$$

Onde $dV = dx \cdot dy \cdot dz$, em Coordenadas Cartesianas, para problemas em 2D (x e y) :

$$dV = dx \cdot dy \cdot 1,0 = dx \cdot dy$$

$$\int_{v.c.} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx \cdot dy \cdot dz + \int_{v.c.} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx \cdot dy \cdot dz + \int_{v.c.} S_{\phi} \cdot dV = 0 \quad (4.4)$$

$$\int_{v.c.} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dy \cdot dz + \int_{v.c.} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx \cdot dz + \int_{v.c.} S_{\phi} \cdot dV = 0 \quad (4.5)$$

Onde : $dy \cdot dz = dA_{nx}$: área infinitesimal e normal à direção x.

$dx.dz = dA_{ny}$: área infinitesimal e normal à direção y.

Daí:

$$\int_w^e \partial \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) A_{nx} + \int_s^n \partial \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) A_{ny} + \int_{V.C.} S_\phi \cdot dV = 0 \quad (4.6)$$

Cada termo da Equação Geral de Transporte é discretizado de forma peculiar.

Considera-se o valor médio do termo fonte no V.C.:

$$\bar{S}_\phi = \frac{1}{\Delta V} \int_{V.C.} S_\phi \cdot dV \Rightarrow \int_{V.C.} S_\phi \cdot dV = \bar{S}_\phi \cdot \Delta V \quad (4.7)$$

$$\int_w^e \partial \left(\Gamma_\phi \cdot A_{nx} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \int_s^n \partial \left(\Gamma_\phi \cdot A_{ny} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \bar{S}_\phi \cdot \Delta V = 0 \quad (4.8)$$

$$\left\{ \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right\} - \left\{ \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right\} + \bar{S}_\phi \cdot \Delta V = 0 \quad (4.9)$$

Sabendo-se que a variável ϕ será avaliada nos pontos nodais, expressa-se os termos da equação (4.9) em função dos referidos valores. Emprega-se uma aproximação linear na variação de ϕ entre os pontos nodais, perfil linear por partes, tendo em vista a relativa proximidade dos mesmos, de modo a avaliar as derivadas parciais de 1ª ordem nas interfaces:

$$\left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \Gamma_e \cdot A_e \cdot \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad (4.10a)$$

$$\left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = \Gamma_w \cdot A_w \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) \quad (4.10b)$$

$$\left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n = \Gamma_n \cdot A_n \cdot \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{\delta y_{PN}} \right) \quad (4.10c)$$

$$\left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s = \Gamma_s \cdot A_s \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_S}{\delta y_{SP}} \right) \quad (4.10d)$$

Como em muitas situações o valor médio do termo fonte pode ser função da variável ϕ , aplica-se uma relação linear, empregando o perfil em degrau, assegurando a linearidade da equação discretizada:

$$\bar{S}_\phi \Delta V = (S_c + S_p \cdot \phi_p) \cdot \Delta V = S_c \cdot \Delta V + S_p \cdot \Delta V \cdot \phi_p \quad (4.11)$$

Aplicar o perfil em degrau significa assumir o valor da variável dependente, avaliado no ponto nodal, como sendo uniforme no Volume de Controle em questão:

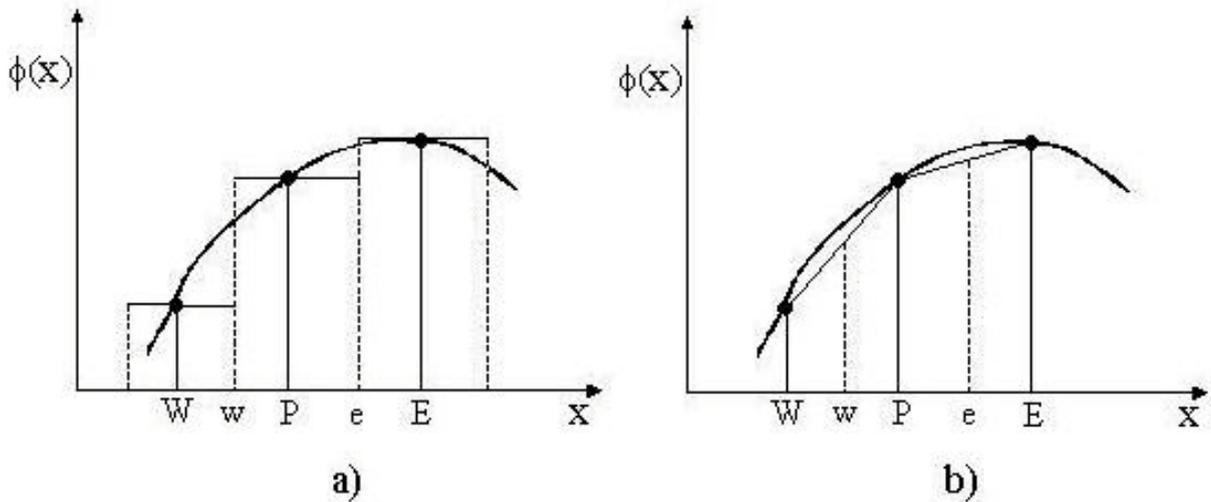


Figura 4.2: a) Perfil em degrau e b) Perfil linear por partes. (Fonte: adaptada a partir de ALTEMANI, 2001)

O emprego dos perfis: perfil linear por partes e perfil em degrau, assegura a obtenção de expressões algébricas lineares para os termos difusivos e também para o termo fonte da equação (4.2) na forma integrada. Tais perfis apresentam a vantagem de serem simples, no entanto, a aproximação da curva real que representa a variável dependente ϕ empregando o perfil em degraus não permite a obtenção da derivada nas interfaces dos Volumes de Controle, devido as descontinuidades. Por isso emprega-se o perfil linear por partes, o qual permite que as derivadas, presentes nos termos difusivos, sejam avaliadas nas interfaces. Percebe-se que variáveis distintas ou inclusive uma mesma variável presente em termos distintos de uma equação diferencial pode ser aproximada por perfis distintos para cada termo (ALTEMANI, 2001). Logo:

$$\Gamma_e \cdot A_e \cdot \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{EP}} \right) - \Gamma_w \cdot A_w \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{PW}} \right) + \Gamma_n \cdot A_n \cdot \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{\delta y_{NP}} \right) - \Gamma_s \cdot A_s \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_S}{\delta y_{PS}} \right) + (S_c + S_p \cdot \phi_p) \cdot \Delta V = 0 \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} \phi_E - \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} \phi_P - \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} \phi_P + \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} \phi_W + \frac{\Gamma_n \cdot A_n}{\delta y_{PN}} \phi_N - \frac{\Gamma_n \cdot A_n}{\delta y_{PN}} \phi_P - \frac{\Gamma_s \cdot A_s}{\delta y_{SP}} \phi_P + \\ & + \frac{\Gamma_s \cdot A_s}{\delta y_{SP}} \phi_S + S_c \cdot \Delta V + S_p \cdot \Delta V \cdot \phi_P = 0 \end{aligned} \quad (4.13)$$

Rearranjando a equação (4.13):

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} + \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} + \frac{\Gamma_s \cdot A_s}{\delta y_{SP}} + \frac{\Gamma_n \cdot A_n}{\delta y_{PN}} - S_p \cdot \Delta V \right) \cdot \phi_P = \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} \phi_W + \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} \phi_E + \\ & + \frac{\Gamma_s \cdot A_s}{\delta y_{SP}} \phi_S + \frac{\Gamma_n \cdot A_n}{\delta y_{PN}} \phi_N + S_c \cdot \Delta V \end{aligned} \quad (4.14)$$

Fazendo:

$$a_W = \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} : \text{coeficiente da variável } \phi \text{ associado ao ponto nodal W.} \quad (4.15a)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} : \text{coeficiente da variável } \phi \text{ associado ao ponto nodal E.} \quad (4.15b)$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s \cdot A_s}{\delta y_{SP}} : \text{coeficiente da variável } \phi \text{ associado ao ponto nodal S.} \quad (4.15c)$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n \cdot A_n}{\delta y_{PN}} : \text{coeficiente da variável } \phi \text{ associado ao ponto nodal N.} \quad (4.15d)$$

$$a_P = (a_W + a_E + a_S + a_N - S_p \cdot \Delta V) : \text{coeficiente da variável } \phi \text{ associado ao ponto nodal P.} \quad (4.15e)$$

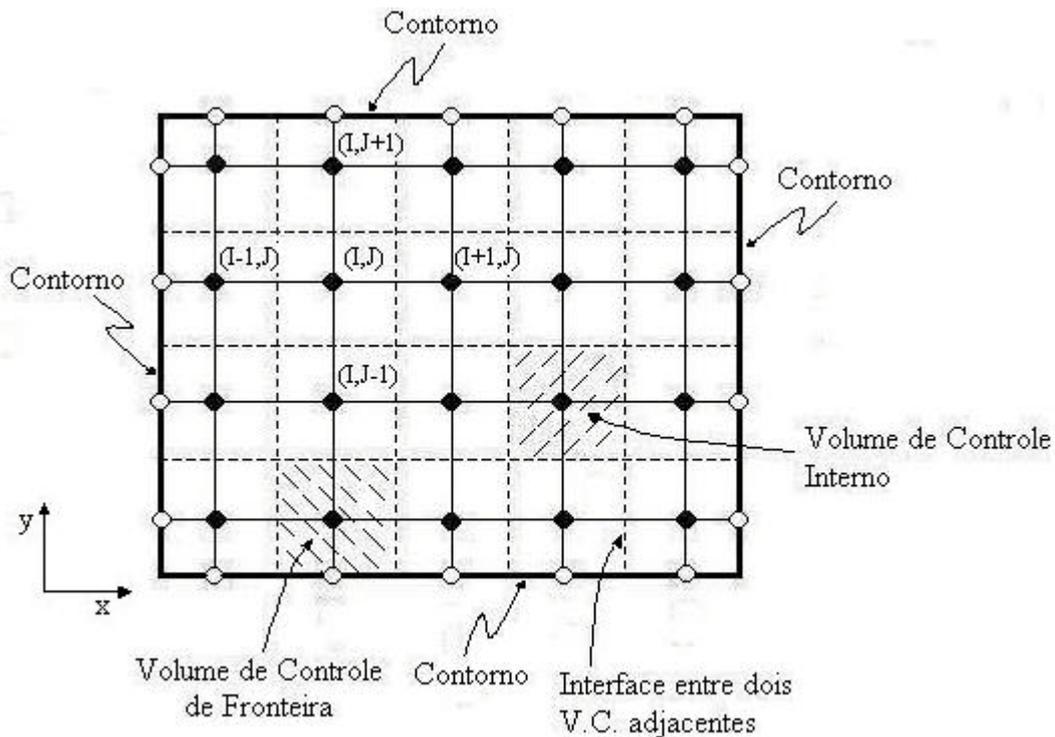
Percebe-se claramente a dependência dos coeficientes das equações lineares, obtidas após a discretização, com o sistema de coordenadas considerado, embutida nas áreas normais ao transporte da variável ϕ em cada direção e no elemento finito de volume (ΔV). Num tratamento mais genérico a variável ϕ seria dependente de três coordenadas espaciais e do tempo ($\phi = \phi(x_1, x_2, x_3, t)$). A escolha conveniente de um sistema de coordenadas pode reduzir o número de variáveis independentes de um problema. Por exemplo: o escoamento, que apresenta simetria axial, num duto de seção circular e em regime estacionário, será 3D para o sistema de Coordenadas Cartesianas; no entanto, será 2D para o sistema de Coordenadas Cilíndricas (r, θ, z), pois devido a simetria na geometria,

e no escoamento, não há dependência da variável ϕ com a variável independente θ :
 $\phi = \phi(r,z)$ (PATANKAR, 1980).

A equação diferencial parcial discretizada empregando o Método dos Volumes Finitos apresenta a seguinte forma padrão:

$$a_P \cdot \phi_P = a_W \cdot \phi_W + a_E \cdot \phi_E + a_S \cdot \phi_S + a_N \cdot \phi_N + b \quad (4.16)$$

Onde o termo b encerra informações acerca do termo fonte: $b = S_c \cdot \Delta V$ (4.17)



○ : pontos nodais de fronteira

● : pontos nodais internos

Figura 4.3: Malha numérica genérica para uma configuração bidimensional (2D).

A partir da malha numérica retratada na figura 4.3, aplica-se uma notação mais conveniente para a representação trabalhada nos algoritmos:

$I = 2 \dots (M-1)$ e $J = 2 \dots (N-1)$; sendo: $\left\{ \begin{array}{l} M : \text{número de pontos nodais na direção } x. \\ N : \text{número de pontos nodais na direção } y. \end{array} \right.$

$$a(I,J) \cdot \phi(I,J) = a(I-1,J) \cdot \phi(I-1,J) + a(I+1,J) \cdot \phi(I+1,J) + a(I,J-1) \cdot \phi(I,J-1) + a(I,J+1) \cdot \phi(I,J+1) + b(I,J) \quad (4.18)$$

Transformou-se uma equação diferencial parcial num conjunto de equações algébricas cuja solução são os valores da variável dependente ϕ calculados numericamente nos pontos nodais internos . Vale ressaltar que no momento da construção da malha numérica deve-se ter em mente as considerações que asseguram a linearidade .

4.4 Obtenção de Γ_ϕ na interface

O coeficiente do termo difusivo avaliado na interface $(\Gamma_\phi)_e = \Gamma_e$ pode ser uma função de ϕ , logo devemos expressar Γ_e como função dos valores nos pontos nodais da malha. PATANKAR (1980) emprega e justifica o seguinte tratamento:

$$\Gamma_e = \left(\frac{1-f_e}{\Gamma_P} + \frac{f_e}{\Gamma_E} \right)^{-1} \quad \therefore \quad f_e = \frac{\delta x_{eE}}{\delta x_{PE}} \quad (4.19)$$

$$\Gamma_n = \left(\frac{1-f_n}{\Gamma_P} + \frac{f_n}{\Gamma_N} \right)^{-1} \quad \therefore \quad f_n = \frac{\delta y_{nN}}{\delta y_{PN}} \quad (4.20)$$

O referido procedimento é oriundo das seguintes considerações:

1) Assume-se variação linear de Γ_ϕ entre os 2 pontos nodais separados pela interface na qual se deseja avaliar o coeficiente difusivo.

Onde:

$$f_e = f_e(\delta x_{PE}, \delta x_{eE})$$

$$f_n = f_n(\delta y_{PN}, \delta y_{nN})$$

2) Utiliza-se na variação linear um fator de interpolação:

δx_{PE} : distância entre o ponto nodal P e o ponto nodal E;

δx_{eE} : distância entre a interface “e” e o ponto nodal E;

δy_{PN} : distância entre o ponto nodal P e o ponto nodal N;

δy_{nP} : distância entre a interface “s” o ponto nodal P;

3) Obter Γ_e e Γ_n de modo que o fluxo de ϕ na interface satisfaça o balanço global

4.5 Realismo físico da solução de ϕ calculado nos pontos nodais da malha numérica

Para assegurar o realismo físico e a condição que a solução satisfaça o balanço global, aplica-se as 4 Regras Básicas citadas por PATANKAR (1980), que norteiam a dedução do método, principalmente no que tange a escolhas dos perfis visando a dedução das equações:

Regra 1: *Consistência nas faces dos volumes de controle*

O fluxo comum a dois Volumes de Controle adjacentes quaisquer (atravessando a face que separa os mesmos; o fluxo que deixa um V.C. deve ser igual ao fluxo entrando no V.C. subsequente) deve ser representado pela mesma expressão nas equações discretizadas para os referidos volumes de controle. Caso isto não ocorra o balanço global da grandeza considerada não será satisfeito. Para respeitar esta regra, deve-se sempre utilizar a Equação Geral do Transporte na forma conservativa.

Regra 2: *Todos os coeficientes que aparecem nas equações discretizadas (a_w , a_e , a_n ,... e a_p) devem apresentar o mesmo sinal.*

Percebe-se que o valor da variável dependente num ponto nodal da malha é influenciado pelos valores dos pontos nodais vizinhos, através de processos de difusão e convecção. Logo, para que haja realismo físico na solução, um aumento no valor de um ponto nodal da malha, assumindo que nenhum dos pontos nodais interiores a malha seja especificado, implicaria num aumento no valores dos pontos nodais vizinhos. Por convenção assegura-se que todos os coeficientes tenham o sinal positivo.

Regra 3: *O termo fonte deve ser linearizado de modo que o coeficiente angular (S_p : coeficiente angular associado a linearização da curva $S(\phi)$ no ponto nodal ϕ_p) seja negativo*

Esta regra pode ser visto, em parte, como uma consequência da Regra 2, a partir da análise da equação (4.15e), pois caso $S_p \leq 0$ assegura-se que a_p seja sempre positivo. Tal regra também assegura a estabilidade numérica da solução, conforme explanado em PATANKAR (1980).

Regra 4: *Soma dos coeficientes dos pontos nodais vizinhos.*

Quando a equação diferencial é constituída apenas de derivadas da variável dependente, não há termo de geração, a solução será uma família de curvas e a diferença entre ϕ e $(\phi + c)$ será apenas o valor da constante, embora ambas as soluções satisfaça a equação diferencial, tal propriedade deve ser refletida pela forma discretizada da equação diferencial que apresenta tal peculiaridade, para isto a_p deve ser igual a soma dos coeficientes vizinhos, apenas. Daí:

$$a_p \cdot \phi_p = \sum a_{viz} \cdot \phi_{viz} \quad (4.21) \quad \text{e} \quad a_p \cdot (\phi_p + c) = \sum a_{viz} \cdot (\phi_{viz} + c) \quad \therefore \quad c : \text{constante} \quad (4.22)$$

$$\text{Logo: } a_p = \sum a_{viz} \quad (4.23)$$

A equação (4.21) nos informa que o valor de ϕ no ponto nodal P será a média ponderada dos valores de ϕ nos pontos nodais vizinhos. Percebe-se que a Regra 4 é aplicável apenas em casos especiais.

4.6 Não-linearidade

Após efetuar-se a discretização da equação diferencial parcial obtém-se um conjunto de equações algébricas lineares as quais são resolvidas empregando métodos numéricos aplicáveis às mesmas (*TDMA: TriDiagonal-Matrix Algorithm, Gauss-Seidel* e etc). Em muitos problemas a não linearidade pode ser encontrada (por exemplo: Γ_ϕ e S_ϕ podem ser funções não lineares de ϕ), implicando na dependência dos coeficientes, da equação diferencial discretizada, com variável ϕ . Tal problema é contornado empregando processos iterativos, que geralmente consistem das seguintes etapas:

- 1) Estimativa inicial de $\phi = \phi^i = \phi^0$ nos pontos nodais da malha numérica;
- 2) A partir da estimativa inicial, calcula-se os valores dos coeficientes presentes na equação diferencial discretizada;
- 3) Resolve-se o sistema de equações “lineares” (linearizadas) de modo a obter um novo conjunto de valores de $\phi = \phi^{i+1}$;

4)O novo conjunto de valores é assumido como uma nova estimativa inicial $\phi^0 = \phi^{i+1}$ e retorna-se a etapa 2 do processo até que as iterações não produzam variações significantes da variável ϕ , implicando na convergência da solução.

A solução convergida das equações linearizadas, empregando o procedimento supracitado bem como um método numérico de resolução de sistemas de equações lineares, satisfará as equações não-lineares dentro de uma acurácia (medida de quanto a solução numérica se aproxima da solução exata).

4.7 Linearização do Termo Fonte

Quando o termo fonte (S_ϕ) for uma função não linear de ϕ , o mesmo deve ser linearizado de modo a especificar os valores de S_c e S_p , definidos na equação (4.11). No entanto, a linearização deve ser uma representação adequada da função $S = S(\phi)$, nas proximidades do ponto onde a mesma é aplicada, sem perder de vista a Regra Básica 3 que impõe $S_p \leq 0$.

PATANKAR (1980) lista e aplica vários artifícios matemáticos visando a linearização de $S(\phi)$ em termos de S_c e S_p . No entanto, a melhor opção consiste na linearização que associa S_p ao valor da inclinação da reta tangente a curva no ponto ϕ_p (caso a inclinação da reta tangente seja negativa, de modo a assegurar $S_p \leq 0$), sendo recomendada a linearização empregando a série de Taylor devido a mesma encerrar tal característica, conforme mostrado na figura 4.4.

$$S(\phi_p) \cong S(\phi_p^*) + \left(\frac{dS}{d\phi_p} \right)_{\phi_p^*} \cdot (\phi_p - \phi_p^*) \quad (4.24)$$

Onde: ϕ_P^* é o valor de ϕ_P na iteração anterior.

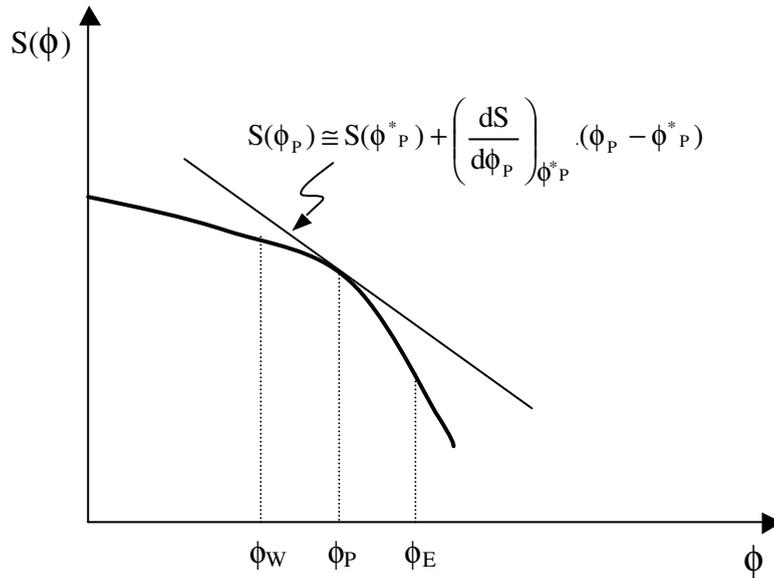


Figura 4.4: Linearização do termo fonte no ponto nodal P empregando a Série de Taylor truncada no 2ª termo.(Fonte: adaptada a partir de ALTEMANI, 2001)

Logo:

$$S_c = S^*(\phi_P^*) + \left(\frac{dS}{d\phi_P}\right)_{\phi_P^*} \cdot \phi_P^* \quad (4.25.a) \quad \text{e} \quad S_p = \left(\frac{dS}{d\phi_P}\right)_{\phi_P^*} < 0 \quad (4.25.b)$$

Em casos onde a função $S = S(\phi)$ seja decrescente, sendo recomendada a aplicação da Série de Taylor truncada no 2º termo visando obter a linearização do termo fonte, o emprego de outros procedimentos deve sempre buscar obter $S_p < \left(\frac{dS}{d\phi_P}\right)_{\phi_P^*}$, pois em tal situação a convergência torna-se mais lenta, porém aumenta-se a estabilidade numérica. Já os procedimentos de linearização onde $\left(\frac{dS}{d\phi_P}\right)_{\phi_P^*} < S_p < 0$ são desaconselháveis, tendo em vista que as mesmas podem causar a divergência.

Em casos onde $S = S(\phi)$ seja uma função crescente um dos artifícios recomendados é:

$$S_c + S_p \cdot \phi_p = S(\phi_p^*) \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} S_c = S(\phi_p^*) & (4.26.a) \\ S_p = 0 & (4.26.b) \end{cases}$$

Ressalta-se a importância da linearização do termo fonte, pois o mesmo influencia o realismo físico da solução (encerrando a observância da Regra Básica 3), bem como na estabilidade numérica (encerrada, também, na Regra Básica 3), pois se $S(\phi)$ for uma função crescente implica que uma aumento em ϕ_p aumentará o termo fonte, que por sua vez induzirá a aumento em ϕ_p na próxima iteração, podendo conduzir a divergência da solução devido ao aparecimento de instabilidade numérica, tais problemas podem ser combatidos simultaneamente pela aplicação da Regra Básica 3 ($S_p \leq 0$).

4.8 Tratamento das condições de contorno

As condições de contorno determinam cada solução particular das Equações Diferenciais Parciais, há três condições de contorno típicas:

- 1) O valor da variável dependente ϕ na fronteira é especificada;
- 2) O valor do fluxo associado a variável dependente ϕ é especificado;
- 3) Fronteira convectiva: h e ϕ_f são especificados.

Os três tipos de condições de contorno, acima citadas, recebem denominações distintas, sendo às vezes denominadas respectivamente de Primeira, Segunda e Terceira Espécies.

As condições de fronteira podem ser tratadas de maneiras distintas, desde que as equações discretizadas nos diferentes enfoques sejam as mesmas e os resultados também, considerando uma mesma malha numérica. Aplicar-se-á neste trabalho o enfoque que resulta num melhor tratamento do ponto de vista de programas computacionais, tendo em vista que o mesmo foi implementado em FORTRAN 77 num pacote computacional desenvolvido por PATANKAR, sendo o mesmo preponderantemente de cunho didático e de aplicações limitadas a casos específicos.

4.8.1 Fronteira de Primeira Espécie

Quando o valor de ϕ é definido numa fronteira do domínio de solução, ele deixa de ser uma incógnita na equação discretizada no volume de controle de fronteira correspondente. Visando não sobrecarregar a notação, considera-se o problema 1D mostrado na figura 4.5:

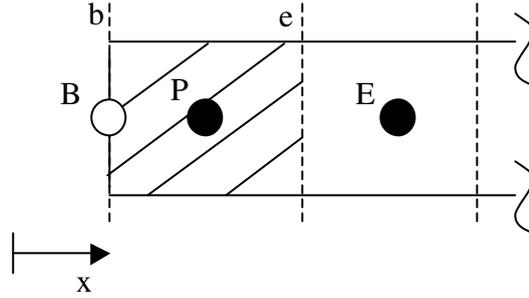


Figura 4.5: Representação de uma fronteira de Primeira Espécie para problemas em 1D. (Fonte: adaptada a partir de ALTEMANI, 2001)

Sabe-se que para o caso 1D: $\Delta y = 1,0$ e $\Delta z = 1,0 \Rightarrow \Delta V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z = \Delta x$, logo a equação (4.9) reduz-se a seguinte forma:

$$\left\{ \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_w \right\} + \bar{S}_\phi \cdot \Delta V = 0 \quad (4.27)$$

onde $w = b$ (*boundary*) para o volume de controle de fronteira, aplicando os procedimentos anteriormente empregados nas discretizações:

$$\left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_e = \Gamma_e \cdot A_e \cdot \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad (4.28a)$$

$$\left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_w = \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_b = \Gamma_b \cdot A_b \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_B}{\delta x_{BP}} \right) \quad (4.28b)$$

Substituindo as equações (4.28.a) e (4.28.b) na equação (4.27), obtém a seguinte forma discretizada :

$$a_P \cdot \phi_P = a_B \cdot \phi_B + a_E \cdot \phi_E + b \quad (4.29)$$

Onde:

$$a_B = \frac{\Gamma_b \cdot A_b}{\delta x_{BP}} \quad (4.30a)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.30b)$$

$$b = S_c \cdot \Delta V \quad (4.30c)$$

$$a_P = (a_B + a_E - S_p \cdot \Delta V) \quad (4.30d)$$

Analisando a equação (4.29) segundo à forma padrão, o caso mais geral:

$$a_P \cdot \phi_P = a_W \cdot \phi_W + a_E \cdot \phi_E + b \quad (4.31)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.32a)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.32b)$$

$$b = S_c \cdot \Delta V \quad (4.32c)$$

$$a_P = a_W + a_E - S_p \cdot \Delta V \quad (4.32d)$$

Como ϕ_B (valor da variável dependente na fronteira) é conhecido, a mesma deixa ser incógnita, logo não precisa ser calculada, faz-se $a_W = 0$. Como resultado o valor de ϕ_B será embutido no termo b e a_P como termos fonte adicionais (S_{cA} e S_{pA}) associados às condições de contorno; tal procedimento faz com que o ponto nodal no volume de controle de fronteira não possua um dos vizinhos:

$$a_W = 0 \quad e \quad b = a_B \cdot \phi_B + S_c \cdot \Delta V = \left(\frac{a_B \cdot \phi_B}{\Delta V} + S_c \right) \Delta V = (S_{cA} + S_c) \cdot \Delta V \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned} a_P &= a_B + a_E - S_p \cdot \Delta V = a_E - (-a_B + S_p \cdot \Delta V) = a_E - \left(-\frac{a_B}{\Delta V} + S_p \right) \Delta V = \\ &= a_E - (S_{pA} + S_p) \cdot \Delta V \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\text{Onde: } S_{cA} = \frac{a_B \cdot \phi_B}{\Delta V} \quad (4.35a) \quad e \quad S_{pA} = -\frac{a_B}{\Delta V} \quad (4.35b)$$

4.8.2 Fronteira de Segunda Espécie

Quando o fluxo associado a ϕ for especificado na fronteira “b” (J_b), conforme mostrado na Figura 4.6:

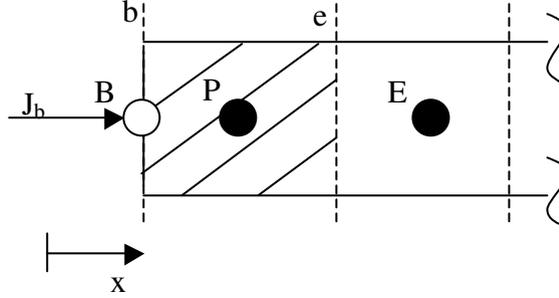


Figura 4.6: Representação de uma fronteira de Segunda Espécie para problemas em 1D.(Fonte: adaptada a partir de ALTEMANI, 2001)

$$-\left(\Gamma.A.\frac{d\phi}{dx}\right)_w = J_b.A_b \quad (4.36)$$

Substituindo a equação (4.36) na equação (4.27):

$$\left\{\left(\Gamma.A.\frac{d\phi}{dx}\right) + J_b.A_b\right\} + \bar{S}_\phi.\Delta V = 0 \quad (4.37)$$

$$\left\{\Gamma_e.A_e.\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}}\right) + J_b.A_b\right\} + (S_c + S_p.\phi_p).\Delta V = 0 \quad (4.38)$$

Desenvolvendo a equação (4.38) chega-se a seguinte forma para a equação discretizada no volume de controle de fronteira:

$$(a_E - S_p.\Delta V)\phi_P = a_E.\phi_E + \left(\frac{J_b.A_b}{\Delta V} + S_c\right)\Delta V = a_E.\phi_E + (S_{cA} + S_c).\Delta V \quad (4.39)$$

Logo: $S_{cA} = \frac{J_b.A_b}{\Delta V}$ (4.40a) e $S_{pA} = 0$ (4.40b), mantém-se o enfoque tal que o ponto

nodal no volume de controle de fronteira não possua um dos vizinhos, no caso o vizinho à esquerda. Após a convergência da solução, o valor de ϕ na fronteira (ϕ_B) é obtido numericamente; pois sabe-se que:

$$-\left(\Gamma.A.\frac{d\phi}{dx}\right)_w = -\Gamma_b.A_b.\left(\frac{\phi_P - \phi_B}{\delta X_{BP}}\right) = J_b.A_b \quad (4.41)$$

Conduzindo a expressão acima para uma notação mais próxima da padrão:

$$a_B.(\phi_P - \phi_B) = J_b.A_b \Rightarrow \phi_B = \phi_P + \frac{J_b.A_b}{a_B} \quad (4.42)$$

Logo:

$$\phi_B = \phi_P + \frac{J_b.\delta X_{BP}}{\Gamma_b} \quad (4.43)$$

4.8.3 Fronteira de Terceira Espécie

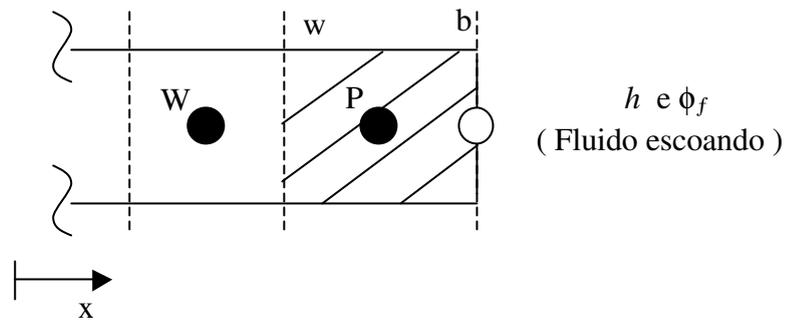


Figura 4.7: Representação de uma fronteira de Terceira Espécie para problemas em 1D.(Fonte: adaptada a partir de ALTEMANI, 2001)

Neste caso, os valores do coeficiente de transferência convectiva h e o valor da variável dependente ϕ num fluido (ϕ_f) escoando e em contato com a fronteira “b” serão fornecidos. Aplica-se o enfoque que está sendo explanado, na fronteira do lado de direito do domínio de interesse, neste caso o ponto nodal no volume de controle de fronteira não possuirá vizinho à direita:

$$-\left(\Gamma.A.\frac{d\phi}{dx}\right)_e = -\left(\Gamma.A.\frac{d\phi}{dx}\right)_b = h.A_b.(\phi_B - \phi_f) \quad (4.44)$$

Para o processo difusivo no interior do domínio:

$$-\left(\Gamma.A.\frac{d\phi}{dx}\right)_b = -\Gamma_b.A_b.\left(\frac{\phi_B - \phi_P}{\delta X_{BP}}\right) \quad (4.45)$$

Aplicando a equação (4.45) na equação (4.44):

$$\Gamma_b \cdot A_b \cdot \left(\frac{\phi_B - \phi_P}{\delta x_{PB}} \right) = -h \cdot A_b \cdot (\phi_B - \phi_f) = -J_b \cdot A_b \quad (4.46)$$

A equação (4.27), Equação Geral de Transporte da Variável ϕ para o caso unidimensional (1D), assume a seguinte forma:

$$\left\{ \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_b - \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_w \right\} + \bar{S}_\phi \cdot \Delta V = 0 \quad (4.47)$$

Logo:

$$-J_b \cdot A_b - \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_w + \bar{S}_\phi \cdot \Delta V = 0 \quad (4.48)$$

Aplica-se a definição de resistência ao transporte de uma propriedade ϕ , como sendo a razão entre o potencial motriz e a taxa de transferência ocasionada pelo mesmo (INCROPERA, 1992):

a) Resistência convectiva:

$$R_{\phi, \text{conv}} = \frac{1}{h \cdot A_b} \quad (4.49)$$

b) Resistência condutiva:

$$R_{\phi, \text{difus}} = \frac{\delta x_{PB}}{\Gamma_b \cdot A_b} \quad (4.50)$$

Em virtude dos fluxos difusivos e convectivos estarem em série na interface que delimita a fronteira, as resistências convectiva e condutiva também estão associadas em série (INCROPERA, 1992). Daí, as mesmas podem ser somadas:

$$R_{\phi, \text{TOTAL}} = R_{\phi, \text{conv}} + R_{\phi, \text{difus}} = \sum R_\phi \quad (4.51)$$

Expressa-se a taxa de transporte da variável ϕ em função da diferença global do potencial motriz $(\phi_P - \phi_f)$:

$$J_b \cdot A_b = \frac{(\phi_P - \phi_f)}{\left(\frac{1}{h \cdot A_b} + \frac{\delta x_{PB}}{\Gamma_b \cdot A_b} \right)} = \frac{(\phi_P - \phi_f)}{\sum R_\phi} \quad (4.52)$$

Substituindo a equação (4.52) na equação (4.48):

$$-\frac{(\phi_P - \phi_f)}{\sum R_\phi} - \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_w + (S_c + S_p \cdot \phi_P) \cdot \Delta V = 0 \quad (4.53)$$

$$-\frac{(\phi_P - \phi_f)}{\sum R_\phi} - \Gamma_w \cdot A_w \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_w}{\delta x_{PW}} \right) + (S_c + S_p \cdot \phi_P) \cdot \Delta V = 0 \quad (4.54)$$

Rearrmando a equação (4.54):

$$\left[a_w + \frac{1}{\sum R_\phi} - S_p \cdot \Delta V \right] \cdot \phi_P = a_w \cdot \phi_w + \frac{\phi_f}{\sum R_\phi} + S_{cA} \cdot \Delta V \quad (4.55)$$

Visando levar a equação (4.55) à forma padrão fazemos os seguintes artifícios:

$$\text{Forma padrão: } a_p \cdot \phi_P = a_w \cdot \phi_w + a_E \cdot \phi_E + b \quad (4.56)$$

Onde

$$a_w = \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.57a)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_c \cdot A_c}{\delta x_{PE}} \quad (4.57b)$$

$$b = S_c \cdot \Delta V \quad (4.57c)$$

$$a_p = a_w + a_E - S_p \cdot \Delta V \quad (4.57d)$$

Faz-se:

$$a_w = \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.58a)$$

$$a_E = 0 \quad (4.58b)$$

$$b = \frac{\phi_f}{\sum R_\phi} + S_{cA} \cdot \Delta V = \left(\frac{\phi_f}{\sum R_\phi \cdot \Delta V} + S_{cA} \right) \Delta V = (S_{cA} + S_c) \cdot \Delta V \quad (4.58c)$$

$$a_p = a_w + \frac{1}{\sum R_\phi} - S_p \cdot \Delta V = a_w + \left(\frac{1}{\sum R_\phi \cdot \Delta V} - S_p \right) \Delta V = a_w - (S_{p_A} + S_p) \cdot \Delta V \quad (4.58d)$$

Onde: $S_{c_A} = \frac{\phi_f}{\sum R_\phi \cdot \Delta V}$ (4.59a) e $S_{p_A} = -\frac{1}{\sum R_\phi \cdot \Delta V}$ (4.59b)

Aplicando tal tratamento, o valor de ϕ na fronteira (ϕ_B) é obtido numericamente após a convergência da solução, aplicando a equação (4.52) na equação (4.46). Nos casos 2D e 3D, o tratamento das condições de contorno empregando o enfoque explanado pode ser feito aplicando um procedimento análogo.

4.9 Aplicação do tratamento das condições de contorno para um caso em 2D

Aplicar-se-á a metodologia explanada para o caso em 2D mostrado na figura 4.8:

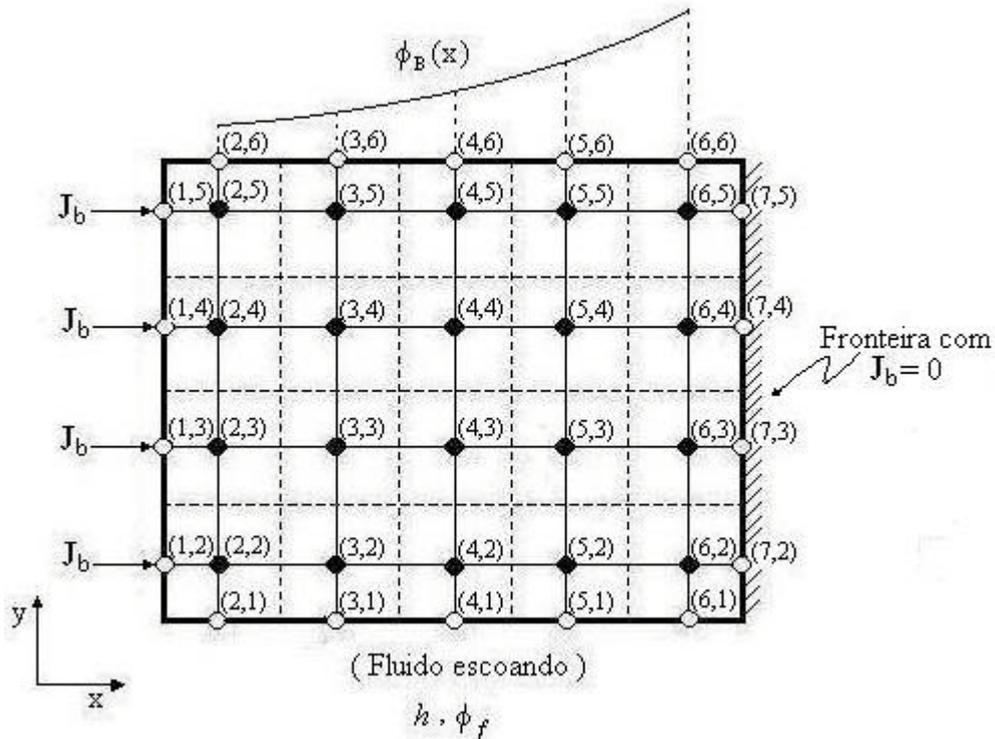


Figura 4.8: Malha numérica numa configuração bidimensional, que apresenta todas as 3 espécies de condições de fronteira.

Ressalta-se que o número de equações algébricas obtidas para uma dada malha numérica é igual não número de Volumes de Controles Finitos nos quais o domínio de

solução foi dividido, quando as condições de contorno forem tratadas através dos termos fontes adicionais (ALTEMANI (2001)):

1) Fronteira à esquerda: fronteira de Segunda Espécie com $J_b \neq 0$.

$$I = 2 \text{ e } J = 2 \dots 5$$

$$a(2,J).\phi(2,J) = a(1,J).\phi(1,J) + a(3,J).\phi(3,J) + a(2,J-1).\phi(2,J-1) + a(2,J+1).\phi(2,J+1) + b(2,J) \quad (4.60)$$

$$a(1, J) = 0 \quad (4.61)$$

$$a(2,J) = a(1,J) + a(3,J) + a(2,J-1) + a(2,J+1) - [S_{PA}(2,J) + S_P(2,J)].\Delta V(2,J) \quad (4.62)$$

$$b(2,J) = [S_{cA}(2,J) + S_c(2,J)].\Delta V(2,J) \quad (4.63)$$

Onde:

$$S_{cA}(2, J) = \frac{J_b(1, J).A_b(1, J)}{\Delta V(2, J)} \quad (4.64)$$

$$S_{PA}(2, J) = 0 \quad (4.65)$$

2) Fronteira à direita: fronteira de Segunda Espécie para o caso especial $J_b = 0$ (Não há transporte da variável dependente na interface que delimita a fronteira), fronteira “adiabática”.

$$I = 6 \text{ e } J = 2 \dots 5$$

$$a(6,J).\phi(6,J) = a(5,J).\phi(5,J) + a(7,J).\phi(7,J) + a(6,J-1).\phi(6,J-1) + a(6,J+1).\phi(6,J+1) + b(6,J) \quad (4.66)$$

$$a(7, J) = 0 \quad (4.67)$$

$$a(6,J) = a(5,J) + a(7,J) + a(6,J-1) + a(6,J+1) - [S_{PA}(6,J) + S_P(6,J)].\Delta V(6,J) \quad (4.68)$$

$$b(6,J) = [S_{cA}(6,J) + S_c(6,J)].\Delta V(6,J) \quad (4.69)$$

Onde:

$$S_{cA}(6, J) = \frac{J_b(7, J).A_b(7, J)}{\Delta V(6, J)} = 0 \quad (4.70)$$

$$S_{PA}(6, J) = 0 \quad (4.71)$$

3) Fronteira ao sul: fronteira de Terceira Espécie.

$$I = 2 \dots 6 \text{ e } J = 2$$

$$a(I,2) \cdot \phi(I,2) = a(I,1) \cdot \phi(I,1) + a(I,3) \cdot \phi(I,3) + a(I-1,2) \cdot \phi(I-1,2) + a(I+1,2) \cdot \phi(I+1,2) + b(I,2) \quad (4.72)$$

$$a(I,1) = 0 \quad (4.73)$$

$$a(I,2) = a(I,1) + a(I,3) + a(I-1,2) + a(I+1,2) - [S_{PA}(I,2) + S_P(I,2)] \cdot \Delta V(I,2) \quad (4.74)$$

$$b(I,2) = [S_{CA}(I,2) + S_C(I,2)] \cdot \Delta V(I,2) \quad (4.75)$$

Onde:

$$S_{CA}(I,2) = \frac{-1}{\left(\frac{1}{h \cdot A_b(I,1)} + \frac{\delta x(I,2)}{\Gamma(I,1) \cdot A_b(I,1)} \right)} \Delta V(I,2) \quad (4.76)$$

$$S_{PA}(I,2) = \frac{\phi_f}{\left(\frac{1}{h \cdot A_b(I,1)} + \frac{\delta x(I,2)}{\Gamma(I,1) \cdot A_b(I,1)} \right)} \Delta V(I,2) \quad (4.77)$$

4) Fronteira ao norte: fronteira de Primeira Espécie.

$$I = 2 \dots 6 \text{ e } J = 5$$

$$a(I,5) \cdot \phi(I,5) = a(I,4) \cdot \phi(I,4) + a(I,6) \cdot \phi(I,6) + a(I-1,5) \cdot \phi(I-1,5) + a(I+1,5) \cdot \phi(I+1,5) + b(I,5) \quad (4.78)$$

$$a(I,6) = 0 \quad (4.79)$$

$$a(I,5) = a(I,4) + a(I,6) + a(I-1,5) + a(I+1,5) - [S_{PA}(I,5) + S_P(I,5)] \cdot \Delta V(I,5) \quad (4.80)$$

$$b(I,5) = [S_{CA}(I,5) + S_C(I,5)] \cdot \Delta V(I,5) \quad (4.81)$$

Onde:

$$S_{CA}(I,5) = \frac{a_B(I,6) \cdot \phi_B(I,6)}{\Delta V(I,5)} \quad (4.82)$$

$$S_{PA}(I,5) = \frac{-a_B(I,6)}{\Delta V(I,5)} \quad (4.83)$$

4.10 Solução do sistema de equações algébricas obtidas pela discretização da Equação Geral de Transporte (*Partial Differential Equation-PDE*)

4.10.2 *Comentários Gerais*

Após a discretização da *PDE* o conjunto de equações algébricas resultante, em tese, pode ser resolvido por quaisquer dos muitos métodos numéricos disponíveis, pois nenhuma restrição inicial foi assumida. Logo, considera-se a derivação do conjunto de equações algébricas e sua solução como 2 operações distintas, podendo ser perfeitamente implementadas em 2 subrotinas separadas de um programa e qualquer uma das mesmas pode ser independentemente modificada quando desejado (PATANKAR, 1980). No entanto, do universo de métodos numéricos aplicáveis a sistema de equações algébricas lineares, os métodos denominados diretos, pois não aplicam nenhum processo iterativo, não são aconselhados devido a exigência de grande espaço em memória no computador, em função da necessidade das equações serem resolvidas repetidamente com atualização dos coeficientes, fato que ocorre nos problemas não-lineares, resultando num grande tempo computacional. Logo, os métodos diretos não são econômicos do ponto de vista do esforço computacional.

A alternativa que resta é a aplicação dos métodos numéricos, aplicáveis a sistema de equações algébricas, ditos iterativos, pois os mesmos se fundamentam na inicialização a partir de uma estimativa inicial do campo escalar ($\phi^0 = \phi(x,y,z,t)$, variável dependente) que associada a um determinado algoritmo, fornece a solução atualizada ϕ^i , a sucessiva repetição do algoritmo (iterações) conduz a um resultado que se aproxima, dentro de uma faixa de desvio especificada, da solução correta do sistema de equações algébricas, caso a convergência seja assegurada. Os métodos iterativos usualmente exigem menos espaço em memória no computador que os métodos diretos e são atrativos no tratamento da não-linearidade.

Há muitos métodos numéricos iterativos aplicáveis a sistema de equações algébricas. Os dois mais comentados na literatura referente ao Método dos Volumes Finitos, consultada neste trabalho, são:

4.10.2 Método Gauss-Seidel ponto-a-ponto

Apresenta a desvantagens de ocorrência de divergência em alguns casos. Há um critério formulado por Scarborough, no final da década de 50, que mostra a condição suficiente, mas não necessária, para o referido método iterativo ser convergente (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995)

$$\frac{\sum |a_{viz}|}{|a_p|} \begin{cases} \leq 1 & \text{em todos os pontos nodais} \\ < 1 & \text{nos pontos nodais a "leste"} \end{cases} \quad (4.84)$$

4.10.3 TDMA (TriDiagonal-Matrix Algorithm) linha-a-linha

Consiste num método linha por linha, pois escolhida uma linha (numa direção x,y ou z) os valores são assumidos temporariamente para os pontos nodais contidos nas linhas vizinhas à escolhida e na mesma direção, sendo empregados na correção dos valores de ϕ nos pontos nodais contido na linha escolhida para aplicação do TDMA, terminada uma linha atualiza-se os valores e aplica-se o TDMA na próxima linha , até que terminem as linhas na direção trabalhada, se desejável, aplica-se o TDMA em todas as linhas das outras direções e em todos os sentidos. Tal procedimento é igualmente aplicado em 2 ou 3 dimensões, apresentando a vantagem de exigir um espaço mínimo, em memória no computador , para o armazenamento de valores quando comparado com outros métodos, sendo computacionalmente econômico, do ponto de vista de esforço computacional, por isso é largamente usado em programas de CFD (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

O algoritmo do TDMA não será discutido devido sua ocorrência nos problemas inerentes ao campo da Engenharia Química que envolve a solução de equações algébricas resultante do equacionamento dos estágios de equilíbrio presentes na modelagem matemática de colunas de destilação, sendo o referido algoritmo, muitas vezes, designado por Algoritmo de Thomas em homenagem ao pesquisador que desenvolveu a referida técnica, em 1949, aplicável à matrizes tridiagonais. Logo, há inúmeras referências de explanações e aplicações do Algoritmo de Thomas (TDMA) na literatura própria da Engenharia Química.

A convergência do método linha-por-linha é rápida, pois as informações contidas nas condições de fronteira presentes nas extremidades de cada linha são transmitidas, cada uma por sua vez, ao interior do domínio de solução retratado pelos pontos nodais internos contidos na linha onde o *TDMA* é aplicado (PATANKAR, 1980).

4.11 Problema bidimensional (2D), regime transiente, puramente difusivo e com termo fonte: presença de termos difusivos, termo transiente e do termo fonte na equação diferencial.

Discretiza-se o termo transiente e faz-se sua inserção nas equações algébricas obtidas pela discretização da Equação Diferencial Parcial que retrata o problema bidimensionais (2D) e estacionário, puramente difusivo, obtendo assim o problema 2D transiente:

$$\frac{\partial(\rho.\phi)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_{\phi} \quad (4.85)$$

A integração da Equação Geral de Transporte será realizada no V.C. e no tempo, de modo a retratar problemas que apresentam regime transiente. A solução com a posição será obtida para cada tempo, atingido utilizando um passo Δt , pois dado os valores nos pontos nodais de ϕ (ϕ_p) num tempo t , encontra-se os valores ϕ_p no tempo $t + \Delta t$. Os valores antigos (*old*), no instante t , serão indicados pelo sobrescrito “o” , enquanto os termos sem este sobrescrito serão avaliados no instante $t + \Delta t$.

$$\int_{v.c.} \left[\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial(\rho.\phi)}{\partial t} .dt \right] .dV = \int_{v.c.} \left[\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) .dt \right] .dV + \int_{v.c.} \left[\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) .dt \right] .dV + \int_{v.c.} \left[\int_t^{t+\Delta t} S_{\phi} .dt \right] .dV \quad (4.86)$$

A ordem de integração seja no tempo ou no volume, depende da natureza do termo. No termo transiente a integração será primeiramente realizada no tempo e para representação do termo $\frac{\partial(\rho.\phi)}{\partial t}$, assume-se que ϕ apresenta o valor ϕ_p (variável dependente

avaliada no ponto nodal) em todo o volume de controle. Considera-se ρ constante (escoamento incompressível) para facilitar o tratamento:

$$\begin{aligned} \rho \cdot \int_{V.C.} \left[\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \phi}{\partial t} \cdot dt \right] \cdot dV &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV \right] \cdot dt + \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dV \right] \cdot dt + \\ &+ \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} S_\phi \cdot dV \right] \cdot dt \end{aligned} \quad (4.87)$$

4.11.1 Tratamento do termo transiente

Emprega-se um esquema de diferenciação de 1ª ordem na variação temporal:

$$\rho \cdot \int_{V.C.} \left[\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \phi}{\partial t} \cdot dt \right] \cdot dV = \rho \cdot \int_{V.C.} \left[\int_t^{t+\Delta t} \partial \phi \right] \cdot dV = \rho \cdot \int_{V.C.} [(\phi_P - \phi_P^o)] \cdot dV = \rho \cdot (\phi_P - \phi_P^o) \cdot \Delta V \quad (4.88)$$

4.11.2 Tratamento do termo difusivo nas direções x e y

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV \right] \cdot dt &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx \cdot dy \cdot dz \right] \cdot dt = \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \partial \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dy \cdot dz \right] \cdot dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_w^e \partial \left(\Gamma_\phi \cdot A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] \cdot dt = \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] \cdot dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \cdot A \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] \cdot dt = \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\Gamma_e \cdot A_e \cdot \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{EP}} \right) - \Gamma_w \cdot A_w \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{PW}} \right) \right] \cdot dt = \\ &= \int_t^{t+\Delta t} [a_E \cdot \phi_E - a_E \cdot \phi_P - a_W \cdot \phi_P + a_W \cdot \phi_W] \cdot dt \end{aligned} \quad (4.89)$$

Assume-se uma hipótese sobre a variação de ϕ_P , ϕ_E e ϕ_W entre os tempo t e $t + \Delta t$. Várias hipóteses podem ser assumidas, muitas das quais podem ser generalizadas pelo emprego de um fator variando entre 0 e 1.

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi \cdot dt = [f \cdot \phi + (1-f) \cdot \phi^o] \Delta t \quad (4.90)$$

Aplicando a expressão acima na equação (4.89):

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV \right] \cdot dt = a_E \cdot [f \cdot \phi_E + (1-f) \cdot \phi_E^o] \Delta t - a_E \cdot [f \cdot \phi_P + (1-f) \cdot \phi_P^o] \Delta t - \\ - a_W \cdot [f \cdot \phi_P + (1-f) \cdot \phi_P^o] + a_W \cdot [f \cdot \phi_W + (1-f) \cdot \phi_W^o] \Delta t \quad (4.91)$$

Rearranjando a equação (4.91):

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV \right] \cdot dt = a_E \cdot [f \cdot \phi_E + (1-f) \cdot \phi_E^o] \Delta t + a_W \cdot [f \cdot \phi_W + (1-f) \cdot \phi_W^o] \Delta t + \\ + (a_E + a_W) \cdot [-f \cdot \phi_P - (1-f) \cdot \phi_P^o] \Delta t \quad (4.92)$$

Por analogia, conclui-se que o termo difusivo na direção y :

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dV \right] \cdot dt = a_N \cdot [f \cdot \phi_N + (1-f) \cdot \phi_N^o] \Delta t + a_S \cdot [f \cdot \phi_S + (1-f) \cdot \phi_S^o] \Delta t + \\ + (a_N + a_S) \cdot [-f \cdot \phi_P - (1-f) \cdot \phi_P^o] \Delta t \quad (4.93)$$

4.11.3 Tratamento do termo fonte

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} S_\phi \cdot dV \right] \cdot dt = \int_t^{t+\Delta t} [\bar{S}_\phi \cdot \Delta V] dt = \int_t^{t+\Delta t} [S_c \cdot \Delta V + S_p \cdot \Delta V \cdot \phi_P] dt = \\ = S_c \cdot \Delta V \cdot \Delta t + S_p \cdot \Delta V \cdot [f \cdot \phi_P + (1-f) \cdot \phi_P^o] \quad (4.94)$$

Aplicando os termos anteriormente derivados na equação (4.87):

$$\begin{aligned}
 \rho \cdot (\phi_P - \phi_P^o) \cdot \Delta V &= a_E \cdot [f \cdot \phi_E + (1-f) \cdot \phi_E^o] \Delta t + a_W \cdot [f \cdot \phi_W + (1-f) \cdot \phi_W^o] \Delta t + \\
 &+ (a_E + a_W) \cdot [-f \cdot \phi_P - (1-f) \cdot \phi_P^o] + a_N \cdot [f \cdot \phi_N + (1-f) \cdot \phi_N^o] \Delta t + \\
 &+ a_S \cdot [f \cdot \phi_S + (1-f) \cdot \phi_S^o] \Delta t + (a_N + a_S) \cdot [-f \cdot \phi_P - (1-f) \cdot \phi_P^o] \Delta t + \\
 &+ S_c \cdot \Delta V \cdot \Delta t + S_p \cdot \Delta V \cdot [f \cdot \phi_P + (1-f) \cdot \phi_P^o] \Delta t
 \end{aligned} \tag{4.95}$$

Rearrmando:

$$\begin{aligned}
 \rho \cdot (\phi_P - \phi_P^o) \cdot \frac{\Delta V}{\Delta t} &= a_E \cdot [f \cdot \phi_E + (1-f) \cdot \phi_E^o] + a_W \cdot [f \cdot \phi_W + (1-f) \cdot \phi_W^o] + \\
 &+ (a_E + a_W) \cdot [-f \cdot \phi_P - (1-f) \cdot \phi_P^o] + a_N \cdot [f \cdot \phi_N + (1-f) \cdot \phi_N^o] + \\
 &+ a_S \cdot [f \cdot \phi_S + (1-f) \cdot \phi_S^o] + (a_N + a_S) \cdot [-f \cdot \phi_P - (1-f) \cdot \phi_P^o] + \\
 &+ S_c \cdot \Delta V + S_p \cdot \Delta V \cdot [f \cdot \phi_P + (1-f) \cdot \phi_P^o]
 \end{aligned} \tag{4.96}$$

$$\text{Define-se: } a_P^o = \rho \cdot \frac{\Delta V}{\Delta t} \tag{4.97}$$

$$\begin{aligned}
 [f \cdot \phi_E + f \cdot \phi_W + f \cdot \phi_N + f \cdot \phi_S + a_P^o - f \cdot S_p \cdot \Delta V] \cdot \phi_P &= a_E \cdot [f \cdot \phi_E + (1-f) \cdot \phi_E^o] + \\
 &+ a_W \cdot [f \cdot \phi_W + (1-f) \cdot \phi_W^o] + a_N \cdot [f \cdot \phi_N + (1-f) \cdot \phi_N^o] + a_S \cdot [f \cdot \phi_S + (1-f) \cdot \phi_S^o] + \\
 &+ [-(1-f) \cdot a_E - (1-f) \cdot a_W - (1-f) \cdot a_N - (1-f) \cdot a_S + a_P^o] \cdot \phi_P^o + S_c \cdot \Delta V + \\
 &+ (1-f) \cdot S_p \cdot \Delta V \cdot \phi_P^o + a_P^o \cdot \phi_P^o
 \end{aligned} \tag{4.98}$$

Na forma padrão:

$$\begin{aligned}
 a_P \cdot \phi_P &= a_W \cdot [f \cdot \phi_W + (1-f) \cdot \phi_W^o] + a_E \cdot [f \cdot \phi_E + (1-f) \cdot \phi_E^o] + \\
 &+ a_S \cdot [f \cdot \phi_S + (1-f) \cdot \phi_S^o] + a_N \cdot [f \cdot \phi_N + (1-f) \cdot \phi_N^o] + \\
 &+ [-(1-f) \cdot a_E - (1-f) \cdot a_W - (1-f) \cdot a_N - (1-f) \cdot a_S + \\
 &+ a_P^o] \cdot \phi_P^o + b
 \end{aligned} \tag{4.99}$$

Onde:

$$a_W = \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} \tag{4.100a}$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.100b)$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s \cdot A_s}{\delta y_{SP}} \quad (4.100c)$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n \cdot A_n}{\delta y_{PN}} \quad (4.100d)$$

$$a_P = f \cdot a_W + f \cdot a_E + f \cdot a_S + f \cdot a_N + a_P^o - f \cdot S_p \cdot \Delta V \quad (4.100e)$$

$$b = S_c \cdot \Delta V + (1 - f) \cdot S_p \cdot \Delta V \cdot \phi_P^o + a_P^o \cdot \phi_P^o \quad (4.100f)$$

4.11.4 Considerações finais a cerca de problemas em regime transiente

A forma final das equações diferenciais discretizadas depende do valor de f .

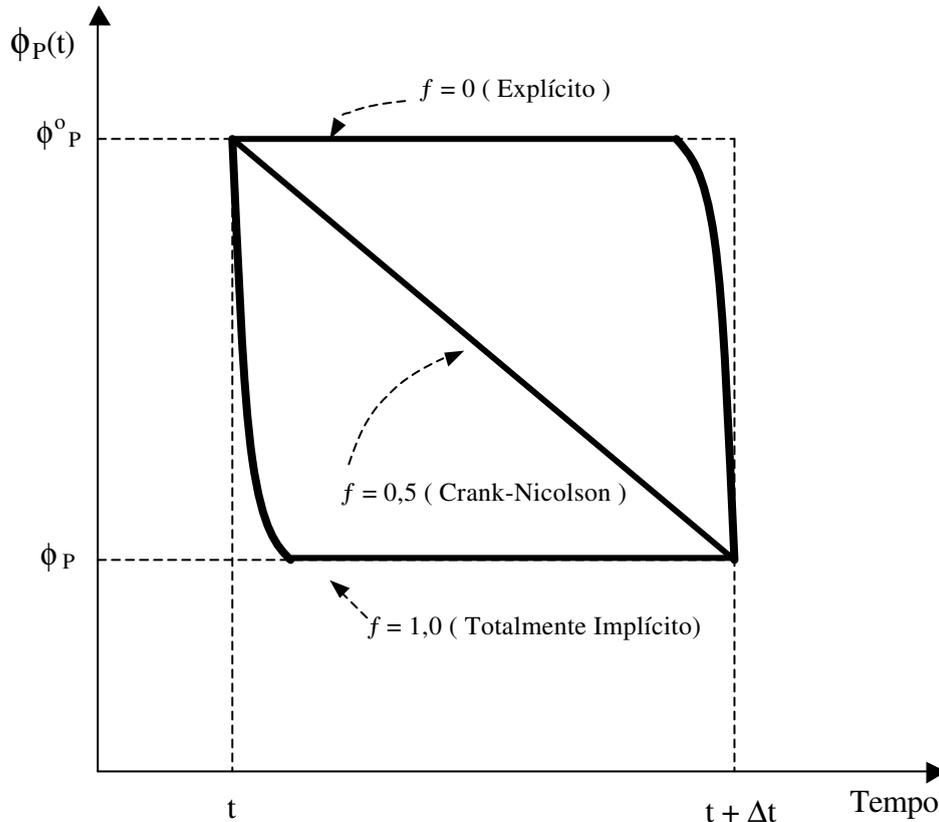


Figura 4.9: Variação da variável ϕ com o tempo para os diferentes esquemas de discretização aplicados nas contribuições associadas ao regime transiente. (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 56)

Quando $f=0$ chega-se ao esquema Explícito, o qual assume que o valor ϕ_P^0 permanece em todo o intervalo de tempo, sendo atualizado em $t + \Delta t$, isto implica que ϕ_P não está relacionado com ϕ_W, ϕ_E, ϕ_S e ϕ_N , porém é explicitamente obtido em termos das variáveis dependentes nos pontos nodais no tempo t ($\phi_W^0, \phi_E^0, \phi_S^0, \phi_N^0$ e ϕ_P^0), por isso tal esquema é chamado Explícito. Qualquer esquema com $f \neq 0$ será implícito, pois ϕ_P será relacionado com os valores da variável dependente nos pontos nodais vizinhos no tempo $t + \Delta t$ (ϕ_W, ϕ_E, ϕ_S e ϕ_N), e a solução simultânea de um conjunto de equações algébricas será necessária. O esquema Explícito apresenta a desvantagem de poder fornecer resultados que

não apresentam realismo físico, pois a Regra Básica 2 pode ser quebrada caso o coeficiente de ϕ^o_P , conforme a equação (4.99), torne-se negativo, isto é: $(a^o_P - a_W - a_E - a_S - a_N > 0)$.

Tal fato conduz a seguinte relação:

$$\rho \cdot \frac{\Delta V}{\Delta t} > a_W + a_E + a_S + a_N \quad (4.101)$$

$$\rho \cdot \frac{\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}{\Delta t} > \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} + \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} + \frac{\Gamma_s \cdot A_s}{\delta y_{SP}} + \frac{\Gamma_n \cdot A_n}{\delta y_{PN}} \quad (4.102)$$

Onde:

$$A_w = \Delta y \cdot \Delta z = \Delta y \cdot 1,0 = \Delta y \quad (4.103a)$$

$$A_e = \Delta y \cdot \Delta z = \Delta y \cdot 1,0 = \Delta y \quad (4.103b)$$

$$A_s = \Delta x \cdot \Delta z = \Delta x \cdot 1,0 = \Delta x \quad (4.103c)$$

$$A_n = \Delta x \cdot \Delta z = \Delta x \cdot 1,0 = \Delta x \quad (4.103d)$$

Supondo Γ_ϕ constante e malha uniforme: $\delta x_{WP} = \delta x_{PE} = \Delta x$ e $\delta y_{SP} = \delta y_{PN} = \Delta y$

$$\rho \cdot \frac{\Delta x \cdot \Delta y \cdot 1}{\Delta t} > \frac{2 \cdot \Gamma \cdot \Delta y}{\Delta x} + \frac{2 \cdot \Gamma \cdot \Delta x}{\Delta y} \quad (4.104)$$

$$\rho \cdot \frac{\Delta x \cdot \Delta y}{\Delta t} > 2 \cdot \Gamma \cdot \left(\frac{\Delta x^2 + \Delta y^2}{\Delta x \cdot \Delta y} \right) \quad (4.105)$$

$$\Delta t < \frac{\rho \cdot (\Delta x \cdot \Delta y)^2}{2 \cdot \Gamma \cdot (\Delta x^2 + \Delta y^2)} \quad (4.106)$$

Para efeito de simplificação, visando uma melhor visualização, do critério aplica-se o caso onde a malha é uniforme e $\Delta x = \Delta y$:

$$\Delta t < \frac{\rho \cdot \Delta x^2}{4 \cdot \Gamma} \quad (4.107)$$

$$\text{Para abordagem 1D: } \Delta t < \frac{\rho \cdot \Delta x^2}{2 \cdot \Gamma} \quad (4.108)$$

Uma característica negativa do critério de estabilidade, acima mostrado, decorre do fato que para se determinar uma solução espacial de ϕ_P bastante acurada (reduzindo Δx e Δy) é necessário empregar um Δt muito pequeno, aumentando o tempo computacional.

Fazendo $f=0,5$ chega-se ao esquema Crank-Nicolson, o qual pode apresentar soluções desprovidas de realismo físico caso o intervalo de tempo (Δt) não seja suficientemente pequeno. O perfil linear mostrado na figura 4.9, entre ϕ_P e ϕ^o_P , é aparentemente uma boa representação da relação funcional de ϕ com o tempo; no entanto, tal consideração só é verdadeira para pequenos intervalos de tempo. Para grandes intervalos é percebido um decaimento (no caso de ϕ_P ser uma função decrescente com a variável t) intrinsecamente exponencial e acentuado no início do intervalo, seguido por uma posterior estabilização na forma de uma calda achatada.

Para o coeficiente de ϕ^o_P ser sempre positivo, deve-se aplicar $f=1.0$ (considerando os 3 esquemas de discretização empregados no termo transiente), logo o esquema Totalmente Implícito assegura o realismo física da solução obtida, supondo que haja convergência no processo iterativo, por essa razão sua preferência entre os demais esquemas na literatura consultada, o que justificará seu emprego nesta breve introdução ao Método dos Volumes Finitos. Outra característica do esquema Totalmente Implícito é sua simplicidade.

4.12 Discretização das contribuições associadas ao regime transiente, empregando o esquema Totalmente Implícito

Fazendo $f=1,0$ obtém-se o esquema Totalmente Implícito, resultando na seguinte forma dos coeficientes das equações lineares oriundas da discretização de uma equação diferencial parcial:

$$a_P \cdot \phi_P = a_W \cdot \phi_W + a_E \cdot \phi_E + a_S \cdot \phi_S + a_N \cdot \phi_N + b \quad (4.109)$$

Onde:

$$a_W = \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.110a)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.110b)$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s \cdot A_s}{\delta y_{SP}} \quad (4.110c)$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n \cdot A_n}{\delta y_{PN}} \quad (4.110d)$$

$$a^{\circ}_P = \rho \cdot \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (4.110e)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a^{\circ}_P - S_p \cdot \Delta V \quad (4.110f)$$

$$b = S_c \cdot \Delta V + a^{\circ}_P \cdot \phi^{\circ}_P \quad (4.110g)$$

Quando $\Delta t \rightarrow \infty \Rightarrow a^{\circ}_P \rightarrow 0$, logo as equações algébricas acima tornam-se:

$$a_W = \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.111a)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.111b)$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s \cdot A_s}{\delta y_{SP}} \quad (4.111c)$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n \cdot A_n}{\delta y_{PN}} \quad (4.111d)$$

$$a^o_P = \rho \cdot \frac{\Delta V}{\Delta t} = 0 \quad (4.111e)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N - S_p \cdot \Delta V \quad (4.111f)$$

$$b = S_c \cdot \Delta V \quad (4.111g)$$

As equações algébricas obtidas quando $\Delta t \rightarrow \infty$ são iguais as obtidas para o problema 2D puramente difusivo e estacionário. Tal fato corrobora o realismo físico da solução de ϕ , nos pontos nodais da malha, para problemas transiente empregando o esquema Totalmente Implícito.

Ressalta-se que o valor de ϕ_P prevalece sobre todo o intervalo de tempo, logo o valor de Γ_ϕ (quando há dependência com ϕ_P) e a linearização do termo fonte são iterativamente calculados no valor atual, exatamente como no procedimento próprio do estado estacionário. Logo as considerações feitas para o problema estacionário, tais como : condições de fronteira e *TDMA*, são perfeitamente aplicáveis aos problemas transiente empregando o esquema Totalmente Implícito na discretização do termo transiente.

4.13 Sub-Relaxação e Sobre-Relaxação

Consistem em técnicas empregadas para atenuar (Sub-Relaxação) ou intensificar (Sobre-Relaxação) as variações da variável dependente durante o processo iterativo de solução. Sobre-Relaxação é freqüentemente empregada em conjunção com o Método Gauss-Seidel, sendo o esquema resultante conhecido como *SOR* (*Successive Over-Relaxation*). No que tange ao método linha-por-linha (*TDMA*), o emprego de Sobre-Relaxação é muito útil no tratamento de problemas não lineares, sendo freqüentemente empregada para evitar divergência na solução iterativa de equações fortemente não lineares.

Há várias maneiras de introduzir relaxação na solução das equações obtidas a partir da discretização da *PDE*. Explanar-se-á o emprego de um fator de relaxação:

$$a_P \cdot \phi_P = a_W \cdot \phi_W + a_E \cdot \phi_E + a_S \cdot \phi_S + a_N \cdot \phi_N + b \quad (4.112)$$

$$a_p \cdot \phi_p = \sum a_{viz} \cdot \phi_{viz} + b \quad (4.113)$$

Indica-se ϕ_p^* como o valor da variável dependente no ponto nodal P, obtido na iteração anterior. Rearrmando a equação (4.113):

$$\phi_p = \left(\frac{\sum a_{viz} \cdot \phi_{viz} + b}{a_p} \right) \quad (4.114)$$

Aplicas-se o seguinte artifício matemático:

$$\phi_p = \phi_p + \phi_p^* - \phi_p^* \quad (4.115)$$

$$\text{Logo: } \phi_p = \phi_p^* + \left[\left(\frac{\sum a_{viz} \cdot \phi_{viz} + b}{a_p} \right) - \phi_p^* \right] \quad (4.116)$$

O termo entre colchetes representa a variação da variável dependente produzida na iteração corrente. A referida variação pode ser modificada pela introdução de um fator de relaxação α , de modo que :

$$\phi_p = \phi_p^* + \alpha \cdot \left[\left(\frac{\sum a_{viz} \cdot \phi_{viz} + b}{a_p} \right) - \phi_p^* \right] \quad (4.117)$$

Rearranjando a equação (4.117) de modo a obter uma expressão que se assemelhe com a forma padrão:

$$\frac{a_p \cdot \phi_p}{\alpha} = \sum a_{viz} \cdot \phi_{viz} + b + \frac{(1-\alpha) \cdot a_p \cdot \phi_p^*}{\alpha} \quad (4.118)$$

Sabe-se que ϕ_p torna-se igual a ϕ_p^* quando a solução converge, pois a cada iteração a diferença $\phi_p - \phi_p^*$ é reduzida, logo o valor convergido de ϕ_p fornecido pela resolução da equação (4.118) satisfaz a equação (4.112). Portanto, o resultado convergido das iterações, obtido empregando um fator de relaxação arbitrário ou um procedimento similar deve satisfazer as equações algébricas originais derivadas a partir da discretização de uma equação diferencial parcial.

Quando o fator de relaxação encontra-se na seguinte faixa: $0 < \alpha < 1.0$, ocorre a sub-relaxação do processo de solução aproximando ϕ_p e ϕ_p^* . Valores muito pequenos de α tornam as variações de ϕ_p muito lentas; no entanto, $\alpha > 1$ causa a sobre-relaxação (ALTEMANI, 2001).

Não há regras gerais para escolha do melhor valor de α . O valor ótimo de α depende de vários fatores, tais como : natureza do problema, o número de pontos nodais da malha numérica, o espaçamento entre os pontos nodais e o procedimento iterativo empregado. Usualmente, um valor adequado de α pode ser encontrado pela experiência e a partir da pesquisa de resultados numéricos preliminares para um dado problema.

Não é necessário manter o mesmo valor de α durante o procedimento de resolução; o valor pode ser mudado de iteração para iteração, é possível, porém não é muito conveniente, escolher um valor diferente de α para cada ponto nodal da malha (PATANKAR, 1980).

Tabela 4.1: Equação diferencial parcial discretizada sem e com o emprego de um fator de relaxação.

<i>Equação discretizada original</i>	<i>Equação discretizada modificada</i>
a_p	$\frac{a_p}{\alpha}$
$\sum a_{viz} \cdot \phi_{viz}$	$\sum a_{viz} \cdot \phi_{viz}$
b	$b + \frac{(1 - \alpha) \cdot a_p \cdot \phi_p^*}{\alpha}$

(Fonte: ALTEMANI (2001))

PATANKAR (1980) cita e explana duas outras estratégias de Relaxação:

- 1) Relaxação através de Inércia;
- 2) Relaxação através de Δt

Vale ressaltar que a linearização do termo fonte de modo que $S_p \leq 0$, assegura o cumprimento da Regra Básica 2 o que implica na obtenção de soluções dotadas de realismo físico. No entanto, caso $S(\phi)$ seja uma função decrescente, valores de

$S_p < \left(\frac{dS}{d\phi_p} \right)_{\phi_p^*}$ aumentam a possibilidade de convergência, embora aumente o tempo de

obtenção da solução implicando num efeito de sub-relaxação, logo a linearização do termo fonte é de suma importância na etapa de discretização da equação diferencial parcial, pois o mesmo influencia o realismo físico (Regra Básica 3) e a estabilidade da solução numérica, embutindo um efeito de sub-relaxação.

4.14 Problemas com termos difusivos e convectivos

Até o presente momento, derivou-se o conjunto de equações algébricas lineares (ou linearizadas) que representam a equação diferencial discretizada nos pontos nodais da malha, aplicando o Método dos Volumes Finitos e levando em conta os termos difusivos, o termo transiente e o termo fonte. Nesta nova etapa, considera-se os termos convectivos o que não alterará a forma da equação diferencial discretizada nem o método numérico aplicado na resolução do sistema de equações algébricas lineares resultante, conforme comentado anteriormente.

O termo convectivo retrata o transporte da propriedade ϕ devido ao escoamento global de um fluido. Os problemas que são descritos por equações diferenciais parciais contendo termos difusivos e convectivos, dentre outros, podem ser classificados em 2 classes:

1) Problemas em que o campo de escoamento (isto é, o campo de velocidade: $\vec{v} = \vec{v}(x, y, z)$, e o campo de massa específica: $\rho = \rho(x, y, z)$) é conhecido seja por métodos analíticos, experimentais ou simplesmente estimados.

2) Problemas em que o campo de escoamento é desconhecido, constituindo uma incógnita a ser calculada.

Devido a maiores dificuldades no tratamento dos termos convectivos, no que tange a discretização, e visando a explanação das considerações adotadas inicia-se o tratamento dos referidos termos em 1D e em seguida, por analogia obtém-se as equações algébricas da equação diferencial parcial discretizada para o caso em 2D.

4.15 Problema em 1D, regime estacionário, sem termo fonte, com termos convectivos e difusivos

$$\frac{\partial(\rho.u.\phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (4.119) \quad \therefore \quad \phi = \phi(x) \Rightarrow \frac{d(\rho.u.\phi)}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (4.120)$$

Nos problemas onde aparecem convecção e difusão, o campo de escoamento tem que satisfazer a Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho.u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho.v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho.w)}{\partial z} = 0 \quad (4.121)$$

Para o caso em questão: $\frac{\partial(\rho.u)}{\partial x} = \frac{d(\rho.u)}{dx} = 0 \Rightarrow \rho.u = \text{cte}$ (4.122)

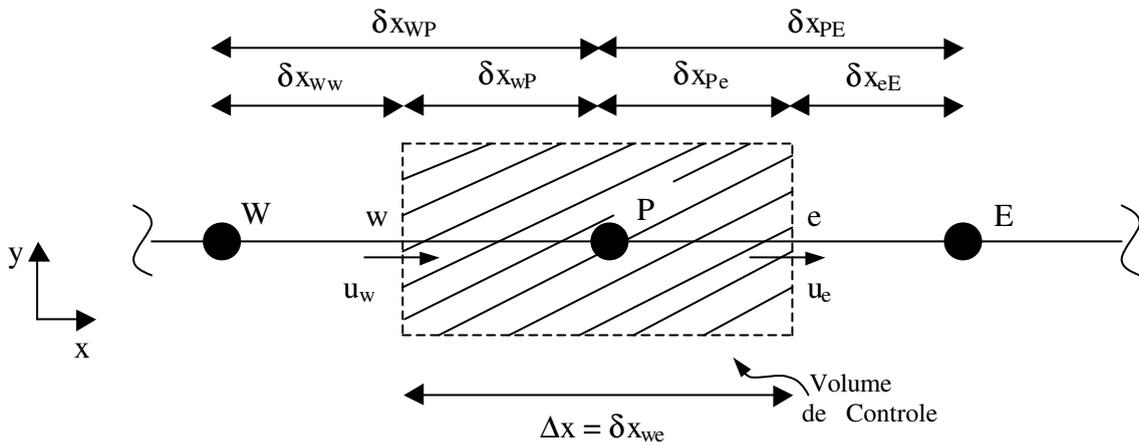


Figura 4.10: Volume de Controle genérico que apresenta transporte convectivo, da variável dependente ϕ , nas interfaces.

Integrando a equação (4.120) no V.C. mostrado na figura 4.10:

$$\int_w^e \frac{d(\rho.u.\phi)}{dx} .dV = \int_w^e \frac{d}{dx} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \right) dV \quad \therefore \quad dV = dx.dy.dz \text{ (Coordenadas Cartesianas)} \quad (4.123)$$

Para problemas em 1D: $dV = dx.dy.dz = dx.1.0.1.0 = dx$

$$\int_w^e \frac{d(\rho.u.\phi)}{dx} .dx = \int_w^e \frac{d}{dx} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \right) dx \Rightarrow \int_w^e d(\rho.u.\phi) = \int_w^e d \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (4.124)$$

$$(\rho.u.\phi)_e - (\rho.u.\phi)_w = \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_w \quad (4.125)$$

4.15.1 Formulação Preliminar (Diferenças-Centrais)

Por motivo de conveniência as interfaces “e” e “w” serão localizadas no meio da distância entre os pontos nodais (interface “w” entre os pontos W e P, interface “e” entre os pontos nodais P e E), o que não afetará a formulação final. Discretiza-se a 1ª derivada ($d\phi/dx$) avaliada na interface, empregando o perfil linear por partes para a variável ϕ .

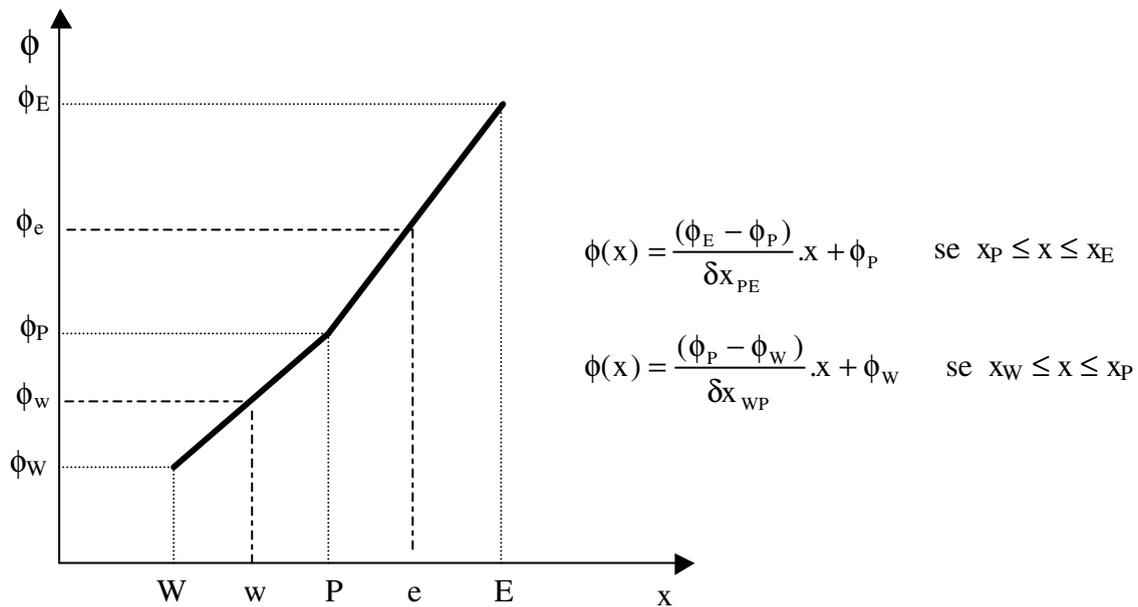


Figura 4.11: Perfil linear por partes empregado na avaliação de ϕ nas interfaces.

Cálculo da variável dependente (ϕ) nas interfaces:

$$\phi_w(\delta x_{ww}) = \phi_w(\delta x_{wp}/2) = \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\delta x_{WP}} \cdot \frac{\delta x_{WP}}{2} + \phi_W = \frac{1}{2} \cdot (\phi_W + \phi_P) \quad (4.126)$$

Por analogia:
$$\phi_e = \frac{1}{2} (\phi_P + \phi_E) \quad (4.127)$$

Ressalta-se que o fator $\frac{1}{2}$ surge em função da colocação das interfaces no meio das distância entre os pontos nodais. Substituindo as expressões de ϕ_e e ϕ_w na equação (4.125):

$$(\rho.u)_e \cdot \frac{1}{2}(\phi_P + \phi_E) - (\rho.u)_w \cdot \frac{1}{2}(\phi_W + \phi_P) = \Gamma_e \cdot \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta X_{EP}} \right) - \Gamma_w \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta X_{PW}} \right) \quad (4.128)$$

O procedimento de avaliação de Γ_ϕ nas interfaces já foi citado anteriormente.

Visando torna a expressão acima mais compacta, defini-se:

$$F = \rho.u.A_{nx} \quad (4.129) \quad \text{e} \quad D = \frac{\Gamma.A_{nx}}{\delta X} \quad (4.130)$$

Onde: F: indica a magnitude do transporte convectivo de ϕ .

D: condutância difusiva.

Percebe-se que D sempre apresentará valores positivos, enquanto F pode apresentar valores positivos ou negativos, a depender do sentido do escoamento. Ambos, F e D apresentam as mesmas dimensões. Logo:

$$\frac{F_e}{2}(\phi_P + \phi_E) - \frac{F_w}{2}(\phi_W + \phi_P) = D_e \cdot (\phi_E - \phi_P) - D_w \cdot (\phi_P - \phi_W) \quad (4.131)$$

$$\left(\frac{F_e}{2} - \frac{F_w}{2} + D_e + D_w \right) \phi_P = \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) \phi_W + \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) \phi_E \quad (4.132)$$

$$\text{Na forma padrão: } a_P \cdot \phi_P = a_W \cdot \phi_W + a_E \cdot \phi_E + b \quad (4.133)$$

Onde:

$$a_W = \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) \quad (4.134a)$$

$$a_E = \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) \quad (4.134b)$$

$$a_P = \left(\frac{F_e}{2} - \frac{F_w}{2} + D_e + D_w \right) \quad (4.134c)$$

$$b = 0 \quad (4.134d)$$

Aplica-se o seguinte artifício:

$$a_P = a_P - F_e + F_e + F_w - F_w = D_e - \frac{F_e}{2} + D_w + \frac{F_w}{2} + (F_e - F_w) \quad (4.135)$$

$$\text{Logo: } a_p = a_w + a_E + \Delta F \quad \therefore \quad \Delta F = (F_c - F_w) \quad (4.136)$$

Comentários:

a) Pela equação da continuidade(caso o campo de escoamento satisfaça a referida equação): $F_c = F_w = \rho.u = \text{cte} \Rightarrow a_p = a_w + a_E$ (4.137)

b) O tratamento de ϕ empregando o perfil linear por partes é também conhecido como esquema de Diferenças-Centrais, sendo oriundo da formulação empregando Série de Taylor.

c) Quando $|F|$ excede 2.D, dependendo do valor de F ser positivo ou negativo, a Regra Básica 2 pode ser violada, pois há a possibilidade de a_w ou a_E tornar-se negativo, implicando em soluções desprovidas de realismo físico.

d) Devido a possibilidade de a_w ou a_E tornar-se negativo, a_p (o qual é igual a $\sum a_{viz}$, para) será menor que $\sum |a_{viz}|$, ocasionando a quebra do critério de Scarborough, implicando no aumento da probabilidade da ocorrência de divergência, caso o método de Gauss-Seidel ponto-a-ponto seja empregado na solução do conjunto de equações algébricas resultantes da discretização.

e) Percebe-se que a solução de problemas convectivos empregando o esquema de Diferenças-Centrais é limitado a casos que apresentem baixo número de Reynolds, isto é valores pequenos de F/D.

f) Para o caso de difusão zero ($\Gamma = 0$) o esquema conduz a $a_p = 0$, tornando a equação intratável pelo método ponto-a-ponto, bem como pelo emprego da maioria dos métodos iterativos.

A partir das observações acima, percebe-se a necessidade de uma melhor formulação que resulte em equações algébricas lineares mais robustas.

4.15.2 Esquema Upwind

O valor de ϕ na interface é igual ao valor da variável dependente no ponto nodal a montante da face, conforme mostrado na figura 4.12; tal característica é fisicamente justificável nos casos onde o transporte da propriedade ϕ é controlado pela convecção. Daí:

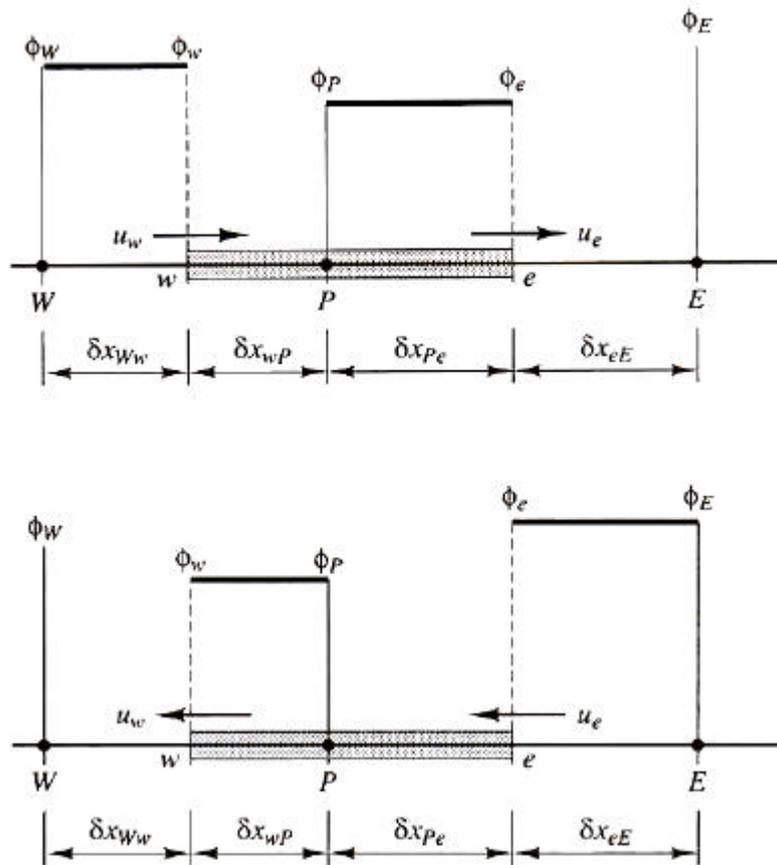


Figura 4.12: Representação do Esquema *Upwind*. (Fonte: VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, pág. 115).

O esquema numérico acima apresentado é chamado de *Upwind*, *Upstream-difference* e *Donor-cell method* (PATANKAR, 1980), o mesmo pode ser escrito numa forma compacta:

$$F_e \cdot \phi_e = \phi_P \cdot \max(F_e, 0) - \phi_E \cdot \max(-F_e, 0) \quad (4.138a)$$

$$F_w \cdot \phi_e = \phi_W \cdot \max(F_w, 0) - \phi_P \cdot \max(-F_w, 0) \quad (4.138b)$$

A notação $Y = \max(A,B,C)$ associa à variável Y o maior dos valores comparados, no caso genérico mostrado: A , B e C . Aplicando tal esquema na equação (4.125):

$$\begin{aligned} & \phi_P \cdot \max(F_e, 0) - \phi_E \cdot \max(-F_e, 0) - \phi_W \cdot \max(F_w, 0) + \phi_P \cdot \max(-F_w, 0) = \\ & = \Gamma_e \cdot \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta X_{EP}} \right) - \Gamma_w \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta X_{PW}} \right) \end{aligned} \quad (4.139)$$

Rearrmando e aplicando a notação : $D = \frac{\Gamma}{\delta X} \therefore D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta X_{PE}}$

$$\begin{aligned} & [D_w + D_e + \max(-F_w, 0) + \max(F_e, 0)] \phi_P = \\ & = [D_w + \max(F_w, 0)] \phi_W + [D_e + \max(-F_e, 0)] \phi_E \end{aligned} \quad (4.140)$$

$$\text{Na forma padrão: } a_P \cdot \phi_P = a_W \cdot \phi_W + a_E \cdot \phi_E + b \quad (4.141)$$

Onde:

$$a_W = D_w + \max(F_w, 0) \quad (4.142a)$$

$$a_E = D_e + \max(-F_e, 0) \quad (4.142b)$$

$$a_P = D_w + D_e + \max(-F_w, 0) + \max(F_e, 0) \quad (4.142c)$$

$$b = 0 \quad (4.142d)$$

.Caso $F > 0$:

$$a_W = D_w + F_w \quad (4.143a)$$

$$a_E = D_e \quad (4.143b)$$

$$a_P = D_w + D_e + F_e \quad (4.143c)$$

Aplica-se o seguinte artifício:

$$a_P = a_P + F_w - F_w = D_w + D_e + F_e + F_w - F_w \quad (4.144)$$

$$\text{Logo: } a_P = a_W + a_E + \Delta F \quad \therefore \quad \Delta F = (F_e - F_w) \quad (4.145)$$

.Caso $F < 0$:

$$a_W = D_w \quad (4.146a)$$

$$a_E = D_e + F_e \quad (4.146b)$$

$$a_P = D_w + D_e + F_w \quad (4.146c)$$

Aplica-se o seguinte artifício:

$$a_P = a_P + F_e - F_e = D_w + D_e + F_w + F_e - F_e \quad (4.147)$$

$$a_P = a_W + a_E + (F_w - F_e) \quad (4.148)$$

$$\text{Devido o sinal de } F \text{ ser negativo: } a_P = a_W + a_E + (|F_e| - |F_w|) \quad (4.149)$$

Generalizando para qualquer sinal de F :

$$a_P = a_W + a_E + \Delta F \quad \therefore \quad \Delta F = (F_e - F_w) \quad (4.150)$$

O esquema *Upwind* assegura que nenhum dos coeficientes assumam valores negativos, garantindo o realismo físico da solução, caso a convergência seja obtida, e o critério de Scarborough é satisfeito. No entanto, o referido método introduz uma deficiência na acurácia, nas soluções onde o transporte difusivo predomina, pois nestes tipos de problema o artifício de tornar o valor de ϕ na interface igual ao valor da variável nodal a montante não será uma boa aproximação, tendo em vista que o tratamento é fundamentado nos casos onde o transporte convectivo de ϕ era dominante.

4.15.3 “Solução Exata”

A solução exata da equação (4.120) pode ser obtida caso Γ_ϕ seja constante, a análise do resultado será empregada na formulação de novos esquemas de discretização dos termos convectivos. Se o domínio de solução empregado for $0 \leq x \leq L$, com as seguintes condições de fronteira:

$$x = 0 \Rightarrow \phi = \phi_0 \quad (4.151a)$$

$$x = L \Rightarrow \phi = \phi_L \quad (4.151b)$$

A partir da equação da continuidade: $\rho \cdot u = \text{cte}$

$$\rho \cdot u \cdot \frac{d\phi}{dx} - \Gamma \frac{d^2\phi}{dx^2} = 0 \quad \text{se } \Gamma = \Gamma_\phi = \text{cte} \quad (4.152)$$

Adimensionalizando as variáveis:

$$X = \frac{x}{L} \Rightarrow \begin{cases} dx = L.dX & (4.153a) \\ x = 0 \Rightarrow X = 0 & (4.153b) \\ x = L \Rightarrow X = 1,0 & (4.153c) \end{cases}$$

$$\theta = \frac{\phi - \phi_o}{\phi_L - \phi_o} \Rightarrow \begin{cases} \phi - \phi_o = (\phi_L - \phi_o).\theta & (4.154a) \\ d\phi = (\phi_L - \phi_o).d\theta & (4.154b) \\ d^2\phi = (\phi_L - \phi_o).d^2\theta & (4.154c) \\ \phi = \phi_o \Rightarrow \theta = 0 & (4.154d) \\ \phi = \phi_L \Rightarrow \theta = 1,0 & (4.154e) \end{cases}$$

Aplicando tais considerações anteriormente citadas na equação (4.152) e rearrumando:

$$\frac{\rho.u}{\Gamma} . (\phi_L - \phi_o) . \frac{d\theta}{(L.dX)} - (\phi_L - \phi_o) . \frac{d^2\theta}{(L.dX)^2} = 0 \quad (\times L^2) \quad (4.155)$$

$$\frac{\rho.u.L}{\Gamma} . \frac{d\theta}{dX} - \frac{d^2\theta}{dX^2} = 0 \quad (4.156)$$

$$\frac{d^2\theta}{dX^2} - P . \frac{d\theta}{dX} = 0 \quad \therefore \quad P = \frac{\rho.u.L}{\Gamma} \quad (4.157)$$

A expressão anterior, equação (4.157), é uma equação diferencial linear e homogênea de 2ª ordem que apresenta coeficientes constantes. Resolução:

$$K^2 - P.K = 0 \quad (4.158)$$

A equação (4.158) é denominada: Equação Característica da Equação Diferencial, no caso a equação (4.157).

$$K.(K - P) = 0 \Rightarrow \begin{cases} K_1 = 0 & (4.159a) \\ K_2 = P & (4.159b) \end{cases}$$

Os valores K_1 e K_2 são as raízes da equação característica.

$$\text{Daí : } \theta = C_1 \cdot e^{K_1 \cdot X} + C_2 \cdot e^{K_2 \cdot X} = C_1 + C_2 \cdot e^{P \cdot X} \quad (4.160)$$

A equação (4.160) é a solução geral da equação diferencial retratada pela equação (4.157).

Aplicando-se as condições de contorno: $\theta(0) = 0$ e $\theta(1) = 1$, obtém-se as constantes C_1 e C_2

. Após o algebrismo chega-se a :

$$\theta(X) = \frac{\text{EXP}(P \cdot X) - 1}{\text{EXP}(P) - 1} \quad (4.161)$$

Logo:

$$\frac{\phi - \phi_o}{\phi_L - \phi_o} = \frac{\text{EXP}(P \cdot x/L) - 1}{\text{EXP}(P) - 1} \quad (4.162)$$

A equação (4.162) é a solução particular da equação diferencial retratada pela equação

$$(4.157), \text{ onde } P \text{ é número de Peclet : } P = \frac{\rho \cdot u \cdot L}{\Gamma} \quad (4.163)$$

O número de Peclet pode ser interpretado como a razão entre a intensidade do transporte convectivo e a intensidade do transporte difusivo.

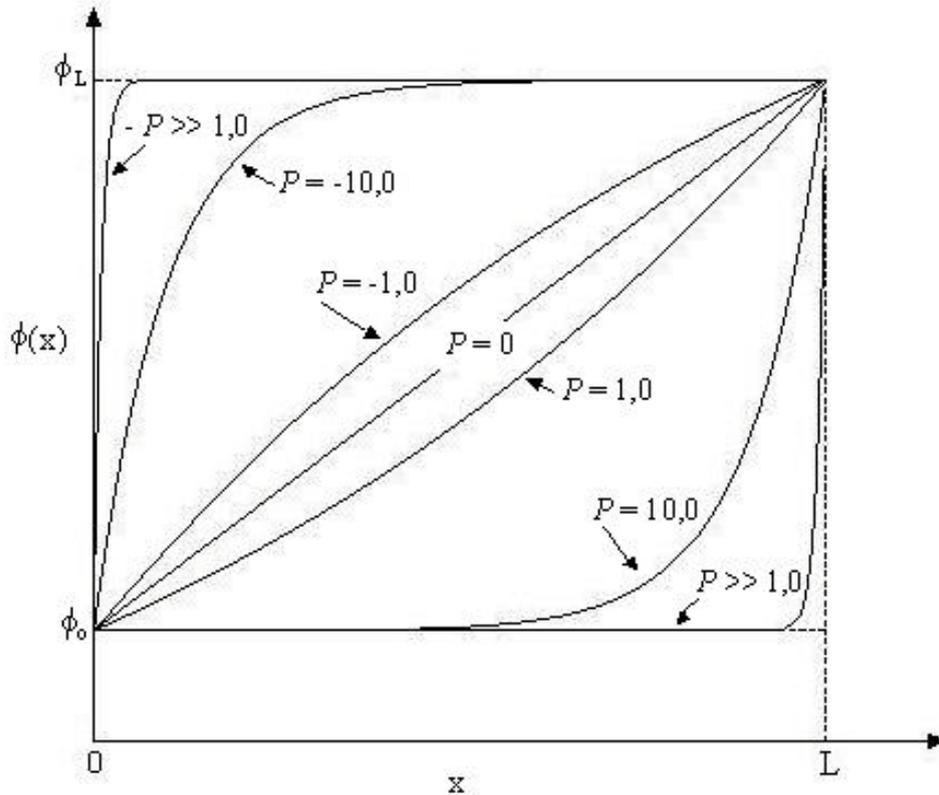


Figura 4.13: Solução exata para o problemas unidimensionais com convecção-difusão e que apresentam $\Gamma_\phi = \text{cte}$. (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 86)

Percebe-se, a partir da figura 4.13, que:

- $P = 0$: problema puramente difusivo a relação $\phi(x)$ é linear.
- $P > 0$: escoamento no sentido positivo do referencial. Caso $P \gg 0$ (o valor de ϕ no domínio de interesse é fortemente influenciado pelo valor a montante: ϕ_0), pois o valor de ϕ sobre maior parte da região de domínio é aproximadamente igual a ϕ_0 .
- $P < 0$: escoamento contrário ao sentido positivo do referencial, ϕ_L torna-se o valor a montante. Caso $P \ll 0$ (a variável ϕ é fortemente influenciada pelo valor a montante: ϕ_L), pois o valor de ϕ sobre maior parte da região de domínio é aproximadamente igual a ϕ_L .

A partir dos gráficos mostrados na figura 4.13, chega-se às seguintes conclusões a respeito das discretizações empregadas anteriormente:

- 1) A discretização empregando perfil linear por partes entre dos pontos nodais da malha só se aproxima do perfil exato para valores pequenos de $|P|$ (onde a relação entre ϕ e x tende a ser linear), logo tal formulação não é satisfatória.
- 2) Quando $|P|$ é grande o valor de ϕ , em $x = L/2$, na interface é aproximadamente igual ao valor no ponto nodal a montante, consideração assumida no desenvolvimento do esquema *Upwind*, no entanto, ela é usada para todos os valores de $|P|$, não apenas para os grandes valores.
- 3) Quando $|P|$ é grande, a derivada $d\phi/dx$, avaliada em $x = L/2$, é aproximadamente zero. Tal fato implica que a difusão é quase ausente. No entanto, o esquema *Upwind* sempre calcula o termo difusivo a partir do perfil linear de ϕ em função de x (aplicando a relação linear), portanto sobrestima a difusão para valores elevados de $|P|$.

A partir das análise e conclusões anteriormente citadas PATANKAR (1980) justifica e explana a obtenção de outros esquemas de discretização para os termos convectivos.

4.15.4 Esquema Exponencial

Visando derivar o esquema exponencial defini-se o fluxo total ($J=J_\phi$) que será a soma do fluxo convectivo ($J_{\text{conv}} = \rho.u.\phi$) com o fluxo difusivo ($J_{\text{difus}} = -\Gamma_\phi.d\phi/dx$) da variável ϕ . Logo:

$$J = J_{\text{conv}} + J_{\text{difus}} = \rho.u.\phi - \Gamma \frac{d\phi}{dx} \quad (4.164)$$

Analisando a equação (4.120):

$$\frac{d(\rho.u.\phi)}{dx} + \frac{d}{dx} \left(-\Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \right) = 0 \quad (4.165)$$

$$\frac{d}{dx} \left[\rho.u.\phi - \Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \right] = 0 \quad (4.166)$$

$$\frac{dJ}{dx} = 0 \quad (4.167) \quad \therefore \quad J = \rho.u.\phi - \Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \quad (4.168), \text{ sendo } u \text{ a componente da velocidade}$$

na direção x .

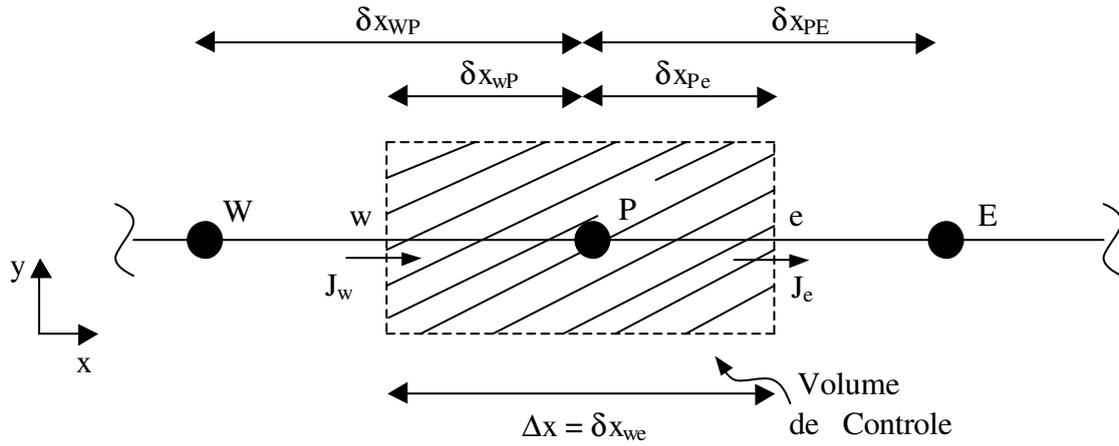


Figura 4.14: Três pontos nodais consecutivos numa malha numérica unidimensional.

Integrando a equação (4.167) no volume de controle mostrado na figura 4.14:

$$J_e - J_w = 0 \quad (4.169)$$

O perfil de ϕ entre P e E, pode ser fornecido pela expressão (4.162) substituindo ϕ_o e ϕ_L por ϕ_P e ϕ_E , respectivamente, e a distância L por δx_{PE} . Com o perfil de ϕ entre P e E obtém-se a expressão para J:

$$\frac{\phi - \phi_P}{\phi_E - \phi_P} = \frac{\text{EXP}(P \cdot x / \delta x_{PE}) - 1}{\text{EXP}(P) - 1} \quad (4.170)$$

$$\phi(x) = (\phi_E - \phi_P) \cdot \frac{\text{EXP}(P \cdot x / \delta x_{PE}) - 1}{\text{EXP}(P) - 1} + \phi_P \quad (4.171)$$

$$\frac{d\phi}{dx} = (\phi_E - \phi_P) \left[\frac{\text{EXP}(P \cdot x / \delta x_{PE})}{\text{EXP}(P) - 1} \right] \cdot \frac{P}{\delta x_{PE}} \quad (4.172)$$

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_e = (\phi_E - \phi_P) \left[\frac{\text{EXP}(P_e \cdot \delta x_{Pe} / \delta x_{PE})}{\text{EXP}(P_e) - 1} \right] \cdot \frac{P_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.173) \quad \therefore \quad P_e = \frac{\rho \cdot u_e \cdot \delta x_{PE}}{\Gamma} \quad (4.174)$$

Logo:

$$J_e = \rho \cdot u_e \cdot \phi_e - \Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_e \quad (4.175)$$

$$J_e = \rho \cdot u_e \left\{ (\phi_E - \phi_P) \left[\frac{\text{EXP}(P_e \cdot \delta x_{Pe} / 2 \cdot \delta x_{Pe}) - 1}{\text{EXP}(P_e) - 1} + \phi_P \right] \right\} - \Gamma \cdot (\phi_E - \phi_P) \cdot \frac{P_e}{\delta x_{Pe}} \left[\frac{\text{EXP}(P_e \cdot \delta x_{Pe} / 2 \cdot \delta x_{Pe})}{\text{EXP}(P_e) - 1} \right] \quad (4.176)$$

$$J_e = \rho \cdot u_e \left\{ (\phi_E - \phi_P) \left[\frac{\text{EXP}(P_e / 2) - 1}{\text{EXP}(P_e) - 1} + \phi_P \right] \right\} - \Gamma \cdot (\phi_E - \phi_P) \cdot \frac{\rho \cdot u_e \cdot \delta x_{Pe}}{\Gamma} \frac{1}{\delta x_{Pe}} \left[\frac{\text{EXP}(P_e / 2)}{\text{EXP}(P_e) - 1} \right] \quad (4.177)$$

$$J_e = \rho \cdot u_e \left\{ \phi_P + (\phi_E - \phi_P) \left[\frac{\text{EXP}(P_e / 2) - 1 - \text{EXP}(P_e / 2)}{\text{EXP}(P_e) - 1} \right] \right\} \quad (4.178)$$

$$J_e = \rho \cdot u_e \left\{ \phi_P + (\phi_E - \phi_P) \left[\frac{-1}{\text{EXP}(P_e) - 1} \right] \right\} \quad (4.179)$$

Como $F_e = \rho \cdot u_e$ (4.180) e $D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{Pe}}$ (4.181)

$$J_e = F_e \cdot \left\{ \phi_P + \left[\frac{\phi_P - \phi_E}{\text{EXP}(P_e) - 1} \right] \right\} \quad (4.182)$$

Por analogia:

$$J_w = F_w \cdot \left\{ \phi_W + \left[\frac{\phi_W - \phi_P}{\text{EXP}(P_w) - 1} \right] \right\} \quad (4.183)$$

O número de Peclet na interface P_e pode ser expresso da seguinte forma:

$$P_e = \frac{\rho \cdot u_e \cdot \delta x_{Pe}}{\Gamma_e} = \frac{F_e}{D_e} \quad (4.184)$$

Substituindo as equações (4.182) e (4.183) na equação (4.169):

$$F_e \cdot \left\{ \phi_P + \left[\frac{\phi_P - \phi_E}{\text{EXP}(P_e) - 1} \right] \right\} - F_w \cdot \left\{ \phi_W + \left[\frac{\phi_W - \phi_P}{\text{EXP}(P_w) - 1} \right] \right\} = 0 \quad (4.185)$$

Desenvolvendo a expressão anterior:

$$\left[F_e + \frac{F_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} + \frac{F_w}{\text{EXP}(P_w) - 1} \right] \cdot \phi_P = \left[\frac{F_w \cdot \text{EXP}(P_w)}{\text{EXP}(P_w) - 1} \right] \cdot \phi_W + \left[\frac{F_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} \right] \cdot \phi_E \quad (4.186)$$

$$\text{Na forma padrão: } a_p \cdot \phi_P = a_w \cdot \phi_W + a_E \cdot \phi_E + b \quad (4.187)$$

Onde :

$$a_w = \frac{F_w \cdot \text{EXP}(P_w)}{\text{EXP}(P_w) - 1} \quad (4.188a)$$

$$a_E = \frac{F_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} \quad (4.188b)$$

$$a_p = F_e + \frac{F_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} + \frac{F_w}{\text{EXP}(P_w) - 1} \quad (4.188c)$$

$$b = 0 \quad (4.188d)$$

Aplica-se o seguinte artifício:

$$a_p = a_p + F_w - F_w = F_e + \frac{F_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} + \frac{F_w}{\text{EXP}(P_w) - 1} + F_w - F_w \quad (4.189)$$

$$a_p = a_p + F_w - F_w = F_e + \frac{F_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} + \left[\frac{1}{\text{EXP}(P_w) - 1} + 1 \right] F_w - F_w \quad (4.190)$$

$$a_p = F_e + \frac{F_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} + \frac{F_w \cdot \text{EXP}(P_w)}{\text{EXP}(P_w) - 1} - F_w \quad (4.191)$$

$$\text{Logo: } a_p = a_w + a_E + \Delta F \quad \therefore \quad \Delta F = (F_e - F_w) \quad (4.192)$$

Os coeficientes obtidos anteriormente encerram as considerações que definem o Esquema Exponencial. Quando aplicado a um problema 1D, estacionário e sem termo fonte, o referido esquema produz a solução exata para quaisquer valores do número de Peclet e para qualquer número de pontos nodais. Apesar de tais características serem almejadas, tal esquema não é largamente usado devido as seguintes razões:

- 1) A presença de funções exponenciais implicam num grande esforço computacional.
- 2) O esquema é não exato para problemas 2D, 3D ou com termos fontes, sem falar que um esforço computacional extra devido a presença de funções exponenciais não é justificado.

Na verdade um esquema de discretização do termos convectivos deve ter como características: não implicar em grande esforço computacional e descrever qualitativamente o esquema Exponencial. Dois esquemas que encerram, em seu bojo, tais característica são:

.Esquema Híbrido

.Esquema *Power-Law*

4.15.5 Esquema Híbrido

O Esquema Híbrido pode ser visto como um derivação do esquema Exponencial, sendo os mesmos correlacionados a partir do gráfico do coeficiente a_E , numa forma adimensional a_E/D_e , em função do número de Peclet:

$$a_E = \frac{F_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} \times \frac{1}{D_e} \quad \Rightarrow \quad \frac{a_E}{D_e} = \frac{P_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} = f(P_e) \quad (193)$$

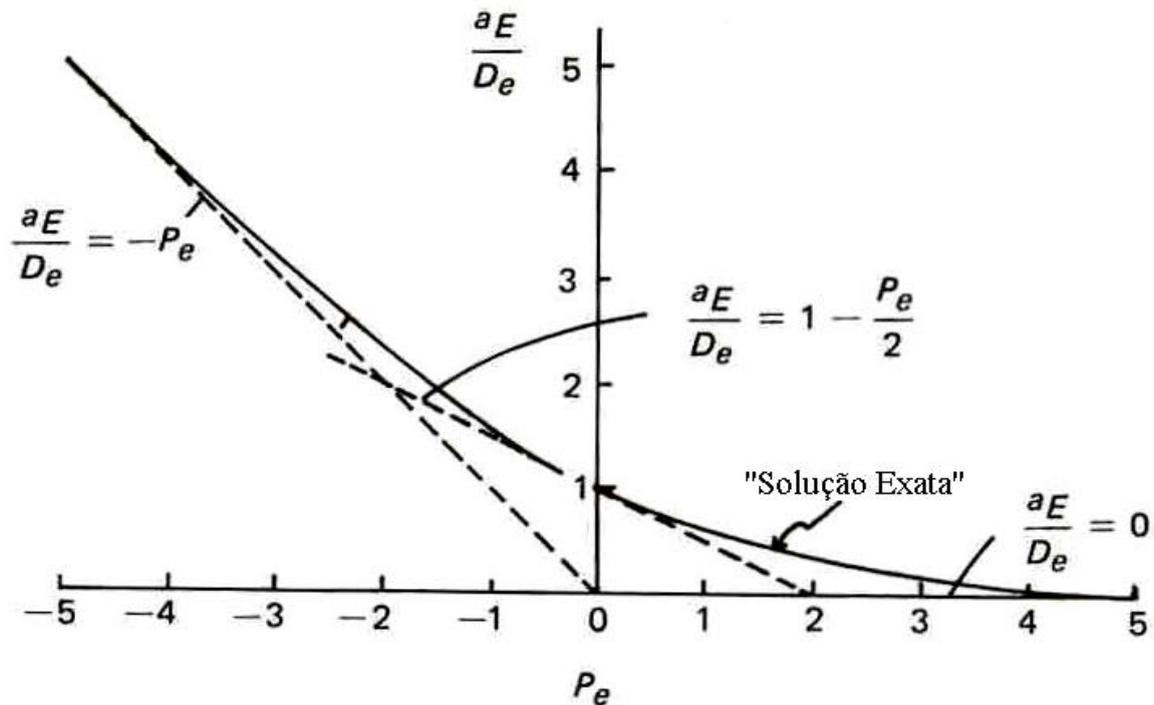


Figura 4.15: Variação do coeficiente a_E , numa forma adimensional (a_E/D_e) com o número de Peclet. (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 89)

Para valores positivos de P_e , o ponto nodal E está a jusante do ponto nodal P (ponto nodal genérico onde se está calculando o valor da variável ϕ), e sua influência no valor do fluxo J_ϕ na interface “e” diminui com o aumento de P_e . Quando P_e é negativo, o ponto nodal E é um vizinho a montante do ponto nodal P, logo sua influência é significativa no valor de J_ϕ na interface “e”:

1) Para $P_e \rightarrow \infty$:

$$\lim_{P_e \rightarrow \infty} \frac{a_E}{D_e} = \lim_{P_e \rightarrow \infty} \frac{P_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} = \frac{\infty}{\infty} \quad (4.194)$$

Aplicando a Regra de L'Hospital:

$$\text{Se } \lim_{P_e \rightarrow \infty} \frac{g(P_e)}{h(P_e)} = \frac{\infty}{\infty} \Rightarrow \lim_{P_e \rightarrow \infty} \frac{g(P_e)}{h(P_e)} = \lim_{P_e \rightarrow \infty} \frac{g'(P_e)}{h'(P_e)}$$

Então:

$$\lim_{P_e \rightarrow \infty} \frac{a_E}{D_e} = \lim_{P_e \rightarrow \infty} \frac{1}{\text{EXP}(P_e)} = 0 \quad (4.195)$$

Logo, o valor de ϕ_P não será fortemente influenciado pelo valor ϕ_E .

2) Para $P_e \rightarrow -\infty$:

$$\lim_{P_e \rightarrow -\infty} \frac{a_E}{D_e} = \lim_{P_e \rightarrow -\infty} \frac{P_e}{\text{EXP}(P_e) - 1} = \frac{\lim_{P_e \rightarrow -\infty} P_e}{\lim_{P_e \rightarrow -\infty} [\text{EXP}(P_e) - 1]} = \lim_{P_e \rightarrow -\infty} \frac{P_e}{(-1)} \quad (4.196)$$

Então:

$$\lim_{P_e \rightarrow -\infty} \frac{a_E}{D_e} = \lim_{P_e \rightarrow -\infty} (-P_e) \quad (4.197)$$

$$\text{Como consequência: } \frac{a_E}{D_e} \rightarrow +\infty \quad (4.198)$$

Logo, o valor de ϕ_P será fortemente influenciado pelo valor ϕ_E .

3) $P_e = 0$:

$$\frac{a_E}{D_e} = 1 - \frac{P_e}{2} \quad (4.199)$$

As 3 retas na figura 4.15 representam os casos limites , anteriormente demonstrados, que formam um envelope que representa uma razoável aproximação da curva exata. O Esquema Híbrido pode ser obtido a partir da expressão das 3 retas citadas:

$$\text{.Para } P_e < -2 : \quad \frac{a_E}{D_e} = -P_e \quad (4.200)$$

$$\text{.Para } -2 \leq P_e \leq 2 : \quad \frac{a_E}{D_e} = 1 - \frac{P_e}{2} \quad (4.201)$$

$$\text{.Para } P_e > 2 : \quad \frac{a_E}{D_e} = 0 \quad (4.202)$$

As equações acima podem ser combinadas e expressas numa forma mais compacta:

$$a_E = D_e \cdot \max\left(-P_e, 1 - \frac{P_e}{2}, 0\right) \quad (4.203)$$

$$\text{ou } a_E = \max\left(-F_e, D_e - \frac{F_e}{2}, 0\right) \quad (4.204)$$

Comentários:

- 1) O Esquema Híbrido é idêntico ao Esquema de Diferenças-Centrais (o qual assume perfil linear por partes) para a seguinte variação do número de Peclet: $-2 \leq P_e \leq 2$
- 2) Fora da variação $-2 \leq P_e \leq 2$, o Esquema Híbrido se reduz ao Esquema *Upwind* no qual a difusão foi igualada a zero. Portanto, as deficiências do Esquema *Upwind*, citadas anteriormente, não são compartilhadas pelo Esquema Híbrido.
- 3) O nome Híbrido indica a combinação do Esquema de Diferenças-Centrais e o Esquema *Upwind*, no entanto o esquema Híbrido pode ser visto como 3 aproximações lineares da curva exata mostrada na figura 4.15.

A equação diferencial parcial com termos convectivos e difusivos (sem a presença do termo fonte) discretizada empregando o esquema Híbrido resulta no seguinte conjunto de equações algébricas lineares:

$$\text{Na forma padrão: } a_P \cdot \phi_P = a_W \cdot \phi_W + a_E \cdot \phi_E + b \quad (4.205)$$

Onde :

$$a_E = \max\left(-F_e, D_e - \frac{F_e}{2}, 0\right) \quad (4.206a)$$

$$a_W = \max\left(F_w, D_w + \frac{F_w}{2}, 0\right) \quad (4.206b)$$

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (4.206c)$$

$$b = 0 \quad (4.206d)$$

A formulação acima mostrada é válida qualquer localização arbitrária da interface entre os pontos nodais e não somente ao caso onde a interface situa-se no meio da distância entre os pontos nodais.

O Esquema *Power-Law* não será comentado devido ao fato do mesmo não ter seu emprego citado na literatura referente a aplicação do Método dos Volumes Finitos em simulações da fluidodinâmica (em 3D) de reatores dos tipos: *Column Bubble* e *Air-Lift*. No

entanto, PATANKAR (1980) explica a obtenção do esquema *Power-Law* e justifica sua aplicação. VERSTEEG e MALALASEKERA (1995) comentam a aplicação do referido esquema, em detrimento do Esquema Híbrido, em alguns dos códigos comerciais de *CFD* disponíveis no mercado, como por exemplo o FLUENT versão 4.22.

4.15.6 Formulação Generalizada

Considera-se a possibilidade de aplicação de um dos vários esquemas de discretização aplicáveis aos termos convectivos, fornecendo uma melhor compreensão da formulação de problemas difusivos-convectivos. Leva-se em conta dois pontos nodais “i” e “i+1” separados por uma distância δ , como mostrado na figura abaixo:

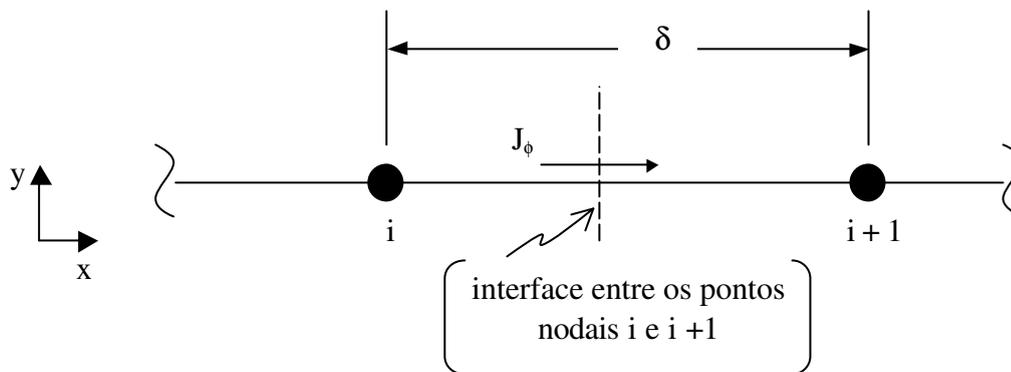


Figura 4.16: Fluxo total J_ϕ entre 2 pontos nodais (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 92)

Sabe-se que para o caso 1D, sem termos fonte e com Γ_ϕ constante, o fluxo total da variável ϕ na interface ($J_\phi = J$) é fornecido pela equação (4.168):

$$J = \rho \cdot u \cdot \phi - \Gamma \frac{d\phi}{dx} \quad \times \quad \frac{\delta}{\Gamma} \quad (4.207)$$

$$J^* = \frac{\rho \cdot u \cdot \delta}{\Gamma} \cdot \phi - \frac{d\phi}{d(x/\delta)} \quad (4.208)$$

$$J^* = P \cdot \phi - \frac{d\phi}{d(x/\delta)} \quad \therefore \quad P = \frac{\rho \cdot u \cdot \delta}{\Gamma} \quad (4.209)$$

Considera-se ϕ na interface como sendo uma média ponderada de ϕ_i e ϕ_{i+1} , enquanto o gradiente $d\phi/d(x/\delta)$ é avaliado como sendo um múltiplo da diferença $\phi_i - \phi_{i+1}$:

$$\phi = \alpha \cdot \phi_i + (1 - \alpha) \cdot \phi_{i+1} \quad (\text{Na interface}) \quad (4.210)$$

$$\frac{d\phi}{d(x/\delta)} = \beta \cdot (\phi_i - \phi_{i+1}) \quad (\text{Na interface}) \quad (4.211)$$

Onde α e β são coeficientes adimensionais que dependem de P . Deste modo J^* pode ser expresso da seguinte forma:

$$J^* = P \cdot [\alpha \cdot \phi_i + (1 - \alpha) \cdot \phi_{i+1}] - \beta \cdot (\phi_i - \phi_{i+1}) \quad (4.212)$$

Rearranjando:

$$J^* = [P \cdot \alpha + \beta] \cdot \phi_i - [P \cdot \alpha + \beta - P] \cdot \phi_{i+1} = B \cdot \phi_i - A \cdot \phi_{i+1} \quad (4.213)$$

Onde: $A = B - P$, sendo $A(P) = g_1(\alpha(P), \beta(P))$ e $B(P) = g_2(\alpha(P), \beta(P))$

O coeficiente A está associado ao ponto nodal “i+1”, situado a frente da interface, enquanto B está associado ao ponto nodal “i”, situado atrás da interface. Os referidos coeficientes apresentam propriedades que permitem avaliar qualitativamente a dependência dos mesmos com o número de Peclet:

1) Se ϕ_i e ϕ_{i+1} são iguais o fluxo difusivo deve ser zero e J^* apresentará somente a contribuição devido ao fluxo convectivo ($\rho \cdot u \cdot \phi$). Nestas condições:

. Nestas condições:

$$J^* = P \cdot \phi_i = P \cdot \phi_{i+1} = B \cdot \phi_i - A \cdot \phi_i \quad \Rightarrow \quad B - A = P \quad (4.214)$$

2) Há uma espécie de simetria entre A e B , pois se invertermos o sentido do eixo coordenado, P aparecerá como $-P$, percebe-se que A e B serão trocados. Logo as funções $A = A(P)$ e $B = B(P)$ devem ser tais que:

$$A(-P) = B(P) \quad (4.215) \quad \text{e} \quad B(-P) = A(P) \quad (4.216)$$

A variação exata de $A(P)$ e $B(P)$ com o número de Peclet, pode ser obtida a partir da expressão de J_ϕ resultante do Esquema Exponencial. O comportamento de A e B com o P é mostrado na figura 4.17:

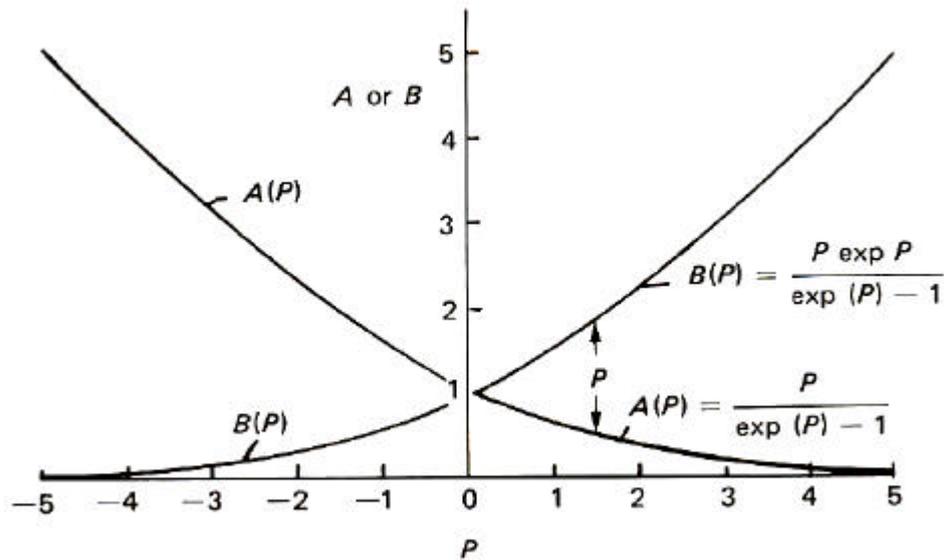


Figura 4.17: Variação de A e B com o número de Peclet. (Fonte: PATANKAR, 1980, pág. 93)

A partir das propriedades de A e B, anteriormente citadas, conclui-se que as curvas resultantes das funções $A = A(P)$ e $B = B(P)$ exibem simetria em torno do eixo $P = 0$, e a distância vertical entre as referidas curvas é igual a P . Tais características possibilitam que as funções $A(P)$ e $B(P)$ possam ser especificadas em termos de $A(P)$ para valores positivos de P :

$$A(P) = B(P) - P = A(-P) - P \quad (4.217)$$

$$\text{Logo, se } P < 0: A(P) = A(|P|) - P \quad (4.218)$$

No entanto, para valores de P positivos e negativos, podemos aplicar a seguinte expressão:

$$A(P) = A(|P|) + \max(-P, 0) \quad (4.219)$$

Aplicando a equação (4.218) na equação (4.213):

$$B(P) = A(|P|) + \max(-P, 0) + P \quad (4.220)$$

$$1) P < 0 \Rightarrow B(P) = A(|P|) - P + P = A(|P|) \quad (4.221)$$

$$2) P > 0 \Rightarrow B(P) = A(|P|) + 0 + P = A(|P|) + P \quad (4.222)$$

Percebe-se que a expressão $B(P)$ pode ser escrita numa forma mais compacta:

$$B(P) = A(|P|) + \max(P, 0) \quad (4.223)$$

Aplicando a relação $B = A + P$ na equação (4.213) chega-se a $J^* = h_1(A, \phi_i, \phi_{i+1})$ e $J^* = h_2(B, \phi_i, \phi_{i+1})$:

$$J^* - P \cdot \phi_i = A(\phi_i - \phi_{i+1}) \quad (4.224) \quad \text{e} \quad J^* - P \cdot \phi_{i+1} = B(\phi_i - \phi_{i+1}) \quad (4.225)$$

Emprega-se a equação (4.213) para avaliar os fluxos nas interfaces “e” e “w”:

$$J_e - J_w = 0 \quad (4.226)$$

$$D_e \cdot J_e^* - D_w \cdot J_w^* = 0 \quad (4.227)$$

$$\text{Sendo: } D_e = \frac{\Gamma_e \cdot A_e}{\delta x_{PE}} \quad \text{e} \quad D_w = \frac{\Gamma_w \cdot A_w}{\delta x_{WP}}$$

Onde, $A_e = (A_{nx})_e$ e $A_w = (A_{nx})_w$, para o problemas em 1D : $A_e = 1,0$ e $A_w = 1,0$. Logo:

$$D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} \quad \text{e} \quad D_w = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}}$$

Aplicando as definições de J^* , equações (4.208) e (4.209):

$$D_e \cdot [B(P_e) \cdot \phi_P - A(P_e) \cdot \phi_E] - D_w \cdot [B(P_w) \cdot \phi_W - A(P_w) \cdot \phi_P] = 0 \quad (4.228)$$

$$[D_e \cdot B(P_e) + D_w \cdot A(P_w)] \cdot \phi_P = D_w \cdot B(P_w) \cdot \phi_W + D_e \cdot A(P_e) \cdot \phi_E \quad (4.229)$$

Substituindo as equações (4.219) e (4.220) na equação (4.229):

$$\begin{aligned} & \{D_w \cdot [A(|P_w|) + \max(P_w, 0)] + D_e \cdot [A(|P_e|) + \max(P_e, 0)]\} \phi_P = \\ & = D_w \cdot [A(|P_w|) + \max(P_w, 0)] \phi_W + D_e \cdot [A(|P_e|) + \max(P_e, 0)] \phi_E \end{aligned} \quad (4.230)$$

$$\text{Sabe-se que: } P_e = \frac{F_e}{D_e} \quad (4.231)$$

$$\text{Na forma padrão: } a_P \cdot \phi_P = a_W \cdot \phi_W + a_E \cdot \phi_E + b \quad (4.232)$$

Onde :

$$a_W = D_w \cdot A(|P_w|) + \max(F_w, 0) \quad (4.233a)$$

$$a_E = D_e \cdot A(|P_e|) + \max(-F_e, 0) \quad (4.233b)$$

$$a_p = D_w \cdot A(|P_w|) + \max(-F_w, 0) + D_e \cdot A(|P_e|) + \max(F_e, 0) \quad (4.233c)$$

$$b = 0 \quad (4.233d)$$

$$1) \text{ Se } P > 0: \quad a_w = D_w \cdot A(|P_w|) + F_w \quad (4.234a)$$

$$a_e = D_e \cdot A(|P_e|) \quad (4.234b)$$

$$a_p = D_w \cdot A(|P_w|) + D_e \cdot A(|P_e|) + F_e \quad (4.234c)$$

$$b = 0 \quad (4.234d)$$

Aplica-se o seguinte artifício:

$$a_p = a_p + F_w - F_w = D_w \cdot A(|P_w|) + D_e \cdot A(|P_e|) + F_e + F_w - F_w \quad (4.235)$$

$$a_p = D_w \cdot A(|P_w|) + F_w + D_e \cdot A(|P_e|) + (F_e - F_w) = a_w + a_e + (F_e - F_w) \quad (4.236)$$

$$\text{Logo: } a_p = a_w + a_e + \Delta F \quad \therefore \quad \Delta F = (F_e - F_w) \quad (4.237)$$

$$2) P < 0: \quad a_w = D_w \cdot A(|P_w|) \quad (4.238a)$$

$$a_e = D_e \cdot A(|P_e|) - F_e \quad (4.238b)$$

$$a_p = D_w \cdot A(|P_w|) + D_e \cdot A(|P_e|) - F_w \quad (4.238c)$$

$$b = 0 \quad (4.238d)$$

Aplica-se o seguinte artifício:

$$a_p = a_p + F_e - F_e = D_w \cdot A(|P_w|) + D_e \cdot A(|P_e|) - F_w + F_e - F_e \quad (4.239)$$

$$a_p = D_w \cdot A(|P_w|) + D_e \cdot A(|P_e|) - F_e + (F_e - F_w) = a_w + a_e + (F_e - F_w) \quad (4.240)$$

$$\text{Logo: } a_p = a_w + a_e + \Delta F \quad \therefore \quad \Delta F = (F_e - F_w) \quad (4.241)$$

Os vários esquemas passíveis de serem empregados na discretização do termo convectivo podem ser tratados de modo generalizado pela adequada escolha da função

$A(|P|)$. Expressões para $A(|P|)$ associadas aos esquemas comentados anteriormente são mostradas na tabela abaixo:

Tabela 4.2: Expressões para a função $A(|P|)$ para os diferentes esquemas de discretização empregados nos termos convectivos.

Esquema	Fórmula para $A(P)$
Diferenças-Centraís	$1-0.5 P $
<i>Upwind</i>	1
Híbrido	$\max(0,1-0.5 P)$
<i>Power Low</i>	$\max\left(0,(1-0.1 P)^5\right)$
Exponencial (“Exata”)	$\frac{ P }{\{\text{EXP}(P)-1\}}$

Fonte: adaptada a partir de PATANKAR (1980), pág. 95.

A discrepância de cada esquema de discretização do termo convectivo, diferentes expressões de $A(|P|)$, podem ser analisadas através da comparação com a solução exata, como mostrado na figura 4.18:

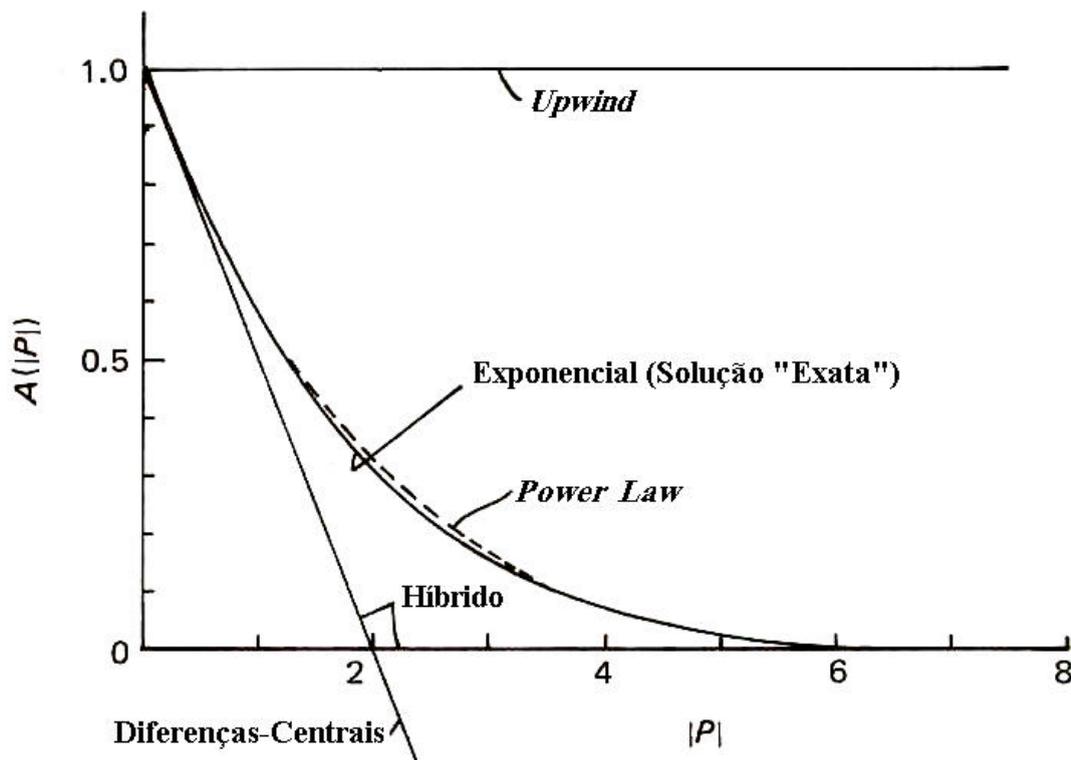


Figura 4.18 : Função $A(|P|)$ para vários esquemas de discretização dos termos convectivos. (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 95)

Vale ressaltar que dos vários esquemas de discretização empregados nos termos convectivos, somente o Esquema de Diferenças-Centrais pode fornecer resultados desprovidos de realismo físico. No entanto, desde que o número de Peclet na malha constitui um parâmetro decisivo na escolha do esquema numérico empregado nos termos convectivos, em princípio é possível refinar a malha (isto é, diminuir δx e δy) de modo que P seja pequeno o suficiente ($P < 2$) o que acarretaria a característica de realismo físico nas soluções obtidas empregando o Esquema de Diferenças-Centrais. No entanto, este estratagema exige malhas excessivamente refinadas, as quais não são possíveis de serem empregadas tendo em vista o excessivo esforço computacional associado às mesmas, logo deve-se buscar esquemas de discretização que forneçam soluções dotadas de realismo físico até mesmo nos casos onde malhas “grosseiras” sejam aplicadas.

4.16 Derivação da equação discretizada em 2D para problemas difusivos-convectivos

Nos problemas que apresentam difusão e convecção, há o transporte da variável dependente ϕ devido ao movimento global de um fluido (convecção), logo a Equação da Continuidade (expressão que retrata a exigência global da conservação da massa) bem como a Equação da Quantidade de Movimento (que retrata a 2ª Lei de Newton do Movimento aplicada aos meios contínuos) devem ser satisfeitas (INCROPERA, 1992). Por conseqüência, o campo vetorial de velocidade e o campo escalar da massa específica (campo de escoamento : $\vec{v}(x,y,z)$ mais $\rho(x,y,z)$) que satisfazem a Equação da Quantidade de Movimento deverão satisfazer a Equação da Continuidade.

Na situação unidimensional, vista anteriormente , a_p torna-se $a_w + a_e$ somente quando a Equação da Continuidade for satisfeita, pois do contrário ($\Delta F = F_e - F_w \neq 0$). Neste caso, a Regra Básica 4 :que diz respeito a soma dos coeficientes dos pontos nodais vizinhos; será satisfeita, somente quando considera-se a Equação da Continuidade na derivação das equações algébricas.

Na derivação empregar-se-á a seguinte forma da Equação Geral de Transporte em 2 dimensões:

$$\frac{\partial(\rho.\phi)}{\partial t} + \left[\frac{\partial J_x}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] + \left[\frac{\partial J_y}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] = S_\phi \quad (4.242)$$

$$\frac{\partial(\rho.\phi)}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} = S_\phi \quad (4.243)$$

Onde J_x e J_y são os fluxos totais (difusão mais convecção) nas direções x e y , respectivamente. Como J_x já foi definido pela equação (4.168), obtém-se J_y por analogia:

$$J_y = \rho.v.\phi - \Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dy} \quad (4.244) , \text{ sendo "v" a componente da velocidade na direção } y.$$

Integra-se a equação (4.244) considerando os limites de integração delimitados pelo volume de controle mostrado na figura 4.19:

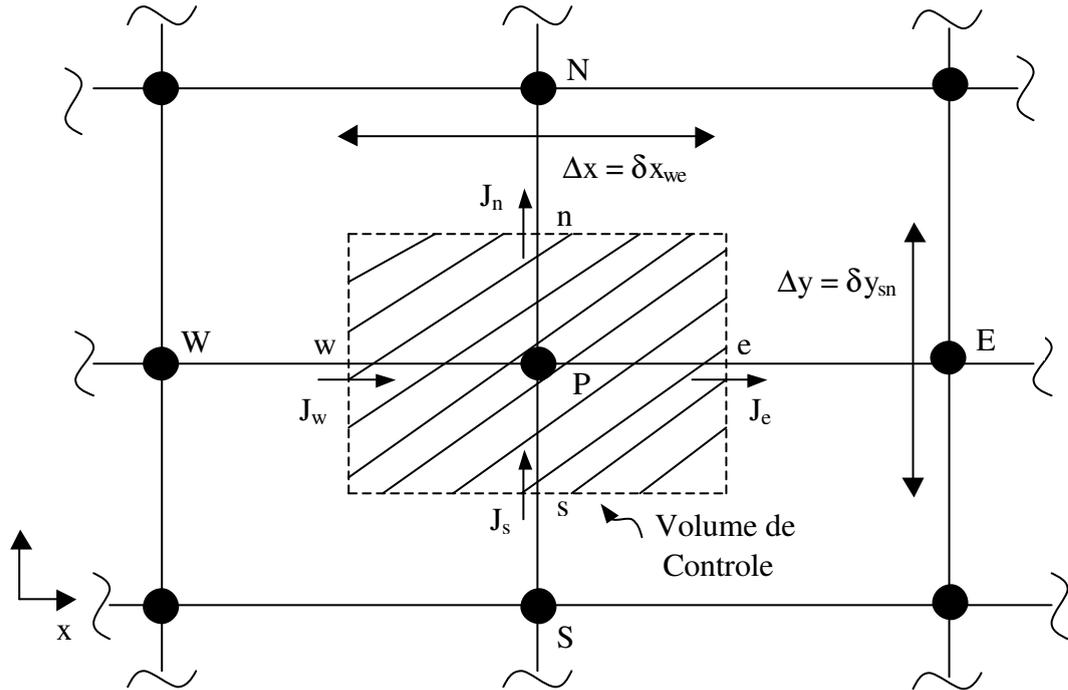


Figura 4.19: Volume de Controle Finito para uma configuração bidimensional, retratando os fluxos totais da variável dependente ϕ nas interfaces.

$$\int_{V.C.} \left[\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} .dt \right] .dV = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial J_x}{\partial x} .dV \right] .dt + \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial J_y}{\partial y} .dV \right] .dt + \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} S_\phi .dV \right] .dt \quad (4.245)$$

Como o termo transiente e o termo fonte já foram tratados anteriormente concentra-se as atenções nos termos referentes ao fluxo total da variável ϕ :

$dV = dx.dy.dz$, para problemas em 2D : $dV = dx.dy.1,0 = dx.dy$

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial J_x}{\partial x} .dV \right] .dt &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial J_x}{\partial x} .dx.dy.1,0 \right] .dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\iint_{A_{nx}} \int_w^e \frac{\partial J_x}{\partial x} .dy.1,0 \right] .dt = \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \iint_{A_{nx}} [(J_x)_e - (J_x)_w] dA \right\} .dt \end{aligned} \quad (4.246)$$

Onde: A_{nx} : área normal à direção x.

$(J_x)_w$: fluxo total da variável ϕ na direção x atravessando a interface “w”.

$(J_x)_e$: fluxo total da variável ϕ na direção x atravessando a interface “e”.

Defini-se: $J_e = \iint_{A_{nx}} (J_x)_e \cdot dA$ (4.247), sendo J_e o fluxo global da variável ϕ na interface

“e”, e considera-se o mesmo constante na referida interface. Logo:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial J_x}{\partial x} \cdot dV \right] \cdot dt = \int_t^{t+\Delta t} [J_e - J_w] dt = [J_e - J_w] \Delta t \quad (4.248)$$

Por analogia:
$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial J_y}{\partial y} \cdot dV \right] \cdot dt = [J_n - J_s] \Delta t \quad (4.249)$$

Assume-se que ρ_p e ϕ_p são uniformes na volume de controle, sendo o valores referente ao tempo $t + \Delta t$; os valores antigos são denotados por ρ_p^o e ϕ_p^o . Aplica-se o esquema Totalmente Implícito na discretização do termo transiente, conforme comentado anteriormente. Aplicando as equações (4.248) e (4.249) na equação (4.245):

$$\frac{(\rho_p \cdot \phi_p - \rho_p^o \cdot \phi_p^o) \cdot \Delta x \cdot \Delta y}{\Delta t} + J_e - J_w + J_n - J_s = (S_c + S_p \cdot \phi_p) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (4.250)$$

A equação da continuidade na forma integrada pode ser obtida a partir da equação (4.1) (Equação Geral de Transporte) na forma integrada, considerando $\phi = 1$, $S_\phi = 0$ e $\Gamma_\phi = 0$ na ,portanto só será explanada a integração do termo convectivo:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial J_x}{\partial x} \cdot dV \right] \cdot dt &= \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \iint_{A_{nx}} [(J_x)_e - (J_x)_w] \cdot dy \cdot 1 \cdot 0 \right\} \cdot dt = \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \iint_{A_{nx}} \left[\left(\rho \cdot u \cdot \phi - \Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\rho \cdot u \cdot \phi - \Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dx} \right)_w \right] \cdot dA \right\} \cdot dt = \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \iint_{A_{nx}} [(\rho \cdot u)_e - (\rho \cdot u)_w] \cdot dA \right\} \cdot dt = \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \iint_{A_{nx}} [(F_x)_e - (F_x)_w] \cdot dA \right\} \cdot dt \end{aligned} \quad (4.251)$$

Onde: $(F_x)_w$ é fluxo de massa na direção x através da interface “

$(F_x)_e$ é fluxo de massa na direção x através da interface “e”.

Defini-se: $F_e = \iint_{A_{nx}} (F_x)_e \cdot dA$ (4.252), sendo F_e a taxa global mássica na interface “e”, e

considera-se a mesma constante na referida interface. Logo:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \iint_{A_{nx}} [(F_x)_e - (F_x)_w] dA \right\} = \int_t^{t+\Delta t} [F_e - F_w] \cdot dt = [F_e - F_w] \Delta t \quad (4.253)$$

Por analogia:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{V.C.} \frac{\partial J_y}{\partial y} \cdot dV \right] \cdot dt &= \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \iint_{A_{ny}} [(\rho \cdot v)_n - (\rho \cdot v)_s] \cdot dx \cdot 1,0 \right\} \cdot dt = \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \iint_{A_{ny}} [(F_y)_n - (F_y)_s] \cdot dA \right\} = [F_n - F_s] \Delta t \end{aligned} \quad (4.254)$$

Aplicando-se as equações (4.253) e (4.254) na Equação Geral de Transporte na forma integrada e após as devidas considerações, chega-se a Equação da Continuidade na forma integrada:

$$\frac{(\rho_p - \rho^o_p) \cdot \Delta x \cdot \Delta y}{\Delta t} + F_e - F_w + F_n - F_s = 0 \quad (4.255)$$

Multiplica-se a equação (4.255) por ϕ_p e em seguida subtrai-se da equação (4.250), de modo a obter a seguinte expressão que encerra informações sobre a Equação Geral de Transporte na e a Equação da Continuidade, ambas na forma integrada:

$$\begin{aligned} (\phi_p - \phi^o_p) \cdot \frac{\rho^o_p \cdot \Delta x \cdot \Delta y}{\Delta t} + (J_e - F_e \cdot \phi_p) - (J_w - F_w \cdot \phi_p) + (J_n - F_n \cdot \phi_p) - \\ - (J_s - F_s \cdot \phi_p) = (S_c + S_p \cdot \phi_p) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \end{aligned} \quad (4.256)$$

Avalia-se os termos $(J - F \cdot \phi_p)$ empregando-se as equações (4.224) e (4.225) com uma pequena modificação:

$$J^* - P \cdot \phi_i = A(P) (\phi_i - \phi_{i+1}) \quad \times \quad D \quad (4.257)$$

$$J^* - P \cdot \phi_{i+1} = B(P) (\phi_i - \phi_{i+1}) \quad \times \quad D \quad (4.258)$$

Resultando nas seguintes expressões:

$$J - F \cdot \phi_i = D \cdot A(P) (\phi_i - \phi_{i+1}) \quad (4.259)$$

$$J - F \cdot \phi_{i+1} = D \cdot B(P) (\phi_i - \phi_{i+1}) \quad (4.260)$$

Logo:

$$J_w - F_w \cdot \phi_P = D_w \cdot B(P_w) (\phi_w - \phi_P) = a_w \cdot (\phi_w - \phi_P) \quad (4.261)$$

$$J_e - F_e \cdot \phi_P = D_e \cdot A(P_e) (\phi_P - \phi_E) = a_E \cdot (\phi_P - \phi_E) \quad (4.262)$$

$$J_s - F_s \cdot \phi_P = D_s \cdot B(P_s) (\phi_S - \phi_P) = a_S \cdot (\phi_S - \phi_P) \quad (4.263)$$

$$J_n - F_n \cdot \phi_P = D_n \cdot A(P_n) (\phi_P - \phi_N) = a_N \cdot (\phi_P - \phi_N) \quad (4.264)$$

$$\text{Onde: } a_w = D_w \cdot A(|P_w|) + \max(F_w, 0) \quad (4.265a)$$

$$a_E = D_e \cdot A(|P_e|) + \max(-F_e, 0) \quad (4.265b)$$

$$a_S = D_s \cdot A(|P_s|) + \max(F_s, 0) \quad (4.265c)$$

$$a_N = D_n \cdot A(|P_n|) + \max(-F_n, 0) \quad (4.265d)$$

Aplicando as equações (4.261)-(4.264) na equação (4.256):

$$(\phi_P - \phi_P^o) \cdot a_P^o + a_E \cdot (\phi_P - \phi_E) - a_w \cdot (\phi_w - \phi_P) + a_N \cdot (\phi_P - \phi_N) - a_S \cdot (\phi_S - \phi_P) = (S_c + S_P \cdot \phi_P) \quad (4.266)$$

$$\text{Onde: } a_P^o = \frac{\rho^o_P \cdot \Delta V}{\Delta t} \quad (4.267) \quad \therefore \Delta V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z, \text{ para problemas em 2D: } \Delta V = \Delta x \cdot \Delta y$$

Rearranjando a equação (4.266) para a forma padrão:

$$a_P \cdot \phi_P = a_w \cdot \phi_w + a_E \cdot \phi_E + a_S \cdot \phi_S + a_N \cdot \phi_N + b \quad (4.268)$$

Onde:

$$a_w = D_w \cdot A(|P_w|) + \max(F_w, 0) \quad (4.269a)$$

$$a_E = D_e \cdot A(|P_e|) + \max(-F_e, 0) \quad (4.269b)$$

$$a_S = D_s \cdot A(|P_s|) + \max(F_s, 0) \quad (4.269c)$$

$$a_N = D_n \cdot A(|P_n|) + \max(-F_n, 0) \quad (4.269d)$$

$$a^o_P = \frac{\rho^o_P \cdot \Delta x \cdot \Delta y}{\Delta t} \quad (4.269e)$$

$$b = S_c \Delta x \cdot \Delta y + a^o_P \cdot \phi^o_P \quad (4.269f)$$

$$a_p = a_w + a_e + a_s + a_n + a^o_P - S_p \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (4.269g)$$

As variáveis sem sobrescrito “o” (a_w , a_e , a_s , a_n e a_p) são calculadas, pois são incógnitas, no tempo $t + \Delta t$. As taxas, em termo de massa, associadas ao transporte convectivo foram definidos pela equação (4.129) e as condutâncias foram definidas pela equação (4.130):

$$F_w = (\rho \cdot u)_e \cdot \Delta y \quad (4.270a)$$

$$F_e = (\rho \cdot u)_w \cdot \Delta y \quad (4.270b)$$

$$F_s = (\rho \cdot v)_s \cdot \Delta x \quad (4.270c)$$

$$F_n = (\rho \cdot v)_n \cdot \Delta x \quad (4.270d)$$

$$D_w = \frac{\Gamma_w \cdot \Delta y}{\delta x_{WP}} \quad (4.271a)$$

$$D_e = \frac{\Gamma_e \cdot \Delta y}{\delta x_{PE}} \quad (4.271b)$$

$$D_s = \frac{\Gamma_s \cdot \Delta x}{\delta y_{SP}} \quad (4.271c)$$

$$D_n = \frac{\Gamma_n \cdot \Delta x}{\delta y_{PN}} \quad (4.271d)$$

e os números de Peclet são expressos por:

$$P_w = \frac{F_w}{D_w} \quad (4.272a)$$

$$P_e = \frac{F_e}{D_e} \quad (4.272b)$$

$$P_s = \frac{F_s}{D_s} \quad (4.272c)$$

$$P_n = \frac{F_n}{D_n} \quad (4.272d)$$

Ressalta-se que os coeficientes dos pontos nodais vizinhos a_W , a_E , a_S e a_N , encerram informações acerca da convecção e difusão nas respectivas faces do volume de controle, em termo das vazões mássicas e das condutâncias difusivas.

4.17 Método dos Volumes Finitos para problemas com difusão e convecção para uma configuração tridimensional (3D)

Por analogia pode-se estender o Método dos Volumes Finitos para problemas em 3D, situação retratada pela figura 4.20 que mostra a configuração dos pontos nodais associados aos coeficientes presentes nas equações discretizadas empregando o referido método numérico e considerando a formulação generalizada para o tratamento dos termos convectivos:

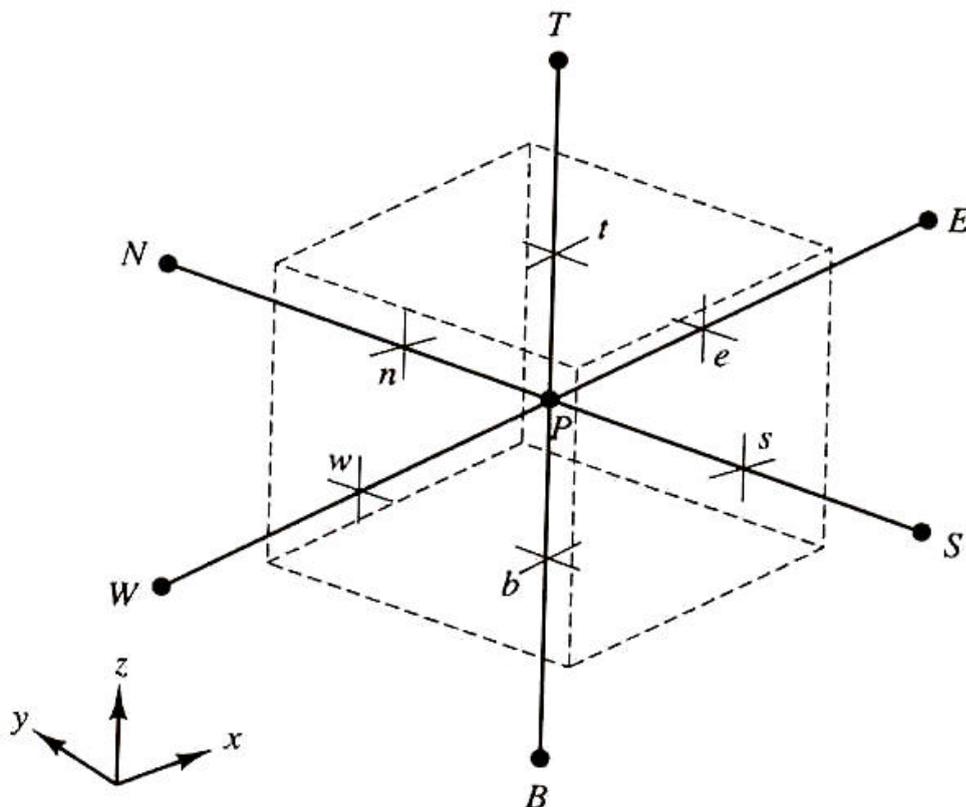


Figura 4.20: Configuração, em três dimensões (3D), de um ponto nodal genérico P e seus vizinhos. (Fonte: adaptada a partir de VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, pág. 101)

Tabela 4.3: Expressões para os coeficientes das equações algébricas aplicando a formulação generalizada.

	1D	2D	3D
a_w	$D_w \cdot A(P_w) + \max(F_w, 0)$	$D_w \cdot A(P_w) + \max(F_w, 0)$	$D_w \cdot A(P_w) + \max(F_w, 0)$
a_e	$D_e \cdot A(P_e) + \max(-F_e, 0)$	$D_e \cdot A(P_e) + \max(-F_e, 0)$	$D_e \cdot A(P_e) + \max(-F_e, 0)$
a_s	---	$D_s \cdot A(P_s) + \max(F_s, 0)$	$D_s \cdot A(P_s) + \max(F_s, 0)$
a_n	---	$D_n \cdot A(P_n) + \max(-F_n, 0)$	$D_n \cdot A(P_n) + \max(-F_n, 0)$
a_b	---	---	$D_b \cdot A(P_b) + \max(-F_b, 0)$
a_t	---	---	$D_t \cdot A(P_t) + \max(-F_t, 0)$
a_p°	$\frac{\rho_p^\circ \cdot \Delta x}{\Delta t}$	$\frac{\rho_p^\circ \cdot \Delta x \cdot \Delta y}{\Delta t}$	$\frac{\rho_p^\circ \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}{\Delta t}$
b	$S_c \cdot \Delta x + a_p^\circ \cdot \phi_p^\circ$	$S_c \cdot \Delta x \cdot \Delta y + a_p^\circ \cdot \phi_p^\circ$	$S_c \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z + a_p^\circ \cdot \phi_p^\circ$
a_p	$\sum a_{viz} - S_p \cdot \Delta x$	$\sum a_{viz} - S_p \cdot \Delta x \cdot \Delta y$	$\sum a_{viz} - S_p \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$
ΔF	$(F_e - F_w)$	$(F_e - F_w) + (F_n - F_s)$	$(F_e - F_w) + (F_n - F_s) + (F_t - F_b)$

(Fonte: adaptada a partir de VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, pág. 124)

As expressões gerais de F , D e P nas interfaces são mostrados na tabela 4.4:

Tabela 4.4: Expressões de F , D e P avaliados nas faces de um V.C. para várias configurações.

Face	w	e	s	n	b	t
F	$(\rho.u)_w . A_w$	$(\rho.u)_e . A_e$	$(\rho.u)_s . A_s$	$(\rho.u)_n . A_n$	$(\rho.u)_b . A_b$	$(\rho.u)_t . A_t$
D	$\frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} . A_w$	$\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} . A_e$	$\frac{\Gamma_s}{\delta y_{SP}} . A_s$	$\frac{\Gamma_n}{\delta y_{PN}} . A_n$	$\frac{\Gamma_b}{\delta z_{BP}} . A_b$	$\frac{\Gamma_t}{\delta z_{PT}} . A_t$
P	$\frac{(\rho.u)_w}{\Gamma_w} . \delta x_{WP}$	$\frac{(\rho.u)_e}{\Gamma_e} . \delta x_{PE}$	$\frac{(\rho.u)_s}{\Gamma_s} . \delta y_{SP}$	$\frac{(\rho.u)_n}{\Gamma_n} . \delta y_{PN}$	$\frac{(\rho.u)_b}{\Gamma_b} . \delta z_{BP}$	$\frac{(\rho.u)_t}{\Gamma_t} . \delta z_{PT}$

(Fonte: adaptada a partir de VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, pág. 124)

Para o sistema de Coordenadas Cartesianas:

Tabela 4.5: Expressões para os Volumes de Controles (em Coordenadas Cartesianas) e para as áreas normais às direções de transporte da variável ϕ , para várias configurações.

	1D	2D	3D
A_w	1,0	Δy	$\Delta y . \Delta z$
A_e	1,0	Δy	$\Delta y . \Delta z$
A_s	---	Δx	$\Delta x . \Delta z$
A_n	---	Δx	$\Delta x . \Delta z$
A_b	---	---	$\Delta x . \Delta z$
A_t	---	---	$\Delta x . \Delta z$
ΔV	Δx	$\Delta x . \Delta y$	$\Delta x . \Delta y . \Delta z$

4.18 Esquemas de Alta-Ordem

A acuracidade dos Esquemas *Upwind* e Híbrido empregados na discretização dos termos convectivos é somente de 1ª ordem em termos dos erros de truncagem da Série de Taylor. O uso de quantidades *upwind* assegura que o esquema seja bastante estável e produza resultados dotados de realismo físico, porém a acuracidade dos esquemas de 1ª ordem pode ser deficiente. Os erros de aproximação podem ser minimizados empregando discretizações de Alta-Ordem. Esquemas de Alta-Ordem envolvem mais pontos vizinhos e reduzem os erros associados a discretização em função da maior influência considerada. No entanto, o Esquema de Diferenças-Centrais, o qual tem acuracidade de segunda-ordem, produz instabilidade e fornece resultados desprovidos de realismo físico. A formulação que não leva em conta a direção do escoamento são instáveis e portanto, esquemas de acuracidade associada a alta-ordem e que preservam a característica *upwind* para a estabilidade e sensibilidade do sentido do escoamento, são necessários (VERSTEEG E MALALASEKERA, 1995).

Há um grande número de aproximações dos termos convectivos empregando esquemas de Alta-Ordem. Embora, muitos destes esquemas sejam muito complexos e podendo produzir soluções oscilatórias, quando a malha não for suficientemente refinada, tendo o agravante de apresentar dificuldades no tange a programação (FERZIGER e PÉRIC, 1997).

Vale ressaltar que os esquemas da Alta-Ordem a serem explanados mais adiante serão aplicados em configurações unidimensionais, tendo em vista o caráter introdutório deste trabalho.

4.18.1 Esquema Upwind de Alta-Ordem (2ª ordem) (HUW: Higher-order Upwind differencing)

Produz uma acurácia de 2ª ordem pelo emprego de uma extrapolação utilizando 2 pontos a montantes da interface, conforme mostrado na figura 4.21, onde a variável ϕ está sendo avaliada:

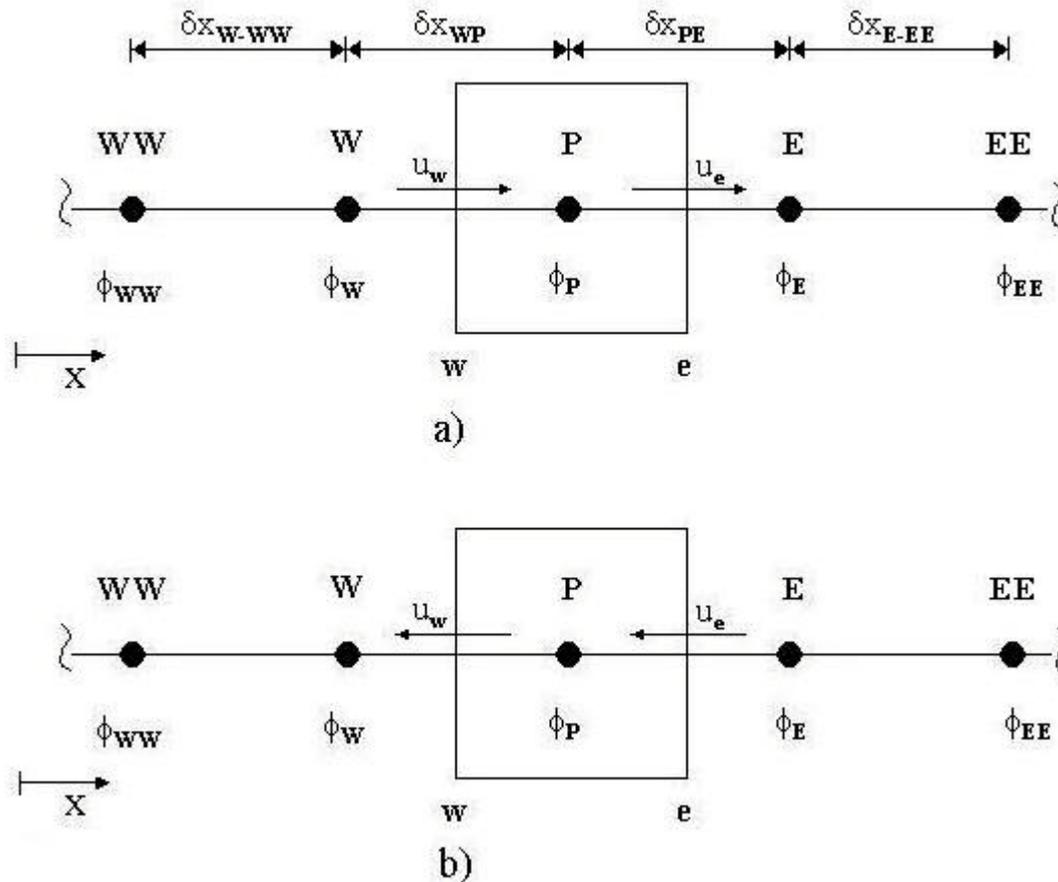


Figura 4.21: Representação de um ponto nodal genérico P e dos seus vizinhos: 2 a direita e 2 a esquerda; numa malha numérica unidimensional. (Fonte: adaptada a partir de AEA, 2001, pág. 840)

Sabe-se que $F_w = (\rho \cdot u \cdot A_{nx})_w$ representa a magnitude da taxa mássica associada ao transporte convectivo da variável dependente ϕ , avaliada na interface “w” e que tal grandeza pode assumir sinais positivo e negativo. Para o caso 1D, a área normal à direção (no caso direção x) do escoamento é unitária ($A_{nx} = 1,0$)

$$\text{Se } F_w \geq 0: \quad \phi_w = \frac{3}{2} \cdot \phi_W - \frac{1}{2} \cdot \phi_{WW} \quad (4.273)$$

Tal esquema representado pela equação (4.273) é menos compacto que o esquema *Upwind* de 1ª ordem devido a presença do termo ϕ_{ww} (AEA, 2001). Visando um melhor implementação no código, o referido esquema é reescrito na seguinte forma:

$$\phi_w = \phi_w + \frac{1}{2} \cdot (\phi_w - \phi_{ww}) \quad (4.274)$$

e o segundo termo é incluso no termo fonte como uma correção a ser aplicada (AEA, 2001). Por analogia:

$$\text{Se } F_e \geq 0: \quad \phi_e = \phi_p + \frac{1}{2} \cdot (\phi_p - \phi_w) \quad (4.275)$$

Generalizando:

$$\text{Se } F_w \geq 0: \quad \phi_w = \phi_w + \frac{1}{2} \cdot (\phi_w - \phi_{ww}) \quad (4.276a)$$

$$\text{Se } F_w < 0: \quad \phi_w = \phi_p + \frac{1}{2} \cdot (\phi_p - \phi_e) \quad (4.276b)$$

$$\text{Se } F_e \geq 0: \quad \phi_e = \phi_p + \frac{1}{2} \cdot (\phi_p - \phi_w) \quad (4.277a)$$

$$\text{Se } F_e < 0: \quad \phi_e = \phi_e + \frac{1}{2} \cdot (\phi_e - \phi_{ee}) \quad (4.277b)$$

O esquema de discretização supracitado é resultante da aproximação do valor da variável dependente avaliada nas interfaces (ϕ_w e ϕ_e) aplicando-se uma extrapolação linear a partir dos pontos nodais vizinhos e a montante da interface em questão, por isso tal esquema é, também, denominado Esquema *Upwind* Linear (*LUDS: Linear Upwind Scheme*). O referido esquema é de 2ª ordem, porém é mais complexo que o *Upwind* anteriormente citado e desenvolvido, o qual também é denominado Esquema de Diferenciação *Upwind* (*UDS: Upwind Differencing Scheme*) (FERZIGER e PÉRIC, 1997).

4.18.2 Formulação do esquemas TVD (Total Variation Dominishing)

O esquema mais usual para aproximar o termo convectivo é o Esquema *Upwind* de primeira ordem, que pode ser expresso da seguinte forma:

$$F^{UP}(\phi_w) = \begin{cases} F_w \cdot \phi_w & \text{Se } F_w \geq 0 \\ F_w \cdot \phi_P & \text{Se } F_w < 0 \end{cases} \quad (4.278a)$$

$$(4.278b)$$

$$F^{UP}(\phi_e) = \begin{cases} F_e \cdot \phi_P & \text{Se } F_e \geq 0 \\ F_e \cdot \phi_E & \text{Se } F_e < 0 \end{cases} \quad (4.279a)$$

$$(4.279b)$$

Esquema *Upwind* conduz a uma difusão numérica (erros associados a truncagem empregada nas aproximações) na ordem de $\frac{|F_e| \cdot \Delta x}{2}$. Usualmente, com um maior refinamento da malha, o qual poder ser aplicado em 2D e 3D, as soluções tornam-se mais acuradas (SOKOLICHIN *et al.*, 1997).

O Esquema de Diferenças-Centrais, que é de 2ª ordem, pode ser expresso na seguinte forma:

$$F^{DC}(\phi_w) = F_w \cdot \frac{(\phi_w + \phi_P)}{2} \quad (4.280a)$$

$$F^{DC}(\phi_e) = F_e \cdot \frac{(\phi_P + \phi_E)}{2} \quad (4.280b)$$

o qual produz bons resultados apenas nos problemas que apresentam baixos valores no número de Peclet, avaliado nas interfaces. Em casos contrários, tende a apresentar soluções desprovidas de realismo físico (SOKOLICHIN *et al.*, 1997).

Melhores resultados podem ser obtidos empregando o Esquema Híbrido, o qual se reduz ao esquema *Upwind* nas situações onde o transporte convectivo é preponderante, apresentando, portanto, um critério associado ao fluxo (transporte convectivo) e que limita as considerações aplicadas na formulação. A teoria da estabilidade de métodos empregando um limitador associado ao fluxo é baseada no conceito da *Total Variation Dominishing* da solução, trabalhada por Le Veque no início da década de 90, o qual é abreviado como *TVD* quando aplicado na aproximação do termo convectivo, também denominado fluxo

convectivo (SOKOLICHIN et al., 1997). Percebeu-se que o Esquema de Diferenças-Centrais podia ser decomposto no Esquema *Upwind* mais um termo de correção:

$$F^{DC}(\phi_w) = F^{UP}(\phi_w) + \frac{|F_w|(\phi_P - \phi_w)}{2} \quad (4.281)$$

Se $F_w \geq 0$:

$$F^{DC}(\phi_w) = F_w \cdot \phi_w + \frac{|F_w|(\phi_P - \phi_w)}{2} = F_w \cdot \phi_w + \frac{F_w \cdot \phi_P}{2} - \frac{F_w \cdot \phi_w}{2} = F_w \cdot \frac{(\phi_w + \phi_P)}{2} \quad (4.282)$$

Se $F_w < 0$:

$$F^{DC}(\phi_w) = F_w \cdot \phi_P + \frac{|F_w|(\phi_P - \phi_w)}{2} = F_w \cdot \phi_P + \frac{|F_w| \cdot \phi_P}{2} - \frac{|F_w| \cdot \phi_w}{2} = -\frac{|F_w| \cdot \phi_P}{2} - \frac{|F_w| \cdot \phi_w}{2} \quad (4.283)$$

Como o sinal de F_w é negativo: $F_w = -|F_w|$. Logo:

$$F^{DC}(\phi_w) = -\frac{|F_w| \cdot \phi_P}{2} - \frac{|F_w| \cdot \phi_w}{2} = \frac{F_w \cdot (\phi_w + \phi_P)}{2} \quad (4.284)$$

$$\text{Por analogia: } F^{DC}(\phi_e) = F^{UP}(\phi_e) + \frac{|F_e|(\phi_E - \phi_P)}{2} \quad (4.285)$$

Tal fato sugeriu o seguinte método empregando um limitador associado ao fluxo (no caso, o transporte convectivo da variável dependente ϕ):

$$F^{TVD}(\phi_w) = F^{UP}(\phi_w) + \frac{|F_w|(\phi_P - \phi_w) \cdot \Phi_w}{2} \quad (4.286)$$

onde Φ_w é o limitador associado ao fluxo, o qual depende da natureza local da solução. Nota-se que se $\Phi_w = 0$ (ou $\Phi_e = 0$) chega-se ao Esquema *Upwind*, enquanto se $\Phi_w = 1,0$ (ou $\Phi_e = 1,0$) chega-se ao Esquema de Diferenças-Centrais. O limitador associado ao fluxo empregado na maioria dos casos apresenta a seguinte forma:

$$\Phi_w = \Phi_w(\theta_w) \quad (4.287)$$

Onde θ_w é a razão entre o coeficiente angular avaliado empregando os valores da variável dependente nos pontos nodais vizinhos à interface na direção *upwind* e o coeficiente angular avaliado empregando os valores da variável dependente nos pontos nodais entre os

quais se situa a interface em questão onde os cálculos estão sendo efetivados.(LEVEQUE, 1996)

$$\theta_w = \frac{(\phi_w - \phi_{ww})/(x_w - x_{ww})}{(\phi_p - \phi_w)/(x_p - x_w)} = \frac{\delta x_{wp}}{\delta x_{w-ww}} \cdot \frac{(\phi_w - \phi_{ww})}{(\phi_p - \phi_w)} \quad (4.288)$$

Para efeito de simplificação e tendo em vista o caráter introdutório deste trabalho, considera-se a malha uniforme: $\delta x_{wp} = \delta x_{w-ww} = \delta x$. Então:

$$\theta_w = \frac{(\phi_w - \phi_{ww})}{(\phi_p - \phi_w)} \quad (4.289)$$

Logo:

$$\text{Se } F_w \geq 0: \quad \theta_w = \frac{\phi_w - \phi_{ww}}{\phi_p - \phi_w} \quad (4.290a)$$

$$\text{Se } F_w < 0: \quad \theta_w = \frac{\phi_E - \phi_P}{\phi_P - \phi_W} \quad (4.290b)$$

Por analogia:

$$\text{Se } F_e \geq 0: \quad \theta_e = \frac{\phi_P - \phi_W}{\phi_E - \phi_P} \quad (4.291a)$$

$$\text{Se } F_e < 0: \quad \theta_e = \frac{\phi_{EE} - \phi_E}{\phi_E - \phi_P} \quad (4.291b)$$

Os esquemas *TVD* são modificações do Esquema *Upwind* de Alta-Ordem com limitadores associados ao fluxo para assegurar o realismo físico da solução (AEA, 2001); os quais diferem entre si somente na expressão do limitador associado ao fluxo, alguns limitadores comumente citadas na literatura e que resultam nos esquemas *TVD* mais usuais, são:

$$\text{Min-Mod:} \quad \Phi_w = \max(0; \min(1, \theta_w)) \quad (4.292a)$$

$$\Phi_e = \max(0; \min(1, \theta_e)) \quad (4.292b)$$

$$\text{Van Leer:} \quad \Phi_w = \frac{\theta_w + |\theta_w|}{1 + |\theta_w|} \quad (4.293a)$$

$$\Phi_e = \frac{\theta_e + |\theta_e|}{1 + |\theta_e|} \quad (4.293b)$$

Superbee: $\Phi_w = \max(0; \min(1; 2\theta_w); \min(2, \theta_w)) \quad (4.294a)$

$$\Phi_e = \max(0; \min(1; 2\theta_e); \min(2, \theta_e)) \quad (4.294b)$$

monotonized centered (MC): $\Phi_w = \max\left(0; \min\left(\frac{(1+\theta_w)}{2}; 2; 2\theta_w\right)\right) \quad (4.295a)$

$$\Phi_e = \max\left(0; \min\left(\frac{(1+\theta_e)}{2}; 2; 2\theta_e\right)\right) \quad (4.295b)$$

O limitador associado ao fluxo é usualmente calculado de modo implícito empregando os valores atuais das variáveis dependentes. Entretanto, ele pode ser calculado explicitamente em termos das variáveis avaliadas no tempo anterior (AEA, 2001)

4.18.3 Aplicação dos esquemas TVD na discretização dos termos convectivos presentes nas equações diferenciais parciais associadas a modelagem da Fluidodinâmica dos Bubble Column Reactors

O limitador de fluxo empregado por SOKOLICHIN *et al.*(1997) na discretização dos termos convectivos na modelagem de um *Bubble Column Reactor* foi o *Superbee*:

$$\Phi = \max(0; \min(1; 2\theta); \min(2, \theta)) \quad (4.296)$$

O esquema TVD Totalmente Implícito citado por SOKOLICHIN *et al.*(1997) é incondicionalmente estável, enquanto o TVD Explícito é estável somente se a seguinte condição for satisfeita: $\frac{|u|\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{2}$, em cada interface. Aplicando o Esquema TVD implícito na Equação Geral de Transporte na forma integrada, obtém-se um sistema de equações algébricas não lineares, as quais devem ser linearizadas e resolvidas iterativamente. A violação do critério supracitado pode conduzir a problemas de divergência. No entanto, SOKOLICHIN *et al.*(1997) empregaram o Esquema TVD explícito na resolução numérica das equações diferenciais parciais associadas a modelagem da fluidodinâmica do *Bubble Column Reactor* estudado, apesar de que o emprego de malhas bastantes refinadas (alta resolução espacial) no domínio de solução exige pequenos incrementos de tempo (segundo

o critério de estabilidade), o que conduz a um aumento considerável no tempo de processamento. No entanto, aplicou-se o seguinte estratagema para reduzir drasticamente o tempo de processamento: empregou-se uma malha refinada em conjunção com pequenos incrementos de tempo somente na resolução da equação discretizada da *gas hold-up* e manteve-se um incremento de tempo relativamente grande na resolução das demais equações do modelo na forma discretizada. Tal artifício foi justificado pelo fato que a acurácia do procedimento de resolução da equação da *gas hold-up*, na forma discretizada, desempenha um papel crucial na modelagem dos potenciais motrizes, os quais estão associados a fase gás, nos escoamentos bifásicos (gás-líquido), porque o padrão de escoamento resultante depende diretamente dos valores da distribuição da *gas hold-up* no reator (SOKOLICHIN *et al.*, 1997).

O emprego de um esquema de Alta-Ordem (no caso um Esquema *TVD*) foi necessário após avaliar-se que a metodologia Euler-Euler produzia soluções muito diferentes dos valores reais quando aplicou-se o Esquema *Upwind*, tal fato decorreu dos efeitos associados a difusão numérica que apresentaram-se como inaceitáveis para o estudo de caso. O que poderia ser compensado por um maior refinamento da malha numérica, procedimento que é limitado pela capacidade de processamento das máquinas.

Consequentemente , o emprego de um esquema mais sofisticado e mais imune às difusões numéricas tornou-se necessário. O Esquema *TVD* aplicado por SOKOLICHIN *et al.* (1997) mostrou-se como uma alternativa razoável, pois forneceu resultados que apresentavam a mesma acurácia das soluções obtidas com a metodologia Euler-Lagrange , a qual é menos afetada pela difusão numérica.

Os efeitos da difusão numérica apresentam relevante importância no *Bubble Column Reactor* considerado como estudo de caso por SOKOLICHIN *et al.* (1997), desde que o escoamento tem como potencial motriz as forças associadas ao empuxo; a difusão numérica pode degradar a avaliação do gradiente do campo de massa específica ($\vec{\nabla} \cdot \rho(x, y, z)$) quando o transporte por difusão for considerável, pois o esquema *Upwind* não é indicado para tais situações; o que conduziria a potenciais motrizes (*driving forces*) incorretos nas simulações(SOKOLICHIN *et al.*, 1997).

SOKOLICHIN e EIGENBERGER (1999) empregam o Método dos Volumes Finitos em 3D, discretizando o domínio de solução em volumes de controle que consistiam

em hexaedros regulares. Aplicaram a estratégia da malha deslocada; empregando o Esquema Totalmente Implícito na discretização do termo transiente e utilizando um incremento de tempo (Δt) constante. No caso das soluções dinâmicas, os cálculos foram repetidos sucessivamente refinando o incremento de tempo, de modo a estimar a ordem do erro associado ao Δt .

Para os termos difusivos o Esquema de Diferenças-Centrais (Esquema de 2ª ordem) foi empregado. Os termos convectivos em todas as equações diferenciais na forma integrada foram discretizados empregando um esquema *TVD* implícito. As dificuldades associadas com a utilização de um Esquema *TVD* Totalmente Implícito foram evitadas pela implementação de uma correção a ser aplicada. O esquema de Alta-Ordem aplicada na discretização dos termos associados ao transporte convectivo (ou fluxo convectivo) foi então dividido em duas partes *upwind*, uma sendo tratada empregando o procedimento totalmente implícito e a outra como um termo de correção, o qual é calculado a partir dos valores conhecidos das variáveis dependentes na iteração anterior (e não na atual). A correção a ser aplicada é portanto incluída no termo fonte, o qual é atualizado a pós cada iteração.

A acurácia da discretização espacial foi controlada pela repetição dos cálculos numa série sucessiva de refinamentos espaciais da malha, até a solução independente da malha ser alcançada. A dependência da taxa de convergência com a forma da função do limitador associado ao fluxo usada na discretização empregando esquemas *TVDs* foi investigada por SOKOLICHIN e EIGENBERGER (1999). Percebeu-se que a forma denominada *monotized contered limiter*:

$$\Phi = \max \left(0; \min \left(\frac{(1+\theta)}{2}; 2; 2.\theta \right) \right) \quad (4.297)$$

apresentou melhor performance que as seguinte formas: *Min-Mode*, van Leer e o previamente usado *Superbee*, o que estava em concordância com os resultados citados por LEVEQUE (1996). Uma pequena modificação do método *SIMPLER* desenvolvido por PATANKAR (1980) é aplicada visando a atualização dos valores da massa específica local da mistura gás-líquido, no domínio de solução, no final de cada *loop* de iteração, como descrito em SOKOLICHIN *et al.*(1997). As iterações internas são executadas empregando um método SIP ou, no caso de 3D, com sua versão 3D.

4.19 Problemas em que o campo de escoamento é desconhecido

Até o presente momento assumia-se que o campo de velocidade era conhecido. No entanto, na maioria dos problemas o mesmo é uma incógnita a ser obtida a partir das Equações da Quantidade de Movimento:

.Equação do Momentum na direção x: (Faz-se: $\phi = u$ e $\Gamma_\phi = \mu$)

$$\frac{\partial(\rho.u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho.u.u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho.v.u)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho.w.u)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{\partial P}{\partial x} + S_u \quad (4.298a)$$

.Equação do Momentum na direção y: (Faz-se: $\phi = v$ e $\Gamma_\phi = \mu$)

$$\frac{\partial(\rho.v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho.u.v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho.v.v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho.w.v)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \frac{\partial P}{\partial y} + S_v \quad (4.298b)$$

.Equação do Momentum na direção z: (Faz-se: $\phi = w$ e $\Gamma_\phi = \mu$)

$$\frac{\partial(\rho.w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho.u.w)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho.v.w)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho.w.w)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{\partial P}{\partial z} + S_w \quad (4.298c)$$

O campo de velocidade obtido a partir das Equação da Quantidade de Movimento deve satisfazer a Equação da Continuidade (Equação 4.121) a qual complementa o conjunto de equações diferenciais de modo a obter, também, o campo de massa específica, tendo como resultado final o campo de escoamento.

Percebe-se que os coeficientes associados aos termos convectivos ($(\rho.u)$, $(\rho.v)$ e $(\rho.w)$) são funções das componentes da velocidade, variáveis que se deseja calcular, implicando em não-linearidade nas Equações da Quantidade de Movimento. Tal peculiaridade é contornada através do emprego de processos iterativos de solução.

A grande dificuldade na obtenção do campo de velocidade decorre do não conhecimento do campo de pressão cujo gradiente aparece nas Equações da Quantidade de Movimento, pois não há equações explícitas para o gradiente de pressão, o mesmo será considerado como uma parte aditiva do termo fonte (PATANKAR, 1980). Contornando-se o problema associado ao campo de pressão, as Equações da Quantidade de Movimento podem ser resolvidas aplicando-se os procedimentos anteriormente citados e explanados.

Vale ressaltar que o campo de pressão é indiretamente especificado através da Equação da Continuidade, pois quando o gradiente do campo de pressão correto for substituído nas Equações da Quantidade de Movimento, a solução das mesmas fornecerá o campo de velocidade que satisfaz a Equação da Continuidade (PATANKAR, 1980). Tal fato induz o emprego de um método iterativo indireto de solução, que consistiria primordialmente:

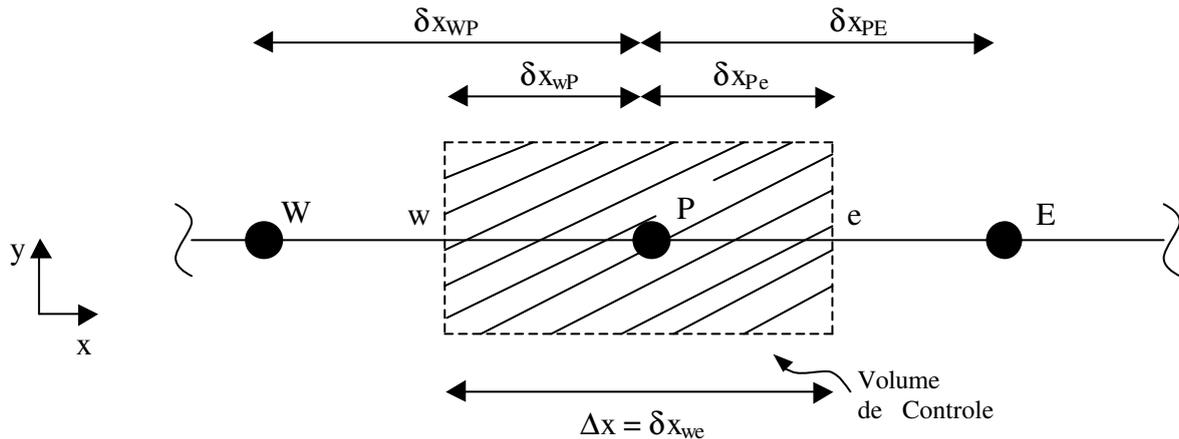
- 1) Escolha de uma distribuição arbitrária de pressão.
- 2) Substituição da referida distribuição de pressão nas Equações do Momentum de modo a obter as componentes do campo de velocidade: u , v e w .
- 3) Verificar se a Equação da Continuidade é satisfeita e retornar a etapa 1 se necessário (caso a equação da continuidade não seja satisfeita)

O procedimento anteriormente citado não é conveniente por não permitir a correção da distribuição inicial de pressão a partir das componentes do campo de velocidade aplicadas na Equação da Continuidade, tal característica faz com que a convergência seja difícil. No entanto, as 4 equações disponíveis (3 do Momentum e a da Continuidade), em princípio são suficientes para a obtenção das variáveis dependentes: u , v , w e ρ .

PATANKAR (1980) defende e justifica o emprego de métodos iterativos que convertam a informação indireta, a respeito do campo de pressão, encerrada na Equação da Continuidade em um algoritmo direto para cálculo de pressão.

4.20 Dificuldade que surgem no emprego de métodos iterativos diretos para o cálculo do campo de pressão

Discretiza-se o gradiente de pressão (∇P), que constituirá um termo aditivo a ser considerado e tratado com o termo fonte, empregando o perfil linear por partes para pressão. Por conveniência aplica-se o tratamento do gradiente de pressão ao caso 1D:



Figuras 4.22: Três pontos nodais consecutivos numa malha numérica unidimensional. (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 116)

$$\int_{V.C.} -\frac{dP}{dx} \cdot dV = \int_{V.C.} -\frac{dP}{dx} \cdot dx \cdot dy \cdot dz = \int_{V.C.} -\frac{dP}{dx} \cdot A_{nx} \cdot dx = A_{nx} \cdot \int_w^e -dP = A_{nx} \cdot (P_w - P_e) \quad (4.299)$$

Para o caso 1D: $A_{nx} = 1,0$

Considera-se que as interfaces dos V.C.'s, empregadas no perfil linear por partes, encontra-se no meio da distância entre os pontos nodais adjacentes às mesmas, o que não causa nenhuma dificuldade no desenvolvimento do método e conduz a uma conveniência no algebrismo aplicado na formulação (PATANKAR, 1980):

$$P(x) = \frac{(P_P - P_W)}{\delta x_{WP}} \cdot x + P_W \quad \text{se } x_W \leq x \leq x_P \quad (4.300)$$

$$P(x) = \frac{(P_E - P_P)}{\delta x_{PE}} \cdot x + P_P \quad \text{se } x_P < x \leq x_E \quad (4.301)$$

Daí:

$$P_w = P(\delta x_{WP}/2) = \frac{(P_P - P_W)}{\delta x_{WP}} \cdot \frac{\delta x_{WP}}{2} + P_W = \frac{(P_W + P_P)}{2} \quad (4.302)$$

$$\text{Por analogia: } P_e = \frac{(P_P + P_E)}{2} \quad (4.303)$$

Logo:

$$\int_{V.C.} -\frac{dP}{dx} \cdot dV = (P_w - P_e) = \frac{(P_W - P_E)}{2} \quad (4.304)$$

O resultado mostra que a força líquida de pressão exercida sobre o volume de controle que apresentar área, normal ao escoamento, unitária: $(P_w - P_e)$, aparecerá na Equação da Quantidade de Movimento como um diferença de pressão entre dois pontos nodais alternados na malha numérica considerada e não entre pontos adjacentes. Tal características apresenta sérios comprometimentos:

- 1) Uma maior perda de informação a cerca do campo de velocidade (o que tenderá diminuir a acuracidade da solução) em função da maior distância entre os pontos nodais empregados na discretização da contribuição do campo de pressão nas Equações da Quantidade de Movimento, considerando o emprego de uma malha grosseira , o que é inicialmente aconselhado.
- 2) A conseqüência mais danosa ao método é que um campo periódico, como o mostrados na figura 4.23, será interpretado como um campo de pressão uniforme pelas Equações do Momentum, haja visto que para qualquer ponto nodal P, o correspondente $(P_w - P_e)$ será zero. Tal peculiaridade comprometerá o realismo físico desejado no Método dos Volumes Finitos.

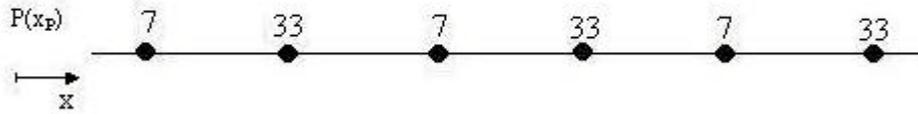


Figura 4.23: Campo de pressão periódico.(Fonte: adaptado a partir de PATANKAR, 1980, pág. 116)

A s dificuldades anteriormente citadas podem ser estendidas para os casos 2D e 3D. Na situação 2D:

.A Equação da Quantidade de Movimento na direção x, discretizada e aplicada no ponto nodal P apresenta a seguinte influência do campo de pressão: $(P_W - P_E)$; parcela aditiva do termo fonte (S_u) .

.A Equação da Quantidade de Movimento na direção y, discretizada e aplicada no ponto nodal P, apresenta a seguinte influência do campo de pressão: $(P_S - P_N)$; parcela aditiva do termo fonte (S_v) .

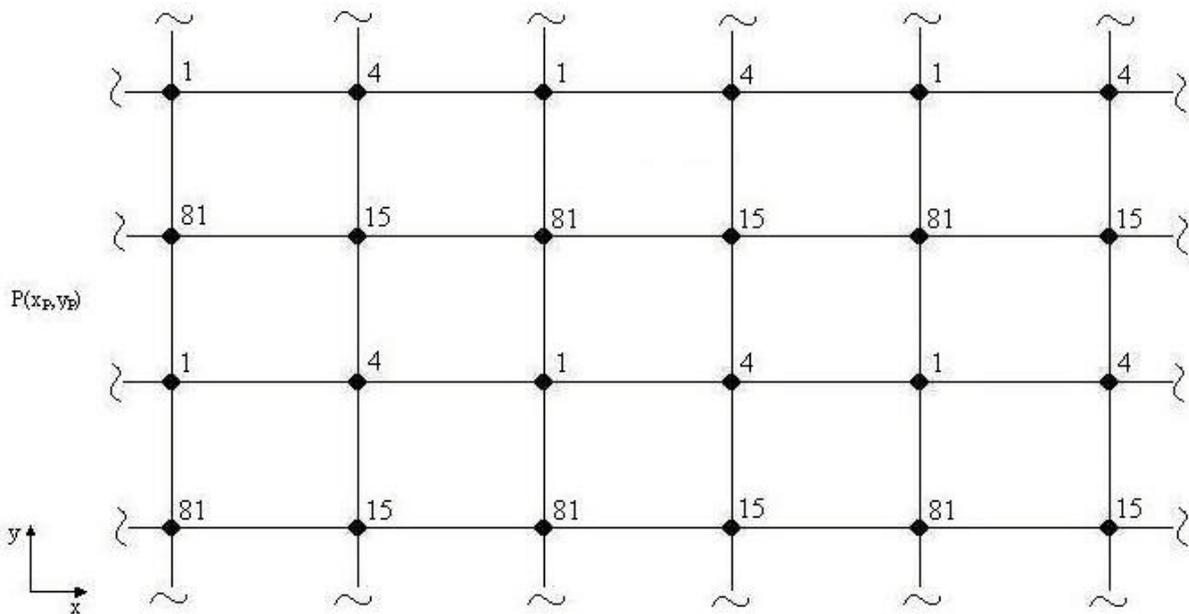
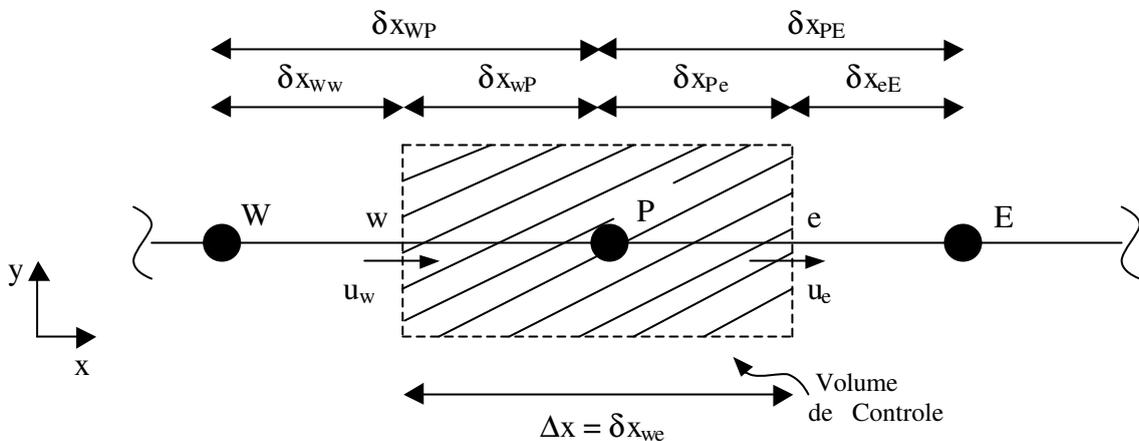


Figura 4.24: Campo de pressão periódico em 2D.(Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 116)

O campo de pressão mostrado na figura 4.24 produzirá valores nulos para as componentes das forças nas direções x e y. Como visto anteriormente, apesar do campo de pressão ser altamente não-uniforme, o mesmo será tratado como um campo uniforme pela Equações do Momentum na forma discretizada. Embora, num primeiro momento a ocorrência de um campo real com tais características seja improvável, será possível que o mesmo seja durante o procedimento iterativo de solução, o que poderá implicar numa convergência do método numérico que fornecerá uma solução desprovida de realismo físico, o que não é desejado (PATANKAR, 1980).

3) Representação da Equação da Continuidade: um espécie semelhante de dificuldade que ocorreu na discretização do campo de pressão, nas Equações da Quantidade de Movimento, surge na discretização da Equação da Continuidade. Para efeito de simplificação considera-se o caso estacionário, 1D e incompressível (massa específica constante), logo a Equação da Continuidade apresentará a seguinte forma:

$$\frac{du}{dx} = 0 \tag{4.305}$$



Figuras 4.25: Três pontos nodais consecutivos numa malha numérica unidimensional. (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 116)

Integrando a equação (4.305) nos limites definidos pelo V.C. mostrado na figura 4.25:

$$\int_{V.C.} \frac{du}{dx} . dV = \int_w^e \frac{du}{dx} . dx . dy . dz = \int_w^e \frac{du}{dx} . A_{nx} . dx = A_{nx} . (u_e - u_w) = 0 \tag{4.306}$$

Para o caso 1D: $A_{nx} = 1,0$

$$\text{Logo: } (u_e - u_w) = 0 \quad (4.307)$$

Emprega-se novamente o perfil linear por partes na variável “u”(componente do campo de velocidade na direção x) e aplicando as interfaces no meio da distância que separa os dois pontos nodais adjacentes à mesma:

$$(u_e - u_w) = \frac{(u_p + u_E)}{2} - \frac{(u_w + u_P)}{2} = \frac{(u_E - u_w)}{2} \quad (4.308)$$

$$\text{Logo : } (u_E - u_w) = 0 \quad (4.309)$$

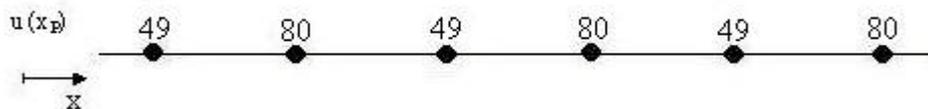


Figura 4.26: Campo periódico de velocidade em 1D.(Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 118)

Percebe-se que a Equação da Continuidade discretizada aplicada no ponto nodal P relaciona a velocidade entre pontos alternados da malha numérica e não pontos nodais adjacentes. Como consequência o campo periódico de velocidade mostrado na figura 4.26, que não apresenta realismo físico, satisfará a Equação da Continuidade na forma discretizada. Nos casos 2D ou 3D uma análise similar pode ser aplicada.

As dificuldades anteriormente citadas devem ser resolvidas antes que o método numérico envolvendo as componentes da velocidade e pressão seja formulado (PATANKAR, 1980).

Até o presente momento, percebe-se que a maior dificuldade na análise numérica do problema está associado com o tratamento da primeira derivada, pois maiores complicações foram encontradas na discretização do termo convectivo que é representado por 1ª derivada; já nos problemas onde o campo de escoamento é uma incógnita a 1ª derivada da pressão que surge nas Equações do Momentum e da velocidade na Equação da Continuidade, implicam em dificuldades consideráveis.

Um solução para tais dificuldades é o emprego de uma malha numérica alternada ou deslocada.

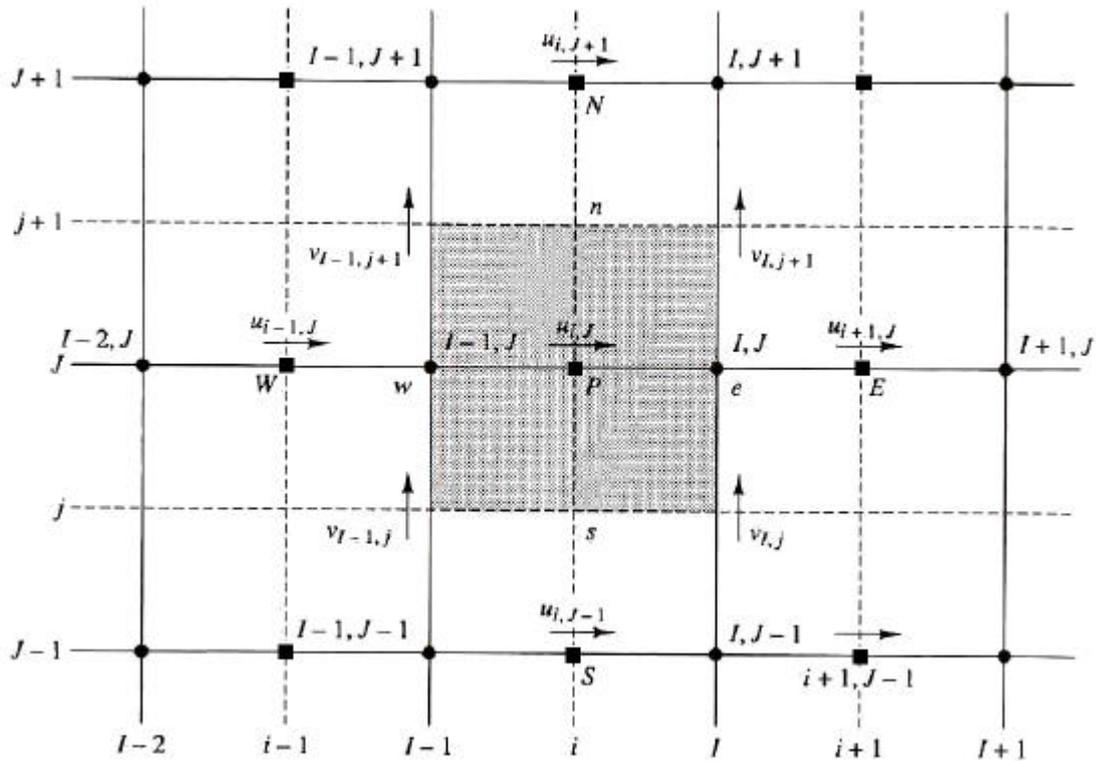
4.21 Malha numérica alternada ou deslocada

Não é necessário calcular todas as variáveis numa mesma malha numérica no qual o domínio de solução foi inicialmente dividido. Emprega-se um malha diferente (malha secundária) para as componentes da velocidade , que são calculadas em pontos nodais situados nas interfaces dos V.C.'s, enquanto as demais variáveis são avaliadas nos pontos nodais da malha principal, que tem sido tratada desde o início do breve desenvolvimento do Método dos Volumes Finitos , considerado neste trabalho.

O artifício do emprego de uma malha deslocada ou alternada (malha secundária) apresenta às seguintes vantagens:

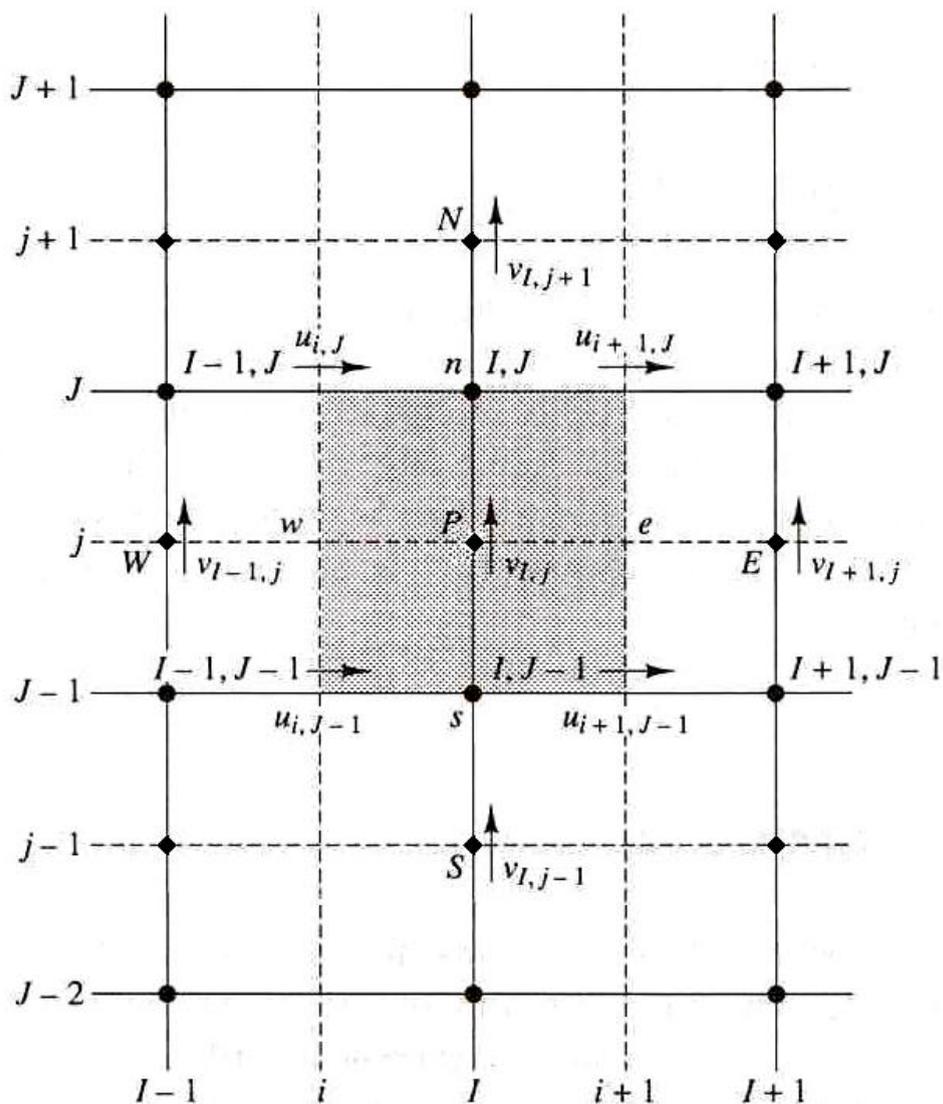
- 1) Os fluxos de massa (F) nas interfaces são obtidos sem interpolação.
- 2) Tomando como referência a componente na direção x das Equações do Momentum, u_e será controlada por $(P_p - P_E)$.
- 3) Para um V.C. da malha principal, a Equação da Continuidade envolverá diferenças de velocidades de posições adjacentes.

As vantagens anteriormente citadas, contornam as dificuldades previamente explanadas, assegurando o realismo físico do método numérico. No entanto, surge a necessidade de um trabalho adicional de informação a respeito da geometria e de indexação a respeito da malha deslocada (PATANKAR, 1980).



■ : pontos nodais (malha secundária) onde são calculadas as componentes da velocidade na direção x.

Figura 4.27: Volume de Controle, associado a malha secundária, para a avaliação da componente “u” da velocidade num ponto nodal genérico (malha secundária) e seus vizinhos. (Fonte: adaptada a partir de VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, pág. 140)



◆ : pontos nodais (malha secundária) onde são calculadas as componentes da velocidade na direção y .

Figura 4.28: Volume de Controle, associado a malha secundária, para a avaliação da componente “ v ” da velocidade num ponto nodal genérico (malha secundária) e seus vizinhos. (Fonte: adaptada a partir de VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, pág. 141)

4.22 Equações do Momentum:

Após o emprego da malha deslocada as Equações da Quantidade de Movimento discretizadas apresentarão as seguintes formas para o caso 3D:

$$a_e \cdot u_e = \sum a_{viz} \cdot u_{viz} + b_u + A_e \cdot (P_P - P_E) \quad (4.310a)$$

$$a_n \cdot v_n = \sum a_{viz} \cdot v_{viz} + b_v + A_n \cdot (P_P - P_N) \quad (4.310b)$$

$$a_t \cdot w_t = \sum a_{viz} \cdot w_{viz} + b_w + A_t \cdot (P_P - P_T) \quad (4.310c)$$

O emprego da malha deslocada no tratamento das Equações do Momentum faz com que a diferença de pressão entre dois pontos adjacentes torne-se a força motriz natural para a respectiva componente de velocidade localizada entre os referidos pontos nodais. O termo $A_e \cdot (P_P - P_E)$, por exemplo, retrata a força de pressão atuando na direção x que influencia a componente “u” avaliada na face “e” do V.C. da malha principal, sendo A_e a área na qual a diferença de pressão atua. Para problemas em duas dimensões: $A_e = \Delta y \cdot 1,0$; enquanto nos casos que envolvam configurações em 3D: $A_e = \Delta y \cdot \Delta z$. Consequentemente, os campos “periódicos” de pressão, não serão mais tratados como campos uniformes, eliminando a possibilidade de soluções desprovidas de realismo físico.

Os coeficientes dos pontos nodais vizinhos (" a_{viz} ", aplicável à malha secundária) quantificam a influência combinada dos transporte difusivos e convectivos nas faces do volume de controle (malha principal). Os termos b's (b_u, b_v, b_w) são definidos do mesmo modo que anteriormente explanado, no entanto o gradiente de pressão na forma discretizada será uma parcela aditiva e não inclusa nas contribuições S_c (S_{c_u}, S_{c_v} e S_{c_w}) e S_P (S_{P_u}, S_{P_v} e S_{P_w}) do termo fonte, tendo em vista que o campo de pressão será calculado, pois constituiria um inconveniente embuti-lo nos termos fonte das Equações da Quantidade de Movimento (PATANKAR, 1980).

Se o campo de pressão fosse conhecido ou estimado, o procedimento até aqui desenvolvido seria suficiente para a resolução numérica das Equações da Quantidade de Movimento. A menos que o campo de pressão (campo escalar) correto seja empregado, o campo de velocidade (campo vetorial) resultante da resolução das Equações do

Momentum na forma discretizada não satisfará a Equação da Continuidade na forma discretizada. Por isso, um campo imperfeito de velocidade (aquele que não satisfaz a equação da continuidade) baseado num campo de pressão estimado (P^*) será denotado por: u^*, v^* e w^* . O referido campo imperfeito de velocidade será oriundo da solução das Equações do Momentum na forma discretizada:

$$a_e \cdot u_e^* = \sum a_{viz} \cdot u_{viz}^* + b_u + A_e \cdot (P_P^* - P_E^*) \quad (4.311a)$$

$$a_n \cdot v_n^* = \sum a_{viz} \cdot v_{viz}^* + b_v + A_n \cdot (P_P^* - P_N^*) \quad (4.311b)$$

$$a_t \cdot w_t^* = \sum a_{viz} \cdot w_{viz}^* + b_w + A_t \cdot (P_P^* - P_T^*) \quad (4.311c)$$

4.23 Correções da Pressão e da Velocidade

Visa-se encontrar um procedimento sequenciado e iterativo (algoritmo) que melhore a estimativa do campo de pressão de modo que o campo imperfeito de velocidade (as componentes do campo de velocidade são calculadas nas faces do V.C.'s da malha principal, que corresponde aos pontos nodais da malha secundária) se aproxime progressivamente da solução que satisfaz a Equação da Continuidade na forma discretizada. As diferenças entre os campos corretos e os campos aproximados de pressão e velocidade são definidos como as respectivas correções:

$$P - P^* = P' \quad (4.312)$$

$$u - u^* = u' \quad (4.313a)$$

$$v - v^* = v' \quad (4.313b)$$

$$w - w^* = w' \quad (4.313c)$$

Subtraindo as equações (4.311a)-(4.311c) das equações (4.310a)-(4.310c):

$$a_e \cdot (u_e - u_e^*) = \sum a_{viz} \cdot (u - u^*)_{viz} + A_e \cdot [(P_P - P_E) - (P_P^* - P_E^*)] \quad (4.314a)$$

$$a_n \cdot (v_n - v_n^*) = \sum a_{viz} \cdot (v - v^*)_{viz} + A_n \cdot [(P_P - P_N) - (P_P^* - P_N^*)] \quad (4.314b)$$

$$a_t \cdot (w_t - w_t^*) = \sum a_{viz} \cdot (w - w^*)_{viz} + A_t \cdot [(P_P - P_T) - (P_P^* - P_T^*)] \quad (4.314c)$$

Numa forma mais compacta:

$$a_e \cdot u'_e = \sum a_{viz} \cdot u'_{viz} + A_e \cdot [P'_P - P'_E] \quad (4.315a)$$

$$a_n \cdot v'_n = \sum a_{viz} \cdot v'_{viz} + A_n \cdot [P'_P - P'_N] \quad (4.315b)$$

$$a_t \cdot w'_t = \sum a_{viz} \cdot w'_{viz} + A_t \cdot [P'_P - P'_T] \quad (4.315c)$$

Rearrmando:

$$u'_e = \frac{\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}}{a_e} + \frac{A_e}{a_e} \cdot [P'_P - P'_E] \quad (4.316a)$$

$$v'_n = \frac{\sum a_{viz} \cdot v'_{viz}}{a_n} + \frac{A_n}{a_n} \cdot [P'_P - P'_N] \quad (4.316b)$$

$$w'_t = \frac{\sum a_{viz} \cdot w'_{viz}}{a_t} + \frac{A_t}{a_t} \cdot [P'_P - P'_T] \quad (4.316c)$$

Defini-se: $d_e = \frac{A_e}{a_e}$; $d_n = \frac{A_n}{a_n}$ e $d_t = \frac{A_t}{a_t}$

Dáí:

$$u'_e = \frac{\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}}{a_e} + d_e \cdot [P'_P - P'_E] \quad (4.317a)$$

$$v'_n = \frac{\sum a_{viz} \cdot v'_{viz}}{a_n} + d_n \cdot [P'_P - P'_N] \quad (4.317b)$$

$$w'_t = \frac{\sum a_{viz} \cdot w'_{viz}}{a_t} + d_t \cdot [P'_P - P'_T] \quad (4.317c)$$

As equações (4.317a)-(4.317c) são denominadas fórmulas para correção das componentes da velocidade e podem ser escrita:

$$u_e = u_e^* + \frac{\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}}{a_e} + d_e \cdot [P'_P - P'_E] \quad (4.318a)$$

$$v_n = v_n^* + \frac{\sum a_{viz} \cdot v'_{viz}}{a_n} + d_n \cdot [P'_P - P'_N] \quad (4.318b)$$

$$w_t = w_t^* + \frac{\sum a_{viz} \cdot w'_{viz}}{a_t} + d_t \cdot [P'_P - P'_T] \quad (4.318c)$$

As equações (4.318a)-(4.318c) mostram que o campo aproximado de velocidade (u^*, v^* e w^*) será corrigida pela correção da pressão de modo a obter um novo campo de velocidade (aproximado). A depender das considerações aplicadas nas fórmulas para correção das componentes da velocidade e sua posterior aplicação na Equação da Continuidade, obtém-se uma determinada Equação para Correção da Pressão, o que determina a essência do algoritmo que encerra o acoplamento entre a pressão e a velocidade; dentre os mais comentados na literatura consultada neste trabalho destacam-se:

- *SIMPLE*
- *SIMPLER*
- *SIMPLEC*

4.24 Algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations)

A consideração inicial na qual se fundamenta o desenvolvimento do referido algoritmo é a eliminação dos termos que retratam a contribuição associada aos pontos nodais vizinhos ($\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}$, $\sum a_{viz} \cdot v'_{viz}$ e $\sum a_{viz} \cdot w'_{viz}$) nas Equações do Momentum na forma discretizada, conseqüentemente assumi-se a seguinte consideração:

$$\frac{\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}}{a_e} \ll d_e \cdot [P'_P - P'_E] \quad (4.319a)$$

$$\frac{\sum a_{viz} \cdot v'_{viz}}{a_n} \ll d_n \cdot [P'_P - P'_N] \quad (4.319b)$$

$$\frac{\sum a_{viz} \cdot w'_{viz}}{a_t} \ll d_t \cdot [P'_P - P'_T] \quad (4.319c)$$

Tendo como resultado as seguinte equações que serão as novas fórmulas para correção das componentes da velocidade:

$$u_e = u_e^* + d_e \cdot [P'_P - P'_E] \quad (4.320a)$$

$$v_n = v_n^* + d_n \cdot [P'_P - P'_N] \quad (4.320b)$$

$$w_t = w_t^* + d_t \cdot [P'_P - P'_T] \quad (4.320c)$$

4.24.1 Equação de Correção da Pressão

A substituição das equações (4.320a)-(4.320c) que corrigem a velocidade, na Equação da Continuidade, na forma discretizada, fornecerá a Equação de Correção da Pressão. A Equação da Continuidade na forma diferencial na situação 3D, apresenta-se como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho.u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho.v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho.w)}{\partial z} = 0 \quad (4.321)$$

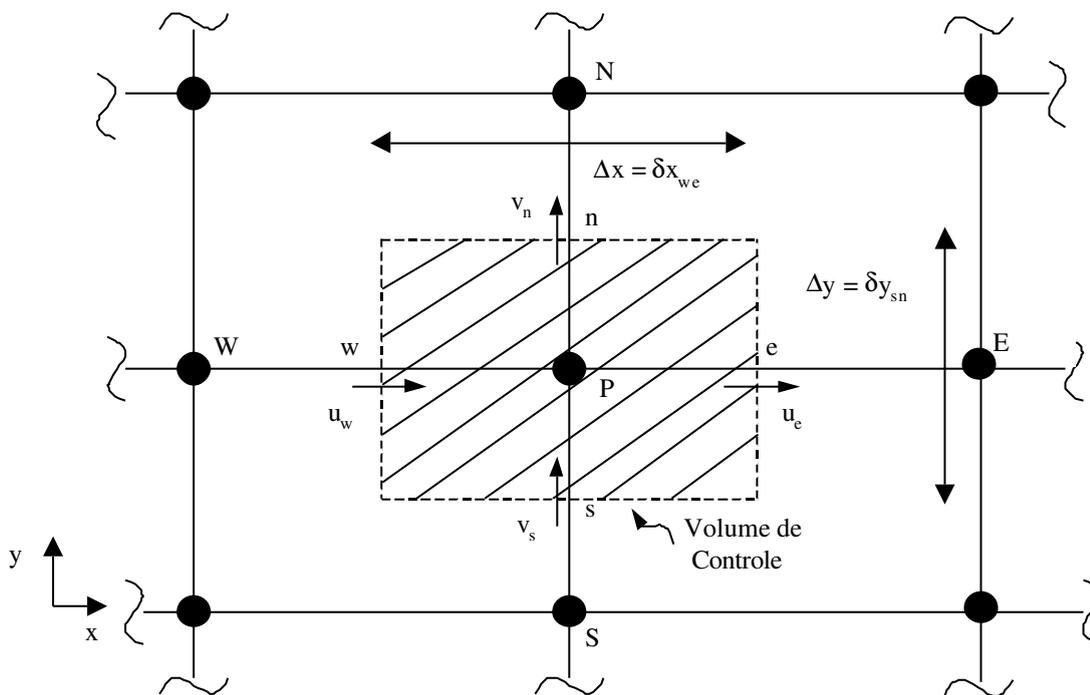


Figura 4.29: Volume de Controle genérico para um configuração bidimensional.(Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 124)

A equação (4.321) será integrada no V.C. genérico mostrado na figura 4.29, empregado para a variável ϕ , estendendo a abordagem para o caso 3D. Para a integração do termo $\partial\rho/\partial t$ assumi-se que a densidade ρ_p é uniforme em todo o volume de controle, empregando-se posteriormente o Esquema Totalmente Implícito para discretizar o referido termo. Os fluxos de massa em cada face do V.C. ($(\rho.u)_w$, $(\rho.u)_e$, $(\rho.v)_s$, $(\rho.v)_n$, $(\rho.w)_b$ e $(\rho.w)_t$) são assumidos como sendo uniformes nas respectivas faces, sendo as componentes

da velocidade avaliada nos pontos nodais da malha secundária, portanto avaliados nas faces dos V.C. que compõem a malha principal.

Equação da Continuidade na forma integrada e discretizada:

$$\frac{(\rho_p - \rho_p^o) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}{\Delta t} + [(\rho \cdot u)_e - (\rho \cdot u)_w] \Delta y \cdot \Delta z + [(\rho \cdot v)_n - (\rho \cdot v)_s] \Delta x \cdot \Delta z + [(\rho \cdot w)_t - (\rho \cdot w)_b] \Delta x \cdot \Delta y = 0 \quad (4.322)$$

Substitui-se as componentes da velocidade na equação (4.322) pelas fórmulas que fornecem a correção das componentes da velocidade:

$$\begin{aligned} & \frac{(\rho_p - \rho_p^o) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}{\Delta t} + \left\{ \rho_e \cdot u_e^* + \rho_e \cdot d_e \cdot (P'_p - P'_E) \right\} - \left\{ \rho_w \cdot u_w^* + \rho_w \cdot d_w \cdot (P'_w - P'_p) \right\} \Delta y \cdot \Delta z + \\ & + \left\{ \rho_n \cdot v_n^* + \rho_n \cdot d_n \cdot (P'_p - P'_N) \right\} - \left\{ \rho_s \cdot v_s^* + \rho_s \cdot d_s \cdot (P'_s - P'_p) \right\} \Delta x \cdot \Delta z + \\ & + \left\{ \rho_t \cdot w_t^* + \rho_t \cdot d_t \cdot (P'_p - P'_T) \right\} - \left\{ \rho_b \cdot w_b^* + \rho_b \cdot d_b \cdot (P'_B - P'_p) \right\} \Delta x \cdot \Delta y = 0 \end{aligned} \quad (4.323)$$

Rearranjando:

$$\begin{aligned} & \left[\rho_w \cdot d_w \cdot \Delta y \cdot \Delta z + \rho_e \cdot d_e \cdot \Delta y \cdot \Delta z + \rho_s \cdot d_s \cdot \Delta x \cdot \Delta z + \rho_n \cdot d_n \cdot \Delta x \cdot \Delta z + \rho_b \cdot d_b \cdot \Delta x \cdot \Delta y + \rho_t \cdot d_t \cdot \Delta x \cdot \Delta y \right] P'_p = \\ & = (\rho_w \cdot d_w \cdot \Delta y \cdot \Delta z) P'_w + (\rho_e \cdot d_e \cdot \Delta y \cdot \Delta z) P'_E + (\rho_s \cdot d_s \cdot \Delta x \cdot \Delta z) P'_S + (\rho_n \cdot d_n \cdot \Delta x \cdot \Delta z) P'_N + (\rho_b \cdot d_b \cdot \Delta x \cdot \Delta y) P'_B + \\ & + (\rho_t \cdot d_t \cdot \Delta x \cdot \Delta y) P'_T + \frac{(\rho_p - \rho_p^o) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}{\Delta t} + [(\rho \cdot u^*)_w - (\rho \cdot u^*)_e] \Delta y \cdot \Delta z + [(\rho \cdot v^*)_s - (\rho \cdot v^*)_n] \Delta x \cdot \Delta z + \\ & + [(\rho \cdot w^*)_b - (\rho \cdot w^*)_t] \Delta x \cdot \Delta y \end{aligned} \quad (4.324)$$

Expressa-se a equação anterior na forma padrão das equações diferenciais parciais discretizadas a partir da forma integrada para o caso 3D:

$$a_p \cdot \phi_p = a_w \cdot \phi_w + a_e \cdot \phi_e + a_s \cdot \phi_s + a_n \cdot \phi_n + a_b \cdot \phi_b + a_t \cdot \phi_t + b \quad \therefore \quad \phi = P' \quad (4.325)$$

Onde:

$$a_w = \rho_w \cdot d_w \cdot \Delta y \cdot \Delta z \quad (4.326a)$$

$$a_e = \rho_e \cdot d_e \cdot \Delta y \cdot \Delta z \quad (4.326b)$$

$$a_s = \rho_s \cdot d_s \cdot \Delta x \cdot \Delta z \quad (4.326c)$$

$$a_n = \rho_n \cdot d_n \cdot \Delta x \cdot \Delta z \quad (4.326d)$$

$$a_B = \rho_b \cdot d_b \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (4.326e)$$

$$a_T = \rho_t \cdot d_t \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (4.326f)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T \quad (4.326g)$$

$$b = \frac{(\rho^o_P - \rho_P) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}{\Delta t} + [(\rho \cdot u^*)_w - (\rho \cdot u^*)_e] \Delta y \cdot \Delta z + [(\rho \cdot v^*)_s - (\rho \cdot v^*)_n] \Delta x \cdot \Delta z + [(\rho \cdot w^*)_b - (\rho \cdot w^*)_t] \Delta x \cdot \Delta y \quad (4.326h)$$

Tendo em vista que a massa específica é avaliada nos pontos nodais (malha principal) os valores da massa específica nas interfaces devem ser avaliados pelo emprego de uma interpolação conveniente de modo a assegurar a consistência do valor da massa específica na interface para os dois volumes de controle, delimitados pela mesma, de modo que a Regra Básica 1 seja obedecida.

Percebe-se a partir da equação (4.322) que o termo b na equação discretizada que fornece a correção da pressão é o negativo do 1º membro da Equação da Continuidade na forma discretizada, avaliado em termos das componentes do campo imperfeito de velocidade. Caso b seja zero, o campo de velocidade (avaliado nos pontos nodais da malha secundária), em conjunção com o valor de $(\rho^o_P - \rho_P)$, avaliado nos pontos nodais da malha principal, satisfazem a Equação da Continuidade, e nenhuma correção da pressão é necessária. O termo b, equação (4.326h), pode ser interpretado como uma “fonte de massa”, cuja correção da pressão, através da sua associação com as componentes da velocidade, deve eliminar (PATANKAR, 1980). Quando o termo b for nulo, os valores de u^* , v^* e w^* ; satisfazem a equação da continuidade, sendo desnecessário efetuar novas correções da pressão.

4.24.2 Seqüência de operações do Algoritmo SIMPLE

- 1) Estima-se do campo de pressão P^* e um campo de velocidade: u^* , v^* e w^* .
- 2) Resolução das Equações do Momentum, equações (4.311a)-(4.311c) de modo a obter novas componente do campo de velocidade: u^* , v^* e w^* ; associadas ao campo de pressão P^* .
- 3) Resolve-se a Equação de Correção da Pressão.
- 4) Corrige-se a pressão a partir dos valores de P'
- 5) Calculam-se os valores corrigidos das componentes das velocidade: u , v e w ; aplicando as fórmulas para correção da velocidade, equações (4.320a)-(4.320c).
- 6) Resolvem-se as equações discretizadas para outros ϕ 's (tais como: temperatura, concentração e quantidades que retratam a turbulência) caso eles influenciem o campo de escoamento através das propriedades do fluido, termo fonte, etc. Se uma variável dependente ϕ , em particular, não influencia o campo de escoamento, é sugerido seu cálculo após uma solução convergida para o campo de escoamento.
- 7) Trata-se o campo de pressão corrigido P como a nova estimativa de pressão: P^* ; considera-se os valores corrigidos das componentes da velocidade (u, v e w) como as novas componentes do campo imperfeito de velocidade (u^* , v^* e w^*).
- 8) Retorna-se a etapa 2 repetindo tais procedimentos até que a solução convergida seja obtida.

As omissão dos termos $\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}$, $\sum a_{viz} \cdot v'_{viz}$ e $\sum a_{viz} \cdot w'_{viz}$, é suficiente para obtenção da equação de P' (Equação de Correção da Pressão) numa forma tratável, por se enquadrar na forma geral das equações diferenciais parciais na forma discretizada para a variável genérica ϕ , possibilitando uma melhor adoção de uma solução que obedece a um procedimento seqüencial (algoritmo)(PATANKAR, 1980).

As palavras *Semi-Implicit* no nome *SIMPLE* são usadas para reconhecer a omissão dos termos : $\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}$, $\sum a_{viz} \cdot v'_{viz}$ e $\sum a_{viz} \cdot w'_{viz}$, nas Equações do Momentum. Os referidos termos representam uma influência indireta ou implícita da correção da pressão na

velocidade, pois a correção da pressão nos pontos nodais próximos (malha principal) pode alterar as componentes da velocidade nos pontos nodais vizinhos , e portanto causa uma correção de velocidade no ponto nodal (malha secundária) que está sendo considerado. Como tal influência não foi incluída, trabalha-se com um esquema que é somente parcialmente, e não totalmente, implícito.

É importante focar atenção especial nas operações do Algoritmo *SIMPLE* durante a iteração “final”, após a qual declara-se a convergência. Na última iteração do processo iterativo:

- a) Dispõe-se de um campo de pressão corrigido: P^* , a partir da iteração anterior.
- b) Resolvendo-se as Equações da Quantidade de Movimento, obtém-se: u^* , v^* e w^* ; que caracterizam um “novo” campo imperfeito de velocidade.
- c) Calcula-se então o termo fonte b da Equação de Correção da Pressão (Equação de P'). Quando o mesmo for suficientemente pequeno (para todos os volumes de controle nos quais o domínio de solução foi dividido), o campo atual de velocidade satisfaz não apenas a Equações do Momentum mas também a Equação da Continuidade. Neste caso, o processo iterativo de solução convergiu, logo o termo “fonte de massa” (termo b) serve como um útil indicador da convergência da solução do campo de escoamento.

Percebe-se que a solução atual da equação de P' não será necessária durante a interação final, logo a solução convergida não é influenciada por quaisquer aproximações feitas para obter a referida equação (Equação de Correção da Pressão) – uma equação que realmente não é empregada na iteração final (PATANKAR, 1980)

4.24.3 Comentários sobre a Equação de Correção da Pressão

1) A Equação de Correção da Pressão está baseada numa forma aproximada das Equações do Momentum, desconsideração dos termos $(\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}, \sum a_{viz} \cdot v'_{viz}$ e $\sum a_{viz} \cdot w'_{viz})$. Assim, o campo corrigido de velocidade satisfará a Equação da Continuidade, mas não satisfará as Equações do Momentum.

2) A Equação de Correção da Pressão é propensa a divergência, pois a aproximação feita para obter a equação de P' influencia a velocidade de convergência. Em função dos valores de P' serem geralmente superestimados em consequência da não consideração dos termos $(\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}, \sum a_{viz} \cdot v'_{viz}$ e $\sum a_{viz} \cdot w'_{viz})$, as aproximações nas fórmulas para correção das componentes da velocidade dependem apenas das correções da pressão. Logo é necessário o emprego de sub-relaxação (nas correções da pressão e das componentes da velocidade) no processo iterativo de solução:

$$u = u^* + \alpha \cdot u' \quad (4.327a)$$

$$v = v^* + \alpha \cdot v' \quad (4.327b)$$

$$w = w^* + \alpha \cdot w' \quad (4.327c)$$

$$P = P^* + \alpha_p \cdot P' \quad (4.328)$$

Os valores dos fatores de sub-relaxação, sugeridos por PATANKAR (1980), para as correções das componentes da velocidade e da pressão, são respectivamente: $\alpha = 0.5$ e $\alpha_p = 0.8$; em função dos mesmos terem sido satisfatório num grande número de cálculos computacionais de campos de escoamento. No entanto, isto não implica que tais valores sejam ótimos ou forneçam convergência para todos os problemas, pois os valores ótimos dos fatores de relaxação são freqüentemente dependentes do problema, logo a experiência em resolução numérica de problemas em que o campo de escoamento é uma incógnita é útil, entretanto, novos problemas, algumas vezes, exigem diferentes práticas de relaxação (PATANKAR, 1980)

4.25 Condições de contorno da Equação de Correção da Pressão:

As Equações do Momentum são casos especiais da Equação Geral de Transporte, e portanto, o tratamento das condições de fronteira anteriormente desenvolvido pode ser aplicado às mesmas. No entanto, desde que as Equação de Correção da Pressão não é uma das equações básicas na forma discretizada, algumas explanações do tratamento de suas condições de fronteiro fazem-se necessárias.

Normalmente, há duas espécies de condições de contorno para a referida equação:

1) A pressão na fronteira é conhecida (a velocidade é desconhecida):

Neste caso, dada uma estimativa do campo de pressão P^* , o valor do mesmo nas fronteira é conhecido, logo nenhuma correção é feita na pressão, na respectiva fronteira do domínio de solução: $P'_B = 0$. Tal condição é análoga ao caso onde ϕ_B é especificada na abordagem genérica anteriormente desenvolvida.

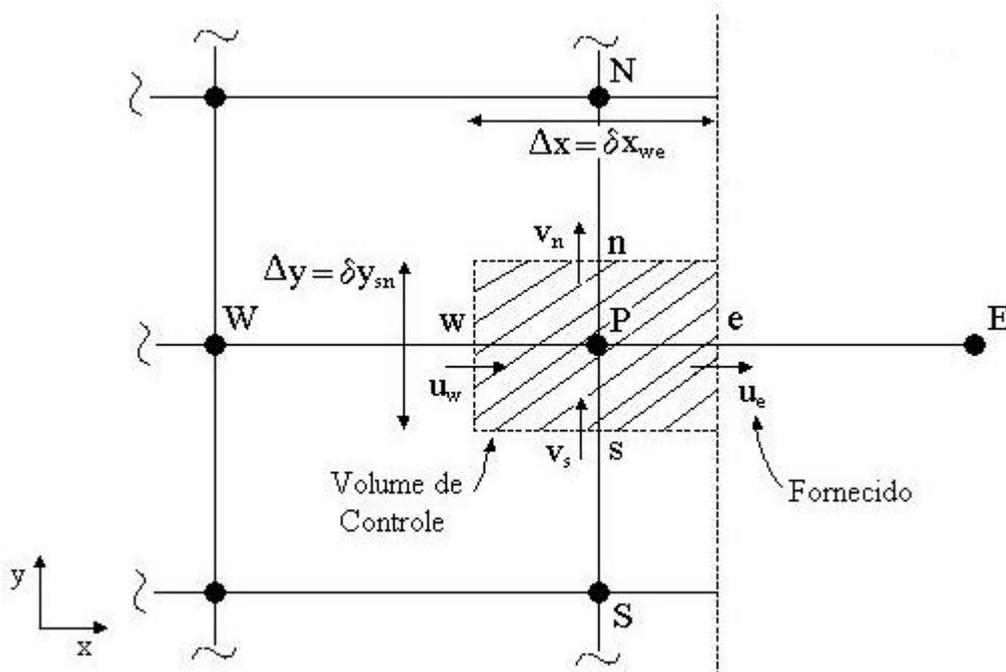


Figura 4.30: Condição de contorno num Volume de Controle de fronteira para a Equação da Continuidade. (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 130)

2) A velocidade normal a fronteira é conhecida:

Caso a malha seja projetada de modo que as fronteiras coincidam com as faces dos volumes de controle de fronteira, como mostrado na figura 4.30. A componente da velocidade (u_e) é conhecida, para o exemplo em questão, neste caso a correção da respectiva componente da velocidade é nula ($u_e^* = 0$), sendo nulo, também, o coeficiente associado ao ponto nodal de fronteira, correspondente na equação de P' ; para o caso mostrado na figura 4.30: $a_E = 0$. Logo, nenhuma informação a cerca de P'_E (para o caso em questão) será necessária. Tal condição é análoga ao caso de fluxo de ϕ especificado na abordagem genérica anteriormente desenvolvida.

4.26 A natureza relativa da pressão

Nos escoamentos incompressíveis em que todas as condições de fronteira são especificadas pelas componentes da velocidade normais às mesmas, a equação de P' (Equação de Correção da Pressão) não pode fornecer um resultado absoluto. Isto ocorre porque neste caso: $a_p = \sum a_{viz}$, isto significa que se P' for uma solução, então $(P' + C)$ também será (Regra Básica 4). A pressão, neste situação, é caracterizada como uma variável relativa e somente a diferenças de pressão é importante. Assim, soluções distintas podem ser obtidas para o campo de pressão, mas elas diferirão entre si de uma mesma constante (C) em todos os pontos nodais.

Quando a pressão é especificada na fronteira ou quando $\rho = f(P)$, a indeterminação acima não ocorre.

4.27 Algoritmo *SIMPLER* (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Revised*)

Apesar do algoritmo *SIMPLE* ter sido extensivamente empregado e apresentado bom desempenho, tentou-se melhorar sua taxa de convergência através de uma versão revisada que foi denominada *SIMPLER*.

A motivação no desenvolvimento de uma versão revisada foi a aproximação introduzida na derivação da equação P' (a omissão dos termos $\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}$, $\sum a_{viz} \cdot v'_{viz}$ e $\sum a_{viz} \cdot w'_{viz}$) que conduz a um campo de pressão bastante exagerada, e por isso a sub-relaxação tornar-se essencial. Desde que as correções das componentes da velocidade nos pontos vizinhos são removidas a partir das fórmulas de correção das componentes da velocidade, a correção da pressão fica inteiramente encarregada da correção das componentes da velocidade, e isto resulta em campos de correção de pressão (P') bastante severos. Em muitos casos, é razoável supor que a equação de correção da pressão realiza um trabalho razoavelmente bom no que tange as correções das componentes da velocidade, porém realiza uma pobre correção no campo de pressão (PATANKAR, 1980).

Se a equação de correção da pressão fosse empregada somente na tarefa de corrigir as componentes da velocidade e algum outro meio fosse utilizado na obtenção do campo de pressão, permitiria a construção de um algoritmo mais eficiente. Isto é a essência do *SIMPLER*

4.27.1 Equação da Pressão

A equação para a obtenção do campo de pressão pode ser derivada a partir das Equações do Momentum , equações (4.310a)-(4.310c), reescritas na seguinte forma:

$$u_e = \frac{\sum a_{viz} \cdot u_{viz} + b_u}{a_e} + d_e \cdot (P_P - P_E) \quad (4.329a)$$

$$v_n = \frac{\sum a_{viz} \cdot v_{viz} + b_v}{a_n} + d_n \cdot (P_P - P_N) \quad (4.329b)$$

$$w_t = \frac{\sum a_{viz} \cdot w_{viz} + b_w}{a_t} + d_t \cdot (P_P - P_T) \quad (4.329c)$$

Defini-se as pseudovelocidades (\hat{u}_e , \hat{v}_n e \hat{w}_t):

$$\hat{u}_e = \frac{\sum a_{viz} \cdot u_{viz} + b_u}{a_e} \quad (4.330a)$$

$$\hat{v}_n = \frac{\sum a_{viz} \cdot v_{viz} + b_v}{a_n} \quad (4.330b)$$

$$\hat{w}_t = \frac{\sum a_{viz} \cdot w_{viz} + b_w}{a_t} \quad (4.330c)$$

Percebe-se que as pseudovelocidades são compostas das velocidades (componentes) nos pontos nodais vizinhos (malha secundária) e não contêm nenhuma contribuição da pressão. Logo:

$$u_e = \hat{u}_e + d_e \cdot (P_P - P_E) \quad (4.331a)$$

$$v_n = \hat{v}_n + d_n \cdot (P_P - P_N) \quad (4.331b)$$

$$w_t = \hat{w}_t + d_t \cdot (P_P - P_T) \quad (4.331c)$$

As equações (4.331a)-(4.331c) são as novas fórmulas para correção das componentes da velocidade, a serem empregadas na obtenção de uma equação para pressão.

A aplicação das equações (4.331a)-(4.331c), que corrigem as componentes da velocidade na Equação da Continuidade fornecerá a Equação da Pressão. A Equação da Continuidade na forma diferencial na configuração 3D é expressão pela equação (4.321). A mesma deve ser integrada no V.C. genérico empregado, figura 4.29, para a variável ϕ , em seguida estendendo a abordagem para o caso 3D.

A Equação da Continuidade na forma integrada e discretizada é expressa pela equação (4.322). Substitui-se as componentes das velocidade na referida pelas equações(4.331a)-(4.331c) que são as novas fórmulas para correção das componentes da velocidade:

$$\begin{aligned} & \frac{(\rho_P - \rho^o_P) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}{\Delta t} + \{[\rho_e \cdot \hat{u}_e + \rho_e \cdot d_e \cdot (P_P - P_E)] - [\rho_w \cdot \hat{u}_w + \rho_w \cdot d_w \cdot (P_W - P_P)]\} \Delta y \cdot \Delta z + \\ & + \{[\rho_n \cdot \hat{v}_n + \rho_n \cdot d_n \cdot (P_P - P_N)] - [\rho_s \cdot \hat{v}_s + \rho_s \cdot d_s \cdot (P_S - P_P)]\} \Delta x \cdot \Delta z + \\ & + \{[\rho_t \cdot \hat{w}_t + \rho_t \cdot d_t \cdot (P_P - P_T)] - [\rho_b \cdot \hat{w}_b + \rho_b \cdot d_b \cdot (P_B - P_P)]\} \Delta x \cdot \Delta y = 0 \end{aligned} \quad (4.332)$$

Rearranjando:

$$\begin{aligned} & [\rho_w \cdot d_w \cdot \Delta y \cdot \Delta z + \rho_e \cdot d_e \cdot \Delta y \cdot \Delta z + \rho_s \cdot d_s \cdot \Delta x \cdot \Delta z + \rho_n \cdot d_n \cdot \Delta x \cdot \Delta z + \rho_b \cdot d_b \cdot \Delta x \cdot \Delta y + \rho_t \cdot d_t \cdot \Delta x \cdot \Delta y] P_P = \\ & = (\rho_w \cdot d_w \cdot \Delta y \cdot \Delta z) P_W + (\rho_e \cdot d_e \cdot \Delta y \cdot \Delta z) P_E + (\rho_s \cdot d_s \cdot \Delta x \cdot \Delta z) P_S + (\rho_n \cdot d_n \cdot \Delta x \cdot \Delta z) P_N + (\rho_b \cdot d_b \cdot \Delta x \cdot \Delta y) P_B + \\ & + (\rho_t \cdot d_t \cdot \Delta x \cdot \Delta y) P_T + \frac{(\rho_P - \rho^o_P) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}{\Delta t} + [(\rho \cdot \hat{u})_w - (\rho \cdot \hat{u})_e] \Delta y \cdot \Delta z + [(\rho \cdot \hat{v})_s - (\rho \cdot \hat{v})_n] \Delta x \cdot \Delta z + \\ & + [(\rho \cdot \hat{w})_b - (\rho \cdot \hat{w})_t] \Delta x \cdot \Delta y \end{aligned} \quad (4.333)$$

Expressando a equação (4.333) na forma padrão associada as equações parciais discretizadas a partir da forma integrada, considerando um configuração em 3D:

$$a_P \cdot \phi_P = a_W \cdot \phi_W + a_E \cdot \phi_E + a_S \cdot \phi_S + a_N \cdot \phi_N + a_B \cdot \phi_B + a_T \cdot \phi_T + b \quad \therefore \quad \phi = P \quad (4.334)$$

Onde:

$$a_W = \rho_w \cdot d_w \cdot \Delta y \cdot \Delta z \quad (4.335a)$$

$$a_E = \rho_e \cdot d_e \cdot \Delta y \cdot \Delta z \quad (4.335b)$$

$$a_S = \rho_s \cdot d_s \cdot \Delta x \cdot \Delta z \quad (4.335c)$$

$$a_N = \rho_n \cdot d_n \cdot \Delta x \cdot \Delta z \quad (4.335d)$$

$$a_B = \rho_b \cdot d_b \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (4.335e)$$

$$a_T = \rho_t \cdot d_t \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (4.335f)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T \quad (4.335g)$$

$$b = \frac{(\rho^o_P - \rho_P) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}{\Delta t} + [(\rho \cdot \hat{u})_w - (\rho \cdot \hat{u})_e] \cdot \Delta y \cdot \Delta z + [(\rho \cdot \hat{v})_s - (\rho \cdot \hat{v})_n] \cdot \Delta x \cdot \Delta z + [(\rho \cdot \hat{w})_b - (\rho \cdot \hat{w})_t] \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (4.335h)$$

Percebe-se que a expressão de b para a Equação da Pressão difere da expressão de b para a Equação de Correção da Pressão pela substituição das componentes da velocidade referente ao campo imperfeito de velocidade (u^* , v^* e w^*) pelas pseudovelocidades (\hat{u}_e , \hat{v}_n e \hat{w}_t).

Embora a Equação da Pressão, equação (4.333), e a Equação de Correção da Pressão, equação (4.324), sejam quase idênticas, há uma grande diferença: nenhuma aproximação foi introduzida na derivação da equação da pressão. Logo, se o campo de velocidade correto for usado para calcular as pseudovelocidades, a equação da pressão fornecerá o campo correto de pressão.

4.27.2 Seqüência de operações do Algoritmo SIMPLER

O algoritmo *SIMPLE* revisado (*SIMPLER*) consiste em resolver a Equação da Pressão para obter o campo de pressão e resolver a Equação de Correção da Pressão somente para corrigir as componentes da velocidade. A seqüência de operações podem ser estabelecidas como:

- 1) Inicia-se com uma estimativa do campo de velocidade.
- 2) Calcula-se os coeficientes para as Equações do Momentum, e portanto calcula-se as pseudovelocidades (\hat{u}_e , \hat{v}_n e \hat{w}_t) empregando as equações (4.330a)-(4.330c), pela substituição dos valores das componentes da velocidade nos pontos nodais vizinhos (malha secundária).
- 3) Calcula-se os coeficientes para a Equação da Pressão, empregando-se as equações (4.335a)-(4.335h) e resolvendo-a obtém-se o campo de pressão.

- 4) Considera-se o campo de pressão anteriormente obtido como sendo P^* , campo de pressão estimado, possibilitando a resolução das equações (4.311a)-(4.311c) de modo a obter: u^* , v^* e w^* .
- 5) Calcula-se a “fonte de massa”, equação (4.326h), termo b da Equação de Correção da Pressão (Equação de P').
- 6) Corrige-se o campo de velocidade pelo emprego das equações (4.320a)-(4.320c), porém não se corrige a pressão.
- 7) Resolvem-se as equações discretizadas para outros ϕ 's (tais como: temperatura, concentração e quantidades que retratam a turbulência). Se for necessário, pois se uma variável dependente ϕ , em particular, não influencia o campo de escoamento é sugerido seu cálculo após uma solução convergida para o campo de escoamento.
- 8) Retorna-se as etapa 2 repetindo tais procedimentos até que a solução convergida seja obtida.

4.28 Comentários gerais a respeito do *SIMPLE* e do *SIMPLER*

- 1) Em geral, desde que a Equação de Correção da Pressão produz um campo razoável de velocidade, e a Equação da Pressão calcula direto (sem aproximação) o campo de pressão para um dado campo de velocidade, a solução final converge mais rapidamente.
- 2) No *SIMPLE*, um campo de pressão estimado desempenha um papel importante. Por outro lado, no *SIMPLER* não é usado estimativa do campo de pressão, porém o mesmo é extraído a partir de um dado campo de velocidade.
- 3) Se acontecer de um dado campo de velocidade ser o campo correto de velocidade, então a Equação da Pressão presente no *SIMPLER* fornecerá o campo de pressão correto, e não será necessário nenhuma iteração adicional. Se por outro lado, o referido campo correto de velocidade e uma estimativa do campo de pressão forem usados para iniciar o algoritmo *SIMPLE*, há inicialmente uma deteriorização do campo de velocidade, pois o uso da estimativa do campo de pressão conduz a um campo imperfeito de velocidade que será diferente do campo correto de velocidade. Então, as aproximações embutidas na Equação de P' (Equação de Correção da Pressão) produzirão um campo incorreto de pressão no final

da primeira iteração. A convergência consumirá muitas iterações, apesar do fato do campo correto de velocidade ter sido empregado na estimativa inicial.

4) Devido as similaridades entre as Equações da Pressão e a Equação de Correção da Pressão, as discussões a respeito das condições de contorno da Equação de P' são também relevantes para a Equação da Pressão. Além do mais, a natureza relativa da pressão, anteriormente comentada, foi explanada, também, em função da sua conexão com a Equação da Pressão

5) Apesar de que o *SIMPLER* obter a convergência mais rápido, menor número de iterações, que o *SIMPLE* é um fato reconhecido que uma iteração do *SIMPLER* envolve um maior esforço computacional. Pois, primeiro a equação da pressão tem que ser resolvida com uma adicional resolução de todas as equações envolvidas no *SIMPLE*, e segundo, os cálculos de \hat{u}_e , \hat{v}_n e \hat{w}_t , representam um esforço que não existe no *SIMPLE*. Entretanto, desde que o algoritmo *SIMPLER* exige menos iterações para atingir a convergência, o adicional esforço computacional por iteração é mais que compensado por economia do esforço computacional global (PATANKAR, 1980).

4.29 Algoritmo *SIMPLEC* (*SIMPLE Consistent*)

4.29.1 Comentários Gerais

O algoritmo *SIMPLEC* é derivado do *SIMPLE*; sabendo-se que o algoritmo *SIMPLE* faz o acoplamento entre pressão e velocidade, concatenando as equações discretizadas do Momentum e Continuidade, sendo que a solução da Equação de P' resultante pode representar mais de 80% do esforço computacional na resolução de problemas onde o campo de escoamento é uma incógnita, buscou-se a obtenção de um algoritmo de convergência mais rápida, no caso o *SIMPLEC*. (RAITHBY e VAN DOORMAAL, 1984).

Desde que a principal aproximação que resulta no algoritmo *SIMPLE* consiste em desprezar os termos: $\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}$, $\sum a_{viz} \cdot v'_{viz}$ e $\sum a_{viz} \cdot w'_{viz}$; resultando nas fórmulas para correção das componentes da velocidade expressas pelas equações (4.320a)-(4.320c).

VAN DOORMAAL e RAITBY (1984) questionam tal procedimento, tendo em vista que as magnitudes dos termos $\sum a_{viz} \cdot u'_{viz}$, $\sum a_{viz} \cdot v'_{viz}$ e $\sum a_{viz} \cdot w'_{viz}$; são iguais as magnitudes dos termos que permanecem no lado esquerdo das Equações do Momentum, na forma discretizada, empregadas na obtenção das fórmulas para correção das componentes da velocidade: $a_e \cdot u'_e$, $a_n \cdot v'_n$ e $a_t \cdot w'_t$; pois:

$$a_e = \left(\sum a_{viz} - S_{P_e} \cdot \Delta V \right) \quad (4.336a)$$

$$a_n = \left(\sum a_{viz} - S_{P_n} \cdot \Delta V \right) \quad (4.336b)$$

$$a_t = \left(\sum a_{viz} - S_{P_t} \cdot \Delta V \right) \quad (4.336c)$$

onde S_{P_e} , S_{P_n} e S_{P_t} , são os coeficientes das linearizações do termos fonte relativo as Equações da Quantidade de Movimento, nos respectivos pontos nodais (malha secundária). O fato anteriormente citado, segundo VAN DOORMAAL e RAITBY (1984), caracteriza uma inconsistência. Para introduzir uma aproximação consistente, a qual fornecerá uma expressão adequadamente simples para P' , os termos: $\sum a_{viz} \cdot u'_e$, $\sum a_{viz} \cdot v'_n$ e $\sum a_{viz} \cdot w'_t$; são respectivamente subtraídos de ambos os lados das equações (4.315a)-(4.315c):

$$(a_e - \sum a_{viz}) \cdot u'_e = \sum a_{viz} \cdot (u'_{viz} - u'_e) + A_e \cdot [P'_P - P'_E] \quad (4.337a)$$

$$(a_n - \sum a_{viz}) \cdot v'_n = \sum a_{viz} \cdot (v'_{viz} - v'_n) + A_n \cdot [P'_P - P'_N] \quad (4.337b)$$

$$(a_t - \sum a_{viz}) \cdot w'_t = \sum a_{viz} \cdot (w'_{viz} - w'_t) + A_t \cdot [P'_P - P'_T] \quad (4.337c)$$

Na aproximação associada ao *SIMPLEC* os termos: $\sum a_{viz} \cdot (u'_{viz} - u'_e)$, $\sum a_{viz} \cdot (v'_{viz} - v'_n)$ e $\sum a_{viz} \cdot (w'_{viz} - w'_t)$; são desprezados, tal procedimento é dito consistente em função dos valores associadas a casa parcela envolvida

na respectiva subtração: $(u'_{viz} - u'_e)$, $(v'_{viz} - v'_n)$ e $(w'_{viz} - w'_t)$, apresentarem a mesma ordem de grandeza. Tem-se como resultado as seguintes equações:

$$u_e = u_e^* + \frac{A_e}{a_e - \sum a_{viz}} \cdot [P'_P - P'_E] \quad (4.338a)$$

$$v_n = v_n^* + \frac{A_n}{a_n - \sum a_{viz}} \cdot [P'_P - P'_N] \quad (4.338b)$$

$$w_t = w_t^* + \frac{A_t}{a_t - \sum a_{viz}} \cdot [P'_P - P'_B] \quad (4.338c)$$

Rearrmando as equações (4.338a)-(4.338c) para um forma mais compacta:

$$u_e = u_e^* + d_e \cdot [P'_P - P'_E] \quad (4.339a)$$

$$v_n = v_n^* + d_n \cdot [P'_P - P'_N] \quad (4.339b)$$

$$w_t = w_t^* + d_t \cdot [P'_P - P'_T] \quad (4.339c)$$

Onde:

$$d_e = \frac{A_e}{a_e - \sum a_{viz}} \quad (4.340a)$$

$$d_n = \frac{A_n}{a_n - \sum a_{viz}} \quad (4.340b)$$

$$d_t = \frac{A_t}{a_t - \sum a_{viz}} \quad (4.340c)$$

As aproximações associadas ao algoritmo *SIMPLEC* remove a necessidade de sub-relaxação na correção da pressão, logo $\alpha_p = 1,0$. As equações e a seqüência de etapas do *SIMPLEC* são idênticas as do algoritmo *SIMPLE*, com as seguintes exceções:

1) Os cálculos do “d’s” empregam as equações (4.340a)-(4.340c) obtidas a partir das considerações intrínsecas do *SIMPLEC*.

2) Os valores dos “d’s” calculados a partir do *SIMPLEC* serão empregados na obtenção dos coeficientes das Equações de Correção da Pressão (Equação de P'), equações (4.326a)-(4.326h), e nas fórmulas das correções das componentes da velocidade, equações (4.339a)-(4.339c).

3) A correção da pressão não é sub-relaxada de modo que $\alpha_p = 1,0$ na equação (4.328).

4.29.2 Seqüência de operações do Algoritmo *SIMPLEC*

1) Estima-se um campo de pressão P^* e um campo de velocidade : u^*, v^* e w^* .

2) Resolução das Equações do Momentum (equações (4.311a)-(4.311c)) de modo a obter novos valores para as componentes do campo de velocidade: u^*, v^* e w^* ; associados ao campo de pressão P^* .

3) Calcula-se os “d’s” empregando as equações (equações (4.340a)-(4.340c)) inerentes ao *SIMPLEC*.

4) Corrige-se a pressão a partir dos valores de P' , obtidos pela resolução da Equação de Correção da Pressão, equação (4.325), empregando os “d’s”, anteriormente calculados, na avaliação dos coeficientes da referida equação. Vale ressaltar que a sub-relaxação não é empregada na correção da pressão : $\alpha_p = 1,0$.

5) Calculam-se os valores corrigidos das componentes da velocidade: u, v e w ; aplicando-se as fórmulas para correção das componentes velocidade, equações (4.339a)-(4.339c), que empregarão os “d’s” associados a modificação inerente ao *SIMPLEC*.

6) Resolvem-se as equações discretizadas para outros ϕ 's (tais como: temperatura, concentração e quantidades que retratam a turbulência) caso eles influenciem o campo de escoamento através das propriedades do fluido, termo fonte, etc. Se uma variável dependente ϕ , em particular, não influencia o campo de escoamento, é sugerido seu cálculo após uma solução convergida para o campo de escoamento.

7) Trata-se o campo de pressão corrigido P como a nova estimativa do campo de pressão: P^* ; consideram-se os valores corrigidos das componentes da velocidade (u, v e w) como as novas componentes do campo imperfeito de velocidade (u^*, v^* e w^*).

8) Retorna-se a etapa 2 repetindo tais procedimentos até que a solução convergida seja obtida.

4.30 Comentários gerais a respeito do *SIMPLE*, *SIMPLER* e *SIMPLEC*

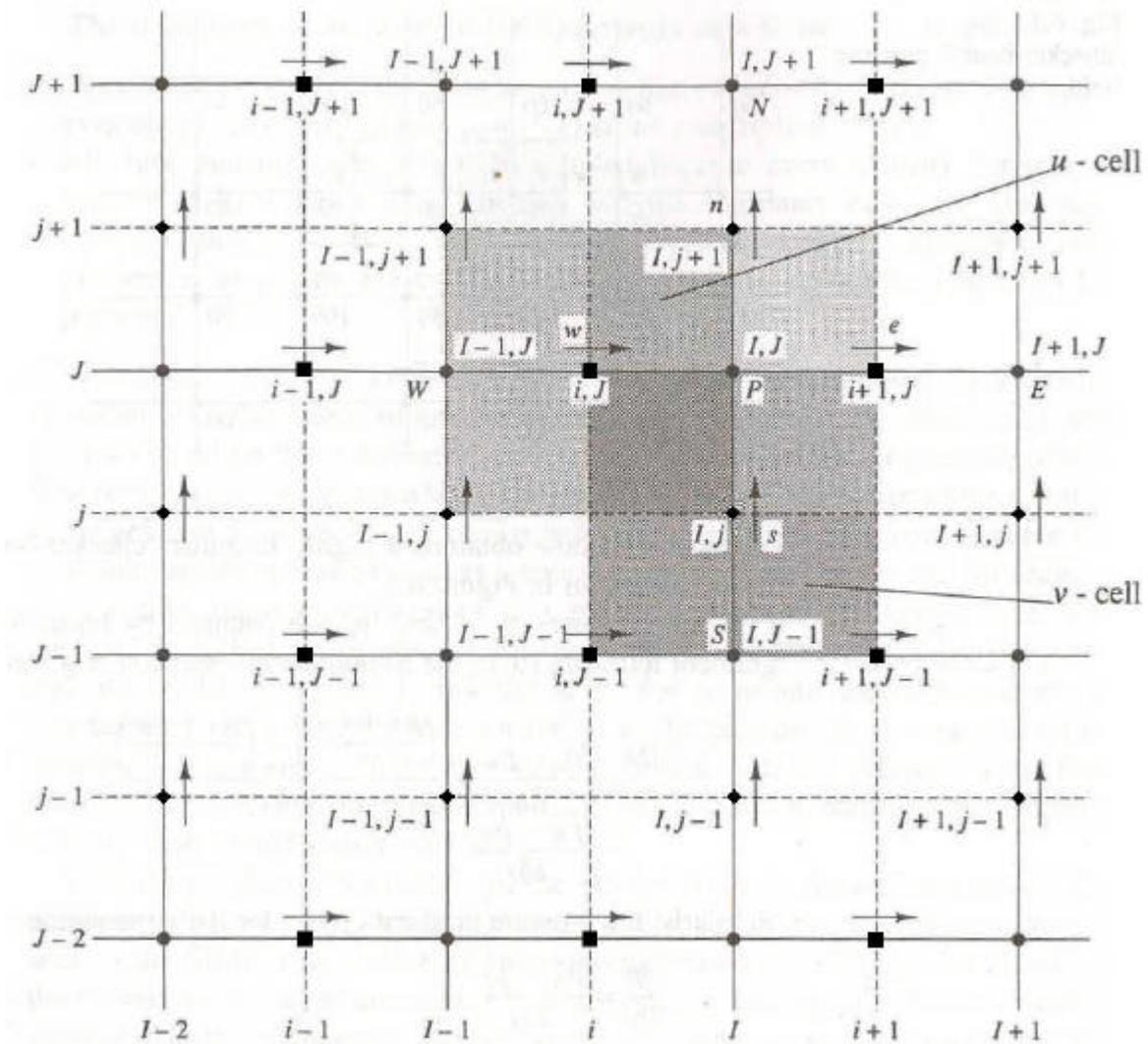
Até o presente momento trabalhou-se na explanação de 3 dos mais populares algoritmos que efetuam o acoplamento pressão e velocidade: *SIMPLE*, *SIMPLER*, *SIMPLEC* e *PISO*; empregados no Método dos Volumes Finitos (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

O *SIMPLE* é o algoritmo mais direto e tem sido usado com sucesso na implementação de numerosos problemas inerentes à *CFD*. Suas variações podem resultar numa economia de esforço computacional devido melhorias no que tange a convergência. Apesar do número de cálculos envolvidos no algoritmo *SIMPLER* ser em torno de 30% superior aos envolvidos no algoritmo *SIMPLE*, a rápida taxa de convergência reduz o tempo computacional em torno de 30–50%. Por isso o algoritmo *SIMPLER* é freqüentemente usado como o procedimento *default* nos códigos comerciais de *CFD* (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

O *SIMPLEC* tem mostrado ser tão eficientes quanto o *SIMPLER* em certos tipos de escoamentos, porém não é claro se ele pode ser categoricamente declarado como melhor que o *SIMPLER*. Comparações têm mostrado que a performance de cada algoritmo depende das condições do escoamento, do grau de acoplamento entre as Equações do Momentum e equações escalares – em escoamentos associados com processos de combustão, por exemplo, há dependência da densidade local como a concentração e temperatura -, da sobre-relaxação usada e algumas vezes até mesmo dos detalhes da técnica numérica empregada para resolver as equações algébricas. Vale ressaltar que a sub-relaxação é exigida em todos os métodos de acoplamento pressão e velocidade até aqui comentados, de modo a assegurar a estabilidade numérica do processo iterativo, sendo que os métodos iterativos usando o *SIMPLER* ou *SIMPLEC* têm como característica, convergência robusta em problemas fortemente acoplados, porém não pode declarar qual é superior (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

Visando uma melhor compressão dos algoritmos que efetuam acoplamento pressão e velocidade, e da estratégia da malha deslocada, aplicado nas Equações do Momentum na forma discretizada, as quais calculam as componentes do campo de

velocidade, serão mostrados os diagramas de bloco dos algoritmos tratados neste trabalho. No intuito de não sobrecarregar a notação empregar-se-á uma abordagem em 2D que permita uma melhor compreensão dos detalhes inerentes à malha numérica, conforme mostrado na figura 4.31:



- : pontos nodais (malha secundária) onde são calculadas as componentes da velocidade na direção x (Componente “u”).
- ◆ : pontos nodais (malha secundária) onde são calculadas as componentes da velocidade na direção y (Componente “v”).

Figura 4.31: Malha genérica em 2D mostrando um ponto nodal P da malha principal e seus vizinhos, bem como pontos nodais da malha deslocada (malha secundária). (Fonte: adaptada a partir de VERSTEEG E MALALASEKERA, 1995, pág. 138)

Os índices retratados por letras maiúsculas, na figura 4.31, estão associados as posições dos pontos nodais da malha principal e os índices retratados por letras minúsculas

estão associados aos pontos nodais da malha secundária, em algumas situações poderão ocorrer a combinação de letras maiúsculas e minúsculas num mesmo índice; por exemplo: a componente da velocidade na direção x apresentará índice (i,J) na face “w” associada a um ponto nodal genérico da malha principal (ponto nodal P)

4.31 Procedimento de solução de problemas em regime estacionário, tendo como incógnita o campo de escoamento (acoplamento pressão e velocidade)

Em tais casos o termo b, e o coeficiente a_p , não apresentam as parcelas referentes ao incremento no tempo. Aplicar-se-á uma notação mais adequada à implementação dos algoritmos

$$a(I,J).\phi(I,J) = a(I-1,J).\phi(I-1,J) + a(I+1,J).\phi(I+1,J) + a(I,J-1).\phi(I,J-1) + a(I,J+1).\phi(I,J+1) + b(I,J) \quad (4.341)$$

Onde:

$$a(I-1,J) = D(i,J).A(|P(i,J)|) + \max(F(i,J),0) \quad (4.342a)$$

$$a(I+1,J) = D(i+1,J).A(|P(i+1,J)|) + \max(-F(i+1,J),0) \quad (4.342b)$$

$$a(I,J-1) = D(I,j).A(|P(I,j)|) + \max(F(I,j),0) \quad (4.342c)$$

$$a(I,J+1) = D(I,j+1).A(|P(I,j+1)|) + \max(-F(I,j+1),0) \quad (4.342d)$$

$$a^\circ(I,J) = \frac{\rho^\circ(I,J).\Delta x(I,J).\Delta y(I,J)}{\Delta t} \quad (4.342e)$$

$$a(I,J) = a(I-1,J) + a(I+1,J) + a(I,J-1) + a(I,J+1) + a^\circ(I,J) - S_p(I,J).\Delta x(I,J).\Delta y(I,J) \quad (4.342f)$$

$$b(I,J) = S_c(I,J).\Delta x(I,J).\Delta y(I,J) + a^\circ(I,J).\phi^\circ(I,J) \quad (4.342g)$$

Para problemas estacionários: $\Delta t \rightarrow \infty \Rightarrow a^\circ(I,J) \rightarrow 0$. Logo:

$$a(I,J) = a(I-1,J) + a(I+1,J) + a(I,J-1) + a(I,J+1) - S_p(I,J).\Delta x(I,J).\Delta y(I,J) \quad (4.343)$$

$$b(I,J) = S_c(I,J).\Delta x(I,J).\Delta y(I,J) \quad (4.344)$$

A aplicação do Algoritmo *SIMPLE* implica no emprego da Equação de Correção da Pressão (Equação de P'):

$$a(I,J).P'(I,J) = a(I-1,J).P'(I-1,J) + a(I+1,J).P'(I+1,J) + a(I,J-1).P'(I,J-1) + a(I,J+1).P'(I,J+1) + b'(I,J) \quad (4.345)$$

Onde:

$$a(I-1,J) = \rho(i,J).d(i,J).\Delta y(I,J) \quad (4.346a)$$

$$a(I+1,J) = \rho(i+1,J).d(i+1,J).\Delta y(I,J) \quad (4.346b)$$

$$a(I,J-1) = \rho(I,i+1).d(I,i+1).\Delta x(I,J) \quad (4.346c)$$

$$a(I,J+1) = \rho(I,j+1).d(I,j+1).\Delta x(I,J) \quad (4.346d)$$

$$a(I,J) = a(I-1,J) + a(I+1,J) + a(I,J-1) + a(I,J+1) \quad (4.346e)$$

$$b'(I,J) = \frac{[\rho^o(I,J) - \rho(I,J)]\Delta x(I,J).\Delta y(I,J)}{\Delta t} + [\rho(i,J).u^*(i,J) - \rho(i+1,J).u^*(i+1,J)]\Delta y(I,J) + [\rho(I,j).v^*(I,j) - \rho(I,j+1).v^*(I,j+1)]\Delta x(I,J) \quad (4.346f)$$

Para problemas em regime estacionários:

$$\Delta t \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{[\rho^o(I,J) - \rho(I,J)]\Delta x(I,J).\Delta y(I,J)}{\Delta t} \rightarrow 0 \quad (4.347)$$

Logo:

$$b' = [\rho(i,J).u^*(i,J) - \rho(i+1,J).u^*(i+1,J)]\Delta y(I,J) + [\rho(I,j).v^*(I,j) - \rho(I,j+1).v^*(I,j+1)]\Delta x(I,J) \quad (4.348)$$

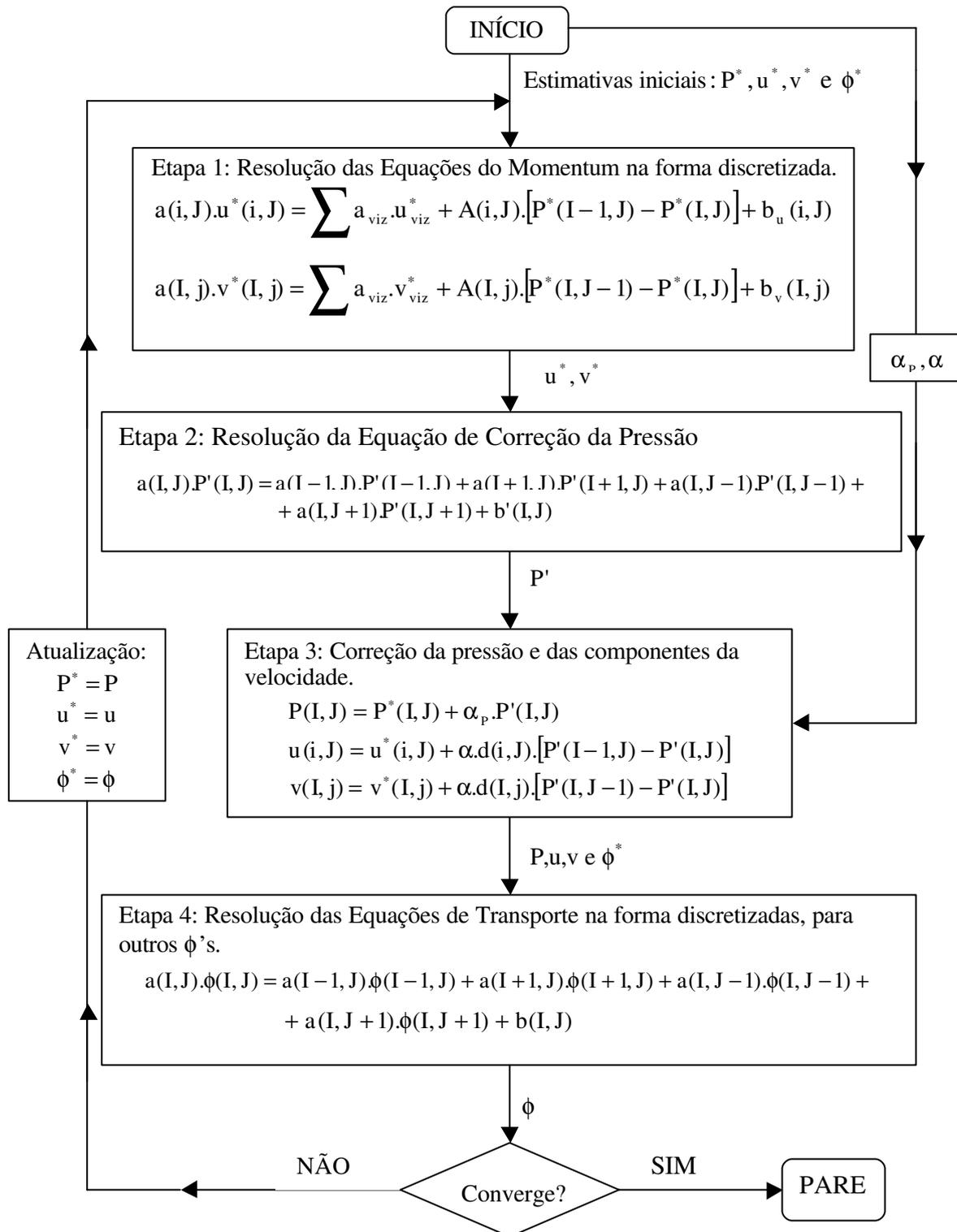


Figura 4.32: Diagrama do Algoritmo *SIMPLE* aplicado a problemas em regime estacionário. (Fonte: adaptada a partir de VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, pág. 147)

A aplicação do Algoritmo *SIMPLER*, implica no emprego da Equação da Pressão:

Onde:

$$a(I, J).P(I, J) = a(I-1, J).P(I-1, J) + a(I+1, J).P(I+1, J) + a(I, J-1).P(I, J-1) + a(I, J+1).P(I, J+1) + b(I, J) \quad (4.349)$$

$$a(I-1, J) = \rho(i, J).d(i, J).\Delta y(I, J) \quad (4.350a)$$

$$a(I+1, J) = \rho(i+1, J).d(i+1, J).\Delta y(I, J) \quad (4.350b)$$

$$a(I, J-1) = \rho(I, j).d(I, j).\Delta x(I, J) \quad (4.350c)$$

$$a(I, J+1) = \rho(I, j+1).d(I, j+1).\Delta x(I, J) \quad (4.350d)$$

$$a(I, J) = a(I-1, J) + a(I+1, J) + a(I, J-1) + a(I, J+1) \quad (4.350e)$$

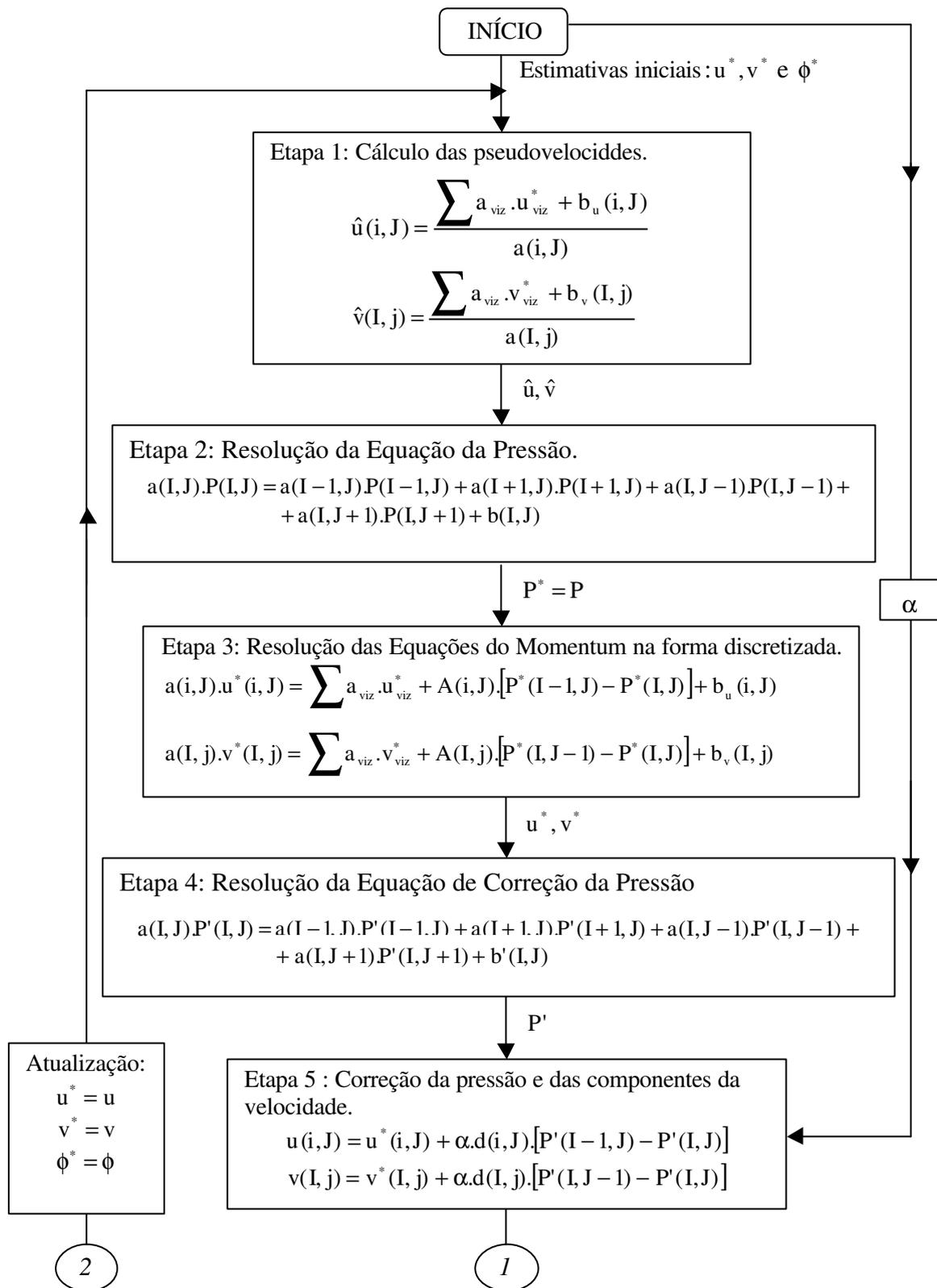
$$b'(I, J) = \frac{[\rho^o(I, J) - \rho(I, J)]\Delta x(I, J).\Delta y(I, J)}{\Delta t} + [\rho(i, J).\hat{u}(i, J) - \rho(i+1, J).\hat{u}(i+1, J)]\Delta y(I, J) + [\rho(I, j).\hat{v}(I, j) - \rho(I, j+1).\hat{v}(I, j+1)]\Delta x(I, J) \quad (4.350f)$$

Para problemas em regime estacionários:

$$\Delta t \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{[\rho^o(I, J) - \rho(I, J)]\Delta x(I, J).\Delta y(I, J)}{\Delta t} \rightarrow 0 \quad (4.351)$$

Logo:

$$b = [\rho(i, J).\hat{u}(i, J) - \rho(i+1, J).\hat{u}(i+1, J)]\Delta y(I, J) + [\rho(I, j).\hat{v}(I, j) - \rho(I, j+1).\hat{v}(I, j+1)]\Delta x(I, J) \quad (4.352)$$



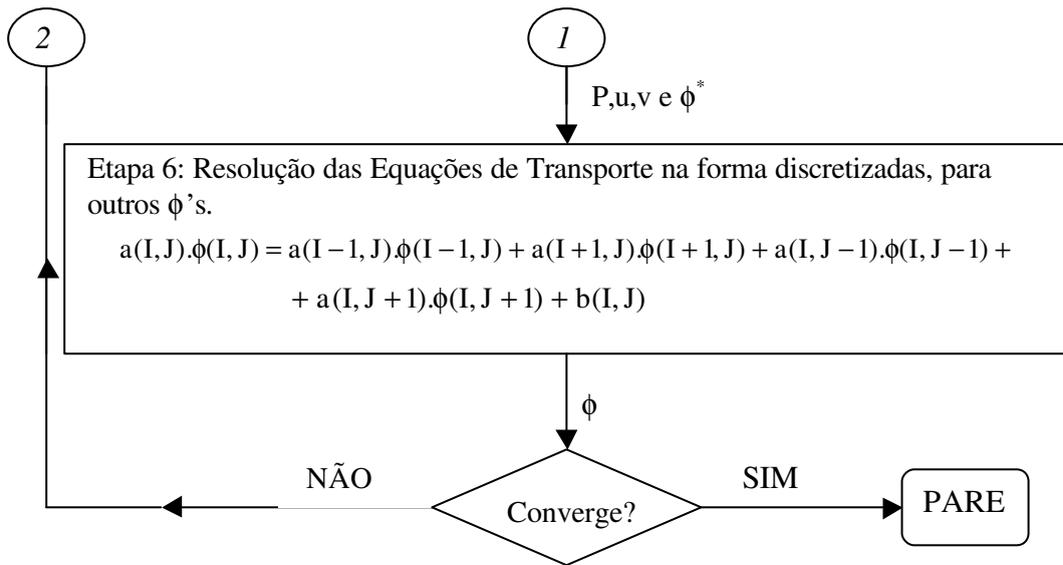
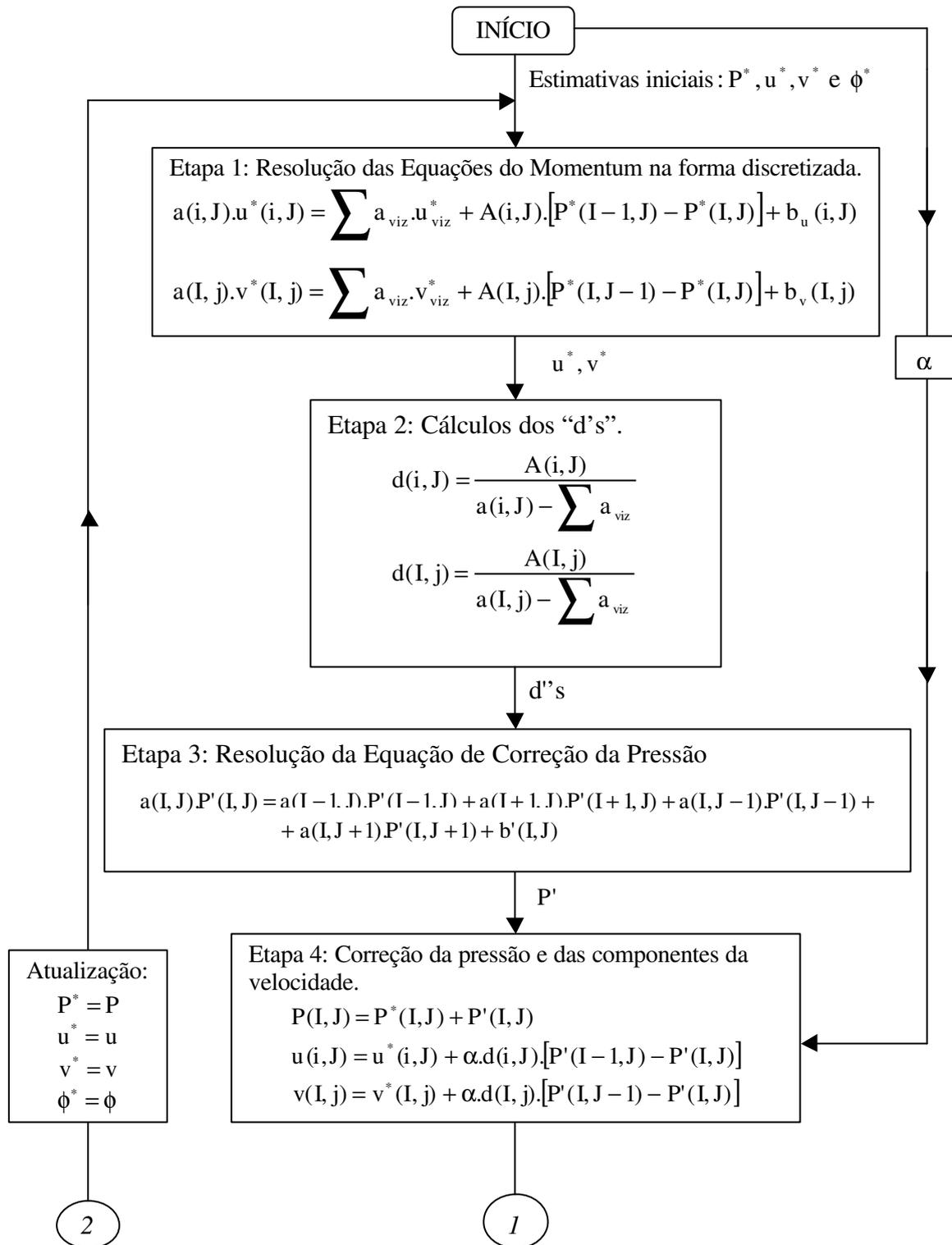


Figura 4.33: Diagrama do Algoritmo *SIMPLER*, aplicado a problemas em regime Estacionário.



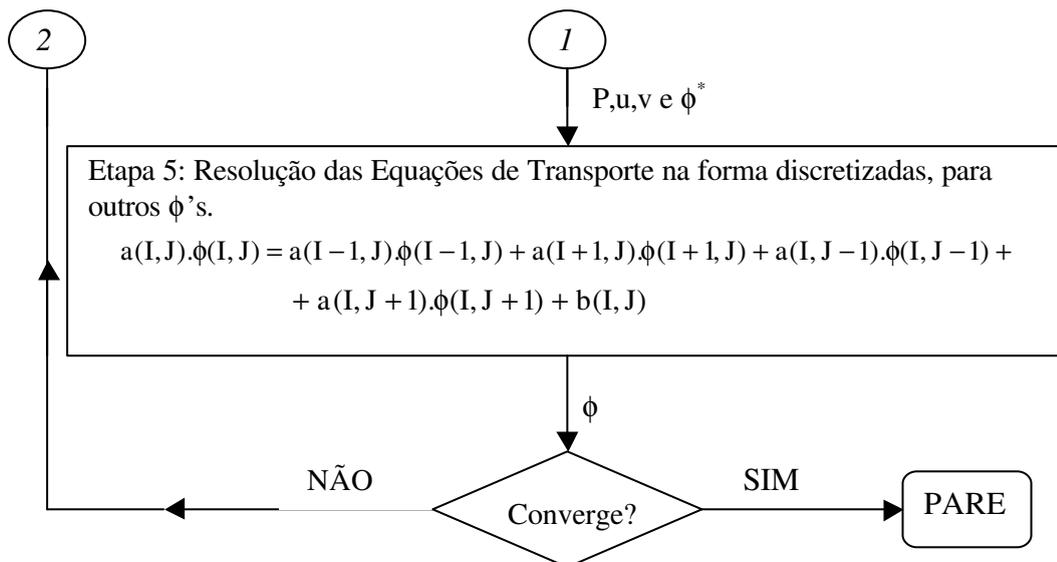


Figura 4.34: Diagrama do Algoritmo *SIMPLEC*, aplicada a problemas em regime estacionário. (Fonte: adaptada a partir de VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, pág. 149)

4.32 Procedimento de solução de problemas em regime transiente, tendo como incógnita o campo de escoamento (acoplamento pressão e velocidade)

Em tais situações os termos b 's presentes nas equações diferenciais parciais discretizadas (as quais também apresentam o termo a_p^o : coeficiente oriundo de problemas em regime transiente, presente no coeficiente a_p), bem como na Equação de Correção da Pressão e na Equação da Pressão apresentarão as parcelas referente ao termo transiente (incremento no tempo)

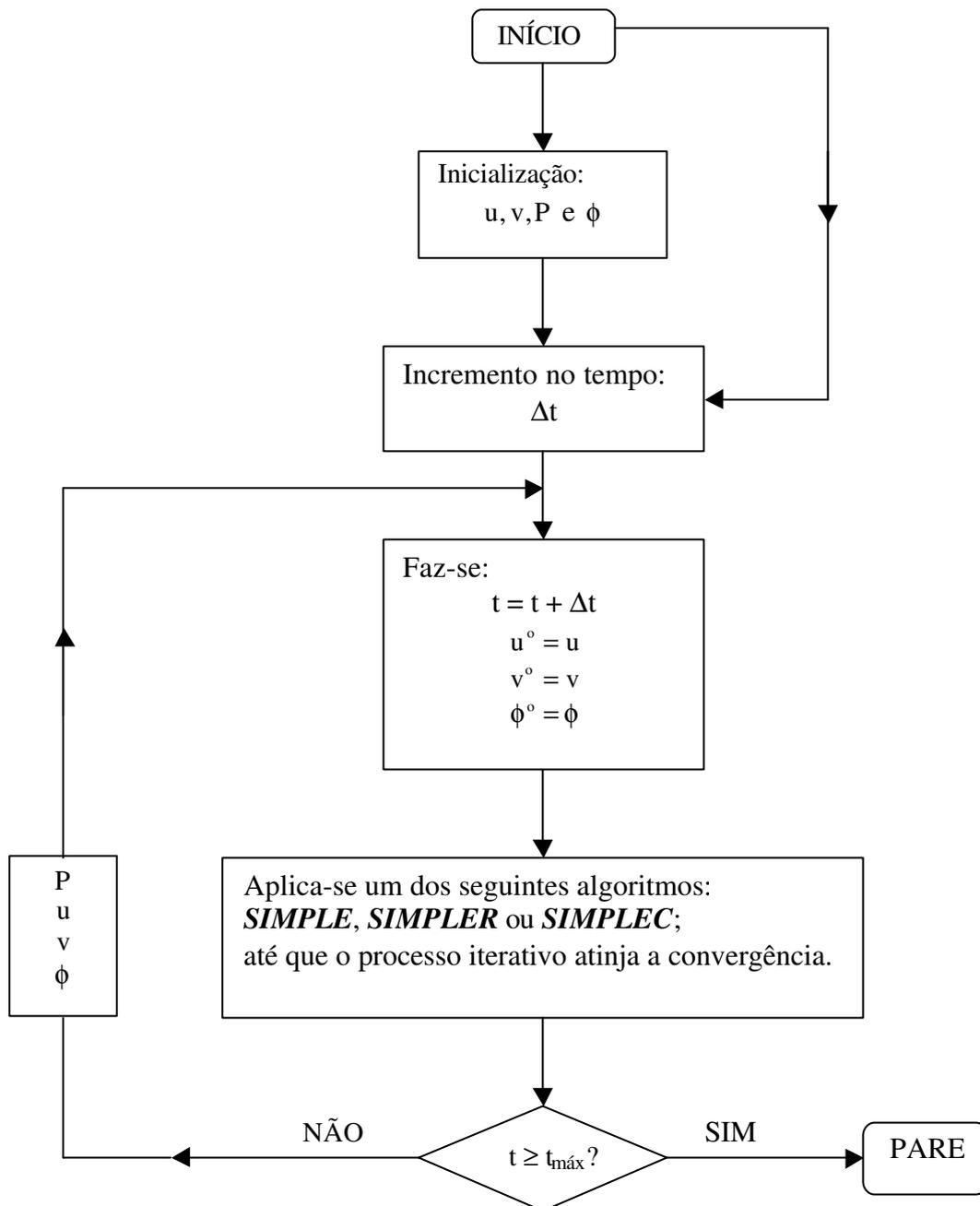


Figura 4.35: Diagrama do Algoritmo de solução de problemas em regime transientes, tendo como incógnita o campo de escoamento (acoplamento pressão e velocidade). (Fonte: adaptado a partir de VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, pág. 188)

4.33 Geometrias Complexas

4.33.1 Comentários Gerais

Até o presente momento explanou-se o Método dos Volumes Finitos empregando malhas regulares associadas a geometrias simples. No que tange a discretização das equações em geometrias complexas (domínio de solução irregular), as quais exigem malhas irregulares (apresentando refinamentos locais em certas regiões), há a necessidade de adaptar o método de discretização. Tais características são obtidas empregando um método híbrido : Método dos Volumes Finitos baseado nos Elementos Finitos; de modo a conjugar as vantagens de ambas as técnicas numéricas.

O Método dos Elementos Finitos divide o domínio de solução em elementos, por exemplo: para problemas em 2D o domínio de solução é dividido em elementos triangulares, como mostrado na figura 4.36:

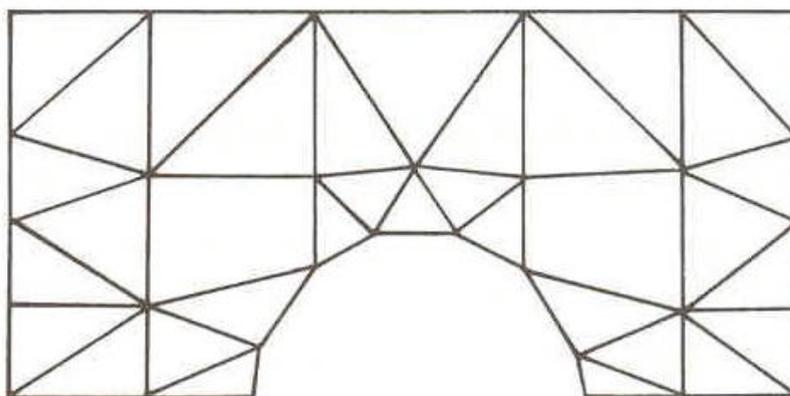
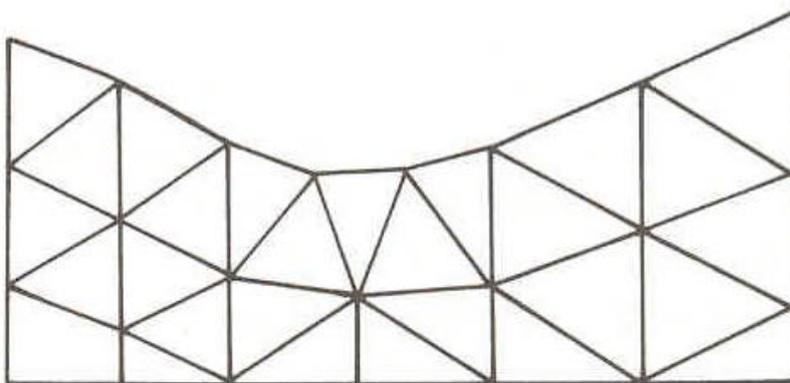
**a)****b)**

Figura 4.36: exemplos (figuras:4.36a e 4.36b) de discretização de domínios de solução associados a geometrias irregulares, empregando elementos triangulares. (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 159)

As equações discretizadas são derivadas pelo uso do Princípio Variacional quando o mesmo existe ou pelo Método de Galerkin, o qual é um caso especial do Método dos Resíduos Ponderados. Na derivação, um perfil para a variável dependente é assumido, sendo o mesmo usado para descrever como a variável ϕ varia num elemento finito. A grande vantagem do Método dos Elementos Finitos é a sua capacidade de tratar geometrias complexas, empregando malhas irregulares. No entanto, seu emprego direto nos problemas que envolvam o cálculo do campo de escoamento e conjunção com transferência de calor, apresenta sérias dificuldades.

1) A dificuldade mais acentuadas diz respeito à natureza *upwind* do termo convectivo.

Pois uma aplicação direta do Método dos Elementos Finitos padrão fornecerá uma

formulação muito semelhante ao Esquema de Diferenças-Centrais; e tal formulação pode conduzir a soluções desprovidas de realismo físico. Algo próximo do Esquema *Upwind* ou do Esquema Exponencial é necessário, porém não é claro como adaptar tais formulações a malhas irregulares (PATANKAR, 1980).

- 2) O uso da estratégia da malha deslocada foi possível porque as linhas das malhas foram projetadas ao longo da coordenada de direção, e as componentes de velocidade nestas direções são apropriadamente deslocadas. Algo semelhante a estratégia da malha deslocada é necessário na malha triangular, pois caso contrário, se todas as variáveis forem calculadas nos pontos nodais da mesma malha numérica, aparecerão dificuldades associadas a capacidade do método numérico em produzir resultados dotados de realismo físico.
- 3) Maioria das publicações de aplicações do Método dos Elementos Finitos em problemas envolvendo cálculos associados ao campo de escoamento (transporte convectivo) empregam a solução direta e simultânea da Equação da Continuidade e de todas as Equações do Momentum de modo a obter as componentes da velocidade e a pressão. Desde que as soluções diretas são dispendiosas do ponto de vista do esforço computacional, é desejável uma formulação seqüencial semelhante ao *SIMPLE* e seus derivados, ao invés de simultâneas, visando a solução das Equações do Momentum e Continuidade (PATANKAR, 1980).
- 4) Para a maioria dos engenheiros cujas atividades envolvem a resolução de problemas envolvendo condução-convecção, o Método dos Elementos Finitos ainda apresenta-se envolvido por incertezas. A formulação Variacional, ou até mesmo a aproximação de Galerkin, não apresenta uma interpretação física palpável (PATANKAR, 1980).

A partir das dificuldades e vantagens associadas ao Método dos Elementos Finitos e sabendo-se que uma das vantagens do Método dos Volumes Finitos é a fácil interpretação física e a capacidade de produzir resultados dotados de realismo físico, até mesmo nas situações empregando malhas “grosseiras”, buscou-se uma técnica numérica que conjugasse as vantagens de ambos métodos e, se possível, isentas de suas limitações ou pelo menos que minimizasse as mesmas. A possibilidade de obter um método numérico híbrido consistindo na união das características desejadas do Método dos Volumes Finitos e da capacidade do Método dos Elementos Finitos em tratar geometrias complexas, pode ter

sido motivada pelo fato do Método dos Elementos Finitos apresentar a derivação das equações discretizadas empregando o Princípio Variacional, quando este existe, ou pelo Método de Galerkin, o qual é um caso especial do Método dos Resíduos Ponderados, sendo que na derivação do mesmo uma distribuição da variável dependente é definida, assumida e empregada para descrever como a variável dependente ϕ varia sobre o elemento finito, possibilitando a conjunção do mesmo com o Método dos Volumes Finitos cuja formulação pode ser vista como um outro caso especial do Método dos Resíduos Ponderados, pois uma distribuição de ϕ é assumida entre os pontos nodais.

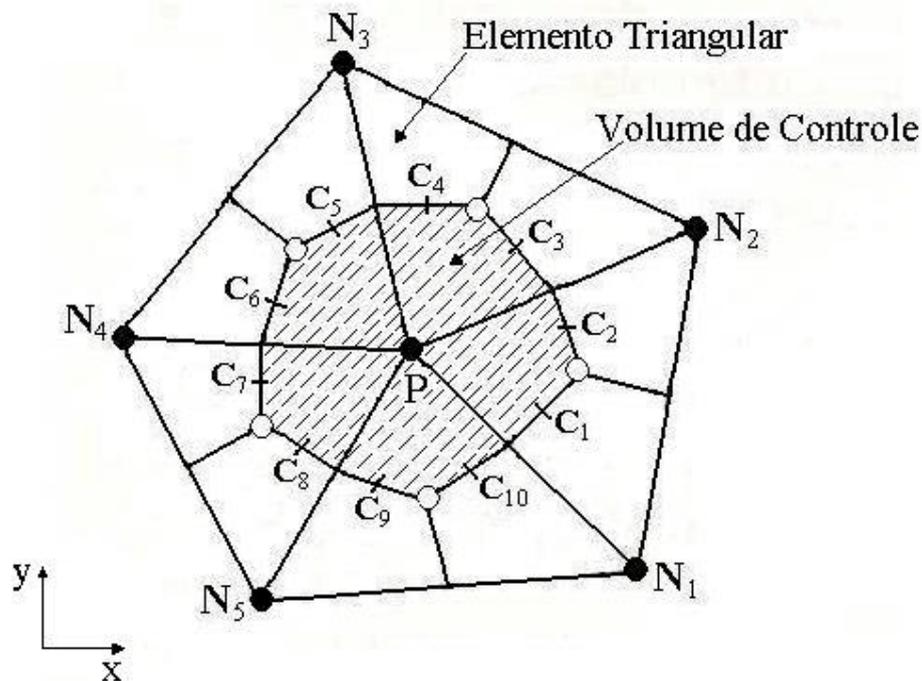
4.33.2 Método dos Volumes Finitos baseados nos Elementos Finitos

O referido método numérico é fundamentados nas seguintes etapas, considerando uma abordagem 2D:

- 1) Divisão do domínio de solução (seja geometria simples ou não) em elementos triangulares. Tais elementos são usados na descrição da variação das variáveis de interesse, conforme mostrado na figura 4.37.
- 2) Os pontos nodais são localizados nos vértices dos elementos triangulares.
- 3) Qualquer variável ϕ é assumida como apresentando uma variação linear no interior do elemento finito, isto é, é assumido uma distribuição do tipo:

$$\phi(x, y) = a.x + b.y + c \quad (4.353)$$

onde os coeficientes a, b e c são expressos em termos dos valores de ϕ nos 3 pontos nodais que delimitam um determinado elemento finito. Logo, tais coeficientes são funções das coordenadas dos pontos nodais, bem como dos valores da variável dependente ϕ nos respectivos pontos nodais. (FERZIGER e PÉRIC, 1997)



- : Vértices do elemento triangular.
- : Centróide do elemento triangular.

Figura 4.37: Princípio do Método dos Volumes Finitos baseado nos Elementos Finitos (Fonte: adaptada a partir de FERZIGER e PÉRIC, 1997, pág. 234)

Nos problemas envolvendo difusão-convecção, a forma da distribuição assumida para ϕ produzirá resultados muito semelhantes ao Esquema de Diferenças-Centrais no Método dos Elementos Finitos. Desde que tal característica pode fornecer resultados desprovidos de realismo físico quando o número de Peclet apresenta grandes valores, a distribuição expressa pela equação (4.353) é inaceitável. Uma alternativa proposta e exposta em PATANKAR (1980) é o emprego da seguinte distribuição :

$$\phi(X, Y) = A + B \cdot \text{EXP}\left(\frac{\rho \cdot U \cdot X}{\Gamma}\right) + C \cdot Y \quad (4.354)$$

onde U é a velocidade resultante no Elemento Finito, X é coordenada do ponto na direção da velocidade resultante, e Y é a coordenada na direção normal a velocidade resultante. As constantes A, B e C são obtidas em termos dos 3 valores de ϕ avaliados nos vértices dos elementos triangulares.

Para baixos números de Peclet a equação (4.354) se reduz a equação (4.353), recaindo numa distribuição própria para problemas onde a condução é predominante. A

distribuição $\phi(x,y)$ expressa pela equação (4.354) encerra a essência do esquema Exponencial e introduz a mesma no Método dos Elementos Finitos.

O esquema Exponencial foi formulado anteriormente usando uma representação local unidimensional; conseqüentemente o Método dos Elementos Finitos baseado na equação 4.354, envolve a velocidade resultante e direções associada a mesma, apresentando menos erros de aproximação que o esquema Exponencial anteriormente formulado para o Método dos Volumes Finitos.

Os volumes de controle são formados em torno de cada ponto nodal pela junção dos centróides dos elementos finitos (no caso, elementos triangulares) e os pontos médios das arestas dos elementos finitos, como mostrado na figura 4.37. As equações da conservação são integradas nos volumes de controle descritos acima de modo a obter as equações discretizadas associadas ao Método dos Volumes Finitos. As integrais de volume e superfície são calculadas na região delimitada pelo seguimentos unindo os centróides dos elementos e os pontos médios das arestas. Para a figura 4.37 a superfície de controle consiste de 10 subsuperfícies, e o volume de controle consiste de 5 subvolumes tendo em vista as contribuições de 5 elementos para o V.C.. Desde que a variação das variáveis num elemento finito é descrita na forma de uma função analítica (assumida), as integrais podem ser calculadas (FERZIGER e PÉRIC, 1997)

As equações algébricas associadas a um V.C. envolve o ponto nodal genérico P e seus vizinhos imediatos (N_1 a N_5 para o caso retratado na figura 4.37). Até mesmo para malhas constituídas somente por triângulos, o número de vizinhos varia em geral de um V.C. para outro, tal peculiaridade conduz a uma matriz de estrutura irregular, restringindo o subuniverso dos numéricos aplicáveis a sistemas de equações algébricas que podem ser empregados: o Método do Gradiente Conjugado e Gauss-Seidel são usualmente empregados (FERZIGER, 1997).

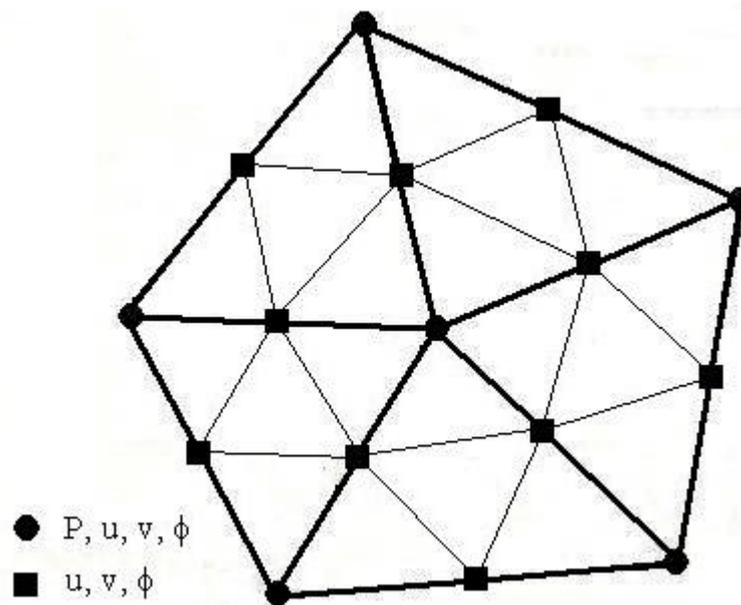


Figura 4.38: Macrotriângulos e subtriângulos (Fonte: adaptada a partir de PATANKAR, 1980, pág. 161)

5) A alternativa equivalente ao emprego da malha deslocada é calcular a pressão numa malha que seja diferente da usada em todas as outras variáveis dependentes. A pressão é calculado nos vértices dos macrotriângulos, os quais são mostrados por pequenos círculos na figura 4.38. Cada macrotriângulo é dividido em 4 subtriângulos, os quais são mostrados por pequenos quadrados na figura 4.38. Os subtriângulos formam a malha para as componentes da velocidade e todas as outras variáveis exceto pressão.(PATANKAR, 1980).

6) Um algoritmo que encerre a essência da solução seqüenciada própria para do *SIMPLER* deve ser formulado. A Equação da Pressão e a Equação de Correção da Pressão são derivadas a partir da Equação da Continuidade escrita para os volumes de controle definidos pelos macrotriângulos.

O Método dos Volumes Finitos baseados nos Elementos Finitos foi rapidamente delineado até aqui, podendo certamente sofrer inúmeras melhorias. Entretanto, o referido método representa uma extensão lógica e efetiva da método de discretização associado ao Método dos Volumes Finitos, empregando malha constituídas de elementos triangulares (PATANKAR, 1980).

4.34 Conclusões

Neste Capítulo foi apresentado de forma didática os principais aspectos relacionados ao Método dos Volumes Finitos. Atenção especial foi dada para o problema do tratamento das condições de contorno, que deve ser considerado com detalhes na formulação do problema e na sua solução por Volumes Finitos. Algumas técnicas relevantes para a solução de problemas empregando o método supracitado foram abordados. Elas constituem a base para o desenvolvimento da *CFD* que é considerada no próximo capítulo.

5 PROCEDIMENTOS, RESULTADOS E COMENTÁRIOS

"Não ergas um edifício alto sem fortes alicerces; se o fizeres, viverás com medo."

(Provérbio persa)

5.1 Introdução

Inicialmente cogitou-se a possibilidade de implementação do Método dos Volumes Finitos em 3D, visando a solução numérica das equações que caracterizam a modelagem matemática associada à fluidodinâmica dos Reatores *Air-Lift*. Tal abordagem foi posteriormente descartada em função dos seguintes fatores:

- a) A implementação do Método dos Volumes Finitos em 3D é desaconselhável em virtude dos imensos esforços demandados e tempo despendido na indexação das informações acerca da geometria, bem como da malha deslocada, caso tal estratégia fosse aplicada.
- b) A configuração do estudo de caso implica numa geometria complexa, logo a solução do problema em 3D exige um método numérico híbrido: Método dos Volumes Finitos baseado no Método dos Elementos Finitos; acarretando um aumento considerável das dificuldades associadas à implementação, pois o Método dos Elementos Finitos além de apresentar difícil implementação, não apresenta um fácil entendimento físico.

Num segundo momento, cogitou-se a possibilidade do emprego de um pacote implementado por PATANKAR, utilizando a linguagem FORTRAN 77. Tal abordagem , também, foi descartadas devido às limitações do referido pacote:

- a) Baseia-se apenas no Método dos Volumes Finitos;
- b) Resolve no máximo problemas em 2D;
- c) Resolve apenas problemas monofásicos;
- d) Resolve apenas problemas em regime estacionário;
- e) Aplicável a geometrias simples;
- f) Apresenta cunho preponderantemente didático.

Em função de tais circunstâncias optou-se pelo uso de códigos comerciais específicos para resolução numérica de problemas associados a Fluido Dinâmica, caracterizando a *CFD*.

Vale ressaltar que a maioria dos problemas práticos encontrados no Campo da Engenharia Química, os mesmos geralmente apresentam geometrias e/ou física complexa (dificuldade de modelagem dos fenômenos físicos relevantes) passíveis de serem modelados empregando a *CFD*, são resolvidos através do emprego de códigos comerciais. Tal fato ocorre porque não é vantajoso para os usuários do meio industrial desenvolverem simulações utilizando ferramentas da *CFD* com programas desenvolvidos por eles próprios, mesmo que tal esforço pudesse resultar em códigos feitos sob medida para as aplicações de interesse, ao invés do emprego de programas genéricos, sendo provável a perda de alguns aspectos detalhados necessários para o tratamento de algumas aplicações específicas, enquanto contém ferramentas desnecessárias as suas aplicações. Muitas vezes a documentação fornecida pelos desenvolvedores de códigos comerciais não é suficientemente detalhada de modo a responder dúvidas específicas que surgem naturalmente no processo de preparação de uma simulação empregando *CFD*, especialmente dúvidas de natureza numérica. As resoluções numéricas de problemas consomem um quantidade considerável de tempo, especialmente em se tratando da modelagem de geometrias complexas e de grande escala utilizando a *CFD*. Os desenvolvedores dos códigos comerciais estão continuamente introduzindo novos modelos físicos nos seus *softwares*, no entanto o efeito da implementação de tais modelos na performance numérica do código é uma questão que merece mais atenção (HARRIS *et al*, 1996).

As simulações empregando os códigos comerciais associados à resolução numérica da modelagem associada à fluidodinâmica podem ser divididas em três etapas:

- 1) Construção da geometria e geração da malha numérica (Pré-processamento)
- 2) Seleção dos modelos considerados, bem como a atribuição dos valores associados aos mesmos, e condições de contorno (*Solver*)
- 3) Visualização dos resultados (Pós-processamento)

Cerca de 50% do tempo gasto na indústria num projeto empregando a *CFD* é destinada à definição da geometria do domínio de solução e a geração da malha (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). A depender da complexidade dos sistema, a montagem e resolução de um problema utilizando a *CFD* exige:

- a) Entendimento físico do campo de escoamento;

- b) Fundamentação do algoritmo numérico;
- c) Experiência com o(s) “pacote(s)”;
- d) Dados experimentais.

5.1.1 Construção da Geometria e Geração da Malha Numérica:

Inicialmente utilizou-se o código CFX versão 4.4, no entanto, o pré-processador da referida versão não disponibilizava recursos necessários para a construção da geometria do caso em estudo, que caracteriza-se como geometria complexa. Mudou-se para o CFX versão 5.5.1, o qual possibilitou a construção da geometria, mostrada na figura 5.1, e a posterior geração da malha:

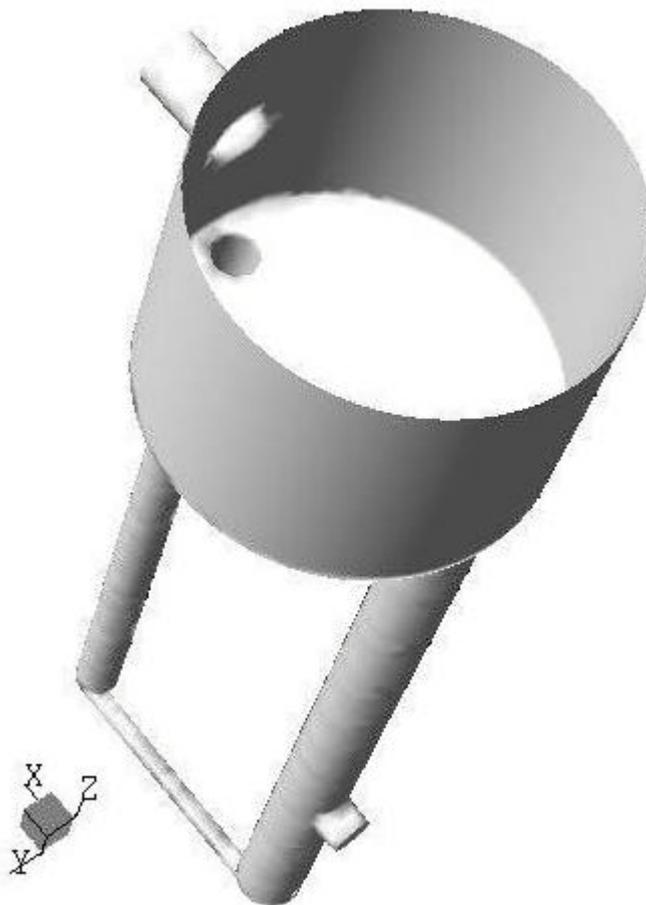


Figura 5.1: Geometria do estudo de caso (Reator *Air-Lift*).

A geometria do estudo de caso apresenta 3,90 m de altura e maiores detalhes acerca da configuração do *External-Loop Air-Lift Reactor* tratado neste trabalho estão disponíveis no Anexo (Seção 8.2).

Percebe-se pela geometria mostrada na figura 5.1 que as fronteiras do problema nem sempre coincidem com as fronteiras físicas, geralmente, delimitadas pelas paredes do recipiente; pois no caso em questão a presença de uma superfície livre no topo define uma fronteira (condição de contorno), sendo que a mesma encontra-se abaixo das bordas do recipiente.

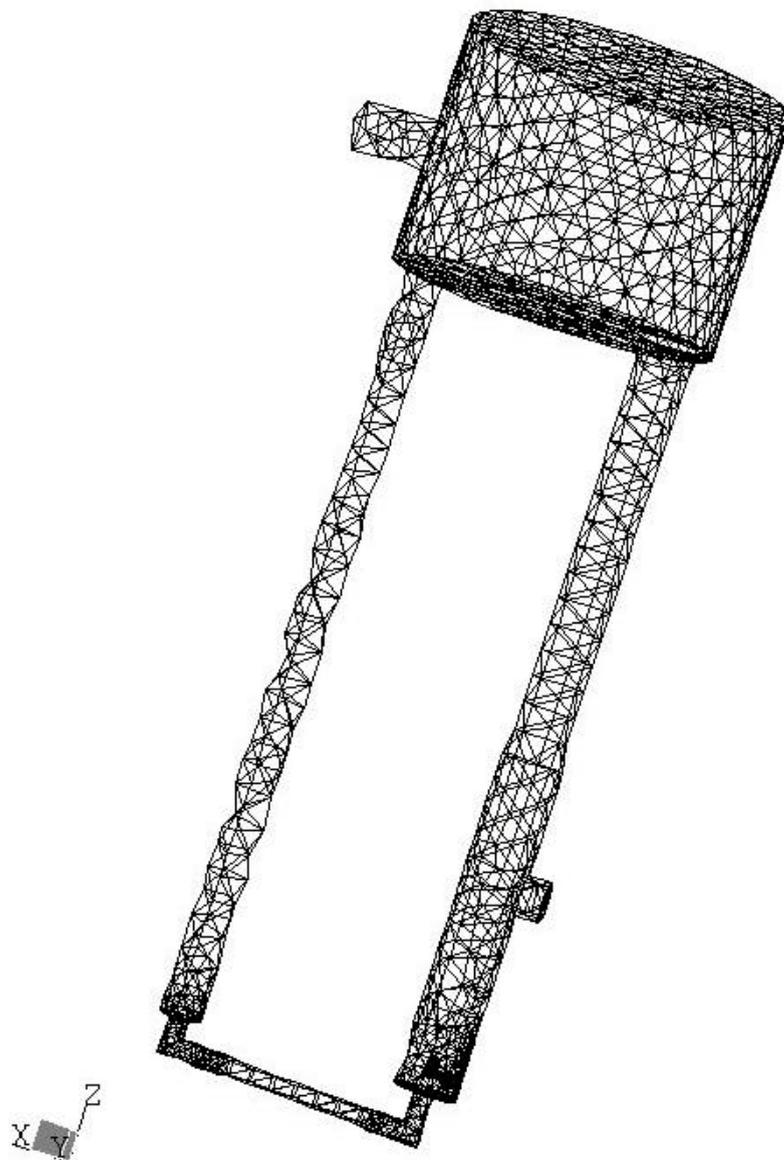


Figura 5.2: Malha numérica (em 3D) da superfície que delimita o domínio de solução.

Vale ressaltar que a malha numérica mostrada na figura 5.2 não foi empregada nas simulações, pois apresenta-se relativamente “grosseira” para as simulações desenvolvidas neste trabalho. No entanto, a mesma apresenta melhor visualização quando impressa, o que facilita a compreensão.

Tabela 5.1: Características da malha numérica (em 3D), na qual o domínio de solução foi dividido, associada a figura 6.2 (malha numérica (em 3D) da superfície que delimita o domínio de solução).

Nº total de pontos nodais	2.859
Nº total de elementos finitos	11.981
Nº total de tetraedros	11.981

Tabela 5.2: Características da malha numérica (em 3D), na qual o domínio de solução foi dividido, empregada nas simulações.

Nº total de pontos nodais	32.676
Nº total de elementos finitos	172.782
Nº total de tetraedros	172.782

As malhas numéricas no código CFX versão 5.5.1 são geradas automaticamente atribuindo-se valores ao parâmetro *Maximum Edge Length*, o qual deve variar de 1 a 5% da maior dimensão da geometria, no caso 3,90 m. A malha numérica empregada nas simulações foi gerada usando o valor 0,04 para o referido parâmetro. Valores menores (que caíram abaixo de 1% da maior dimensão da geometria) resultaram em *Loops* infinitos no processo de geração de malha.

Vale ressaltar que após a validação dos resultados numéricos é aconselhável um estudo de malhas numéricas visando obter a malha menos refinada capaz de fornecer os resultados com a precisão desejada, implicando num melhor uso da capacidade de processamento da máquina. Tal estudo é seguido com a busca de malhas não-uniforme, pois as malhas devem ser mais refinadas nas regiões onde há grandes variações das variáveis dependentes e das propriedades físicas e menos refinadas nas regiões que apresentam variações relativamente pequenas. Tal procedimento é capaz de otimizar o uso da capacidade de processamento disponível.

5.1.2 Simulações

As simulações foram divididas, e seqüenciadas , nos seguintes subgrupos:

- (1) Escoamento Monofásico, Modelo Laminar em Regime Estacionário;
- (2) Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário;
- (3) Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente;
- (4) Escoamento Bifásico, Modelo turbulento em Regime Estacionário.

Tabela 5.3: Dados empregados nas simulações dos Escoamentos Monofásicos.

Fluido	Água
Propriedades do fluido	$\rho = 995,0 \text{ Kg.m}^{-3}$
	$\mu = 9,0.10^{-4} \text{ Kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
Temperatura (escoamento isotérmico)	298 K
Esquema discretização aplicado nos termos convectivos	<i>Upwind</i>

Nas estimativas iniciais considerou-se que todas as componentes da velocidades eram nulas, o que coincide com *default* do código.

5.1.3 Condições de Contorno:

5.1.3.1 Escoamento Monofásico, Modelo Laminar em Regime Estacionário

- Condição de Entrada (*Inlet*):

O módulo da velocidade normal à superfície que delimita a entrada foi especificada, a mesma foi calculada a partir do gráfico mostrado na figura 2.11, que retrata a região de operação dos *Bubble Columns Reactors* e dos Reatores *Air-Lift*. Considerou-se a média dos extremos do intervalo de variação de U_{Lr} (Velocidade superficial da fase líquida no *Riser*):

$$V_{in} \cong \frac{0,26 + 0,81}{2} \cong 0,535 \text{ m/s}$$

- Condição de Parede:

Considerou-se a opção sem deslizamento (*No Slip*) tendo em vista o Princípio da Aderência, a velocidade relativa (velocidade do fluido em relação a velocidade da parede) do fluido em contato com a parede é zero. Como as paredes do recipiente estão em repouso a velocidade do fluido em contato com as mesmas será zero; tal condição seria o *Default* do código.

- Superfície Livre (Plano de Simetria):

Empregou-se a condição de simetria (Plano de Simetria) no topo (Superfície Livre), pois sabe-se que as tensões cisalhantes são nulas nas superfícies livres, tal situação é descrita matematicamente pelas expressões que caracterizam simetria num escoamento (Condição de Simetria). Logo, devido a tais peculiaridades empregou-se o Plano de Simetria, opção disponível no código CFX versão 5.5.1, como condição de contorno no topo do *External-Loop Air-Lift Reactor* estudado.

- Condição de Saída (*Outlet*):

Empregou-se a condição associada à pressão relativa igual a zero (Pa) para que não haja problema de convergência, pois a distribuição de velocidade na saída é uma incógnita.

5.1.3.2 *Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário:*

Nas simulações envolvendo turbulência empregou-se o modelo k- ϵ , com as condições de contorno e estimativas iniciais padrões (*Default*) sugerida pelo manual, pois não foi realizado um estudo prévio e mais aprofundado a cerca dos modelos de Turbulência, suas constantes e condições de contorno; devido ao caráter introdutório deste trabalho. Vale ressaltar que as demais condições de contorno, bem como as propriedades físicas do fluido e estimativas iniciais, coincidem com as empregadas na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Laminar em Regime Estacionário.

5.1.3.3 *Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente:*

Empregou-se as mesmas propriedades e condições de contorno utilizadas na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário. No entanto, aplicou-se valores de 10^{-6} para as estimativas iniciais das componentes da velocidade, pois não se conseguiu iniciar as simulações aplicando valores nulos nas referidas componentes; no que tange ao valores iniciais de k e ϵ aplicou-se os valores padrões (*Default*) do programa, pois não houve um estudo aprofundado dos modelos de turbulência.

Nas simulações do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente empregou-se um incremento de tempo de 0,1 s (passo de tempo), aplicando o número máximo de três iterações por incremento de tempo, visando simular o comportamento dinâmico do escoamento num tempo rela, no caso considerou-se 120 s.

5.1.3.4 *Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário:*

Visando o aumento gradativo da complexidade do sistema físico real a ser descrito pelos modelos, não foi considerada a alimentação da fase líquida na modelagem de escoamentos bifásicos.

Valer ressaltar que em função das simulações dos escoamentos bifásicos (gás-líquido) serem mais sensíveis a difusão numérica em decorrência do papel crucial desempenhado pela precisão nos cálculos da *gas hold-up*, a qual afeta sensivelmente a avaliação dos potenciais motrizes dos escoamento bifásicos, empregou-se não somente o Esquema *Upwind* (Esquema de 1ª Ordem) como também um esquema de discretização (dos termos convectivos) de Alta-Ordem (no caso o Esquema *Upwind* de Alta-Ordem) disponível na versão 5.5.1 do código CFX.

• Condição de Entrada (*Inlet*):

O módulo da velocidade superficial do gás, normal à superfície que delimita a entrada foi especificada, a mesma foi calculada a partir do gráfico mostrado na figura 2.11. Considerou-se a média dos extremos do intervalo de variação de U_{Gr} (Velocidade superficial da fase gás baseado no *Riser*)

$$V_{G\ in} \cong \frac{0,10 + 0,60}{2} \cong 0,350\ \text{m/s}$$

- Condição de Parede:

Considerou-se a opção sem deslizamento (*No Slip*) tendo em vista o Princípio da Aderência, a velocidade relativa (velocidade do fluido em relação a velocidade da parede) do fluido em contato com a parede é zero. Como as paredes do recipiente estão em repouso a velocidade do fluido em contato com as mesmas será zero; tal condição seria o *Default* do código.

- *Degassing Condition* (*Outlet* no topo + superfície livre):

Tal condição de fronteira aplica-se a superfícies livres associadas a escoamentos bifásicos, sendo que a fase gás é liberada na referida superfície (*Outlet*). A superfície livre no escoamento gás-líquido é assumida como sendo plana, estacionária e sem atrito. A superfície livre, portanto, é especificada como um plano de simetria (AEA, 2001).

Empregou-se a condição associada à pressão relativa igual a zero (Pa) para que não haja problema de convergência, pois a distribuição de velocidade na saída é uma incógnita.

Empregou-se o diâmetro $D = 4,0$ mm avaliado como sendo o máximo valor do diâmetro equivalente a partir dos gráficos que retratam a distribuição de tamanho das bolhas para o sistema ar/água empregando distribuidores espinha de peixe num reator com as mesmas dimensões do que foi empregado nas simulações, e que foi estudado por CARVALHO (2001). Ressalta-se que a distribuição do tamanho das bolhas depende do tipo de distribuidor e da velocidade superficial da fase gás na alimentação, bem como das propriedades do sistema.

Os valores associados às condições de fronteira das *hold-ups* na entrada (saída do distribuidor), bem como os parâmetros relacionados com os modelos empregados na descrição da transferência de energia cinética turbulenta e quantidade de movimento entre as fases, aplicados na simulação do escoamento bifásico foram idênticos ao empregado no estudo de caso de um Reator *Air-Lift* com recirculação externa e de dimensões de bancada: $H = 0,77$ m (Altura) e $D_{ext} = 0,08$ m (Diâmetro do cilindro externo); presente no Tutorial da versão 5.5 do código empregado. Tal procedimento é questionável devido às dimensões de planta-piloto reator em estudo, no entanto, os parâmetros empregados por AEA (2002), são para o sistema (ar/água) empregado neste trabalho. Além do mais, ressalta-se o caráter

exploratório da Fluidodinâmica Computacional abordado neste primeiro contato com a modelagem do escoamento bifásico em Reatores *Air-Lift*.

Quanto às estimativas iniciais aplicam-se os valores utilizados no exemplo explanado em AEA (2002) ,devido ao não aprofundamento dos modelos disponíveis no código, o que dificulta a produção de *insights* sobre os valores das constantes e as estimativas iniciais.

5.1.4 Convergência

O critério de convergência empregado foi o *RMS* (*Root Mean Square* que consiste na raiz quadrada da média dos quadrados dos resíduos normalizados e que fornece uma boa idéia da magnitude dos resíduos, pois uma solução que apresenta uma boa convergência deve apresentar um resíduo máximo em torno de 10^{-3} , tipicamente o *RMS* do resíduo deve apresentar ordem de magnitude menor (AEA, 2002). Portanto, atribui-se o valor de 10^{-4} em conjunção com um número máximo de iterações, escolhido previamente para cada simulação.

5.2 Resultados e Comentários

5.2.1 Escoamento Monofásico, Modelo Laminar em Regime Estacionário

Apesar de apresentar convergência, mostrada na figura 5.3, o código sugere que o modelo turbulento como o mais adequado em função do valor de um número de Reynolds Global (“ Re ”= $1,08740 \cdot 10^5$), avaliado a partir dos valores locais do referido parâmetro (avaliados na malha numérica), encontra-se fora da faixa associada ao modelo laminar. Tal recomendação é aceitável, pois as condições de operação dos Reatores *Air-Lift* empregados na indústria encontram-se na região associada a escoamentos turbulentos. Daí, partiu-se para modelos turbulentos.

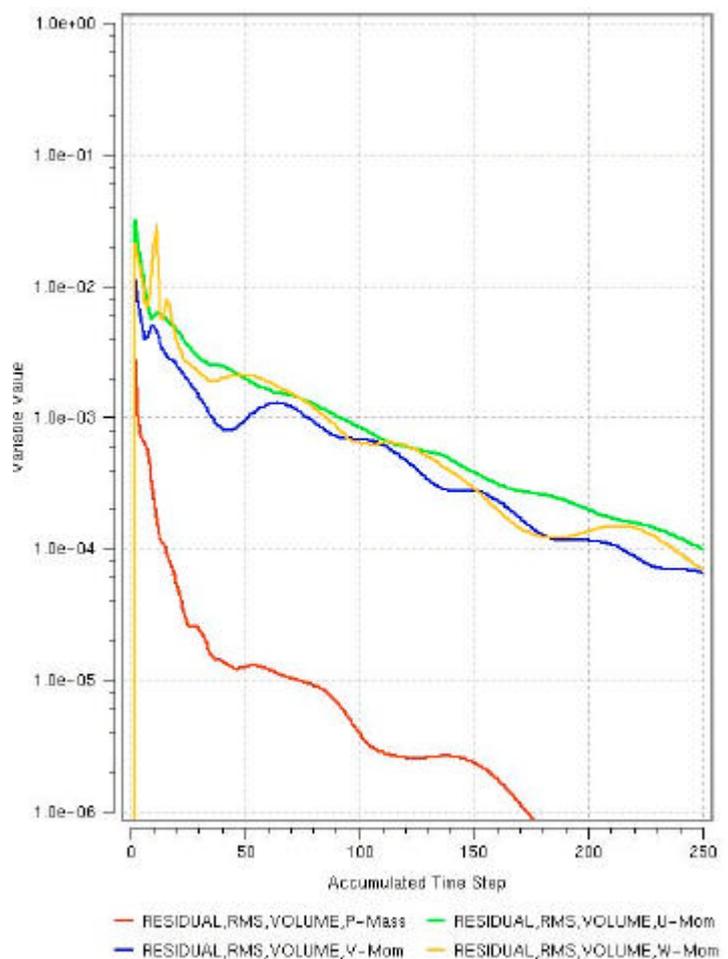


Figura 5.3: Gráfico dos *RMSs* das variáveis dependentes modeladas na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Laminar em Regime Estacionário.

5.2.2 Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário

Percebe-se claramente que o critério de convergência foi satisfeito, mostrado nas figuras 5.4 e 5.5, num número menor de iterações quando comparado com as simulações (1), apesar da presença de um número maior de equações diferenciais parciais a serem resolvidas (modelo $k-\epsilon$), fato que pode ser atribuído a maior adequação do modelo matemático na descrição do modelo físico. Os resultados numéricos são mostrados na figura 5.6:

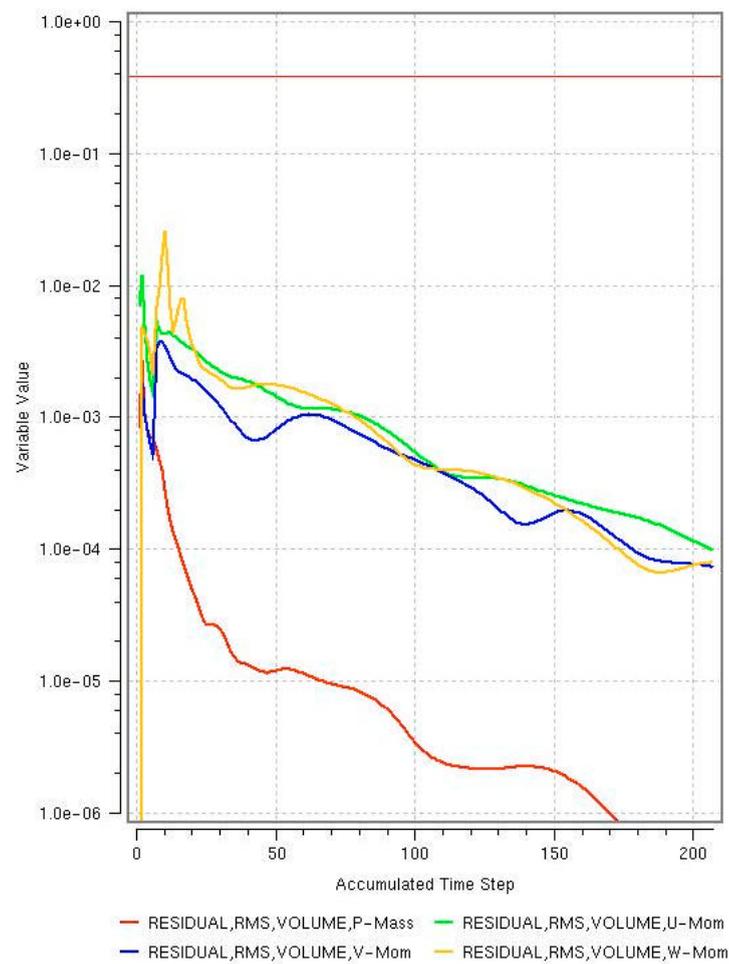


Figura 5.4: Gráfico dos *RMSs* das variáveis dependentes modeladas na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário.

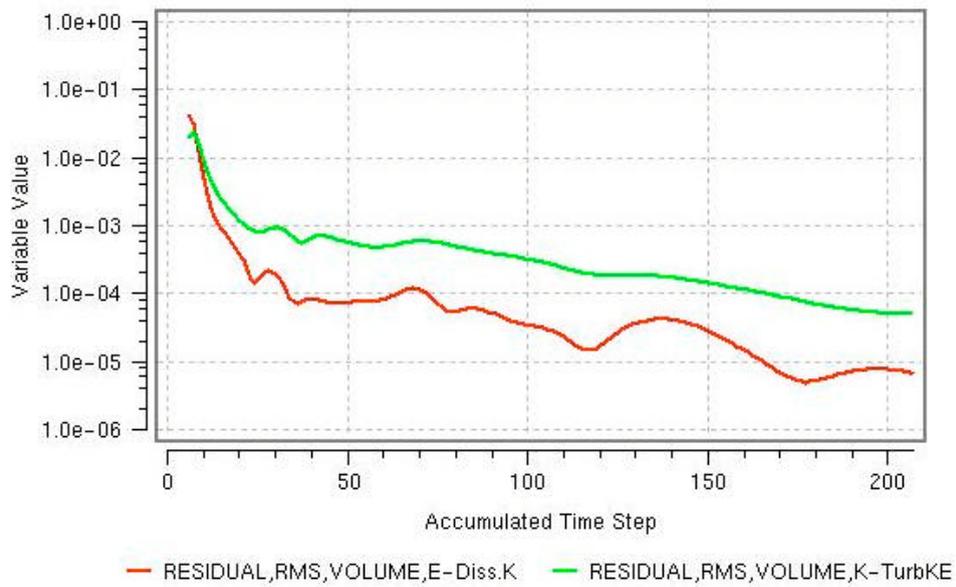


Figura 5.5: Gráfico dos *RMSs* associados as grandezas utilizadas na quantificação da turbulência na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário.

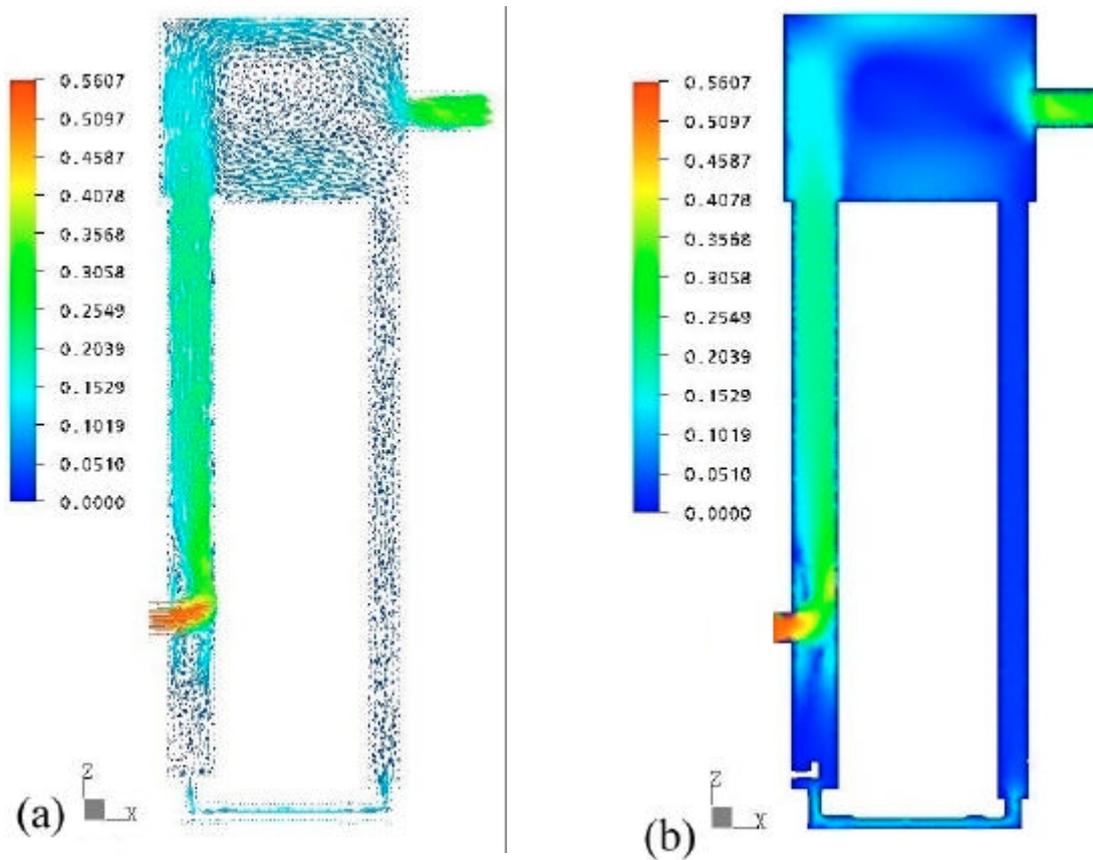


Figura 5.6: (a) Vetores velocidade representando o campo de velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Y = 0$ e (b) Valores do módulo do vetor velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Y = 0$.

5.2.3 Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente:

Percebe-se pelas figuras 5.7 e 5.8 que o critério de convergência foi satisfeito. Vale ressaltar que os valores dos *RMSs* visualizados nas simulações do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente estão associados a última iteração do processo de solução do sistema de equações lineares produzido em cada incremento de tempo.

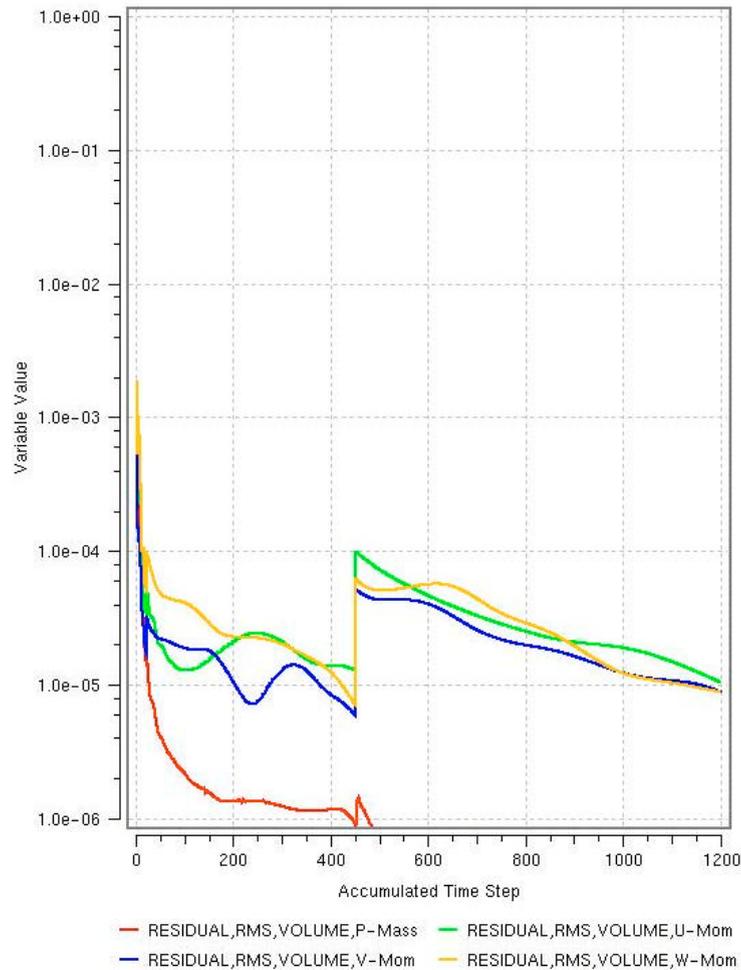


Figura 5.7: Gráfico dos *RMSs* das variáveis dependentes modeladas na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente.

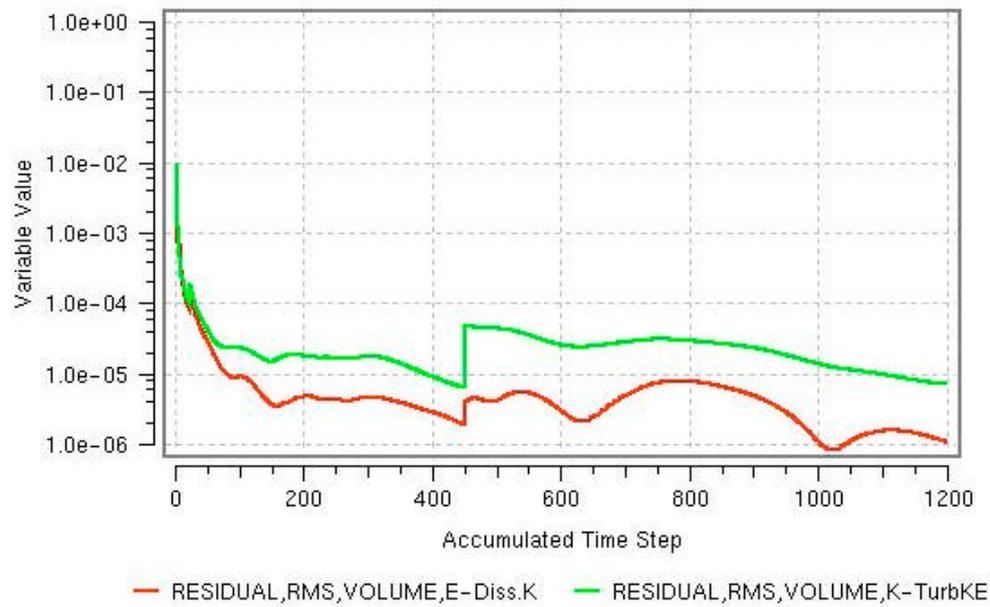


Figura 5.8: Gráfico dos *RMSs* associados às grandezas utilizadas na quantificação da turbulência na simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente.

Os resultados numéricos da simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente são mostrados na figuras 5.9 e 5.11.

Resultados das simulações transientes:

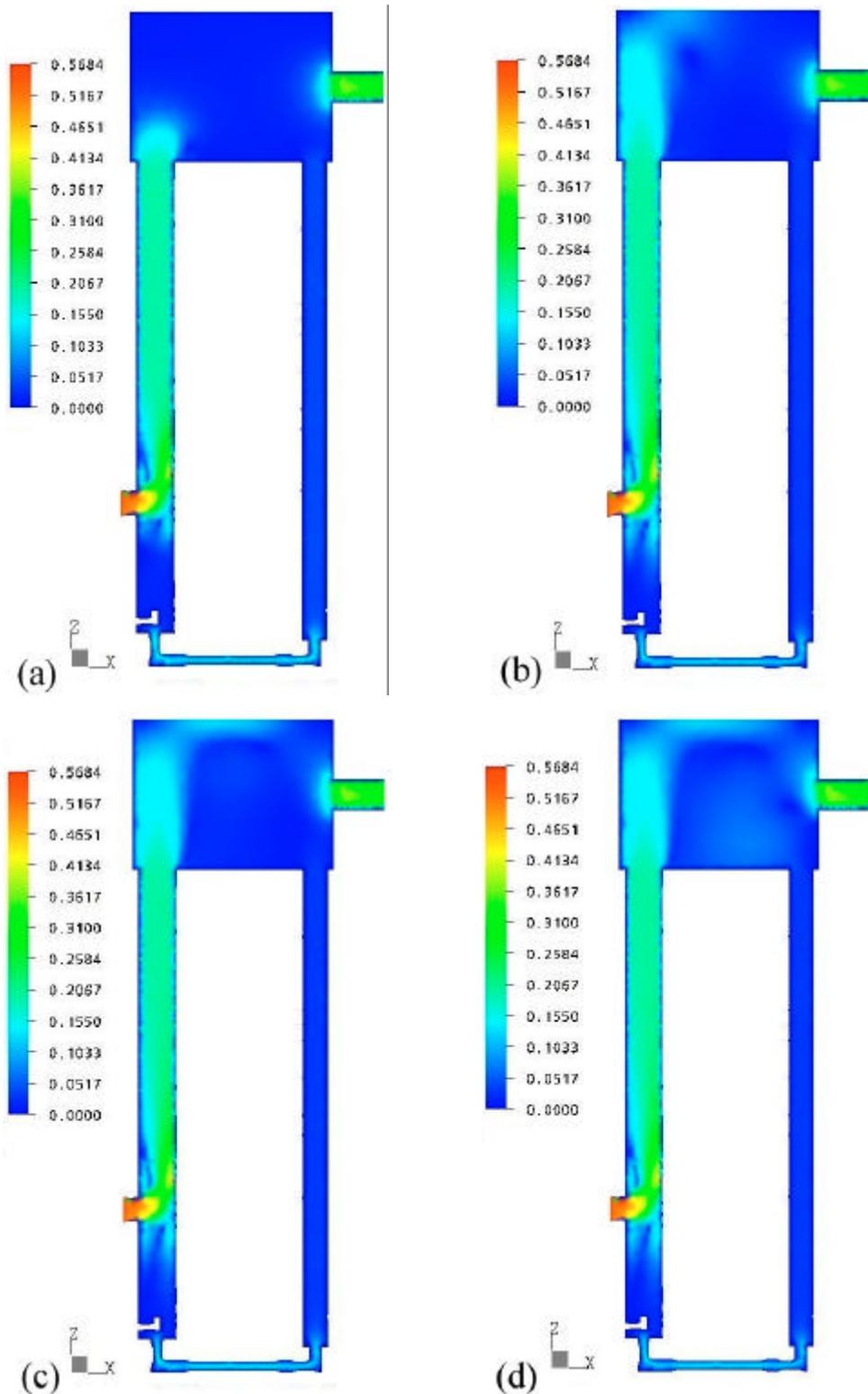
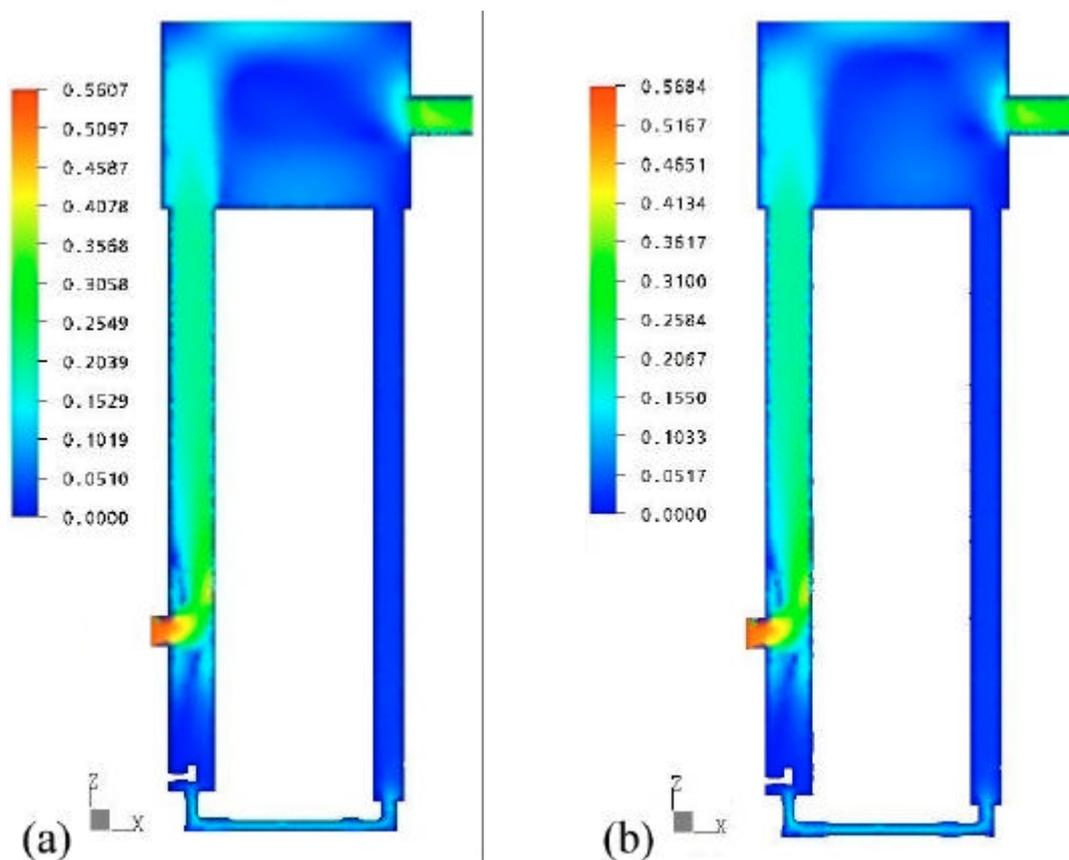


Figura 5.9: Valores do módulo dos vetores velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Y = 0$ a diferentes tempos (tempo real) : (a) $t = 2,5$ s; (b) $t = 15,0$ s; (c) $t = 30,0$ s e (d) $t = 50,0$ s.

Comparação dos resultados obtidos para o estado estacionário empregando a consideração do Regime Estacionário e aplicando um tempo suficientemente grande na simulação considerando o Regime Transiente. Percebe-se pelas figuras 5.10 e 5.11, que os resultados obtidos para o estado estacionário empregando a consideração do Regime Estacionário na simulação e aplicando um tempo suficientemente grande, no caso 50 s, foi suficiente, na



simulação considerando o Regime Transiente são concordantes, corroborando a robustez do algoritmo implementado na código CFX 5.5.1.

Figura 5.10: (a) valores do módulo dos vetores velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Y = 0$ obtidos diretamente a partir da consideração do Regime Estacionário e (b) valores do módulo dos vetores velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$), no plano $Y = 0$, obtidos empregando um tempo suficientemente grande no Problema Transiente.

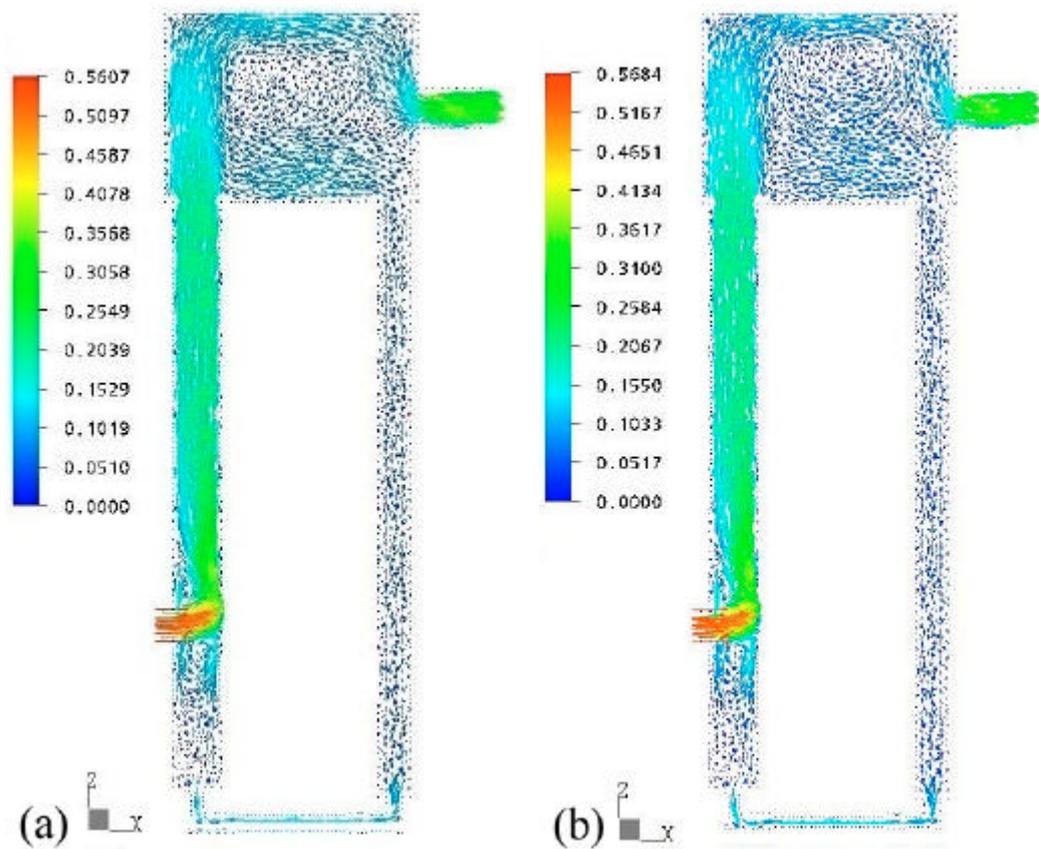


Figura 5.11: (a) Vetores velocidade representando o campo de velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Y = 0$ obtidos diretamente a partir da consideração do Regime Estacionário e (b) Vetores velocidade representando o campo de velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Y = 0$ obtidos empregando um tempo suficientemente grande no Problema Transiente.

5.2.4 Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente

(4.a) Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário; empregando o Esquema *Upwind* na discretização dos termos convectivos.

O acompanhamento do processo de solução da simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário é mostrado nas figuras 5.12 e 5.13:

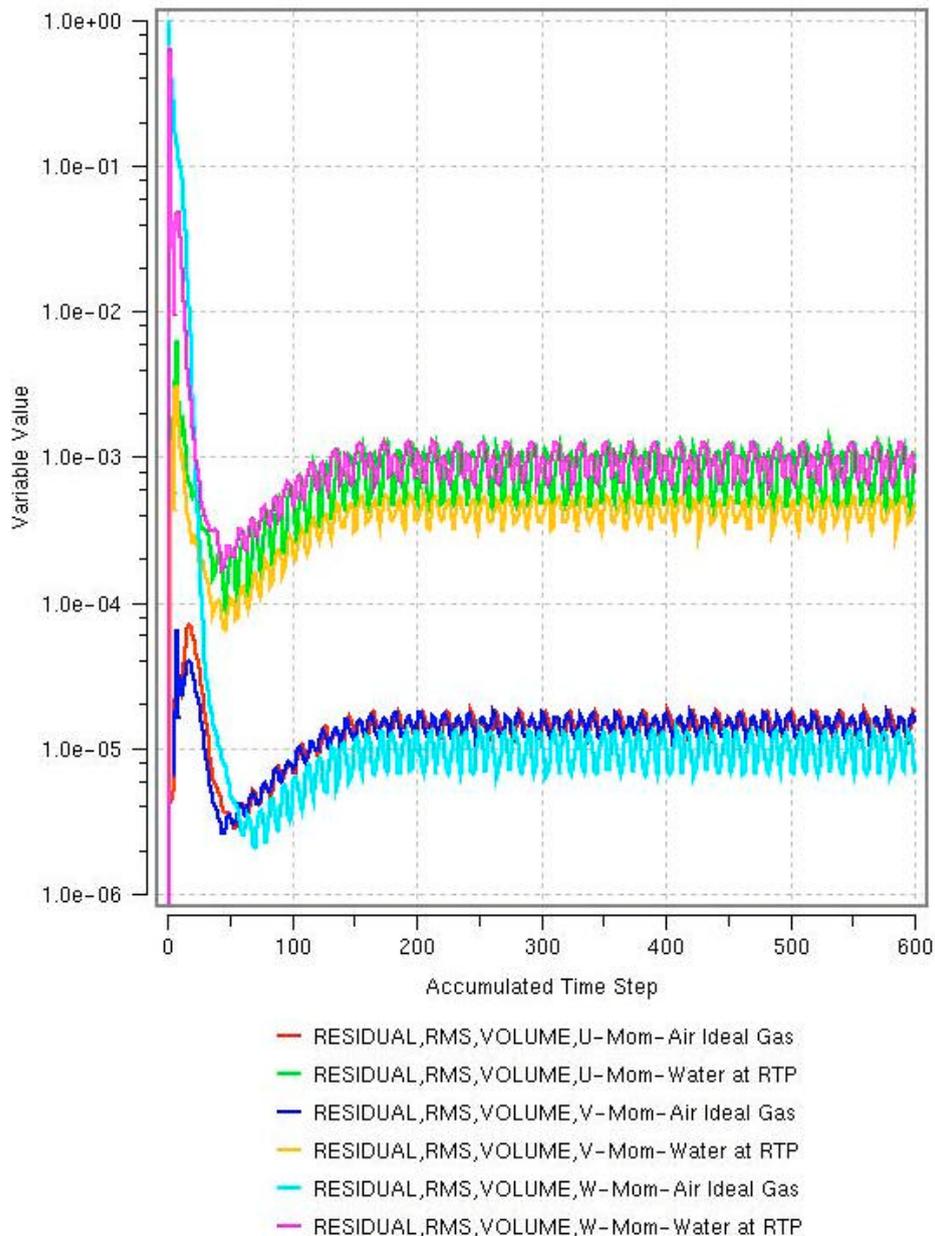


Figura 5.12: Gráfico dos *RMSs* das variáveis dependentes modeladas na simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário; empregando o Esquema *Upwind* na discretização dos termos convectivos.

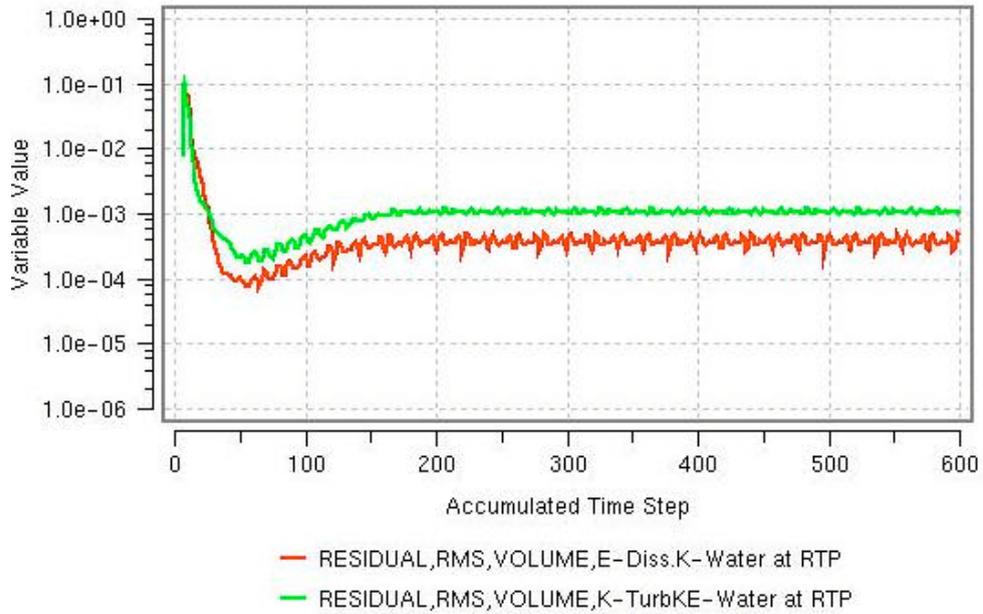


Figura 5.13: Gráfico dos *RMSs* associados as grandezas utilizadas na quantificação da turbulência na simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário.

Percebe-se pelas figuras 5.12 e 5.13 que o critério de convergência não foi satisfeito, embora o processo de solução não apresentasse divergência propriamente dita mas uma incapacidade de produzir resultados mais precisos com o decorrer do processo de solução.

(4.b) Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário; empregando o Esquema *Upwind* de Alta-Ordem na discretização dos termos convectivos.

O acompanhamento do processo de solução da simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário é mostrado nas figuras 5.14 e 5.15:

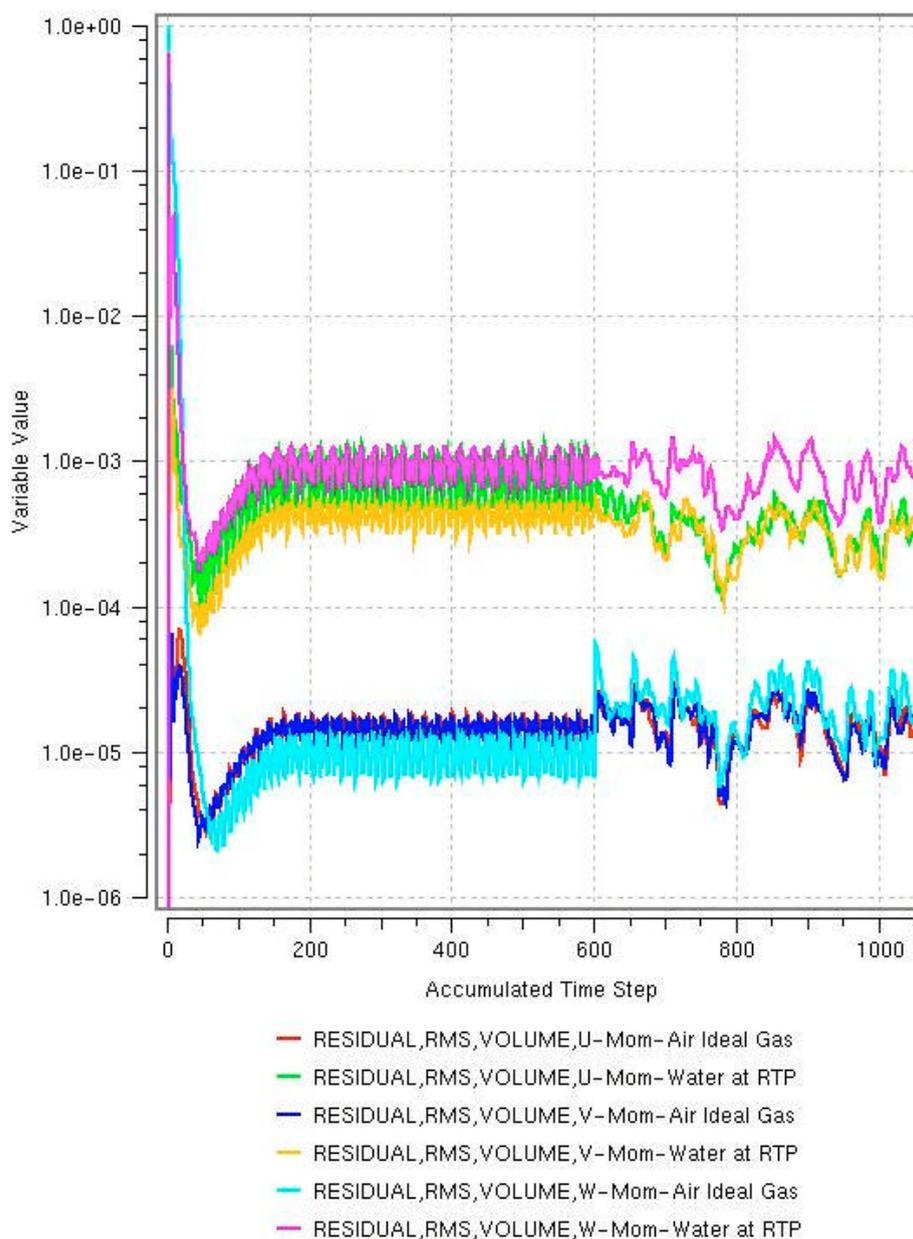


Figura 5.14: Gráfico dos *RMSs* das variáveis dependentes modeladas na simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário; empregando o Esquema *Upwind* de Alta-Ordem na discretização dos termos convectivos.

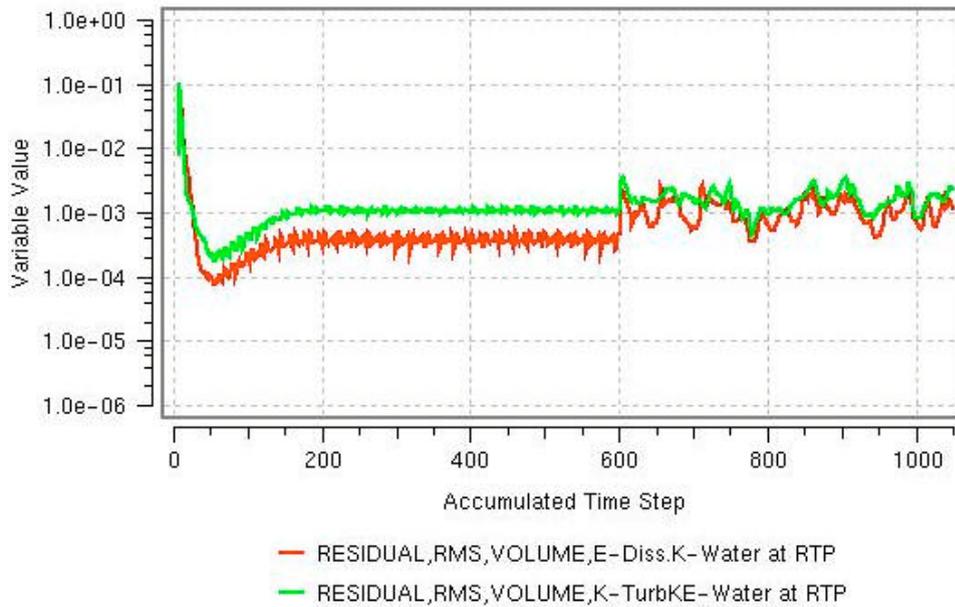


Figura 5.15: Gráfico dos *RMSs* associados às grandezas utilizadas na quantificação da turbulência na simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário.

Percebeu-se pelas figuras 5.14 e 5.15, que o critério de convergência não foi satisfeito, embora tenha-se empregado os resultados associados as figuras 5.13 e 5.14 e que foram obtidos a partir da simulação do Escoamento Bifásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário, aplicando o Esquema *Upwind* (Esquema de 1ª Ordem) na discretização dos termos convectivos como uma estimativa inicial mais refinada. Nenhuma melhoria foi percebida, pelo contrário, os valores dos *RMSs* apresentaram uma maior amplitude de oscilação.

Tabela 5.4: Comparações entre as simulações.

Simulação	$N_{\text{máx}}$ de Iteração	Nº de iteração	Tempo de CPU (h)
1	450	250	2,5
2	450	207	3,5
3	---	---	28,0
4.a	600	600	33,0
4.b	450	450	28,0

As simulações de escoamentos em regime transiente, caso (3), apresentam o número de iterações igual ao número de incrementos no tempo, no caso trabalhado $\Delta t = 0,1$ s, multiplicado pelo número máximo de iterações (no caso em questão empregou-se 3 iterações por incremento de tempo) de modo que o tempo total seja atingido, no caso 120 s.

5.3 Conclusões

Neste Capítulo foram apresentados os resultados da aplicação do “Método dos Volumes Finitos”, através do uso do CFX 5.5.1, para Reatores *Air-Lift*. As simulações foram divididas de forma didática considerando diferentes níveis de dificuldades. Os resultados mostram a robustez dos procedimentos empregados que permitiram uma avaliação qualitativa da fluidodinâmica.

6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

"Aqueles que temem a própria destruição não vivem; rastejam como vermes no vale da mediocridade." ("Khalil Al-Mukafa")

6.1 Conclusões

O principal objetivo desta Tese foi o trabalho exploratório da aplicação da Fluidodinâmica Computacional na descrição em 3D, da fluidodinâmica dos Reatores *Air-Lift*. A partir dos resultados obtidos e apresentados percebeu-se uma maior robustez da referida ferramenta no que tange à descrição de escoamentos monofásicos, sendo considerado o modelo turbulento $k-\epsilon$, haja visto a maior ocorrência de escoamentos turbulentos em processos de escala industrial e ao fato da escala do estudo de caso se aproximar de tais casos. Verificou-se, também, que o código empregado apresenta critérios que sugerem a adequação ou não, de modelos previamente escolhidos para uma dada simulação.

No que se refere aos escoamentos bifásicos, os quais são de maior relevância devido a ocorrência dos mesmos na classe de reatores estudada, percebeu-se pelos gráficos da figura 6.12 que o Esquema *Upwind* aplicado ao escoamento bifásico não atinge o critério de convergência. Tal fato pode ser associado a difusão numérica (erros de aproximação) que são agravados com o aumento do coeficiente do termo difusivo presentes nas equações de conservação empregadas na modelagem, em função da contribuição associada à presença da fase gás recaindo numa situação onde o transporte difusivo torna-se significativo. Tentou-se contornar tal adversidade empregando o Esquema *Upwind* de Alta-Ordem tendo como estimativa inicial os valores finais calculados na simulação aplicando o Esquema *Upwind* de 1ª ordem. Nenhuma melhoria significativa foi percebida, pelo contrário os valores dos *RMSs* apresentaram maiores amplitudes de oscilação durante o processo iterativo.

O emprego dos esquemas de Alta-Ordem é aconselhado em conjunção com malhas numéricas mais refinadas que as aplicadas nos esquemas de 1ª ordem; o que não foi possível, pois a malha foi gerada automaticamente após definir-se o parâmetro *Maximum Edge Length* o qual varia de 1% a 5% da maior dimensão da geometria. A malha empregada neste trabalho foi obtida usando valor de 0,04 para o referido parâmetro, valores

menores (que caíram abaixo de 1 % da maior dimensão da geometria) resultaram em *Loops* infinitos no processo de geração da malha.

Apesar das dificuldades e limitações encontradas, muitas das quais oriundas da incipiência no que tange ao emprego do código CFX, que sem sombra de dúvida caracteriza-se como um *software* poderoso no que se refere a solução numérica da fluidodinâmica. A *CFD* constitui um caminho necessário a ser percorrido e profundamente compreendido pela Engenharia Química, visando contornar os notórios problemas associados a *scale-up* e projetos de reatores cujas operações são fortemente influenciadas pela fluidodinâmica, subconjunto onde se encontram os *Bubble Column Reactors* e os Reatores *Air-Lift*. Entretanto, seria interessante uma maior interação entre os desenvolvedores do código e os profissionais atuantes no campo da Engenharia Química, visando um maior fluxo de informações buscando melhorar os modelos referentes a escoamentos multifásicos e melhorias no algoritmo de solução.

6.2 Sugestões

- Iniciar o estudo pela fluidodinâmica dos *Bubble Column Reactors* mais simples, devido à geometria de tais sistemas serem menos complexas, tendo-se um ganho de tempo na parte do pré-processamento : construção da geometria e da malha numérica; o que seria uma etapa na obtenção de *insights* a respeito do manuseio dos código e das características do escoamento, haja visto a maior disponibilidade de dados experimentais, na literatura, a cerca das operações dos *Bubble Column Reactors* o que possibilita a validação dos resultados fornecido pela *CFD*.
- Um aprofundamento no que se refere à modelagem da turbulência, o que melhoraria a seleção dos modelos mais adequados, bem como a maior sensibilidade na escolha das constantes associadas a cada modelo e *insights* no que se refere a estimativas iniciais, pois as simulações dos escoamentos multifásicos são mais sensíveis às estimativas iniciais; as mesmas podem aumentar ou diminuir o tempo de processamento, bem como originar divergência do processo de solução.
- Após a validação dos resultados das simulações dos escoamentos multifásicos nos *Bubble Column Reactors* partiria-se para a modelagem de escoamentos multifásicos nos Reatores *Air-Lift*, haja visto a escassez de dados experimentais na literatura, a caracterização da

geometria como complexa, embora haja códigos específicos para a construção de geometrias complexas e geração de malhas numéricas nas mesmas, podendo ser utilizadas pelo CFX, que forneceria o *Solver* e o Pós-processamento.

- Um maior estudo dos modelos empregados na descrição dos escoamentos multifásicos (gás-líquido), principalmente no que se refere a transferência de momentum e energia cinética entre as fases, pois em decorrência da presença de duas regiões distintas no Reatores *Air-Lift* (*Riser* e *Downcomer*) a faixa de aplicabilidade dos modelos, bem como os valores das constantes em cada região devem ser cuidadosa e profundamente estudadas.

7 BIBLIOGRAFIA

“Se não houver frutos, valeu a beleza das flores. Se não houver flores, valeu a sombra das folhas. Se não houver folhas, valeu a intenção da semente.”

(Provérbio chinês)

Bibliografia e Referências

ABUNAHMAN, S. A. Equações Diferenciais. LTC- Livros Técnicos e Científicos Editora S.A, Rio de Janeiro, 1986. Cap. 4, pág. 153-162.

AEA. CFX 4.3- Solver. Oxfordshire, United Kingdom: AEA Technology plc, 2001.

AEA. CFX 5.5 – Solver, Solver Manager and Tutorials. AEA Technology plc, 2002.

ALTEMANI, C. A. C. IM 535 – Método dos Volumes de Controle, notas de aula. Departamento de Energia da Faculdade de Engenharia Mecânica. Universidade Estadual de Campinas, 2001.

BAUER, M. and EIGENBERGER, G. A concept for multi-scale modeling of bubble columns and loop reactors. Chem. Engng. Sci., 54, 5109-5117, 1999.

BAUER, M., and EIGENBERGER, G. Multiscale modeling of hydrodynamics, mass transfer and reaction in bubble column reactors. Chem. Engng. Sci., vol. 56, 1067-1074, 2001.

BECKER, S., SOKOLICHIN, A. and EIGENBERGER, G. Gas-liquid flow in bubble columns and loop reactors: Part II. Comparison of detailed experiments and flow simulations. Chem. Engng. Sci., 49 (24B), 5747-5762, 1994.

BECKER, S., and PFLEGER, D. Modelling and simulation of the dynamic flow behavior in bubble column. Chem. Engng. Sci., 56, 1737-1747, 2001.

BORCHERS, O., BUSCH, C., SOKOLICHIN, A. and EIGENBERGER, G. Applicability of the standard k- ϵ turbulence model to the dynamic simulation of bubble

BORCHERS, O., BUSCH, C., SOKOLICHIN, A. and EIGENBERGER, G.
Applicability of the standard k- ϵ turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns. Parte II: Comparison of detailed experiments and flow simulations. Chem. Engng. Sci., 54, 5109-5117, 1999.

CAMARASA, E., MELEIRO, L.A.C., CARVALHO, E., DOMNGUES, A., MACIEL FILHO, R. et al. A complete Model for oxidation Air-Lift reactors. ESCAPE -10, May 7-10, Florence-Italy, 2000.

CAMARASA, E., MELEIRO, L.A.C., CARVALHO, E., DOMINGUES, A., MACIEL FILHO, R. et al. Developmente of a Complete Model for na Air-Lift Reactor. Chem. Engng. Sci., 56, 493-502, 2001.

CARVALHO, E. Desenvolvimento de Modelo Hidrodinâmico para Reatores Air-Lift. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2001. Tese (Mestrado)

CHEN, X., HAN, P. A note on the solution of conjugate heat tranfer problems using SIMPLE-like algorithms. Int. J. Heat and Fluid Flow , 21,463-467, 2000.

CHISTI, M. Y. Airlift Bioreactors. Elsevier Science Publishers LTD, New York,1989. Cap. 1-3.

COCKX, A., LINÉ, A., ROUSTAN, M., DOQUANG, Z. and LAZAROVA, V. Numerical simulation and physical modeling of the hydrodynamics in an air-lift internal loop reactor. Chem. Engng. Sci., Vol.52, Nos 21/22, pp. 3787-3793, 1997.

DECKWER, W. -D. Bubble Column Reactors. English translation copyright by John Wiley & Sons Ltd, 1992. Cap. 1-3.

DELNOIJ, E., KUIPERS, J.A.M., and SWAAIJ, W.P.M. A three-dimensional CFD model for gas-liquid bubble columns. Chem. Engng. Sci., 54,2217-22261, 1999.

FERZIGER, J.A., and PÉRIC, M. Computational Methods for Fluid Dynamics. Springer, Berlin,1997. Cap. 4, pp. 71-76; Cap. 8, pp. 233-239.

FREEDMAN, W., and DAVIDSON, J. F. Hold-up and liquid circulation in bubble columns. *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, vol. 47, Y251-T262, 1969.

GRIENBERGER, J. and HOFMANN, H. Investigations and modelling of bubble columns. *Chem. Engng. Sci.*, 47, 2215-2221, 1992.

HARRIS, C. K., ROEKAERTS, D. and ROSENDAL, F.J.J. Computacional Fluid Dynamics for Chemical Reactor Engineering. *Chem. Engng. Sci.*, 51, 1569-1594, 1996.

HILLMER, G., WEISMANTEL, L. and HOFMANN, H. Investigations and modelling of Slurry bubble columns. *Chem. Engng. Sci.*, Vol. 49, No. 6, pp. 837-843, 1994

HJERTAGER, B. H., and MORUD, K. Computational fluid dynamics simulation of bioreactors. *Modeling, Identification and Control*, vol. 16, N° 4, 177-191, 1995.

INCROPERA, F. P., e WITT, D. P. Fundamentos de Transferência de Calor e Massa, 3ª edição. Guanabara Koogan, Rio de Janeiro, 1992, Cap. 3, pág. 39-41, Cap. 6, pág. 147-156.

LAPIN, A., and LÜBBERT, A. Numerical simulation of the dynamics of two-phase gas-liquid flows in bubble columns. *Chem. Engng. Sci.*, 49, No. 21, pp 3661-3674, 1994.

LAPIN, A., MAUL, C., JUNGHANS, K., LÜBBERT, A. Industrial-scale bubble column reactors: gas-liquid flow and chemical reaction. *Chem. Engng. Sci.*, 56, 239-246, 2001, 2001.

LEVEQUE, R. J. High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33, pp 627-665, 1996.

MERCHUK, J. C. Gas hold-up and liquid velocity in a two-dimensional air lift reactor. *Chem. Engng. Sci.*, vol. 41, n° 1, pp. 11-16, 1986.

MOREIRA, D. R. R. Modelagem não isotérmica de um Regenerador FCC usando a Fluido Dinâmica Computacional. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2002. Tese (Mestrado). Cap. 4-5.

ONOZAKI, M., NAMIKI, Y., SAKAI, N. et al. Dynamic simulation of gas-liquid dispersion behavior in coal liquefaction reactors. *Chem. Engng. Sci.*, 55, 5099-5113, 2000.

PATANKAR, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing Corporation, 1986.

PERRY, R. H., GREEN, D. W., and MALONEY, J. O., eds., Chemical Engineers's Handbook, 7 th. ed, McGraw-Hill, New York, 1997. *Seção 18-24*

PFLEGER, D., GOMES, S., WAGNER, H.-G., & GILBERT, N. Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns fundamental studies of the Eulerian-Eulerina modeling approach. Chem. Engng. Sci., vol. 54, 5091-5099, 1999.

PINTO, J. C., e LAGE, P. L. C. Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química, E-papers Serviços Editoriais Ltda, Rio de Janeiro, 2001. Cap. 4, pág. 139-191.

RIGGS, J. B. An introduction to numerical methods for chemical engineers, 2^a edition. Texas Tech University Press, Texas, 1994. Cap. 1 and Cap. 8.

SAHU, A. K., KUMAR, P., PATWARDHAN, A. W. and JOSHI, J. B. CFD modelling and mixing in stirred tanks. Chem. Engng. Sci., 54, 2285-2293, 1999.

SVENDEN, H. F., JAKOBSEN, H.A. and TORVIK, R. Local Flow structures in internal loop and bubble column reactors. Chem. Engng, Sci., vol. 47, N° 13/14, pp. 3297-3304, 1992.

SOKOLICHIN, A., and EIGENBERGER, G. Gas-liquid flow in bubble columns and loop reactors: Part I. Detailed modelling and numerical simulation. Chem. Engng. Sci., Vol. 49, No. 24B, pp. 5735-5746, 1994.

SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G., LAPIN, A. & LÜBBERT, A. Dynamic numerical simulation of gas-liquid two-phase flows Euler-Euler versus Euler-Lagrange. Chem. Engng. Sci., Vol.52, pp. 611-626, 1997

SOKOLICHIN, A., and EIGENBERGER, G. Applicability of the standard K- ϵ turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns. Parte I: Detailed numerical simulations. Chem. Engng. Sci., 54, 2273-2284, 1999.

THAKRE, S. S., and JOSHI, J. B., CFD simulation of bubble column reactors: importance of drag force formulation. Chem. Engng. Sci., 54, 5055-5060, 1999.

TORVIK, R., and SVENDSEN, H. F. Modelling of slurry reactors: a fundamental approach. Chem. Engng. Sci., 45, 2325-2332, 1990.

VAN DOORMAAL, J. P., and RAITHBY, G. D. Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows. Numerical Heat Transfer, vol. 7, pp. 147-163, 1984.

VERSTEEG, H.K., and MALALASEKERA, W. An introduction to Computational Fluid Dynamics (The Finite Volume Method). Prentice Hall ,1995.

WACHI, S. & YATES, J. G. Comments on modelling of slurry reactors – a fundamental approach. Comment and reply by Torvik & Swendsen. Chem. Engng. Sci., 46, 1528-1530, 1991

WARNECKE, H. -J., PRÜSS, J., SCHÄFER, M. & WEIDENBACH, M. A concept to simulate an industrial size tube reator with faz complex kinetics and absorption of two gases on the basis of CFD modeling. Chem. Engng. Sci., vol. 54, 2513-2519, 1999.

8 ANEXO

“Onde há uma vontade, há um caminho.”

(Provérbio chinês)

8.1 Resultados das simulações visualizadas no plano $Z = 3,45$ m

8.1.1 Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento e Regime Estacionário

Os resultados numéricos da simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Estacionário são mostrados na figura A.1:

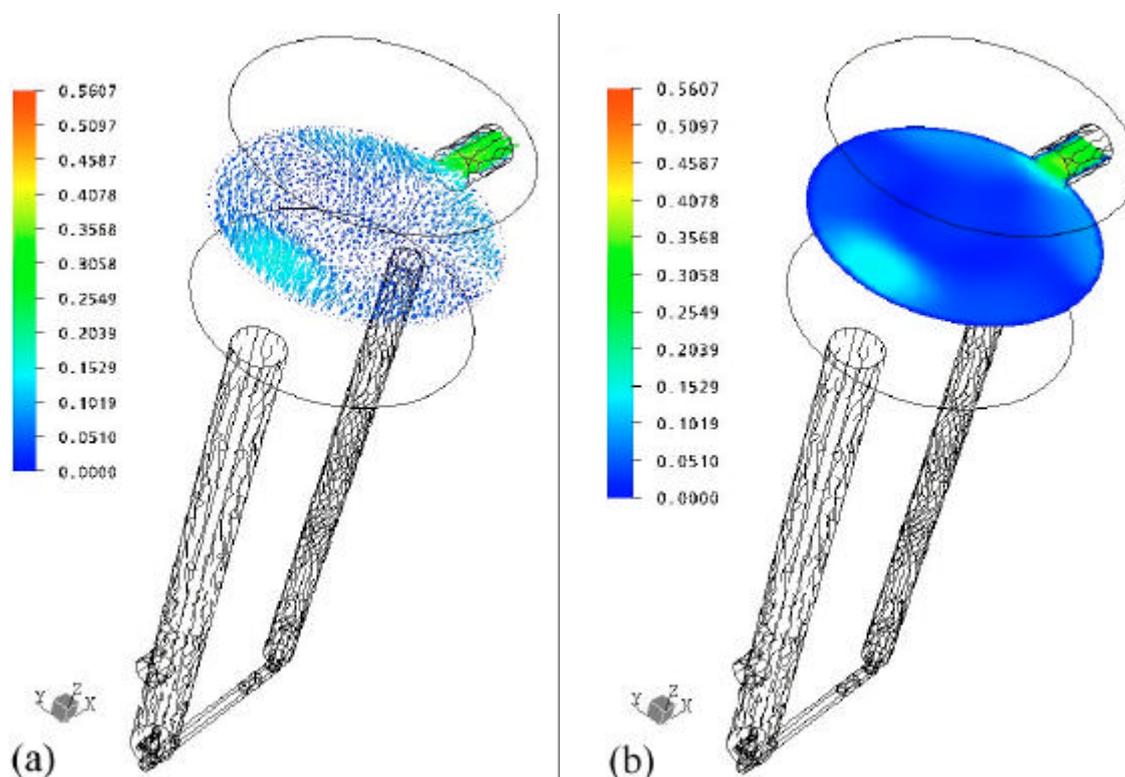


Figura A.1: (a) Vetores velocidade representando o campo de velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Z = 3,45$ m e (b) Valores do módulo dos vetores velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Z = 3,45$ m.

8.1.2 Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente

Os resultados numéricos da simulação do Escoamento Monofásico, Modelo Turbulento em Regime Transiente são mostrados na figura A.2:

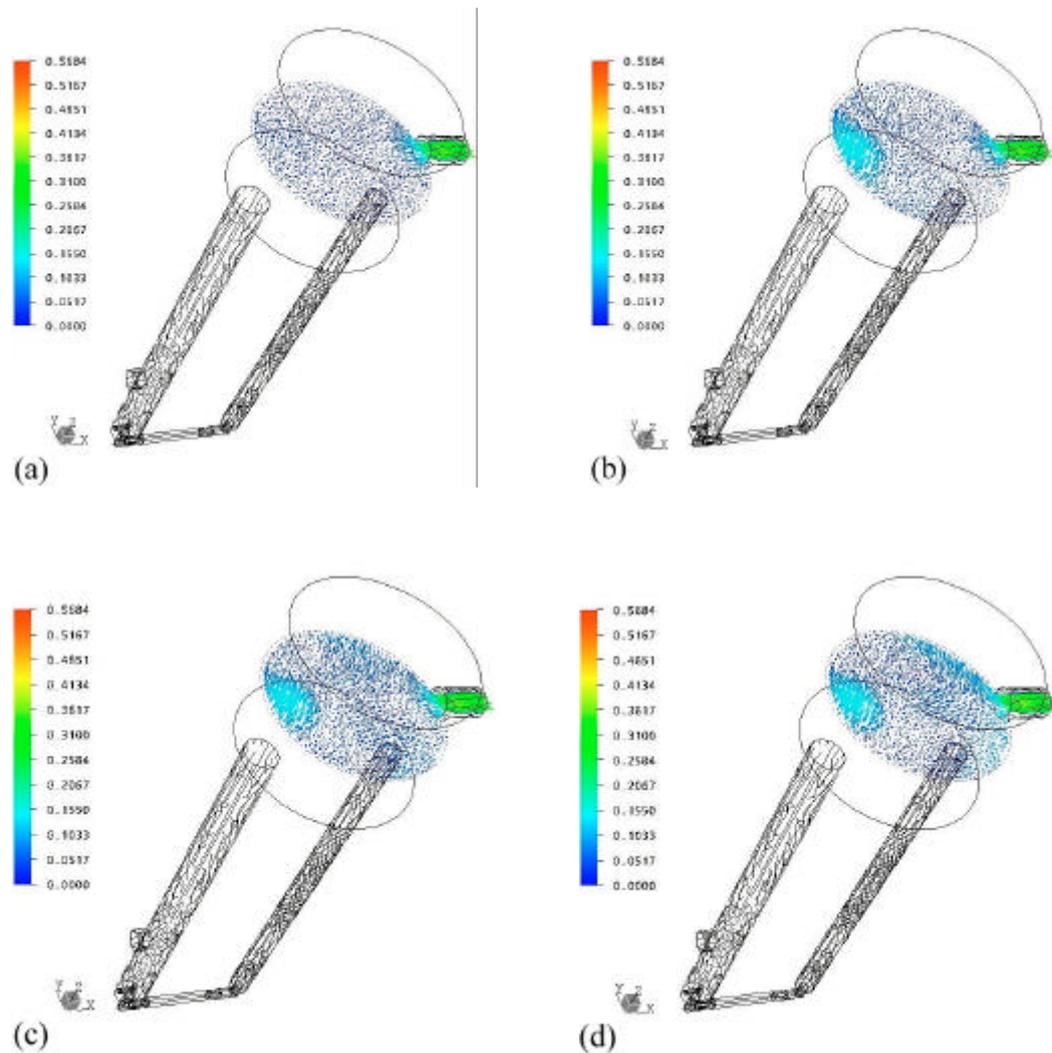


Figura A.2: Vetores velocidade representando o campo de velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Z = 3,45 \text{ m}$ a diferentes tempos (tempo real): (a) $t = 2,5 \text{ s}$; (b) $t = 15,0 \text{ s}$; (c) $t = 30,0 \text{ s}$ e (d) $t = 50,0 \text{ s}$.

A comparação dos resultados obtidos para o estado estacionário empregando a consideração do Regime Estacionário na simulação e aplicando um tempo suficientemente grande na simulação considerando o Regime Transiente é mostrada na figuras A.3 e A.4:

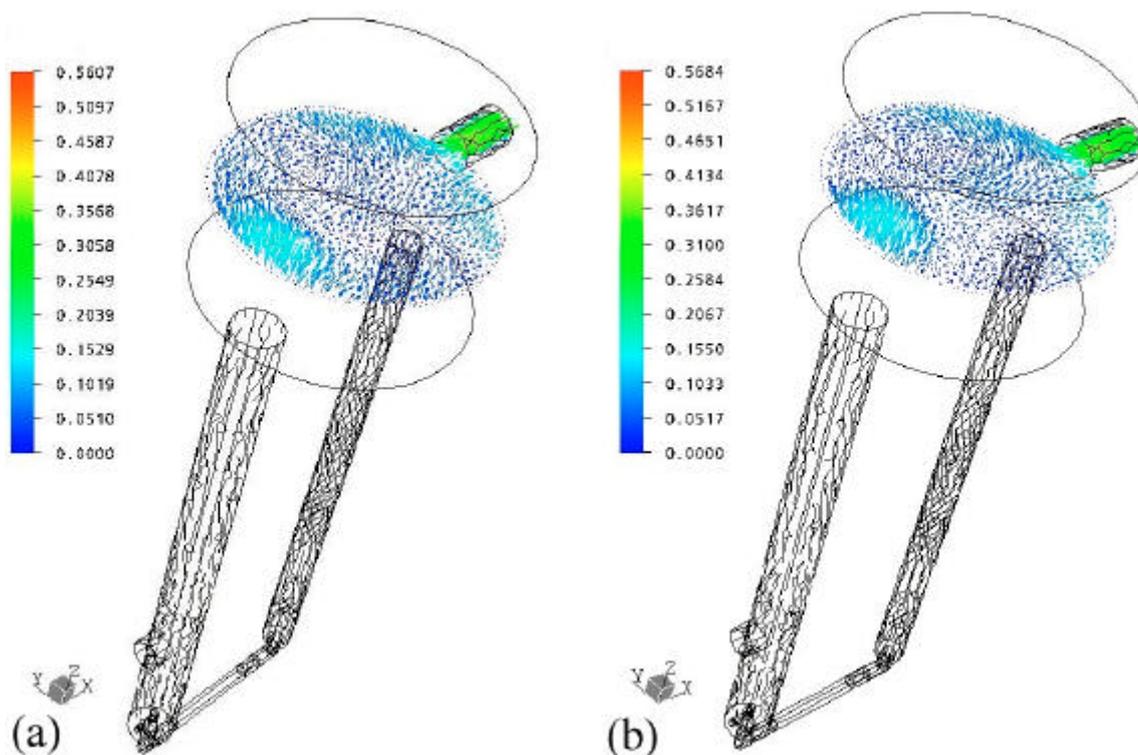


Figura A.3: (a) Vetores velocidade representando o campo de velocidade (m.s^{-1}) no plano $Z = 3,45$ m obtidos diretamente a partir da consideração do Regime Estacionário e (b) Vetores velocidade representando o campo de velocidade (m.s^{-1}) no plano $Z = 3,45$ m obtidos empregando um tempo suficientemente grande na simulação considerando o Regime Transiente.

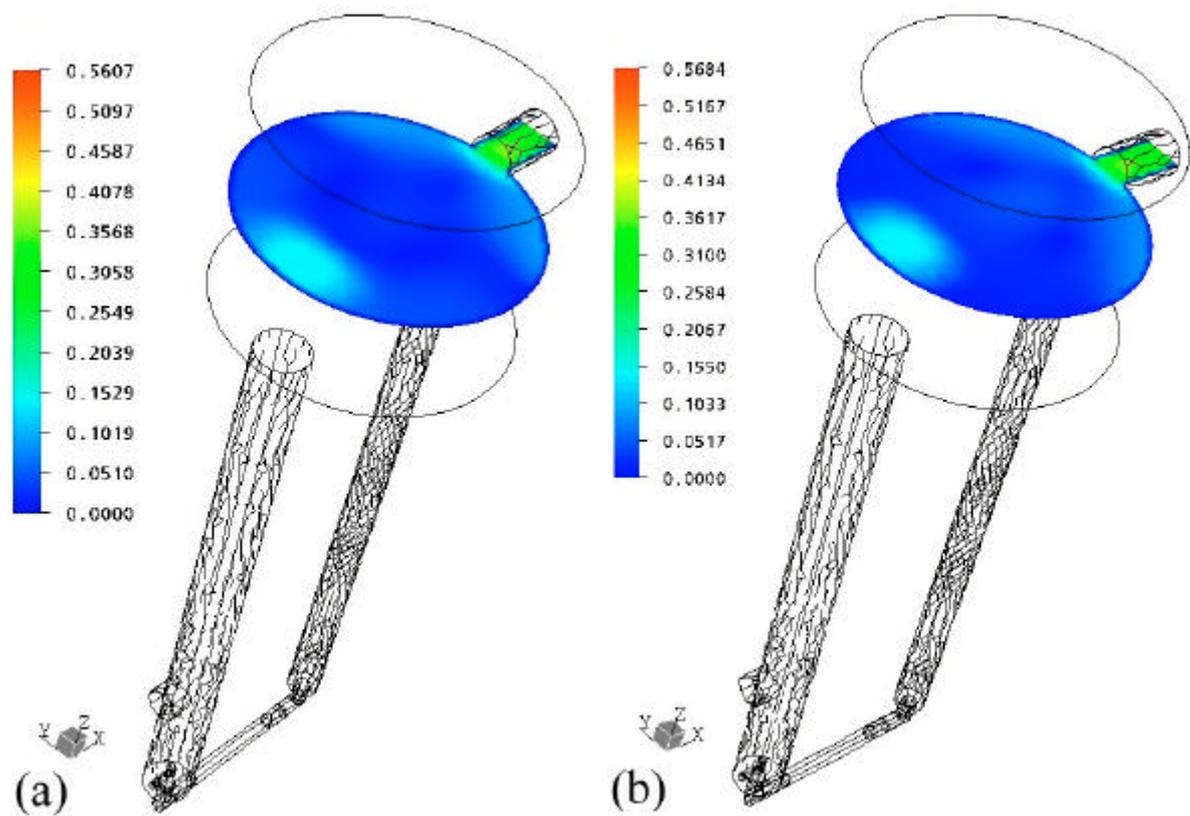


Figura A.4: (a) Valores do módulo dos vetores velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Z = 3,45$ m obtidos diretamente a partir da consideração do Regime Estacionário e (b) Valores do módulo dos vetores velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) no plano $Z = 3,45$ m obtidos empregando um tempo suficientemente grande na simulação considerando o Regime Transiente.

8.2 Configuração da geometria empregada no estudo de caso

A configuração do reator empregado neste trabalho foi baseada no estudo de caso de CARVALHO (2001). Fez-se algumas alterações de modo a permitir simulações de escoamentos monofásicos, inicialmente, para depois se buscar simulações de escoamento bifásico.

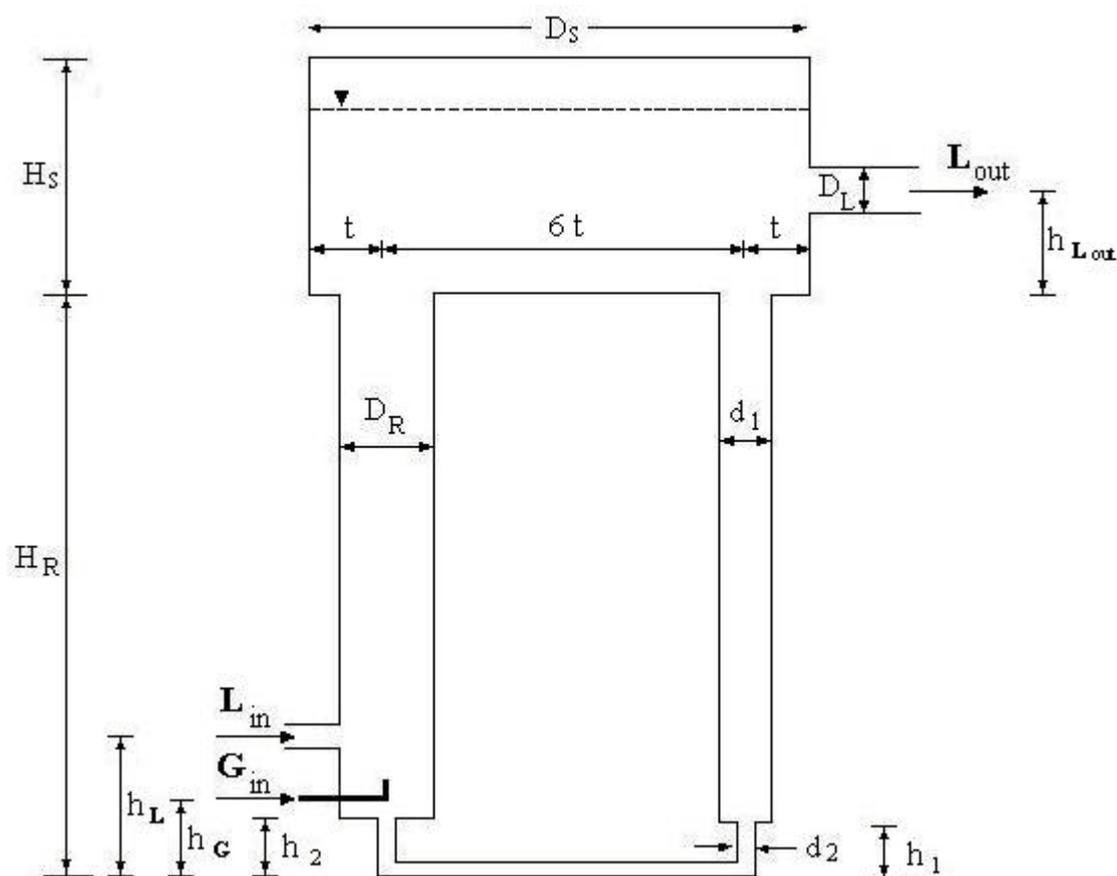


Figura A.5: Configuração da geometria do estudo de caso empregado neste trabalho.

Dados extraídos do trabalho de CARVALHO (2001):

- “Separador”:

$$D_S = 1,20 \text{ m}$$

• *Riser*:

$$H_R = 3,00 \text{ m}$$

$$D_R = 0,23 \text{ m}$$

• *Downcomer*:

$$d_1 = 0,152 \text{ m}$$

Vale ressaltar que detalhes da construção do equipamento (Ex.: diâmetro do tubo que une a região do *Riser* e do *Downcomer*) são necessários na construção da geometria, o que não foi priorizado no primeiro momento deste trabalho de caráter exploratório da aplicação da *CFD* na modelagem de Reatores *Air-Lift*.

Alterações de modo a possibilitar a construção de uma geometria visando obter uma configuração mais geral:

• Separador:

$$t = D_s/8 = 0,15 \text{ m}$$

$$H_S = 1,20 \text{ m}$$

$$h_{L \text{ out}} = 0,45 \text{ m}$$

$$D_L = \frac{(D_R + d_1)}{2}$$

• *Riser*:

$$h_2 = 0,20 \text{ m (arbitrado)}$$

$$h_L = 0,97 \text{ m (arbitrado)}$$

$$h_G = 0,27 \text{ m (arbitrado)}$$

$$d_G = D_R / 6 \cong 3,83 \cdot 10^{-2} \text{ m}$$

$$d_L = d_1 = 0,152 \text{ m (arbitrado)}$$

• *Downcomer:*

$$d_2 = d_1 / 2 = 0,076 \text{ m}$$

$$h_1 = 0,15 \text{ m (arbitrado)}$$

Nas simulações considerou-se apenas o volume limitado pelo nível do fluido, que equivale a “ H_S ” de estudo de caso de CARVALHO (2001), que seria 0,90 m; uma altura adicional foi acrescentada no separador, mostrado na figura A.5, em função do fato que a operação de tais sistemas deve empregar uma diferença entre o nível da mistura reacional e a borda do separador, visando evitar o transbordamento.

Reflexão àqueles que se interessaram pelo final desta dissertação:

*“Não digas tudo o que sabes,
Não faças tudo o que podes,
Não acredites em tudo o que ouves,
Não gaste tudo o que tens.*

Porque:

*Quem diz tudo o que sabe,
Quem faz tudo o que pode,
Quem acredita em tudo o que ouve,
Quem gasta tudo o que tem.*

Muitas vezes,

Diz o que não convém,

Faz o que não deve,

Julga o que não vê,

Gasta o que não pode.”

(Provérbio árabe)