



COPPE/UFRJ

SIMULAÇÃO DA FORMAÇÃO DE COQUE NO COLETOR DE LÍQUIDO DE
GASÓLEO RESIDUAL ATRAVÉS DA FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL

Alessandra Bastos dos Santos

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Programa de Pós-graduação em Engenharia
Química, COPPE, da Universidade Federal
do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos
necessários à obtenção do título de Mestre
em Engenharia Química.

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Rio de Janeiro
Setembro de 2009

SIMULAÇÃO DA FORMAÇÃO DE COQUE NO COLETOR DE LÍQUIDO DE
GASÓLEO RESIDUAL ATRAVÉS DA FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL

Alessandra Bastos dos Santos

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE
ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE
JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA
QUÍMICA.

Aprovada por:

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Prof. José Carlos Costa da Silva Pinto, D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Enga. Karolline Ropelato, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

SETEMBRO DE 2009

Santos, Alessandra Bastos dos

SIMULAÇÃO DA FORMAÇÃO DE COQUE
NO COLETOR DE LÍQUIDO DE GASÓLEO
RESIDUAL ATRAVÉS DA FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL/Alessandra Bastos dos Santos.

– Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2009.

XIV, 95 p.: il.; 29, 7cm.

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de
Engenharia Química, 2009.

Referências Bibliográficas: p. 90 – 95.

1. CFD. 2. Formação de Coque. 3. transferência
de calor. I. Lage, Paulo Laranjeira da Cunha.
II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,
Programa de Engenharia Química. III. Título.

*Aos meus pais e minha
madrinha pelo amor e carinho.*

*À minha tia Eunice (in
memoriam).*

Agradecimentos

À Deus, criador de todas as coisas, que me oriente sempre pelo caminho do bem.

Aos meus pais e minha madrinha, vocês são meus alicerces.

Aos meus irmãos, pelo incentivo, e demais familiares que me apoiaram.

Ao CENPES, por dar oportunidade para que seus empregados estudem e se especializem.

À Solange, minha ex-gerente, que viabilizou que eu fizesse o mestrado.

Ao Washington, meu gerente, por todo apoio e compreensão.

Ao professor Paulo, meu orientador, pela orientação dada.

À Silvia e Antônio, meus coordenadores, e Camila, minha amiga, que deram entrada dos documentos no CENPES para que eu fizesse o mestrado. Eu nunca esqueço disso. Obrigada!

À todos do grupo de destilação, obrigada pelo incentivo e apoio. Em especial ao Ney, Navegantes, Mauro, Edílson, Raquel, Elizabeth, Patricia, Ana Lucia, Camila, Danilo, Roberto, Arlan e Rodrigo.

Ao Marco Antônio, consultor de química do CENPES, pela literatura indicada e pelas discussões e conversas.

À Karolline, por ter me ajudado a mexer no CFX.

Ao Ricardo Damian, por ter me ensinado a escrever no Latex.

À minha amiga Vivian, pelas orações para que eu terminasse este trabalho.

Aos meus amigos: Janaina, Marcio, Alexandre, Ligia, Nirinha, Adriana, Edgard, Camila, Érica, Vanessa, Chrystine, Tatiana, Edson, Bianca e à todos outros amigos que sempre me deram uma palavra amiga.

Ao Fábio, Marcelo, Evelyne, Tosta e Otávio, meus amigos do mestrado.

Às minhas fisioterapeutas, Jucéia e Valéria, obrigada por cuidarem de mim.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

SIMULAÇÃO DA FORMAÇÃO DE COQUE NO COLETOR DE LÍQUIDO DE
GASÓLEO RESIDUAL ATRAVÉS DA FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL

Alessandra Bastos dos Santos

Setembro/2009

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Programa: Engenharia Química

O objetivo do presente trabalho foi analisar a formação de coque no coletor de gasóleo residual de uma fracionadora à vácuo da unidade de destilação utilizando a fluidodinâmica computacional (CFD), usando o software comercial ANSYS CFX 11 SP1. Um modelo cinético simplificado da literatura foi usado para estimar a taxa de formação de coque a partir de asfaltenos. As simulações CFD tridimensionais com transferência de calor foram feitas na escala real do coletor, considerando apenas a fase líquida. O modelo tratou o asfaleno como uma variável adicional (componente traço) e o coque formado como outra variável adicional que é simplesmente acumulada no seu ponto de formação. O líquido foi considerado incompressível, a turbulência foi considerada pelo modelo SST (Shear Stress Transport) e a parede inferior do coletor foi assumida a temperatura do vapor ascendente. O regime permanente não foi obtido, porém simulações transientes mostraram que o escoamento tem características quase-estacionárias. A análise dos resultados mostrou que o coque é formado preferencialmente nos pontos quentes do coletor. O modelo numérico mostrou ser suficientemente sensível na análise dos efeitos de mudanças na geometria do coletor e nas condições de operação sobre a quantidade de coque formada no coletor, servindo, pois, como uma ferramenta para o projeto do mesmo.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

SIMULATING COKE FORMATION IN THE SLOP WAX COLECTOR USING COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS

Alessandra Bastos dos Santos

September/2009

Advisor: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Department: Chemical Engineering

The aim of this study was to analyze coke formation in a slop wax collector of vacuum distillation column by computational fluid dynamics (CFD), using the commercial software ANSYS CFX 11 SP1. A simplified kinetic model available in the literature was used to estimate the coke formation from asphaltenes. The three-dimensional CFD simulations with heat transfer were carried out in full size collector, but considering only the flow of the liquid phase. In the model, asphaltenes was set up as an additional variable (component trace) and the coke formed as another additional variable that is simply accumulated in your point of formation. The liquid was considered incompressible, turbulence was considered by the model SST (Shear Stress Transport) and the lower wall of the collector was assumed the temperature of the steam rising. The steady state was not obtained, but transient simulations showed that the flow is quasi-stationary characteristics. The results showed that coke is formed preferentially in hot points of the collector. The numerical model proved to be sufficiently sensitive in the analysis of the effects of changes in the geometry of the collector and the in the operating conditions on the amount of coke formed in the collector, serving, therefore as a tool for its design.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xiv
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.1.1 A Unidade de Destilação	2
1.1.2 Coque	6
1.2 Objetivo	7
1.3 Organização da tese	7
2 Revisão Bibliográfica	9
2.1 Formação de coque	9
2.1.1 Modelo cinético da formação de coque	10
2.2 CFD aplicado à destilação e à formação de coque	12
2.3 Fundamentos da Fluidodinâmica Computacional	14
2.3.1 As Equações Governantes	14
2.3.2 Método de Volumes Finitos	16
2.3.3 Modelos de Turbulência	21
2.3.4 O Conceito de Camada Limite	29
3 Metodologia Numérica	39
3.1 Modelo geométrico	39
3.2 Equações governantes	42
3.3 Modelo cinético de coque	43
3.4 Algoritmo de Solução	47

3.5	Condições de contorno e iniciais	48
3.6	Geração da malha	51
3.7	Critério de convergência	52
3.8	Estratégia de solução	54
4	Resultados e Discussões	55
4.1	Teste de convergência de malha	55
4.1.1	Comparação dos resultados das simulações transientes em diferentes instantes de tempo	59
4.1.2	Comparação dos resultados da simulação transiente com a simulação permanente	63
4.1.3	Comparação dos resultados entre malhas de diferentes tamanhos	66
4.2	Análise de resultados do coletor de gásóleo residual	69
4.2.1	Resolução da camada limite	69
4.2.2	Análise da termofluidodinâmica do coletor de gásóleo residual	69
4.3	Análise do caso A: coletor com 2 bocais de saída	76
4.4	Análise do caso B: coletor com chaminés laterais inclinadas	77
4.5	Análise do caso C: coletor com entrada de líquido centralizada	81
4.6	Análise da taxa de formação de coque para os casos de estudo	82
5	Conclusões e Sugestões	86
	Referências Bibliográficas	90

Lista de Figuras

2.1	Regiões de escoamento para descrever a turbulência próxima a uma parede (BIRD [1]):1) subcamada viscosa, 2) camada tampão, 3) subcamada inercial, 4) corrente turbulenta principal.	31
2.2	Esquema do fluxo na camada limite próximo ao ponto de separação. S =ponto de separação. (SCHLICHTING & GERSTEN [2])	32
3.1	Configuração simplificada da torre de vácuo	40
3.2	Geometria do coletor de gasóleo residual	41
3.3	Domínio computacional do coletor de gasóleo residual	49
3.4	Detalhe das camadas de prisma para a malha 1	53
3.5	Detalhe das camadas de prisma para a malha 2	53
3.6	Detalhe das camadas de prisma para a malha 3	54
4.1	Resíduos das equações hidrodinâmicas da simulação permanente da malha 1.	57
4.2	Resíduos das equações hidrodinâmicas da simulação permanente da malha 2.	58
4.3	Resíduos das equações hidrodinâmicas da simulação permanente da malha 3.	58
4.4	Linhas utilizadas para análise das simulações, no plano xy a $z = 0$	60
4.5	Gráfico distribuição de coque <i>versus</i> comprimento para as simulações transientes da malha 3 em 250 s, 500 s e 1000 s.	60
4.6	Gráfico distribuição de coque <i>versus</i> comprimento para as simulações transientes da malha 3 em 250 s, 500 s e 1000 s.	61
4.7	Gráfico distribuição de coque <i>versus</i> comprimento para as simulações transientes da malha 3 em 250 s, 500 s e 1000 s.	61

4.8	Gráfico distribuição de coque <i>versus</i> comprimento para as simulações transientes da malha 3 em 250 s, 500 s e 1000 s.	62
4.9	Gráfico da taxa de formação de coque em diferentes instantes de tempo para as simulações transientes da malha 1, 2 e 3.	63
4.10	Gráfico asfalteno <i>versus</i> comprimento para as simulações transiente em 1000 s e permanente para a malha 3.	64
4.11	Gráfico asfalteno <i>versus</i> comprimento para as simulações transiente em 1000 s e permanente para a malha 3.	64
4.12	Gráfico asfalteno <i>versus</i> comprimento para as simulações transiente em 1000 s e permanente para a malha 3.	65
4.13	Gráfico asfalteno <i>versus</i> comprimento para as simulações transiente em 1000 s e permanente para a malha 3.	65
4.14	Gráfico coque <i>versus</i> comprimento das simulações transientes das malhas 1, 2 e 3 em 1000 s.	67
4.15	Gráfico coque <i>versus</i> comprimento das simulações transientes das malhas 1, 2 e 3 em 1000 s.	67
4.16	Gráfico coque <i>versus</i> comprimento das simulações transientes das malhas 1, 2 e 3 em 1000 s.	68
4.17	Gráfico coque <i>versus</i> comprimento das simulações transientes das malhas 1, 2 e 3 em 1000 s.	68
4.18	Resolução da malha 3 da simulação transiente em 1000 s.	70
4.19	Distribuição de coque na superfície da parede aquecida da simulação transiente em 1000 s para a malha 3. Principais regiões: 1) extremidade do coletor do lado do bocal, 2) entre as chaminés e a calha, 3) nas faces das chaminés laterais, 4) na calha e 5) na face do bocal. . .	71
4.20	Vetores de velocidade da simulação transiente no instante de tempo de 1000 s para a malha 3, no plano xy em $z=0,01$ m.	72
4.21	Fluxo de calor da superfície da parede aquecida da simulação transiente no instante de tempo de 1000 s para a malha 3.	72
4.22	Perfil de velocidade da simulação transiente no instante de tempo de 1000 s para a malha 3, no plano xy em $z=0,01$ m.	73

4.23	Gráfico asfalteno <i>versus</i> comprimento para as simulações transiente em 120 s e permanente para o caso A.	75
4.24	Gráfico asfalteno <i>versus</i> comprimento para as simulações transiente em 120 s e permanente para o caso B.	75
4.25	Gráfico asfalteno <i>versus</i> comprimento para as simulações transiente em 120 s e permanente para o caso C.	76
4.26	Distribuição de coque projetada na superfície da parede aquecida da simulação transiente em 120 s para o caso A.	77
4.27	Vetores de velocidade da simulação transiente em 120 s para o caso A, no plano xy em $z=0,01$ m.	78
4.28	Perfil de velocidade da simulação transiente em 120 s para o caso A, no plano xy em $z=0,01$ m.	78
4.29	Fluxo de calor da simulação transiente em 120 s para o caso A.	79
4.30	Distribuição de coque projetada na superfície da parede aquecida da simulação transiente em 120 s para o caso B.	80
4.31	Fluxo de calor da simulação transiente em 120 s para o caso B.	80
4.32	Perfil de velocidade da simulação transiente em 120 s para o caso B, no plano xy em $z=0,01$ m.	81
4.33	Distribuição de coque projetada na superfície da parede aquecida da simulação transiente em 120 s para o caso C.	82
4.34	Perfil de velocidade da simulação transiente em 120 s para o caso C, no plano xy em $z=0,01$ m.	83
4.35	Fluxo de calor da simulação transiente em 120 s para o caso C.	83
4.36	Gráfico da taxa de coque em diferentes instantes de tempo para as simulações transientes dos casos de estudo e para a simulação transiente da malha 3 do coletor original	84
4.37	Taxa de formação de coque para valores maiores de $0,015 \text{ kg/m}^3\text{s}$ da simulação transiente em 120 s para o caso A.	85
4.38	Taxa de formação de coque para valores maiores de $0,015 \text{ kg/m}^3\text{s}$ da simulação transiente em 120 s para o caso B.	85
4.39	Taxa de formação de coque para valores maiores de $0,015 \text{ kg/m}^3\text{s}$ da simulação transiente em 120 s para o caso C.	85

4.40 Taxa de formação de coque para valores maiores de $0,015 \text{ kg/m}^3\text{s}$ da simulação transiente em 120 s para a malha 3 do coletor original. . .	85
---	----

Lista de Tabelas

3.1	Propriedades do gasóleo residual ($T = 370^{\circ}\text{C}$)	42
3.2	Análise elementar dos asfaltenos isolados do petróleo da bacia de Campos (GONÇALVES [3]).	44
3.3	Energia de ativação a diferentes níveis de conversão entre temperaturas de 300 e 500°C (GONÇALVES [3]).	45
3.4	Condições iniciais	51
4.1	Análise de y^+ para a malha 1: 270188 nós	55
4.2	Análise de y^+ para a malha 2: 588451 nós	56
4.3	Análise de y^+ para a malha 3: 1289207 nós	56
4.4	Análise de y^+ do coletor com 2 bocais de saída	73
4.5	Análise de y^+ do coletor com chaminés laterais inclinadas	74
4.6	Análise de y^+ do coletor com entrada de líquido centralizada	74

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

O processamento de petróleos pesados (*heavy crudes*) ainda é um desafio para as refinarias nos dias de hoje. As principais características destes petróleos de densidades altas são viscosidades mais altas, quantidade de contaminantes e sal maiores, acidez maior, resíduo de carbono mais alto e, também podem ter, estabilidade térmica menor. Por apresentarem tais características, estes petróleos possuem seus preços depreciados no mercado. Assim, os refinadores que conseguem processar uma maior quantidade destes petróleos (também chamados *opportunity crudes*) obtém um ganho marginal. No entanto, há várias dificuldades relatadas no processamento destes petróleos como a manutenção da vazão de carga, do rendimento e qualidade dos produtos e da confiabilidade da unidade.

Poucas refinarias conseguem processar petróleos pesados puros. Geralmente, eles são misturados com petróleos de densidades menores. Contudo, mesmo misturados, é preciso investir nas refinarias para adaptá-las ao processamento. Um dos grandes desafios é adaptar a refinaria para processar petróleos pesados sem tornar o custo das modificações proibitivos. No Brasil, a produção de petróleos pesados da bacia de Campos, em especial, – o Marlim – foi determinante para que a PETROBRAS – Petróleo Brasileiro S/A começasse a fazer a adaptação de suas refinarias a fim de poder processar tais petróleos.

A unidade de destilação é uma das unidades que sofre as maiores modificações e desafios para o processamento de petróleos pesados. Para processá-los, mantendo o rendimento e qualidade dos produtos, a unidade de destilação deve operar em condições operacionais mais severas.

1.1.1 A Unidade de Destilação

Na unidade de destilação, o petróleo é separado fisicamente em destilados de acordo com a temperatura de ebulição dos seus componentes. A fração vaporizada do cru é determinada pela temperatura e pressão de operação. A destilação é a primeira unidade da refinaria por onde passa o petróleo. O processamento do cru na unidade de destilação constitui-se nas etapas de pré-aquecimento, dessalgação, pré-fracionamento, fracionamento atmosférico e fracionamento à vácuo. A seguir é feita uma breve descrição de cada etapa da unidade de destilação e, sem querer ser extensiva, uma apresentação de algumas modificações que são feitas a fim de processar cargas mais pesadas.

O pré-aquecimento da carga é feito através de uma série de permutadores de calor. Na primeira série de trocadores de calor chamada de primeira bateria, o cru troca calor com produtos de potencial crescente de calor sendo aquecido até uma temperatura adequada para uma boa eficiência na dessalgação. Na segunda bateria de calor, o cru é aquecido até a temperatura máxima possível dada pela integração energética. Os produtos que trocam calor com o cru são os seus destilados que são fracionados nas torres (nafta pesada, querosene, diesel leve, etc) e que devem ser resfriados para serem estocados e também correntes circulantes (querosene circulante, diesel circulante, gasóleo circulante, etc) que são retiradas das torres com o objetivo de retirar calor na torre.

As cargas mais pesadas produzem uma menor quantidade de destilados nas torres fracionadoras. Com isso, as vazões das correntes quentes são menores, como consequência, há menos calor disponível para ser trocado com o cru. Por outro lado, os trocadores de calor do lado cru possuem coeficientes de transferência de

calor menores e uma perda de carga maior devido a viscosidade mais alta das cargas pesadas. Para resolver estes problemas é preciso aumentar a área superficial do trocador do lado do cru e/ou aumentar o número de trocadores de calor. Correntes adicionais das fracionadoras também podem ser retiradas para aumentar a eficiência energética. A indústria de petróleo tem investido bastante em pesquisas e inovações para aumentar a eficiência dos trocadores de calor e melhorar a integração energética da unidade.

Na etapa da dessalgação, o cru é pré-tratado para retirar o sal e água por meios eletromagnéticos e de diluição em vasos chamados dessalgadoras. A dessalgação faz então a separação da carga emulsionada em petróleo com quantidade de sal, água e sólidos especificados e água livre com teor de óleo especificado. Nesta etapa há muitos problemas para dessalgar petróleos pesados. Para dessalgar cargas pesadas quase sempre é preciso aumentar a temperatura com o objetivo de diminuir a viscosidade do cru. No entanto, há um limite para o aumento da temperatura impostos pelo aumento da condutividade do cru e pela integridade dos eletrodos. Além disso, cargas com elevada acidez naftênica são surfactantes, emulsionando o cru e dificultando a dessalgação. Outro problema é a menor estabilidade térmica de algumas cargas que pode ocasionar a precipitação de asfaltenos dentro das dessalgadoras. Uma má dessalgação causa severa corrosão no sistema de topo da torre fracionadora. Assim, um bom desempenho das dessalgadoras é crucial na manutenção da confiabilidade da unidade. Esta é uma área de estudos que está numa crescente com muitas novas tecnologias aparecendo nos últimos anos.

No pré-fracionamento, o petróleo passa pelo primeiro processo de separação física numa torre de fracionamento chamada de pré-fracionadora ou torre *pré-flash* onde são retirados pelo topo os componentes leves do petróleo: gás combustível, gás liquefeito de petróleo (GLP) e nafta leve. A carga sem os componentes leves (cru pré-vaporizado) sai pelo fundo da torre onde é enviado para aquecimento num forno atmosférico. Este esquema de refino com torre pré-fracionadora é muito utilizado com cargas leves que possuem uma quantidade significativa de componentes leves. A retirada destes componentes mais leves da carga propicia a diminuição do tamanho da torre atmosférica e a economia de combustível no forno atmosférico. Com o

processamento de cargas mais pesadas, este pré-fracionamento não é mais vantajoso. Contudo, os refinadores observaram que a retirada de água e de componentes leves de uma carga mais pesada num vaso pré-flash depois que o petróleo passa pelas dessalgadoras abaixa a pressão de vapor da carga e, com isso, os trocadores de calor da segunda bateria puderam ser dimensionados de forma mais econômica (WAINTRAUB *et al.* [4]).

Na etapa do fracionamento atmosférico, a carga é separada fisicamente em seus destilados a pressões atmosféricas. São retirados pelo topo da torre atmosférica o gás combustível, GLP e nafta leve ou nafta pesada (quando há torre de pré-fracionamento). Os destilados querosene, diesel leve e diesel pesado são retirados lateralmente na torre atmosférica de cima para baixo, respectivamente. No fundo da torre atmosférica é retirado o cru não vaporizado chamado resíduo atmosférico que é enviado para aquecimento no forno de vácuo.

Um dos principais objetivos das fracionadoras atmosféricas das refinarias brasileiras é a maximização de diesel. Cargas pesadas resultam num maior rendimento de resíduo atmosférico, logo o sistema de fundo da torre atmosférica é, portanto, o gargalo desta torre. Faz-se necessário, então, otimizar o ponto de corte do resíduo atmosférico. O ponto de corte é definido como a temperatura na curva de destilação do ponto de ebulição verdadeiro (PEV) que corresponde ao rendimento de destilado acumulado. Assim, um ponto de corte maior ou mais profundo (como é dito na indústria de petróleo) do resíduo atmosférico, significa vaporizar uma fração maior da carga, ou seja, retirar uma quantidade de diesel maior na torre atmosférica. Caso isso não possa ser feito, o diesel será retirado na torre de vácuo, sobrecarregando o sistema de vácuo desta torre. Para otimizar o ponto de corte do resíduo atmosférico pode-se aumentar a temperatura de saída da carga do forno, diminuir a pressão de operação, aumentar a eficiência da seção de retificação através de internos mais eficientes e/ou aumentar a vazão de vapor de retificação ou também minimizar a porcentagem de sobrevaporizado (definido como a porcentagem da carga vaporizada a mais para garantir a qualidade do destilado).

No fracionamento à vácuo, o resíduo atmosférico é fracionado a temperaturas

mais baixas usando pressões sub-atmosféricas. Os produtos retirados são o gasóleo leve e o gasóleo pesado. O gasóleo leve dependendo da sua composição é incorporado ao *pool* de diesel ou é usado como diluente de óleo combustível. O gasóleo pesado é carga para unidade de fracionamento catalítico fluido. Pelo topo são retirados gases craqueados e não condensáveis e pelo fundo o resíduo de vácuo que é enviado como carga para unidade de coque ou utilizado como óleo combustível ou asfalto.

Várias configurações podem ser empregadas no projeto de uma torre de vácuo, quais sejam, vácuo úmido, semi-úmido ou seco. No vácuo úmido utiliza-se vapor no forno e na seção de retificação. Este arranjo reduz a pressão parcial dos hidrocarbonetos e minimiza a formação de coque nos tubos do forno. O vácuo semi-úmido utiliza vapor somente no forno e o vácuo seco não utiliza vapor. Esta última configuração permite que a torre trabalhe com pressão mais baixa e com um sistema de vácuo menor, e também diminui o consumo de utilidades. É no fracionamento à vácuo que os refinadores obtêm ganhos marginais otimizando a recuperação de gasóleos de cargas pesadas de preços depreciados. No entanto, é necessário fazer grandes investimentos para alcançar tal meta. Manter ou aumentar o ponto de corte do gasóleo pesado exige condições operacionais mais severas que podem levar ao rápido coqueamento do forno ou da torre de vácuo se os equipamentos não forem bem projetados.(WHITE & BARLETTA [5]). As modificações podem englobar todo o sistema de destilação à vácuo: forno, linha de transferência, torre, sistema de vácuo e sistemas associados. A avaliação das modificações deve ser feita considerando a temperatura e pressão ótimas para o rendimento e qualidade dos gasóleos requeridos.

No projeto de uma torre de vácuo para processar cargas pesadas, vários fatores têm contribuído para melhorar o seu desempenho. Novos distribuidores de carga estão sendo feitos com o objetivo de melhorar a distribuição de vapor e minimizar o arraste de gotas de líquido (WEHRLI [6]). Os leitos da torre estão sendo projetados com recheios combinados de alta capacidade e de alta eficiência com perda de carga mínima. Há também novos projetos de torres com seções sem recheio na região de troca térmica (WAINTRAUB *et al.* [7]). E muitos outros estudos relacionados a internos de torres, simulação e arranjo da torre de vácuo, integração energética e caracterização da carga são documentados na literatura (GOLDEN *et al.* [8],

GOLDEN & BARLETTA [9], ZEIDAN[10] e PILLING [11]).

Na torre de vácuo, a seção de óleo de lavagem é a seção mais crítica para o seu bom desempenho (SPANGLER *et al.* [12]). Esta seção está localizada acima da zona de vaporização, trabalhando com uma grande quantidade de vapor superaquecido e pouco líquido. A função desta seção é remover asfaltenos e compostos organometálicos do vapor da carga a partir do contato com o refluxo de gasóleo pesado (óleo de lavagem). No leito de óleo de lavagem normalmente são utilizados recheios combinados para a transferência de massa e calor. Abaixo há um prato coletor de líquido – chamado coletor de gasóleo residual – que coleta o líquido que deixa a seção de lavagem (sobrevaporizado verdadeiro) e o líquido arrastado da zona de vaporização. Algumas configurações de torres utilizam uma outra seção de recheio entre o leito de lavagem e o coletor de gasóleo residual. O projeto da seção de óleo de lavagem deve estimar uma vazão mínima adequada de óleo de lavagem para garantir a qualidade do gasóleo pesado e minimizar o coqueamento na seção.

1.1.2 Coque

O coque é formado devido ao craqueamento térmico do petróleo à altas temperaturas, sendo definido como o material carbonáceo insolúvel em solventes aromáticos como o tolueno (RAHMANI *et al.* [13]). Sua formação é atribuída ao fenômeno de condensação e polimerização de componentes aromáticos. Os asfaltenos são considerados os principais precursores de coque, resultando em 35–65% em peso de coque (SPEIGHT [14]).

Segundo levantamento de KISTER [15], o coqueamento é a principal causa de mau funcionamento nas torres de refinaria, sendo a torre de vácuo a que apresentou o maior número de casos de coqueamento. Este fato deve-se principalmente ao fracionamento de cargas cada vez mais pesadas.

As principais incidências de coqueamento na torre de vácuo ocorrem no leito, no distribuidor e no prato coletor de líquido da seção de óleo de lavagem. A formação de coque na torre de vácuo é decorrente dos seguintes fatores:

- temperatura do vapor
- distribuição do óleo de lavagem
- composição do vapor
- arraste de líquido

O coqueamento na torre de vácuo provoca aumento de perda de carga, escurecimento do gasóleo pesado, menor rendimento de gasóleos e paradas não programadas, comprometendo a confiabilidade da unidade de destilação.

1.2 Objetivo

Esta tese trata do estudo do comportamento térmico de um coletor de líquido de gasóleo residual visando a análise de formação de coque pela técnica de CFD (*Computational Fluid Dynamics*). A simulação é feita com a geometria em tamanho real, tridimensional, transiente e com um modelo de turbulência apropriado para resolver a camada limite térmica. Para análise de formação de coque, um modelo cinético de coqueamento simplificado foi implementado no *software* comercial ANSYS CFX 11. Os principais objetivos desta tese são analisar os perfis de velocidade e de temperatura, identificando possíveis causas para a formação de coque e, a partir desta análise, propor novas concepções de coletores de líquido para minimizar a formação de coque. A grande vantagem da utilização da técnica de CFD para o presente trabalho é poder ter a oportunidade de analisar a termofluidodinâmica do problema com base na sua geometria original. Para este propósito, a técnica de CFD tem se mostrado uma ferramenta investigativa poderosa para propor alterações de projeto e também para servir de base para projetos experimentais e de *scale up*.

1.3 Organização da tese

A tese está organizada da seguinte maneira:

- **Capítulo 1:** introdução descrevendo a motivação para o presente trabalho, principais etapas da unidade de destilação, o problema de formação de coque nas fracionadoras, objetivo e organização da tese;
- **Capítulo 2:** revisão bibliográfica apresentando uma seção introdutória de formação de coque com a descrição de um dos principais modelos cinéticos de coque. As principais referências da aplicação da técnica de CFD à formação de coque e na área de destilação. Os fundamentos teóricos da fluidodinâmica computacional, descrevendo as equações governantes na sua forma conservativa, o método de discretização de volumes finitos, os principais modelos de turbulência de duas equações com destaque para os modelos $k - \epsilon$, $k - \omega$ e SST (*Shear Stress Transport*). E, por último, uma apresentação da teoria da camada limite;
- **Capítulo 3:** descrição da metodologia numérica empregada: modelo geométrico, hipóteses e equações governantes, modelagem das condições de contorno e iniciais, descrição das malhas, critério de convergência usado para a simulação e estratégia de solução do problema;
- **Capítulo 4:** análise dos resultados do teste de convergência de malhas, análise dos resultados da simulação para o coletor de líquido original, modelagem e análise dos novos projetos do coletor e comparação de resultados;
- **Capítulo 5:** conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Formação de coque

O comportamento térmico de uma mistura complexa como o petróleo é difícil de prever. Em face à química e física do processo, os grandes desafios são determinar o meio pelo qual o petróleo termicamente se decompõe, a natureza dos produtos de decomposição térmica, a subsequente decomposição dos produtos térmicos primários, a interação entre os produtos, a interação dos produtos com os constituintes originais e a influência dos produtos na composição dos líquidos (SPEIGHT [14]). Devido a grande complexidade do petróleo, normalmente, os estudos de comportamento térmico do petróleo são realizados separando o petróleo em quatro frações composicionais: saturados, aromáticos, resinas e asfaltenos. Uma outra classificação usada por WIEHE [16], consiste em dividir o petróleo somente entre maltenos e asfaltenos.

A formação de coque a partir de resíduos de petróleo pode ser atribuída principalmente à decomposição térmica dos asfaltenos. Estes são os constituintes do petróleo de mais alta massa molecular, de estrutura complexa e desconhecida. Eles consistem de macroaromáticos condensados contendo heteroátomos. São definidos em termos de solubilidade como uma fração constituída de materiais insolúveis em hidrocarbonetos alifáticos e solúveis em hidrocarbonetos aromáticos (SPEIGHT *et al.* [17]). Encontram-se no petróleo como suspensões coloidais estabilizados pelas

resinas. Este efeito de estabilidade dos asfaltenos pelas resinas é conhecido como *peptização*.

Apesar das incertezas no processo de formação de coque de uma mistura complexa como o petróleo, pode-se atribuir que o processo de formação de coque é devido principalmente a separação de fases dos asfaltenos. Após a separação de fase, a geração de coque é sempre devida às reações de craqueamento da substância depositada. Esta separação de fase ocorre principalmente devido a fatores como variações de pressão, temperatura e composição (SCHABRON *et al.* [18]). O período de indução é um parâmetro fundamental e influenciado por fatores químicos e físicos do meio como a presença de hidrogênio doador e a estabilidade de asfaltenos. A cinética das reações de coque pode ser descrita como de primeira ordem.

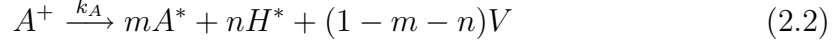
2.1.1 Modelo cinético da formação de coque

Em 1966, LEVINTER *et al.* [19] propôs que o coque é produzido como subproduto da decomposição térmica de uma sequência de polimerizações e condensações, onde uma parte dos hidrocarbonetos do petróleo são convertidos progressivamente em resinas, asfaltenos, carbenos e carbóides. As resinas caracterizam-se por serem solúveis em heptano. Os asfaltenos são insolúveis em heptano e solúveis em tolueno. Os carbenos constituem a fase inicial do coque, sendo solúveis em quinolina. E, por fim, os carbóides que são o coque com características gráficas insolúveis em quinolina.

MARGARIL *et al.* [20] postulou que o coque é formado em uma fase separada precipitada de asfaltenos, mas considerou uma cinética de ordem zero para a formação de coque. Outros pesquisadores, SAVAGE *et al.* [21], também observaram um período de indução para a termólise de asfaltenos que desaparecia quando a temperatura chegava próximo de 450°C.

WIEHE [16] a partir de experimentos de fracionamento de resíduos de vácuo propôs um modelo cinético baseado na separação das fases entre maltenos (solúveis em heptano) e asfaltenos (insolúveis em heptano). A primeira parte do modelo

cinético considera as seguintes reações ocorrendo paralelamente:



onde a , m e n são coeficientes estequiométricos, H^+ são os maltenos reagentes e A^+ são os asfaltenos reagentes. V são os voláteis, H^* são os maltenos produzidos e A^* são os núcleos asfaltênicos, todos produzidos durante a reação de decomposição térmica e k_H e k_A são as constantes de cinética da conversão dos maltenos e dos asfaltenos, respectivamente. As reações apresentam cinética aparente de primeira ordem. Durante o período de indução, os asfaltenos reagentes produzem somente produtos de baixa massa molecular. Enquanto os asfaltenos permanecem dissolvidos, os maltenos fornecem hidrogênio transferível para completar os radicais livres formados pelo craqueamento, tornando a recombinação dos núcleos asfaltênicos menos frequente. À medida que a reação prossegue, a concentração de asfaltenos continua a aumentar enquanto que a concentração dos maltenos diminui até atingir o limite de solubilidade dos asfaltenos na fase maltenos.

Após atingir o limite de solubilidade, representada pela equação (2.3), a fração de asfaltenos em excesso separa-se do meio por precipitação, definido pela equação (2.4). Os núcleos asfaltenos precipitados formam uma segunda fase líquida empobrecida em hidrogênio transferível. Nesta nova fase, recombinações entre núcleos asfaltênicos são mais frequentes formando coque e maltenos como produtos, que é mostrado pela reação química apresentada pela equação (2.5).

$$A_{max}^* = S_L(H^+ + H^*) \quad (2.3)$$

$$A_{ex}^* = A^* - A_{max}^* \quad (2.4)$$



Nas equações (2.3), (2.4) e (2.5), S_L é o fator de solubilidade, IT é a quantidade de coque, definida como insolúveis em tolueno, e y é o fator estequiométrico. O

conceito de reação constante de cinética infinita é usado por WIEHE [16] para representar a precipitação por separação de fase.

2.2 CFD aplicado à destilação e à formação de coque

A fluidodinâmica computacional (CFD) pode ser resumida como o conjunto das técnicas de simulação computacional usadas para prever os fenômenos físicos ou físico-químicos que ocorrem em escoamentos (SILVA *et al.* [22]). A utilização da técnica de CFD tem reduzido substancialmente o tempo e o custo para o desenvolvimento e pesquisa de novos equipamentos. Esta técnica permite a análise em detalhes dos campos de velocidade, temperatura, composição, das variáveis da turbulência e de outras que, às vezes, não podem ser determinadas através de experimentos.

Uma grande área de utilização de CFD em destilação encontra-se em projetos de pratos para melhorar eficiência e capacidade. Destaca-se também a aplicação em projetos de distribuidores de entrada de carga para reduzir o arraste de líquido, no qual WEHRLI *et al.* [6] são um dos contribuidores nestes estudos. E também há aplicação de CFD em projetos de recheios e distribuidores pelos fabricantes de recheios.

Especificamente na seção de óleo de lavagem da fracionadora à vácuo, não foi encontrado nenhum trabalho da aplicação da técnica de CFD. Porém, PALADINO *et al.* [23] fizeram um estudo utilizando CFD na seção de óleo de lavagem de fracionadoras de coque. Neste trabalho, várias configurações de partes internas foram estudadas. Um dos estudos foi remover as chicanas e estimar a altura necessária para resfriar o vapor a uma temperatura suficiente para evitar a formação de coque na região. O modelo foi implementado na formulação Lagrangeana onde a fase contínua foi a fase vapor, representada por cinco pseudo-componentes, e a fase dispersa foi a fase líquida, representada por dois pseudo-componentes. O modelo considerou os fenômenos de evaporação e condensação. A condição de equilíbrio para a mis-

tura foi calculada usando a equação de Soave-Redlich-Kwong. Neste trabalho não houve a implementação de modelo cinético de formação de coque. Os resultados mostraram que na redução de 50% da altura original, houve uma diminuição de 75% da temperatura comparada com a diferença de temperatura obtida na altura original. Concluíram que a utilização da seção de spray vazia pode reduzir a altura da coluna e minimizar a formação de coque.

A quantidade de estudos na estimação de formação de coque utilizando a técnica de CFD é relativamente pequena. Particularmente, na fracionadora à vácuo, não foi encontrado nenhum trabalho. A maioria dos estudos relacionados a este assunto foi feito em equipamentos de fornos. Será destacado aqui o trabalho de SOUZA *et al.* [24] que apresentou um modelo para estimar a formação de coque devido ao craqueamento térmico de resíduo de petróleo pesado da fracionadora à vácuo dentro de tubos de fornos. Neste trabalho, as propriedades físicas (viscosidade, densidade, capacidade térmica e condutividade térmica) foram consideradas dependentes da temperatura. Para estimação da formação de coque foi utilizado um modelo cinético de craqueamento térmico de petróleo baseado no modelo modificado de KÖSEOGLU & PHILLIPS (1988) [25] *apud* SOUZA *et al.* [24] que considera o petróleo representado por uma mistura de sete pseudo-componentes: destilados, aromáticos, resinas, asfaltenos solúveis, asfaltenos em mesofase, saturados e coque. Neste modelo cinético de formação de coque somente asfaltenos geram coque. Um diagrama ternário foi utilizado para indicar as regiões onde o asfaleno precipita e, conseqüentemente, onde há formação de coque. A técnica de CFD foi usada a fim de determinar condições operacionais (vazão mássica e temperatura de parede) onde a formação de coque é evitada ou minimizada. O problema bidimensional foi simulado no modo permanente, considerando simetria axial, modelo de turbulência de zero ordem e condição de contorno de transferência de calor com temperatura da parede do tubo constante. O modelo indicou que para uma temperatura de parede de 450°C, coque pode ser formado em fluxo laminar e turbulento. Os asfaltenos solúveis não saturam somente para número de Reynolds, $Re \leq 18650$.

Uma referência que relata superficialmente a formação de coque é encontrado no trabalho de NOVIA *et al.* [26] que utilizou um modelo multifásico tridimensional

com reação para estudar a hidrodinâmica do reator de riser da unidade de fracionamento catalítico fluido. O modelo bifásico (vapor e sólido) emprega o método *Euleriano-Euleriano* e modelo de turbulência $k - \epsilon$. Nas reações de craqueamento catalítico foi considerado que o gasóleo alimentado converte-se em gasolina e gases leves mais coque e que uma parte da gasolina é convertida também em gases e coque. Apenas um quarto do riser foi simulado com condições simétricas. Os resultados da distribuição de entalpia mostraram que o calor de craqueamento varia axialmente com um valor maior no fundo do riser. O valor maior da entalpia da fase sólida no fundo do riser indica que as reações de coqueamento são proeminentes no fundo do riser. Neste trabalho, gases leves mais coque foram considerados como um grupo único (*lump*).

2.3 Fundamentos da Fluidodinâmica Computacional

2.3.1 As Equações Governantes

A fluidodinâmica é baseada em três princípios físicos fundamentais:

1. Conservação de massa.
2. Segunda lei de Newton, onde o somatório das forças externas \mathbf{F} é igual a variação temporal da quantidade de movimento, p , do corpo, $\mathbf{F} = \frac{dp}{dt}$.
3. Conservação de energia.

As equações governantes são o resultado da formulação matemática baseada nestes princípios físicos. Estas equações formam um sistema acoplado de equações diferenciais parciais não-lineares que descrevem a conservação da massa, momentum e energia para um fluido. Na literatura de CFD, as equações governantes são chamadas de equações do movimento para o escoamento de um fluxo viscoso

e equações de Euler para o escoamento de um fluxo não viscoso, onde os efeitos dissipativos são desprezíveis.

Na modelagem matemática das equações governantes, o fluido é considerado como contínuo. A base desta *hipótese do contínuo* é que o fluido pode ser subdividido dentro de um conjunto infinitesimal de elementos ou volumes, sendo que cada um é pequeno o suficiente para ser considerado uniforme e grande o bastante para conter estatisticamente um grande número de moléculas.

As equações governantes podem ser obtidas de várias formas diferentes, sendo todas as formas interconvertíveis. As equações resultantes da aplicação dos princípios físicos num volume de controle finito estão na forma *Eulereana*. A formulação que analisa o movimento do corpo do fluido ao longo do tempo é dita *Lagrangeana*. Na formulação *Eulereana*, temos:

i) Equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \quad (2.6)$$

ii) Equação de movimento

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (2.7)$$

ii) Equação de energia

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\frac{1}{2} \rho v^2 + \rho U)}{\partial t} = & -\nabla \cdot ((\frac{1}{2} \rho v^2 + \rho U) \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot (p \mathbf{v}) \\ & - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{v}) + \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{g}) \end{aligned} \quad (2.8)$$

sendo ρ a massa específica, t o tempo, \mathbf{v} o vetor velocidade, p a pressão, $\boldsymbol{\tau}$ o tensor tensão viscosa, \mathbf{g} o vetor gravidade, $\frac{1}{2}v^2$ a energia cinética por unidade de massa, U a energia interna por unidade de massa e \mathbf{q} o vetor fluxo térmico.

Para fluidos newtonianos, o tensor tensão viscosa, $\boldsymbol{\tau}$, é uma combinação simétrica de gradientes de velocidade definido por:

$$\boldsymbol{\tau} = -\mu(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) + (\frac{2}{3}\mu - \kappa)(\nabla \cdot \mathbf{v})\boldsymbol{\delta} \quad (2.9)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica, $\nabla \mathbf{v}$ é o tensor gradiente de velocidade, $(\nabla \mathbf{v})^T$ é o seu transposto, κ é a viscosidade dilatacional, $(\nabla \cdot \mathbf{v})$ é o divergente do vetor velocidade e $\boldsymbol{\delta}$ é o tensor unitário.

Nas equações (2.6), (2.7) e (2.8), o termo do lado esquerdo representa o acúmulo da propriedade por unidade de volume e o primeiro termo do lado direito corresponde à parcela convectiva por unidade de volume. Na equação (2.7), o segundo termo é a força de pressão, o terceiro termo é o transporte de momentum por difusão e o quarto termo é a força externa sobre o fluido, todos por unidade de volume.

Na equação (2.8), o segundo termo do lado direito corresponde a energia transportada por condução por unidade de volume. O terceiro e quarto termos referem-se ao trabalho feito sobre o fluido pelas forças de pressão e viscosas por unidade de volume, respectivamente. O quinto termo representa o trabalho feito sobre o fluido pelas forças externas por unidade de volume. A equação de energia também pode ser formulada como uma equação de balanço para a energia interna, entalpia total específica e temperatura.

A forma apresentada nas equações (2.6), (2.7) e (2.8) é chamada forma conservativa ou divergente. Nesta forma os termos convectivos aparecem dentro do operador vetorial $\nabla \cdot$ (divergente). Qualquer outra forma é dita não-conservativa.

2.3.2 Método de Volumes Finitos

Para grande parte dos problemas fluidodinâmicos, não há uma solução analítica para as equações de Navier-Stokes. Contudo, elas podem ser discretizadas e resolvidas numericamente. O método da discretização é o processo na qual uma função, ou uma equação integral ou diferencial é aproximada por expressões análogas (mas diferentes) que vem da sua aplicação a um número finito de pontos ou volumes discretos no domínio (ANDERSON [27]). O conjunto destes pontos discretos ou volumes no domínio do escoamento é chamado malha.

Um dos métodos mais usados em CFD é o método dos volumes finitos. Como dito

na seção anterior 2.3.1, as equações governantes, equações (2.6), (2.7) e (2.8), podem ser representadas na forma integral através da aplicação dos princípios físicos fundamentais num volume de controle finito fixado no espaço. A integração das equações governantes na sua forma conservativa é uma das formas empregadas para a aproximação das equações pelo método de volumes finitos. A outra forma é a utilização do balanço da propriedade conservada para cada um dos volumes discretos no domínio, nos quais a lei física seja feita válida dentro de um certo grau de aproximação (PINTO & LAGE [28]).

Considerando a equação geral de conservação de uma grandeza intensiva por unidade de massa ϕ , onde Γ é o coeficiente de difusão e S^ϕ é o termo fonte:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) + \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S^\phi \quad (2.10)$$

A integração da equação, (2.10), em um volume de controle P resulta numa equação algébrica linear discretizada da seguinte forma:

$$a_P\phi_P = \sum a_{viz}\phi_{viz} + b \quad (2.11)$$

onde os coeficientes de ϕ estão associados ao transporte de ϕ através da fronteira com o volume vizinho, estabelecendo a conexão do volume de controle P com seus vizinhos. Os seguintes critérios devem ser adotados para garantir a conservação da propriedade, a estabilidade e a convergência da solução numérica pelo método dos volumes finitos:

1. Conservação do fluxo na interface: o fluxo que cruza uma determinada face entre dois volumes da malha deve ser calculado pela mesma expressão nas equações discretizadas correspondentes a estes dois volumes.
2. Positividade dos coeficientes: os coeficientes de conexão do ponto P devem ser positivos. Esta regra garante a consistência física do problema, pois se a grandeza conservada ϕ aumenta em um ponto, é esperado um aumento de ϕ nos volumes vizinhos de P .

3. Linearização do termo fonte com inclinação negativa ($S^\phi \leq 0$): isto é necessário para que a positividade dos coeficientes seja garantida.
4. Quando a equação diferencial contiver somente derivadas da variável dependente, a soma dos coeficientes dos ϕ vizinhos deve ser igual ao coeficiente de ϕ no ponto P .

Nos problemas difusivos, as integrações espaciais do termo do lado esquerdo e do termo fonte, S^ϕ , podem ser feitas considerando o integrando como a média representativa dentro do volume. As integrações temporais dos termos Γ podem ser aproximadas usando uma formulação implícita como o método de Euler implícito, no qual considera que os valores são avaliados no fim do intervalo de tempo. Enquanto, os valores da difusividade Γ nas interfaces podem ser aproximadas por diferenças centrais.

A utilização do método de diferenças centrais para a interpolação dos termos de transporte convectivos da grandeza ϕ nos problemas convectivo-difusivos pode gerar coeficientes negativos. Se não for usado um método robusto para a solução do sistema linear, a simulação poderá divergir, ou apresentar oscilações numéricas em regiões de grandes gradientes. A utilização de uma aproximação de um lado só, de primeira ordem, conhecida como *upwind* tem efeitos dissipativos gerando soluções com difusão numérica. Assim, outros esquemas de interpolação devem ser usados como o esquema de potência (*power-law*), WUDS (*Weighted Upstream Differencing Scheme*), *upwind* quadrática (*Quick*), etc.

A aplicação do método de volumes finitos resulta num sistema de equações discretizadas formado pelos coeficientes de conexão do ponto P . Para malhas estruturadas com o uso de funções de interpolação unidimensionais de até 2ª ordem, a matriz tem a forma tridiagonal para problemas unidimensionais, pentadiagonal para problemas em duas dimensões e heptadiagonal para problemas tridimensionais. Na discretização de malhas não-estruturadas, pode-se ter diferentes números de vizinhos para cada volume, originando matrizes com banda diagonal variável.

Na solução das equações algébricas linearizadas há duas formas que podem ser

empregadas: a forma segregada e a acoplada. Na solução acoplada, o sistema de equações algébricas lineares é resolvido numa única matriz envolvendo todos os coeficientes e resolvendo todas as incógnitas simultaneamente. Na solução segregada, os sistemas lineares para a solução de cada uma das variáveis são resolvidos um a um, de forma sequencial e com interação.

A natureza segregada do processo de solução requer que cada variável tenha uma equação evolutiva para ser avançada. Considerando um escoamento tridimensional com transferência de calor, há cinco equações a serem resolvidas: conservação da massa, equação do movimento em cada direção coordenada e a equação de energia. As incógnitas são massa específica, pressão, temperatura e as três componentes do vetor velocidade. As equações evolutivas para as variáveis massa específica, as três componentes do vetor velocidade e a temperatura são a equação da continuidade, a equação do movimento em cada direção e equação de energia, respectivamente.

No escoamento compressível onde a massa específica varia fortemente com a pressão, a equação de estado é a relação empregada para o fechamento do problema. A equação de estado é então a equação evolutiva para a pressão. Essa formulação em que todas as variáveis dependentes possuem a sua equação é chamada formulação compressível.

No escoamento incompressível, a massa específica deixa de ser função de pressão e a determinação da pressão é através das equações do movimento em que as velocidades obtidas devem satisfazer a conservação da massa. Este problema de determinar um campo de pressões que, quando inserido nas equações do movimento, origine um campo de velocidades que satisfaça a equação da conservação da massa é chamado de problema de acoplamento entre a pressão e a velocidade (MALISKA [29]).

Existem diversos métodos para tratar o acoplamento, dentre eles, os métodos de Chorin, SIMPLE, SIMPLER, PRIME e SIMPLEC. O objetivo de todos eles é criar uma equação para a pressão que permita que o processo iterativo avance observando a conservação da massa.

Nas duas formas, métodos diretos ou indiretos podem ser utilizados para resolver o sistema de equações algébricas lineares. Os métodos diretos têm em geral a grande desvantagem de trabalhar com a matriz completa, não tirando proveito da esparsidade da matriz gerada pelo método numérico. O esforço computacional na aplicação deste método é muito grande, sendo, por isso, pouco utilizados em fluidodinâmica. Dentre os métodos diretos, destacam-se a eliminação de Gauss, a decomposição LU, o método de Thomas, etc. Nos métodos iterativos, há os métodos ponto a ponto como o Jacobi, Gauss-Seidel, SOR (*método das Sobre-relaxações Sucessivas*) e métodos linha a linha como o LSOR e o AOI e métodos de bloco como o SIP, MSIP, etc.

Uma solução numérica de uma equação diferencial pode apresentar três tipos de erros: erro de truncamento, erro de arredondamento e erro herdado. O erro de arredondamento é o erro numérico introduzido pela inabilidade do computador representar os números reais com precisão infinita. O erro herdado é advindo de passos anteriores do processo de solução do problema. E o erro de truncamento é devido a inexatidão das funções de interpolação. É o erro existente no processo de discretização (PINTO & LAGE [28]).

Uma característica desejada é que a solução numérica tenha estabilidade. Uma solução é estável se ela produz uma solução limitada quando a solução exata é limitada. É instável quando resulta numa solução ilimitada para uma solução exata limitada (PINTO & LAGE [28]). Diversos fatores interferem na estabilidade como erros de arredondamento e dificuldades no tratamento de acoplamento entre as variáveis.

Consistência é uma outra propriedade que deve ter uma solução numérica. Ou seja, os erros de truncamento devem tender a zero quando a malha tende a um número infinito de pontos. Todo modelo numérico cuidadosamente desenvolvido a partir das equações na forma conservativa usando volumes finitos é consistente (MALISKA [29]).

2.3.3 Modelos de Turbulência

A maioria dos escoamentos encontrados na natureza e nas aplicações de engenharia são turbulentos. A caracterização do regime de escoamento, entre laminar e turbulento, é definido pelo parâmetro adimensional chamado número de Reynolds, Re , que descreve a relação entre forças inerciais e viscosas do escoamento, sendo:

$$Re = \frac{V_r L}{\nu} \quad (2.12)$$

onde V_r é a velocidade de referência, L é uma dimensão característica do problema e ν é a viscosidade cinemática.

O regime é laminar até um certo valor crítico deste parâmetro, Re_{crit} . O valor numérico de Re_{crit} depende das condições particulares do escoamento e da dimensão L . Por exemplo, em condições usuais de escoamento dentro de um tubo, o valor de Re_{crit} é 2300 quando L é o diâmetro do tubo. Porém, se as condições na entrada do tubo forem livres de perturbações, experimentos realizados por EKMAN (1910) mostraram que o valor de Re_{crit} chega a 40000 (SCHLICHTING & GERSTEN [2]).

Os escoamentos turbulentos ocorrem então a altos números de Reynolds e são caracterizados por serem de natureza tridimensional, irregulares, difusivos e dissipativos. Possuem também um amplo espectro de escalas, onde há transferência de energia das maiores escalas às menores (chamado *processo de cascata*). Neste processo, os pequenos turbilhões recebem energia cinética de turbilhões ligeiramente maiores. Estes ligeiramente maiores recebem sua energia cinética de turbilhões maiores que eles próprios e assim em diante. E os maiores turbilhões, da ordem da geometria do escoamento, extraem sua energia do escoamento médio (SU [30]). Este processo de cascata prossegue até a dissipação da energia dos pequenos turbilhões em energia interna. A energia mecânica dos escoamentos turbulentos é, portanto, transformada em energia interna por duas formas diferentes: a) pela viscosidade (dissipação direta) e b) de forma indireta via flutuações turbulentas, no qual a energia mecânica do escoamento médio é transformada em flutuações turbulentas e, posteriormente, em energia interna.

As equações do movimento governam tanto o escoamento laminar quanto o turbulento. Nos escoamentos turbulentos, os três componentes da velocidade flutuam nas três direções espaciais e no tempo. Devido ao largo espectro de flutuação, a solução numérica das equações do movimento requer um número muito grande de pontos de discretização. Assim, a simulação numérica direta (*DNS*) das equações de Navier-Stokes é restrita a pouquíssimos casos, sendo utilizada no meio acadêmico e na calibração de modelos de média de Reynolds (*RANS*).

Apenas recentemente, os códigos comerciais implementaram modelos de simulação de grandes escalas (*LES–Large Eddy Simulation*), onde as grandes escalas são resolvidas na forma direta e as menores escalas são aproximadas por modelos algébricos. A hipótese básica da LES é que os grandes turbilhões são afetados pelas condições de contorno, enquanto os turbilhões menores tendem a ser mais homogêneos, isotrópicos e menos influenciados pelas condições de contorno (SU [30]). Contudo, LES só pode ser aplicado nos problemas com variações inerciais, não se aplicando nos casos de números de Reynolds baixos e, principalmente, nos escoamentos próximos a paredes sólidas (WOLFSHTEIN [31]).

Os modelos computacionais mais utilizados para a solução de problemas turbulentos são os modelos baseados na modelagem de média de Reynolds das equações de Navier-Stokes (*RANS*). Neste procedimento, devido a não linearidade das equações, termos extras de correlações dos componentes flutuantes da velocidade aparecem nas equações de média de Reynolds. Estes termos extras são modelados empiricamente por modelos de turbulência que são equações, expressões e coeficientes empíricos que determinam os termos extras nas equações de Navier-Stokes de média de Reynolds.

A modelagem de média de Reynolds consiste na decomposição de uma variável de escoamento turbulento numa parcela média mais uma parcela de flutuação. Assim, por exemplo, a velocidade instantânea é decomposta em:

$$v_i = \bar{v}_i + v_i' \quad (2.13)$$

onde a velocidade média é obtido efetuando-se uma média temporal para um grande

número de flutuações.

A aplicação da média de Reynolds nas equações de conservação para um fluido newtoniano, incompressível e com propriedades constantes resulta:

$$\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.14)$$

$$\rho \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \rho \bar{v}_j \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 \bar{v}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \rho \frac{\partial (\overline{v'_i v'_j})}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (2.15)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{v}_i \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) = \lambda \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x_j \partial x_j} - \rho c_p (\overline{v'_j T'}) \quad (2.16)$$

onde \bar{v}_i e x_i são vetores de velocidade média e de coordenadas, na notação indicial, t é tempo, \bar{p} é a pressão média, \bar{T} é a temperatura média, c_p é a capacidade calorífica específica à pressão constante e λ é a condutividade térmica. A dissipação viscosa é desprezada na equação de energia. Os termos extras $\overline{\rho v'_i v'_j}$ são chamados de tensões turbulentas ou tensões de Reynolds e os termos $\overline{\rho c_p v'_j T'}$ são chamados de fluxos térmicos turbulentos ou fluxos térmicos de Reynolds. A modelagem das tensões de Reynolds e dos fluxos térmicos turbulentos é chamado de problema de fechamento.

As flutuações turbulentas v'_i influenciam o curso do movimento médio (\bar{v}_i) conferindo a este um aumento aparente na resistência contra a deformação (SCHLICHTING & GERSTEN [2]). Ou seja, o movimento flutuante age no movimento médio de tal forma que sua viscosidade é aparentemente aumentada. Este aumento de viscosidade aparente é o conceito central da consideração teórica da viscosidade turbulenta nos escoamentos turbulentos. Baseado neste conceito, em 1877, BOUSSINESQ propôs a seguinte relação entre a tensão turbulenta e a deformação do escoamento médio, que é similar à relação entre a tensão cisalhante e o gradiente de velocidade de um escoamento newtoniano:

$$\overline{\rho v'_i v'_j} = -\mu_t \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} k \quad (2.17)$$

onde μ_t é a viscosidade dinâmica turbulenta e k é a energia cinética turbulenta.

Analogamente à hipótese de viscosidade turbulenta, o fluxo térmico turbulento pode ser definido como:

$$\rho c_p \overline{v'_j T'} = -\rho c_p \alpha_t \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} \quad (2.18)$$

com

$$\alpha_t = \frac{\nu_t}{Pr_t} \quad (2.19)$$

onde α_t é a difusividade térmica turbulenta, $\nu_t (= \mu_t/\rho)$ é a viscosidade cinemática turbulenta e Pr_t é número de Prandtl turbulento dado por:

$$Pr_t = \frac{\mu_t c_p}{\lambda_t} \quad (2.20)$$

onde λ_t é a condutividade térmica turbulenta.

Os modelos de turbulência para a equação de energia são em geral baseados no conceito de número de Prandtl turbulento constante. O número de Prandtl turbulento é estimado pela analogia de Reynolds, segundo o qual as difusividades de momento e térmica são consideradas iguais, ou seja, $Pr_t = 1$. A analogia de Reynolds é uma simplificação, contudo é uma aproximação razoável para fluidos reais com número de $Pr > 0,5$.

Os modelos de turbulência mais usados são os baseados no conceito da viscosidade turbulenta. Estes modelos classificam-se em modelos algébricos e diferenciais lineares de uma ou duas equações. A viscosidade turbulenta, ν_t , é primariamente uma propriedade do escoamento, sendo modelada como o produto de uma velocidade turbulenta e um comprimento de turbulência.

Os modelos algébricos não utilizam equações diferenciais no cálculo da viscosidade turbulenta. Nestes modelos, a viscosidade turbulenta é determinada usando-se somente as variáveis locais de escoamento médio. O efeito histórico da turbulência não é considerado. O primeiro modelo proposto foi o comprimento de mistura de

Prandtl (PRANDTL [32] *apud* WILCOX [33]), que só é válido na região logarítmica da camada limite. Os modelos de Cebeci-Smith (SMITH & CEBECI [34] *apud* WILCOX [33]) e o de Baldwin-Lomax (BALDWIN & LOMAX [35] *apud* WILCOX [33]) são aprimoramentos do modelo de comprimento de mistura de Prandtl. Os modelos algébricos só devem ser usados para escoamentos simples como camada limite, jato e esteira.

Nos modelos diferenciais de uma equação, a viscosidade turbulenta é resolvida através de uma equação de transporte que normalmente é a energia cinética turbulenta. Desta maneira, a viscosidade turbulenta leva em conta a história do desenvolvimento da turbulência. SPALART & ALLMARAS [36] *apud* WILCOX [33] formularam um modelo alternativo no qual a viscosidade turbulenta é determinada diretamente de uma equação de transporte para a própria viscosidade turbulenta. Outros modelos de uma equação são os modelos de Prandtl (PRANDTL [37] *apud* WILCOX [33]), de Bradshaw-Ferris-Atwell (BRADSHAW *et al.* [38] *apud* WILCOX [33]) e de Baldwin-Barth (BALDWIN & BARTH [39] *apud* WILCOX [33]).

Os modelos diferenciais de duas equações têm sido os mais utilizados nos cálculos de escoamento de processos industriais. Uma segunda equação diferencial parcial é introduzida para modelar a escala de comprimento da turbulência, além da equação da energia cinética turbulenta que modela a escala de velocidade turbulenta. Os modelos de turbulência $k - \epsilon$ e $k - \omega$ são as principais vertentes e, por isso, serão detalhados neste trabalho. Além destes, também será descrito o modelo SST (*Shear Stress Transport*), baseados em ambos, que foi o modelo utilizado no presente trabalho.

Modelo de Duas Equações $k - \epsilon$

É o modelo de duas equações mais popular, foi desenvolvido com contribuições de CHOU [40], DAVIDOV [41], HARLOW & NAKAYAMA [42] e JONES & LAUNDER [43] *apud* WILCOX [33]. Posteriormente, LAUNDER & SHARMA [44] *apud* WILCOX [33] reajustaram os coeficientes de fechamento do modelo que

passou a ser referenciado como modelo $k - \epsilon$ padrão. Este modelo introduz duas propriedades para caracterizar o movimento turbulento, a energia cinética turbulenta, κ , e a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, ϵ . Com estas duas propriedades do escoamento, a viscosidade turbulenta foi definida como:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (2.21)$$

onde C_μ é a constante do modelo $\kappa - \epsilon$. Os valores de κ e ϵ são calculados pelas equações de transporte:

$$\rho \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho \bar{v}_j \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} = -\rho \bar{v}_i' v_j' \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} - \rho \epsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] \quad (2.22)$$

$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \rho \bar{v}_j \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] - C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{\kappa} \rho \bar{v}_i' v_j' \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{\kappa} \quad (2.23)$$

Os coeficientes para o problema de fechamento são $C_\mu = 0,09$, $\sigma_\kappa = 1,0$, $C_{\epsilon 1} = 1,44$, $C_{\epsilon 2} = 1,92$ e $\sigma_\epsilon = 1,3$.

O modelo $\kappa - \epsilon$ padrão é estável e robusto numericamente. No entanto, este modelo foi formulado considerando a turbulência de altos números de Reynolds, não se aplicando nas regiões próximas à parede sólida. Tratamentos especiais, como as funções de parede, tem que ser usados junto ao modelo de $\kappa - \epsilon$ padrão para as regiões próximas às paredes.

O modelo *RNG* $\kappa - \epsilon$ foi desenvolvido por YAKHOT & ORSZAG [45] *apud* WILCOX [33], utilizando uma técnica estatística rigorosa chamada de teoria do grupo de renormalização (Renormalization Group Theory-RNG). Os resultados da derivação analítica levam a um modelo com constantes diferentes do modelo $\kappa - \epsilon$ padrão. Contudo, a forma final do modelo é bastante parecida à do modelo $\kappa - \epsilon$ padrão. Este modelo descreve melhor o escoamento de números de Reynolds baixos e escoamentos próximos à parede.

Modelo de Duas Equações $k - \omega$

Este modelo foi proposto inicialmente por KOLMOGOROV [46] *apud* WILCOX [33], e foi desenvolvido ao longo de cinco décadas com contribuições importantes de SAFFMAN [47] *apud* WILCOX [33], SPALDING (veja LAUNDER & SPALDING [48] *apud* WILCOX [33]) e WILCOX [49] *apud* WILCOX [33]. A viscosidade turbulenta é representada por:

$$\mu_t = \rho \frac{\kappa}{\omega} \quad (2.24)$$

onde ω ($= \epsilon/\kappa$) é a taxa de dissipação específica.

A maioria dos códigos utiliza a implementação definida por WILCOX [49] *apud* CFX-Solver Manual [50] conhecido como modelo $k - \omega$ de WILCOX (1998), onde as equações de transporte de k e ω são descritas como:

$$\rho \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho \bar{v}_j \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} = -\overline{\rho v'_i v'_j} \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} - \rho \beta' \kappa \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] \quad (2.25)$$

$$\rho \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho \bar{v}_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] - \alpha \frac{\omega}{\kappa} \overline{v'_i v'_j} \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} - \beta \rho \omega^2 \quad (2.26)$$

As constantes dos modelos têm os seguintes valores: $\beta' = 0,09$, $\alpha = 5/9$, $\beta = 0,075$, $\sigma_\kappa = 2$ e $\sigma_\omega = 2$.

O modelo $\kappa - \omega$ é numericamente estável, especialmente a baixos números de Reynolds, resultando em soluções convergentes mais rápidas. É adequado para determinação da turbulência próxima à parede, mas é sensível às condições de contorno de turbulência no escoamento livre.

Modelo de Duas Equações SST (*Shear Stress Transport*)

Este modelo, desenvolvido por MENTER [51] *apud* CFX-Solver Manual [50], combina as vantagens dos modelos $\kappa - \epsilon$ e $\kappa - \omega$ através de funções de mistura (*blend*) que selecionam automaticamente as zonas de aplicação do $\kappa - \epsilon$ ou do $\kappa - \omega$. Na aplicação do modelo, as equações de transporte para $\kappa - \omega$ são utilizadas próxima à parede enquanto às equações transformadas de $\kappa - \epsilon$ são adotadas na região longe da parede.

As equações de transporte de $\kappa - \epsilon$ transformadas em $\kappa - \omega$ são:

$$\rho \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho \bar{v}_j \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} = -\rho \bar{v}_i' \bar{v}_j' \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} - \rho \beta' \kappa \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\kappa 3}} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho \bar{v}_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 3}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] - \alpha_3 \frac{\omega}{\kappa} \bar{v}_i' \bar{v}_j' \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} - \beta_3 \rho \omega^2 \\ &+ (1 - F_1) 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (2.28)$$

onde os coeficientes têm os seguintes valores: $\beta' = 0,09$, $\alpha_1 = 5/9$, $\beta_1 = 0,075$, $\sigma_{\kappa 1} = 2$, $\sigma_{\omega 1} = 2$, $\alpha_2 = 0,44$, $\beta_2 = 0,0828$, $\sigma_{\kappa 2} = 1$ e $\sigma_{\omega 2} = 1/0,856$.

A ponderação da contribuição de cada modelo é dada pela função mistura:

$$\Phi_3 = F_1 \Phi_1 + (1 - F_1) \Phi_2 \quad (2.29)$$

A função de mistura vale 1 na parede diminuindo até valor zero na região externa à camada limite. Os termos Φ_1 e Φ_2 representam às contribuições de cada modelo. A função de mistura F_1 é definida como:

$$F_1 = \tanh \left(\arg_1^4 \right) \quad (2.30)$$

sendo

$$arg_1 = \min \left(\max \left(\frac{2\sqrt{\kappa}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho\kappa}{CD_\omega \sigma_\omega y^2} \right) \quad (2.31)$$

$$CD_\omega = \max \left(2\rho \frac{1}{\sigma_\omega y} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 1.0 \times 10^{-10} \right) \quad (2.32)$$

onde y é a distância mais próxima da parede e ν é a viscosidade cinemática (μ/ρ).

O modelo SST tem um limitador para a viscosidade cinemática turbulenta, obtido por:

$$\nu_t = \frac{a_1 \kappa}{\max(a_1 \omega, SF_2)} \quad (2.33)$$

onde $a_1 = 0,31$, S é uma medida invariante da taxa de deformação, definida por:

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad \text{com} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.34)$$

e F_2 é uma função mistura, análoga a F_1 , definida como:

$$F_2 = \tanh \left(\arg_2^2 \right) \quad (2.35)$$

com

$$\arg_2 = \max \left(\frac{2\sqrt{\kappa}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \quad (2.36)$$

O modelo SST permite predições acuradas da separação sob condições de gradiente adverso devido ao adequado transporte das tensões cisalhantes. É recomendado quando se deseja uma alta acurácia para resolução da camada limite (CFX-Solver Manual [50]).

2.3.4 O Conceito de Camada Limite

Prandtl observou que próximo a um corpo sólido, numa região extremamente fina, o fluido escoava lentamente, não podendo ser considerado como fluido não viscoso.

Com isso, o escoamento sobre corpos sólidos pode ser analisado dividindo-o em duas regiões (SCHLICHTING & GERSTEN [2]): a) uma fina região adjacente à fronteira sólida, chamada camada limite, onde os efeitos viscosos são importantes; e b) a região restante, fora da camada limite, onde o escoamento é dominado pelos efeitos inerciais e o efeito da viscosidade é desprezível, ou seja, o fluido pode ser tratado como não viscoso. Dentro da camada limite, o componente da velocidade normal à superfície sólida cresce gradativamente, do valor $v = 0$ até seu valor máximo (V_∞), que corresponde ao escoamento não viscoso da região externa. Assim, há um gradiente de velocidade normal à parede muito grande dentro da camada limite que torna as tensões viscosas importantes, mesmo quando a viscosidade é pequena.

Dentro da camada limite, o escoamento pode ser laminar ou turbulento. A transição do escoamento laminar para turbulento numa camada limite é caracterizado por um rápido aumento na espessura da camada limite. A transição na camada limite é influenciada por fatores como transferência de calor, gradiente de pressão da corrente livre, rugosidade da superfície e intensidade turbulenta da corrente livre.

Nos escoamentos em camada limite, a velocidade de referência na equação (2.12) do parâmetro de Reynolds é a velocidade da região externa, $V_r = V_\infty$, e a dimensão característica normalmente corresponde à posição ao longo da placa, x . Para uma placa plana, o número de Reynolds crítico varia entre $3,5 \times 10^5$ e 5×10^5 .

Quando a camada limite torna-se turbulenta, nem toda região dentro da camada limite é afetada pela viscosidade. Na figura 2.1 é mostrado o escoamento próximo a uma superfície plana dividido em quatro regiões distintas (BIRD [1]):

1. **subcamada viscosa**: região muito próxima da parede, escoando em regime viscoso.
2. **camada tampão**: onde ocorre a transição entre as subcamadas viscosa e inercial.
3. **subcamada inercial**: no início da corrente turbulenta principal, onde a viscosidade, tem um papel menor.

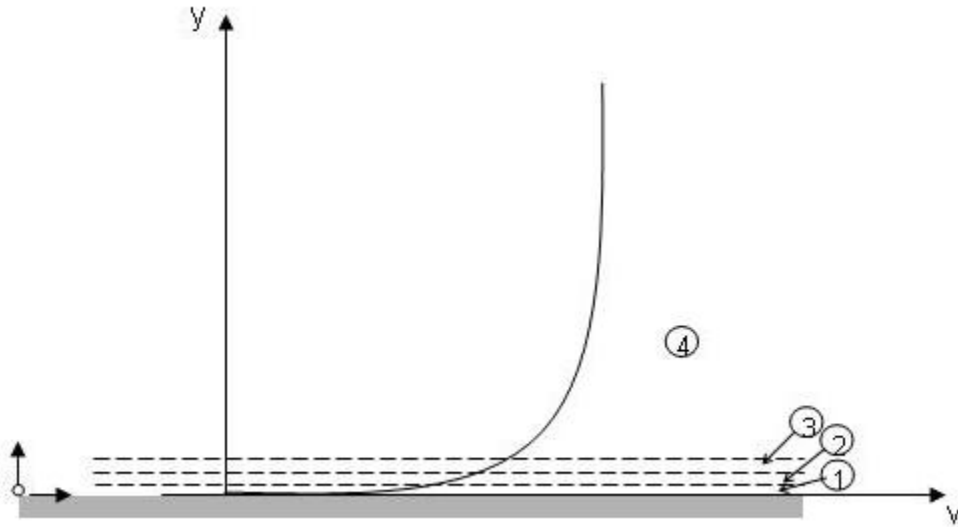


Figura 2.1: Regiões de escoamento para descrever a turbulência próxima a uma parede (BIRD [1]): 1) subcamada viscosa, 2) camada tampão, 3) subcamada inercial, 4) corrente turbulenta principal.

4. *corrente turbulenta principal*: onde a viscosidade não é importante.

Estimação da espessura da camada limite

A definição da espessura da camada limite é arbitrária, uma vez que, o perfil de velocidade na camada atinge seu limite apenas assintoticamente (CURLE & DAVIES [52]). Neste sentido, o valor da espessura δ_x é infinito. Contudo, para propósitos práticos é possível estimar a espessura da camada limite como sendo a distância da superfície sólida ao ponto onde a velocidade atinge 99% da velocidade na região externa. Para camada limite em placa laminar, a espessura da camada limite pode ser estimada a partir de sua solução analítica, obtendo-se a relação:

$$\frac{\delta_x(x)}{x} = \frac{5}{\sqrt{Re_x}} \quad (2.37)$$

onde x é a distância ao longo da placa a partir da borda frontal e Re_x é o número de Reynolds baseado na distância x .

Considerando que a camada limite turbulenta inicia em $x = 0$, a espessura da camada limite em escoamentos turbulentos pode ser estimada por:

$$\frac{\delta_x(x)}{x} = \frac{0,375}{Re_x^{1/5}} \quad (2.38)$$

Das equações (2.37) e (2.38) verifica-se que a espessura da camada limite turbulenta varia com $x^{0,8}$, enquanto a espessura da camada limite laminar varia com $x^{0,5}$.

Separação da camada limite

Um aumento de pressão na direção do escoamento na camada limite, ou seja, um gradiente de pressão adverso aumenta a espessura da camada limite. O gradiente de pressão e as fortes forças de atrito agem reduzindo o momento na camada limite, podendo causar uma deflexão com o fluido se desviando para fora da área de pressão alta e separando-se da superfície sólida. A separação da camada limite está sempre associada com a formação de vórtices e com grandes perdas de energia na esteira do corpo, atrás do ponto de separação (SCHLICHTING & GERSTEN [2]). A figura 2.2 mostra o fluxo na camada limite perto do ponto de separação, S.

A posição do ponto de separação é definido pela condição de gradiente de veloci-

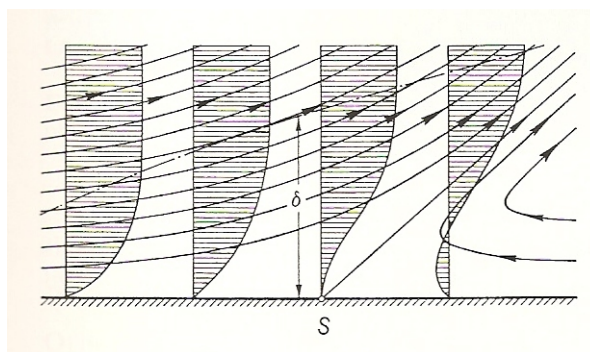


Figura 2.2: Esquema do fluxo na camada limite próximo ao ponto de separação. S = ponto de separação. (SCHLICHTING & GERSTEN [2])

dade normal à parede nulo, ou seja, a tensão cisalhante à parede, τ_w , é zero:

$$\tau_w = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)_w = 0 \quad (2.39)$$

A teoria da separação da camada limite é importante para explicar os arrastes de atrito e de forma e, conseqüentemente, no desenvolvimento de projetos onde o arrasto deve ser minimizado como nos projetos de aerofólios de avião e de carros.

Camada limite térmica

De forma análoga ao campo velocidade, o escoamento de um fluido com temperatura T_∞ sobre um corpo sólido também pode ser dividido em duas regiões: a) uma região bem próxima à parede, definida como camada limite térmica, onde a condutividade térmica é importante e b) a região restante, onde a condutividade térmica pode ser desconsiderada. Dentro da camada limite térmica, a temperatura do fluido varia da temperatura da parede (T_0) (temperatura requerida pelo equilíbrio termodinâmico para o fluido imediatamente adjacente à superfície) até T_∞ (temperatura do fluido na região externa).

A espessura da camada limite térmica, δ_T , não é necessariamente igual à espessura da camada limite de momentum, δ . O número de Prandtl é o parâmetro adimensional que relaciona a razão das espessuras das camadas limites. O número de Prandtl é uma propriedade física definida pela razão entre duas quantidades que caracterizam as propriedades de transporte do fluido, quais sejam, a viscosidade cinemática com respeito ao momento e a difusividade térmica com respeito ao calor.

Quando $Pr = 1$, as espessuras das duas camadas limites são da mesma ordem de magnitude ($\delta_T = \delta$). Para números de Pr muito grandes, $\delta_T \ll \delta$, o campo térmico será dependente do campo velocidade e para números de Pr muito pequenos, $\delta_T \gg \delta$ e, neste caso, a camada limite de velocidade pode ser desconsiderada no cálculo da camada limite térmica.

Perfis de Velocidades da Parede

Na região próxima à parede, os termos convectivos são desprezíveis comparando com o termo de tensão cisalhante. Assim, a tensão cisalhante total composta por tensão viscosa e tensão turbulenta é aproximadamente constante e igual à tensão cisalhante na parede, τ_w . Assim,

$$\tau_{total} = \tau_w = \rho (\nu + \nu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \quad (2.40)$$

DEISSLER [53] *apud* BURMEISTER [54] propôs uma expressão empírica para a viscosidade cinemática turbulenta na região próxima à parede, que é calculada, com $n = 0,124$, por:

$$\nu_t = n^2 \bar{v} y \left[1 - \exp \left(-n^2 \frac{\bar{v} y}{\nu} \right) \right] \quad (2.41)$$

Similarmente, VAN DRIEST [55] *apud* BURMEISTER [54] também apresentou uma relação para a viscosidade turbulenta:

$$\nu_t = K^2 y^2 \left[1 - \exp \left(-\frac{y}{A} \right) \right]^2 \left| \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right|, \quad K = 0,4 \quad \text{e} \quad A = \frac{26\nu}{v^*} \quad (2.42)$$

onde v^* é chamada de velocidade de atrito, sendo definida por

$$v^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (2.43)$$

O perfil de velocidade turbulenta adimensional para um fluxo turbulento estacionário completamente desenvolvido num tubo usando a fórmula de viscosidade cinemática de Deissler, equação (2.41), pode ser dado por:

$$\frac{dv^+}{dy^+} = \frac{1}{1 + n^2 v^+ y^+ [1 - \exp(-n^2 v^+ y^+)]}, \quad v^+(0) = 0 \quad (2.44)$$

onde y^+ e v^+ são, respectivamente, a coordenada adimensional normal à superfície e a velocidade adimensional definidas por:

$$v^+ = \frac{\bar{v}}{v^*}, \quad y^+ = \frac{yv^*}{\nu} \quad (2.45)$$

Na região mais próxima à parede – subcamada viscosa – efeitos moleculares prevalecerão, então:

$$\frac{dv^+}{dy^+} \approx 1, \quad v^+(0) = 0 \quad (2.46)$$

ou seja,

$$v^+ \approx y^+ \quad 0 \leq y^+ < 5 \quad (2.47)$$

significando que o perfil de velocidade de um escoamento turbulento possui forma linear numa região muito próxima à parede.

Na camada tampão, ambos os efeitos moleculares e turbulentos são importantes. A integração da equação (2.44) resulta no seguinte perfil aproximado de velocidade:

$$v^+ \approx 5 + \ln\left(\frac{y^+}{5}\right) \quad (2.48)$$

que apresenta boa acurácia para valores de $5 < y^+ < 26$.

A teoria do comprimento de mistura de Prandtl é utilizada na região da subcamada inercial. Desconsiderando a contribuição dos efeitos moleculares, chega-se ao seguinte perfil de velocidade logarítmico:

$$v^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \quad (2.49)$$

Demonstrou-se experimentalmente que os seguintes valores são razoáveis para a constante de von Kármán, $\kappa = 0,4$ e $C = 5$, resultando (SCHLICHTING &

GERSTEN [2]):

$$v^+ = 2,5 \ln y^+ + 5 \quad y^+ > 30 \quad (2.50)$$

A equação (2.50), é conhecida como *distribuição logarítmica universal de velocidades de Kármán-Prandtl* (BIRD [1]).

Na região da corrente turbulenta principal, o perfil de velocidade pode ser descrito como (BURMEISTER [54]):

$$v^+ = 8,74 (y^+)^{1/7} \quad (2.51)$$

Uma representação do perfil de velocidade através de uma única equação para toda a região da parede foi proposta por REICHARDT [56] *apud* BURMEISTER [54]:

$$v^+ = 2,5 \ln (1 + 0,4y^+) + 7,8 \left[1 - \exp\left(-\frac{y^+}{11}\right) - \left(-\frac{y^+}{11}\right) \exp(-0,33y^+) \right] \quad (2.52)$$

SPALDING [57] *apud* BURMEISTER [54] também apresentou uma proposta de uma única equação para perfil de velocidade da parede, com $\kappa = 0,0407$ e $E = 10$:

$$y^+ = v^+ + E^{-1} \left[e^{\kappa v^+} - 1 - \kappa v^+ - \frac{(\kappa v^+)^2}{2!} - \frac{(\kappa v^+)^3}{3!} - \frac{(\kappa v^+)^4}{4!} \right] \quad (2.53)$$

Perfis de Temperatura da Parede

O fluxo de calor numa camada limite turbulenta desenvolvida, na direção y , é representado por:

$$\bar{q} = -\rho c_p (\alpha + \alpha_t) \frac{d\bar{T}}{dy} \quad (2.54)$$

Similarmente à camada limite de velocidade, o fluxo de calor próximo à parede para valores pequenos de y pode ser considerado constante e igual ao fluxo de calor na parede, q_w . Resultando,

$$\frac{dT^+}{dy^+} \left(\frac{1}{Pr} + \frac{\nu_t/\nu}{Pr_t} \right) = -1 \quad (2.55)$$

com as seguintes variáveis adimensionais:

$$v^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}, \quad T^+ = (\bar{T} - T_w) \left(\frac{\rho c_P}{q_w} v^* \right), \quad y^+ = \frac{y v^*}{\nu}, \quad v^+ = \frac{\bar{v}}{v^*} \quad (2.56)$$

Para determinação do perfil de temperatura é necessário primeiro determinar o perfil de velocidade. Igualmente à camada limite de velocidade, a camada limite térmica é dividida nas regiões: subcamada viscosa, camada tampão e núcleo turbulento. Na subcamada viscosa, os efeitos moleculares predominam sobre os turbulentos e ν_t/ν pode ser desconsiderada. Assim,

$$\Delta T^+ = -Pr y^+, \quad y^+ < 5 \quad (2.57)$$

onde $\Delta T^+ = T^+(y^+) - T^+(0)$

Na camada tampão, efeitos moleculares e turbulentos devem ser considerados. Utilizando o perfil de velocidade para esta região determinado pela equação (2.48), resulta no seguinte perfil de temperatura para Pr_t constante:

$$\begin{aligned} \Delta T^+ &= - \int_5^{30} \frac{dy^+}{1/Pr + (1/Pr_t)(y^+/5 - 1)} \\ &= -5Pr_t \ln \left(5 \frac{Pr}{Pr_t} + 1 \right), \quad 5 < y^+ < 30 \end{aligned} \quad (2.58)$$

No núcleo turbulento, efeitos moleculares podem ser desconsiderados, exceto para os metais líquidos. Assim, considerando Pr_t constante, o perfil de temperatura

pode ser determinado pela seguinte expressão:

$$\Delta T^+ = -Pr_t [v_\infty^+ - 5(1 + \ln 6)], \quad y^+ > 30 \quad (2.59)$$

Capítulo 3

Metodologia Numérica

3.1 Modelo geométrico

O objeto de estudo do presente trabalho é um prato coletor de líquido de uma fracionadora à vácuo da unidade de destilação chamado coletor de gasóleo residual. A figura 3.1 mostra uma configuração simplificada da torre de vácuo com as retiradas dos produtos GOL (gasóleo leve), GOP (gasóleo pesado) e RV (resíduo de vácuo), a carga é o RAT (resíduo atmosférico) e o GOR (gasóleo residual). Como observa-se, o coletor de gasóleo residual está localizado logo acima do bocal de entrada de carga na torre de vácuo. As principais funções deste coletor são:

- garantir uma boa distribuição de vapor através das chaminés,
- evitar a contaminação do gasóleo pesado,
- reter as gotículas de resíduo de vácuo arrastadas com o vapor.

Conforme dito na seção 1.1.1 da introdução, para aumentar a recuperação de gasóleo no processamento de cargas mais pesadas, os refinadores operam a torre de vácuo sob condições de operação mais severas. Este é um dos principais motivos da maior incidência de coque nas fracionadoras à vácuo, sendo a seção de óleo de

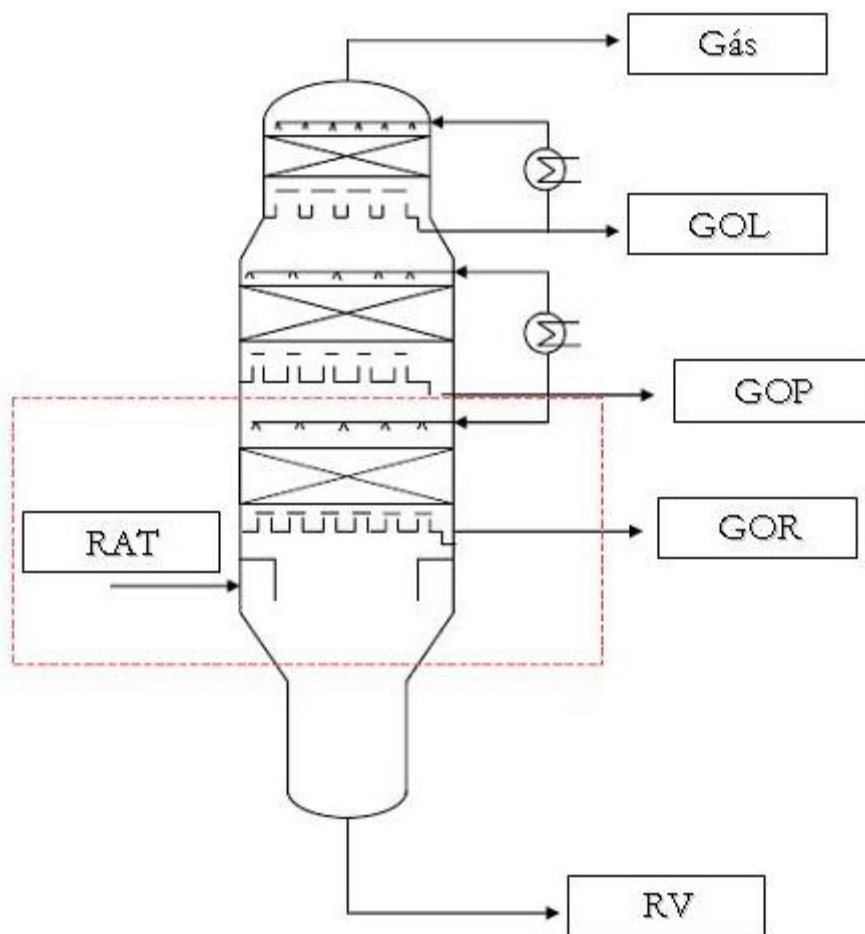


Figura 3.1: Configuração simplificada da torre de vácuo

lavagem, a região mais propensa ao coqueamento. Assim, a confiabilidade desta fracionadora passa por um projeto adequado do coletor de gasóleo residual.

O coletor de gasóleo residual é constituído por: a) chaminés que têm a função de distribuir o vapor ascendente, b) calha para coletar o líquido dentro da torre e c) bocal para saída do líquido da fracionadora. Um dos requisitos para o projeto deste coletor baseia-se no cálculo do gradiente de fluxo líquido de maneira que o tempo de residência de líquido seja mínimo para evitar o coqueamento. Grande parte destes coletores operam quase que completamente seco. Em alguns projetos, o nível de líquido no coletor é controlado dentro da calha.

No presente trabalho, com a finalidade de analisar o perfil de distribuição de velocidade e de temperatura do líquido no coletor e a formação de coque, a interface

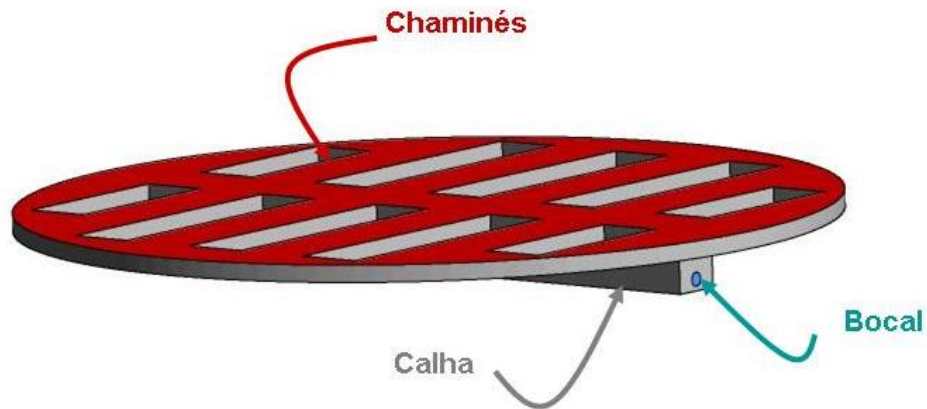


Figura 3.2: Geometria do coletor de gás residual

de líquido no coletor está localizado acima da calha, numa altura intermediária à altura das chaminés. Assim, toda a região de líquido em torno da chaminés e a calha é considerada como domínio físico.

A geometria é baseada num coletor de líquido de gás residual de uma refinaria da PETROBRAS. Ela foi gerada em tamanho original, tridimensional no software Workbench da ANSYS. O coletor tem 8840 mm de diâmetro, seis chaminés centrais com áreas de 3200 mm de comprimento e 700 mm de largura e quatro laterais com área de 2000 mm de comprimento e 700 mm de largura, a calha tem altura de 510 mm e área de 7200 mm de comprimento e 560 mm de largura e o bocal de saída tem 146,3 mm de diâmetro interno. A figura 3.2 mostra a geometria do coletor de gás residual.

Na tabela 3.1 estão descritas as principais propriedades físicas do gás residual.

Tabela 3.1: Propriedades do gasóleo residual ($T = 370^\circ\text{C}$)

Propriedades	Valor
massa específica, ρ	797,8447 kg/m ³
viscosidade dinâmica, μ	0,6665 cP
condutividade térmica, λ	0,1147 W/(m.K)
capacidade térmica específica a pressão constante, c_p	2921,97 J/(kg.K)

3.2 Equações governantes

A formulação matemática para o escoamento de um fluido é baseada nas equações de Navier Stokes definidas na seção 2.3.1. As seguintes considerações foram feitas para o presente trabalho:

- escoamento tridimensional e turbulento,
- fluido newtoniano incompressível,
- propriedades físicas do fluido (ρ, μ, λ, c_p) constantes,
- o fluido é isotrópico,
- a lei de Fourier é válida,
- outras fontes de calor (radiação, reações químicas, etc) são desconsideradas.

Mediante as considerações acima as equações de Navier Stokes são descritas da seguinte maneira:

Equação da continuidade

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}} = 0 \quad (3.1)$$

Equação de movimento

$$\frac{\partial(\rho\bar{\mathbf{v}})}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho\bar{\mathbf{v}}\bar{\mathbf{v}}) - \nabla\bar{p} + \mu \left(\nabla\bar{\mathbf{v}} + (\nabla\bar{\mathbf{v}})^T \right) - \nabla \cdot (\rho\overline{\mathbf{v}'\mathbf{v}'}) \quad (3.2)$$

Equação de energia

$$\rho c_p \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \bar{T} \bar{\mathbf{v}}) + \nabla \cdot ((\lambda + \lambda_t) \nabla \bar{T}) \quad (3.3)$$

Na equação de movimento (3.2), o último termo do lado direito é modelado pela equação (2.17), apresentada na seção 2.3.3.

Na modelagem da turbulência foi utilizado o modelo SST (*Shear Stress Transport*). Este modelo, com valores de $y^+ < 2$ e cerca de 15 volumes ao longo da espessura da camada limite, é apropriado para resolver os perfis de velocidade e temperatura próximos à região de parede.

3.3 Modelo cinético de coque

A formação de coque é estimada por um modelo cinético a partir de asfaltenos. É sabido que os asfaltenos são os principais precursores na formação de coque. Os parâmetros cinéticos para o asfaleno foram obtidos na literatura (GONÇALVES [3]) num estudo sobre comportamento térmico de asfaltenos de um petróleo brasileiro. No trabalho de GONÇALVES [3], foi feita uma análise por espectroscopia de absorção na região do infravermelho mostrando que o espectro dos asfaltenos extraídos da bacia de Campos tem perfil similar ao dos asfaltenos isolados de diferentes origens geológicas. A tabela 3.2 mostra o resultado da análise elementar dos asfaltenos isolados do petróleo da bacia de Campos no trabalho de GONÇALVES [3].

O estudo do comportamento térmico dos asfaltenos foi feita pela técnica de termogravimetria. Esta técnica consiste em se aquecer uma amostra em uma balança e registrar a perda ou ganho de massa durante o programa controlado de temperatura. O estudo cinético de decomposição térmica dos asfaltenos por termogravimetria foi realizado pelo programa de cinética fornecido pelo fabricante do analisador TGA - 951. Este programa é baseado no método desenvolvido por FLYNN & WALL [58] *apud* GONÇALVES [3] que determina os parâmetros cinéticos das curvas de perda de massa *versus* temperatura obtidas em diferentes taxas de aquecimento.

Tabela 3.2: Análise elementar dos asfaltenos isolados do petróleo da bacia de Campos (GONÇALVES [3]).

Elemento	Resultado
Carbono	85.8 %m
Hidrogênio	8.4 %m
Nitrogênio	1.8 %m
Oxigênio	1.3 %m
Enxofre	0.93 %m
Níquel	26 ppm
Vanádio	28 ppm
Ferro	4.2 ppm
Cobalto	1.9 ppm
Gálio	< 0.5 ppm

O programa utiliza como base a equação de Arrhenius:

$$\frac{d\alpha}{dt} = k \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) f(\alpha) \quad (3.4)$$

O experimento é feito a uma taxa linear de aquecimento, β , assim:

$$T = \beta t + a \quad \implies \quad \frac{dT}{dt} = \beta \quad (3.5)$$

Para uma cinética de primeira ordem, resulta em:

$$\frac{d\alpha}{dT} \beta = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) (1 - \alpha) \quad (3.6)$$

onde α é a fração reagida, t é tempo, k_0 é o fator pré-exponencial em 1/min, E_a é a energia de ativação em J/mol, R é a constante dos gases e T é a temperatura.

Resolvendo a equação diferencial (3.6) e fazendo uma série de aproximações, determinou-se a energia de ativação para diferentes graus de conversão através do coeficiente angular das retas, obtida no gráfico de $\log \beta$ versus $1/T$. A tabela 3.3 apresenta os valores de energia de ativação a diferentes níveis de conversão. Observa-se que a energia de ativação aumenta gradualmente com a temperatura, indicando que o mecanismo de decomposição é dependente do nível de conversão. Porém, no

Tabela 3.3: Energia de ativação a diferentes níveis de conversão entre temperaturas de 300 e 500°C (GONÇALVES [3]).

% Conversão	E_a , kJ/mol	Log k_0 , 1/min
5	175.5	12.33
10	175.2	12.16
15	179.1	12.41
20	182.6	12.66
25	185.2	12.83
30	189.1	13.10
35	192.8	13.37
40	195.6	13.56
45	198.0	13.73
50	198.9	13.80
60	199.0	13.90
70	202.7	13.88
80	207.5	14.26
90	231.0	15.82

estudo e na vasta literatura, a cinética de coqueamento é considerada correspondente a uma reação de primeira ordem.

Para o presente trabalho foram adotados os parâmetros cinéticos referentes a 5% de conversão a coque. Não é esperado no coletor de gasóleo residual uma conversão alta de asfaltenos em coque pelo fato da temperatura nesta região da fracionadora encontrar-se por volta de 400°C.

Na implementação do modelo cinético no simulador da ANSYS CFX-11.0, asfalto e coque foram adicionados na simulação na forma de variáveis adicionais. Estas são definidas como componentes escalares que são transportadas pelo escoamento sem alterá-lo (ANSYS Solver Manual [50]). A formulação da reação química de formação de coque é representada como um termo fonte nas equações de transporte do asfalto e do coque. A equação de transporte para o asfalto foi modelada da

seguinte maneira:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -\nabla \cdot (\bar{\mathbf{v}}C_A) + \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla C_A \right) - R_C \quad (3.7)$$

onde C_A é a concentração de asfalto, μ_t é a viscosidade dinâmica turbulenta, Sc_t é o número de Schmidt turbulento e R_C é a taxa de reação de formação de coque.

O coque foi modelado por uma equação de transporte difusiva, definida por:

$$\frac{\partial C_C}{\partial t} = \nabla \cdot (D_C \nabla C_C) + R_C \quad (3.8)$$

onde C_C é a concentração de coque, D_C é a difusividade cinemática para o coque e R_C é a taxa de reação de formação de coque.

No entanto, no presente trabalho, é considerado que o coque é apenas acumulado no domínio. Logo, a equação (3.8) simplifica-se para:

$$\frac{\partial C_C}{\partial t} = R_C \quad (3.9)$$

As seguintes simplificações foram adotadas na implementação do modelo cinético de coque:

- o período de indução do coque não foi considerado no estudo.
- a quantidade de asfalto no coletor de gasóleo residual é ínfima numa fracionadora à vácuo operando sob condições normais. Com isso, o asfalto pode ser considerado como traço na formulação do problema, não interferindo no balanço de massa do problema. Isto permitiu o uso de variáveis auxiliares no transporte de asfalto e coque.

3.4 Algoritmo de Solução

O código de fluidodinâmica computacional comercial CFX versão 11.0 da ANSYS *Technology* foi usado para solução numérica do problema de estudo. As equações foram discretizadas pelo método de volumes finitos baseado em elementos finitos (EbFVM). Este método utiliza o conceito do método de volumes finitos, visto na seção 2.3.2, no qual as equações governantes são integradas sobre os volumes de controle. No entanto, os balanços sobre esses volumes são feitos através de um somatório de fluxos calculados nos pontos de integração dos elementos. Ou seja, este método realiza balanços sobre um volume de controle criados a partir dos elementos, emprestando do método de elementos finitos apenas o conceito de elemento e sua representação geométrica (MALISKA [29]).

O programa da ANSYS CFX-11.0 utiliza o arranjo co-localizado para o arranjo das variáveis dependentes da malha. Por este arranjo, todas as variáveis estão localizadas no centro do mesmo volume de controle. Assim, os volumes de controle são idênticos para todas as equações de transporte. O problema do desacoplamento do campo de pressão é resolvido através do método de discretização *Rhie Chow* [59] *apud* CFX-Solver Manual [50], onde um termo de variação de pressão de alta ordem é carregado numa equação de movimento em cada ponto de integração.

Para a discretização dos termos temporais das equações governantes foi adotado o método implícito de segunda ordem. Para os termos convectivos, o seguinte esquema de alta resolução foi usado para a discretização:

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \beta \nabla \phi \cdot \Delta \mathbf{r} \quad (3.10)$$

onde ϕ_{ip} é o valor da variável no ponto de integração, ϕ_{up} é o valor variável no nó *upwind*, \mathbf{r} é o vetor do nó *upwind* para o *ip*, o valor de β é o valor mais próximo de 1 que for possível para que não haja oscilações locais e $\nabla \phi$ é o gradiente do volume de controle do nó *upwind*.

O sistema de equações hidrodinâmicas discretizadas pelo método de EbFVM é

resolvido de forma acoplada através do método multigrid. Neste método, todas as incógnitas são resolvidas simultaneamente por uma única matriz envolvendo todos os coeficientes das equações algébricas lineares. A aceleração da convergência neste método é conseguida fazendo-se malhas de diferentes tamanhos. O fundamento é que os erros são eliminados com comprimentos de onda da ordem do tamanho da malha. Assim, os erros em todas as frequências serão eliminados, acelerando o processo de convergência (MALISKA [29]). O procedimento consiste em identificar na malha fina as direções onde os coeficientes são dominantes, e nesta direção, engrossar a malha, de modo a filtrar as frequências advindas de qualquer difusão numérica.

O programa da ANSYS CFX 11.0 utiliza o método algébrico ACM (*Additive Correction Multigrid*). Seu princípio básico consiste em manter os princípios de conservação nos blocos de malha criados na malha fina. A malha grossa é criada a partir da união dos volumes originais da malha fina até se obter volumes maiores.

3.5 Condições de contorno e iniciais

O domínio computacional do coletor de gasóleo residual está esquematizado na figura 3.3, onde x é a direção de saída do escoamento pelo bocal e z a direção vertical. No presente trabalho, a formulação do problema foi simplificada considerando apenas o escoamento da fase líquida. A região de troca de calor e de massa entre o líquido vindo da seção superior da fracionadora à vácuo e o vapor da seção não foi considerada. Dessa forma, a condição de entrada de líquido no domínio computacional foi localizada na interface gás-líquido do coletor (que está a uma certa altura intermediária das chaminés).

Na entrada foram especificadas a vazão mássica e a temperatura do gasóleo residual e a concentração de asfalto. Na formulação do problema não é considerado a existência de coque na entrada. Foi considerado o efeito da turbulência na entrada com intensidade de turbulência de 10%. A vazão mássica é especificada normal ao contorno e o fluxo mássico foi feito uniforme sobre toda a superfície de entrada.

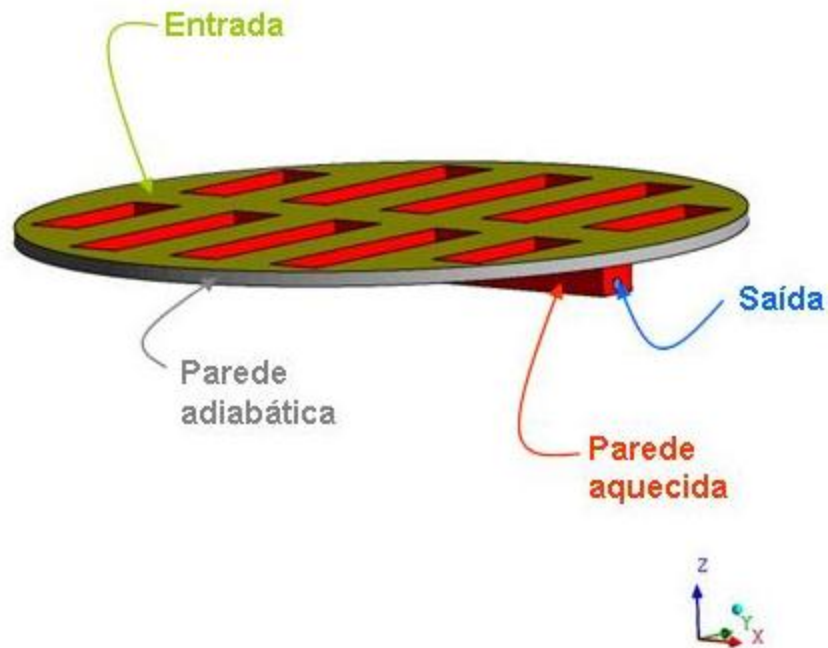


Figura 3.3: Domínio computacional do coletor de gás residual

Neste caso o fluxo mássico é calculado (ANSYS Solver Manual [50]):

$$\rho v = \frac{m^{\circ}}{\int_S dA} \quad (3.11)$$

onde a $\int_S dA$ é a área superficial da entrada integrada a uma dada resolução de malha.

Na região de saída, foi imposta uma condição de pressão estática média. Desta maneira, é permitido que a pressão estática varie localmente no contorno, mas sendo restringida pelo valor médio da pressão especificado. Neste trabalho, o coque é apenas acumulado no domínio, não sendo transportado pelo fluxo. Uma condição de fluxo de entrada zero foi prescrita para o coque no contorno de saída.

Foi adotada uma temperatura prescrita para o fundo, calha e chaminés representando a temperatura do vapor ascendente. Estas regiões foram denominadas na formulação do problema como parede aquecida.

A lateral do coletor foi representada como parede adiabática. Condição de não-

deslizamento foi considerada para ambas as paredes (adiabática e aquecida), ou seja, a velocidade do fluido na parede é zero. Para o asfalto, uma condição de contorno de fluxo zero foi implementada nas paredes adiabática e aquecida.

A seguir descreve-se de forma sucinta as condições de contorno usadas para o problema:

1. Entrada

- $\dot{m}_{GOR} = 7,1453 \text{ kg/s}$
- $I = 10\%$
- $T_{GOR} = 370^\circ\text{C}$
- $C_C = 0 \text{ kg/m}^3$
- $C_A = 30 \text{ kg/m}^3$

2. Saída

- $\bar{P}_{est} = 0 \text{ Pa}$
- $D\nabla C_C \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}$

3. Parede Aquecida

- não-deslizamento
- $T_{fundo} = 400,7^\circ\text{C}$
- $D\nabla C_A \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}$

4. Parede Adiabática

- não-deslizamento
- $D\nabla C_A \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}$

As variáveis usadas para inicialização do problema foram os três componentes do vetor velocidade, a pressão estática, a temperatura do gasóleo residual na entrada, a intensidade turbulenta, a razão entre a viscosidade dinâmica turbulenta e viscosidade dinâmica molecular e as concentrações de coque e asfalto. A tabela 3.4 mostra os valores que foram usados para as variáveis de inicialização.

Tabela 3.4: Condições iniciais

Variável	Valor Inicial
\mathbf{v}	0 m/s
P_{est}	0 Pa
T	370°C
I	0,05
μ_t/μ	10
Coque	0 kg/m ³
Asfaleno	30 kg/m ³

3.6 Geração da malha

A malha computacional representa a geometria da região de interesse. No processo de geração da malha, o domínio do escoamento é subdividido em um grande número de volumes de controle. Todos estes volumes juntos formam a malha da geometria. Em cada volume de controle, as equações do modelo são resolvidas, resultando em distribuições discretas de massa, momento e energia. O número de volumes na malha deve ser suficientemente grande para que se tenha uma resolução adequada da representação da geometria do escoamento e do fenômeno do escoamento no domínio.

A malha pode ser estruturada, não-estruturada e híbrida. A malha estruturada consiste de elementos hexaédricos. Neste tipo de malha, as arestas da célula formam linhas contínuas que começam e terminam nas faces do bloco oposto. Os elementos hexaédricos são teoricamente os elementos mais eficientes, porém não se adaptam bem em geometrias complexas. Malhas não estruturadas podem ser geradas automaticamente, sem considerar a continuidade das linhas da malha no arranjo dos volumes de controle. A informação da conectividade para cada face de célula necessita ser armazenada em uma tabela, resultando num aumento de armazenamento e tempo de cálculo. Normalmente é formada por elementos tetraédricos. A malha híbrida combina diferentes tipos de elementos: tetraédricos, hexaédricos, prismas e pirâmides.

A geometria do presente trabalho foi representada por uma malha não-estruturada híbrida. O programa computacional usado para a geração da malha foi o ICEM-CFD. A região do escoamento próximo à parede aquecida (camada limite) é a região de maior interesse para análise de formação de coque. Para resolver esta região, foi feito um refinamento com 15 camadas de elementos prismáticos. Este tratamento da parede juntamente com a utilização do modelo de turbulência SST permitiu que os gradientes de velocidade e temperatura dentro da camada limite fossem resolvidos. Testes de simulações foram realizados com três malhas com tamanho de 270188, 588451 e 1289207 nós para verificar a sensibilidade dos resultados da simulação ao tamanho da malha. As figuras 3.4, 3.5, 3.6 mostram em destaque as camadas de prismas empregadas nas malhas do trabalho.

3.7 Critério de convergência

O nível de convergência foi analisado baseado no resíduo de cada equação discretizada do problema. O resíduo é uma medida do não fechamento de balanço local das leis de conservação de massa, momento e energia em cada volume de controle, ou seja, o resíduo indica o quão longe a solução aproximada apresentada está das leis de conservação (MARNET-CFD [60]).

O critério de convergência da solução numérica é então baseado nos resíduos normalizados das equações que são somados para todos os volumes de controle no domínio computacional. A convergência foi considerada atingida quando os resíduos máximos ficaram menores que 10^{-4} . Nas simulações transientes com malhas de diferentes tamanhos, todas as variáveis dependentes atingiram o critério de convergência, ao longo de cada passo de integração temporal.

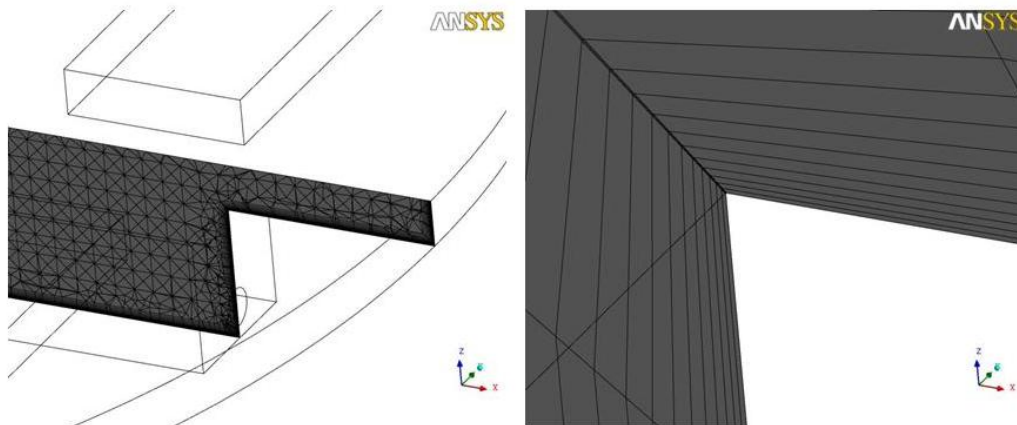


Figura 3.4: Detalhe das camadas de prisma para a malha 1

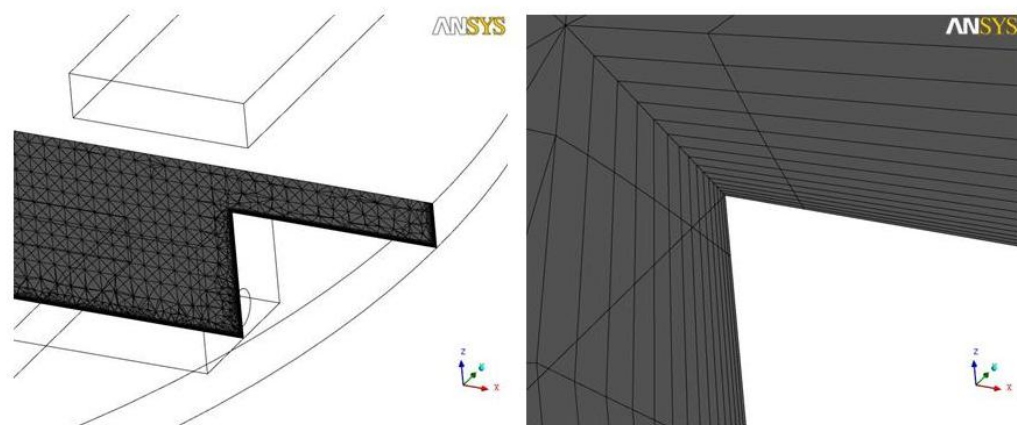


Figura 3.5: Detalhe das camadas de prisma para a malha 2

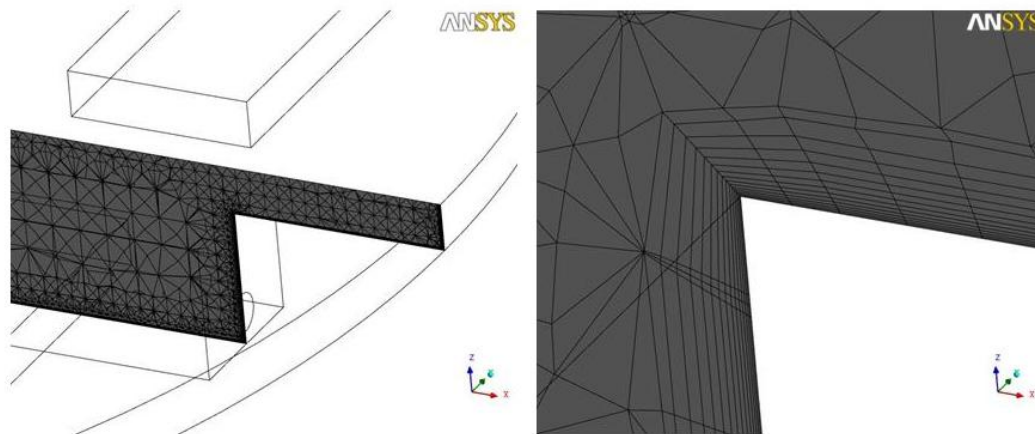


Figura 3.6: Detalhe das camadas de prisma para a malha 3

3.8 Estratégia de solução

Este trabalho consistiu no estudo do coletor de líquido do gásóleo residual contemplando apenas a fase líquida. Primeiramente, o problema foi simulado no estado permanente sem a ativação da formação de coque. Nesta simulação foi observado uma quase convergência para qualquer passo de tempo, indicando um comportamento quase estacionário das variáveis dependentes. O resultado desta simulação (perfis de velocidades e pressão) foi usado como valor inicial para uma simulação transiente ainda sem ativação da formação de coque. Esta simulação foi rodada por um tempo de 0,02 segundos apenas para estabilizar os perfis de velocidade, pressão e temperatura. E, finalmente, o resultado desta simulação foi utilizado como valor inicial para a simulação transiente com formação de coque. A simulação foi rodada por um tempo de 1000 segundos que é aproximadamente o tempo de residência do gásóleo residual no coletor. Este procedimento foi realizado para as três malhas na geometria original.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

4.1 Teste de convergência de malha

Três malhas foram geradas para o teste de convergência dos resultados. O número de nós da malha mais refinada é aproximadamente o dobro da malha intermediária e quatro vezes o da malha grosseira. As malhas foram refinadas na região próxima à parede, tendo como critério o valor de y^+ . Todas as malhas são não-estruturadas híbridas com tetraedros e com 15 camadas de prismas próximo à parede. Nas tabelas 4.1, 4.2 e 4.3 são mostradas as análises dos valores de y^+ para cada malha. Nota-se que, com exceção da superfície da face de saída, o maior valor de y^+ ficou da ordem de 5 na malha 1, da ordem de 2 na malha 2 e da ordem de 1 na malha 3. A superfície da saída obteve valores altos de y^+ devido à velocidade mais alta.

Tabela 4.1: Análise de y^+ para a malha 1: 270188 nós

Superfície	y^+ min	y^+ max	y^+ médio
Lateral	0,015	1,07	0,34
Chaminés	0,016	1,59	0,25
Fundo	0,018	2,45	0,32
Calha	0,056	5,16	0,70
Face da saída	0,44	19,47	5,20

Tabela 4.2: Análise de y^+ para a malha 2: 588451 nós

Superfície	y^+ min	y^+ max	y^+ médio
Lateral	0,011	0,75	0,22
Chaminés	0,0039	0,88	0,13
Fundo	0,0041	1,40	0,18
Calha	0,017	2,63	0,33
Face da saída	0,12	14,52	3,03

Tabela 4.3: Análise de y^+ para a malha 3: 1289207 nós

Superfície	y^+ min	y^+ max	y^+ médio
Lateral	0,0029	0,45	0,14
Chaminés	0,0016	0,56	0,065
Fundo	0,0016	0,93	0,088
Calha	0,0095	1,39	0,18
Face da saída	0,046	9,49	1,05

Com o refinamento das malhas feito de acordo com o objetivo de diminuir os valores de y^+ nas regiões de interesse, a etapa seguinte foi simular as três malhas no modo estacionário do CFX. O modelo de turbulência usado foi o modelo SST e o esquema de discretização para os termos convectivos foi o de alta resolução conforme descrito na seção 3.4. O critério de convergência adotado foi o máximo resíduo de 10^{-5} e para o critério de balanço global foi imposto uma meta de fechamento de 99,9 %. O número de iterações máximo estipulado foi de 1000. Para resolver o sistema de equações discretizadas do problema no modo estacionário, ANSYS CFX utiliza uma simulação transiente como forma de subrelaxar as equações até a solução estacionária. A simulação iniciou com passo de tempo de 0,01 segundos e, com a diminuição dos resíduos no decorrer da simulação, este passo de tempo foi aumentado até 50 segundos.

As simulações no modo permanente não convergiram com os critérios adotados. No entanto, observa-se pelos gráficos 4.1, 4.2, 4.3 das malhas 1, 2 e 3 que os resíduos das equações hidrodinâmicas foram diminuindo até que começaram a oscilar dentro de um patamar curto e permaneceram neste patamar até o número máximo de

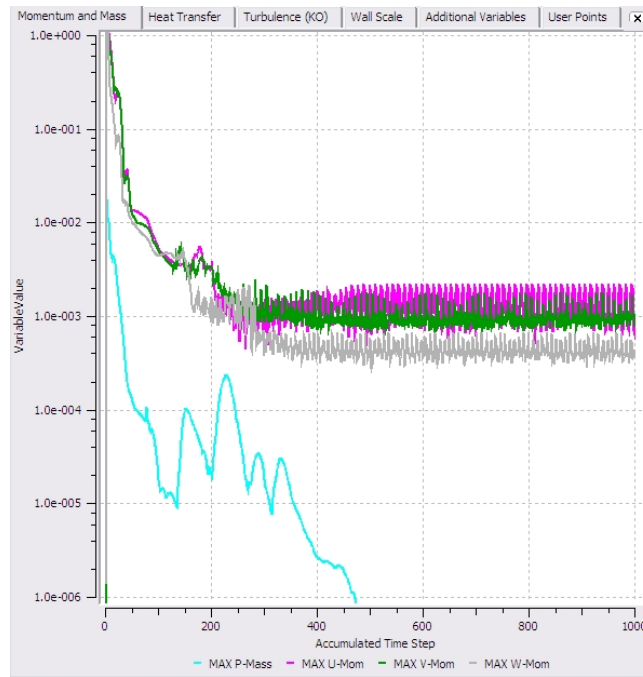


Figura 4.1: Resíduos das equações hidrodinâmicas da simulação permanente da malha 1.

iterações estipulado sugerindo um estado quase-estacionário.

Como não foi obtida a convergência requerida nas simulações no modo permanente, partiu-se para a solução do problema no modo transiente. Toda a formulação do problema para a simulação transiente está descrita no capítulo 3, usando o modelo de turbulência SST, o esquema de alta resolução para a discretização dos termos convectivos e o método implícito de segunda ordem para a integração no tempo. O critério de convergência adotado foi o máximo resíduo de 10^{-4} e para o critério de balanço global foi designada uma meta de tolerância de 99,9 %.

As simulações transientes foram rodadas até 1000 segundos que corresponde a aproximadamente um tempo de residência (1079 segundos). O número de iterações internas para fechar um passo de tempo foi de no mínimo 2 e máximo de 20. Foi adotada a opção de passo de tempo adaptativo, iniciando com passo de 0,002 segundos e com número máximo de Courant de 2. No transcorrer da simulação, o número máximo de Courant foi aumentado até um valor de 200. O número de Courant é

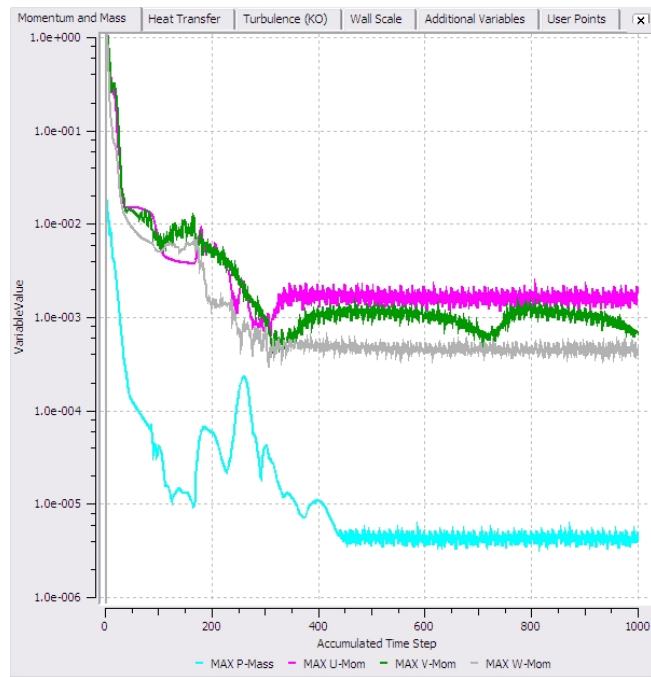


Figura 4.2: Resíduos das equações hidrodinâmicas da simulação permanente da malha 2.

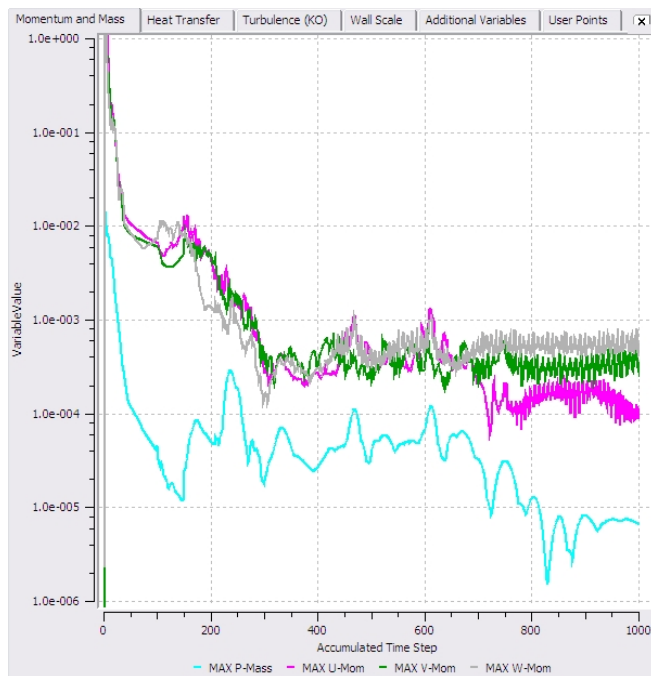


Figura 4.3: Resíduos das equações hidrodinâmicas da simulação permanente da malha 3.

definido para uma malha unidimensional como:

$$\text{Courant} = \frac{v\Delta t}{\Delta x} \quad (4.1)$$

onde v é a velocidade do fluido, Δt é o passo de tempo e Δx é o tamanho da malha. O número de Courant para uma melhor descrição do comportamento transiente das variáveis deveria ser da ordem de 1. Números altos de Courant podem tornar a simulação instável e também detalhes da fluidodinâmica transiente poderão não ser observados. Contudo, devido ao tempo de CPU que seria enorme e também ao fato de que o problema apresenta solução quase-estacionária, aumentou-se o número de Courant até 200.

Todas as simulações convergiram dentro do número máximo de iterações internas determinado: a) malha 1 com 2 a 3 iterações, b) malha 2 com 3 a 5 iterações e c) malha 3 com 4 a 7 iterações. Os resultados das rodadas transientes intermediárias foram salvos para comparação da convergência em diferentes instantes de tempo.

4.1.1 Comparação dos resultados das simulações transientes em diferentes instantes de tempo

Os resultados das simulações transientes das três malhas foram comparados em diferentes instantes de tempo. A verificação foi feita para a variável distribuição de coque ($C_{coque}/\max(C_{coque})$). Para tanto, foram traçadas linhas na região do coletor onde há maior concentração de coque, conforme pode ser visto no exemplo da figura 4.4 feita com o resultado da simulação transiente da malha 3. A partir destas linhas, gráficos da variável distribuição de coque *versus* comprimento ao longo da linha foram plotados para comparação de cada malha em diferentes instantes de tempo. Os gráficos 4.5, 4.6, 4.7 e 4.8 mostram a comparação para a malha 3 nos instantes de tempo de 1000 s, 500 s e 250 s. Nota-se pelos gráficos que os resultados apresentam o mesmo perfil e que praticamente não mudam com o intervalo de tempo, com pequena variação nas regiões de pico.

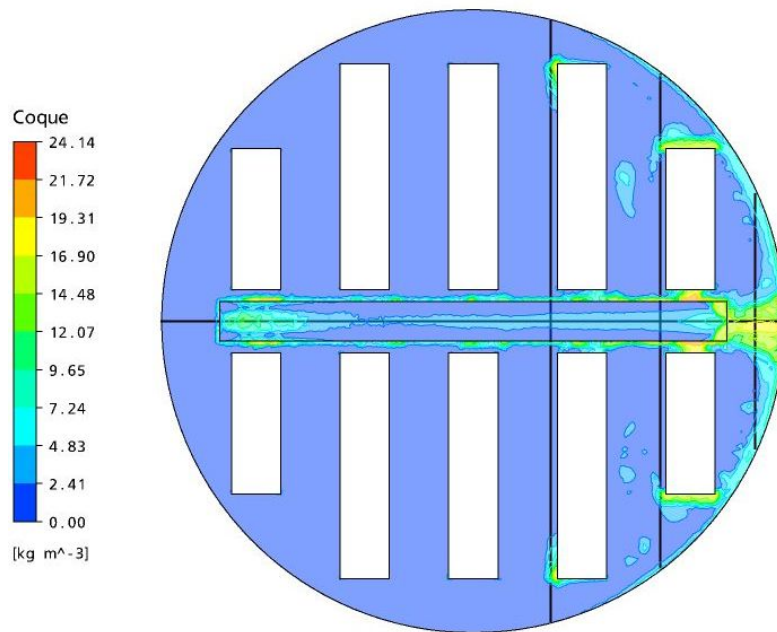


Figura 4.4: Linhas utilizadas para análise das simulações, no plano xy a $z = 0$

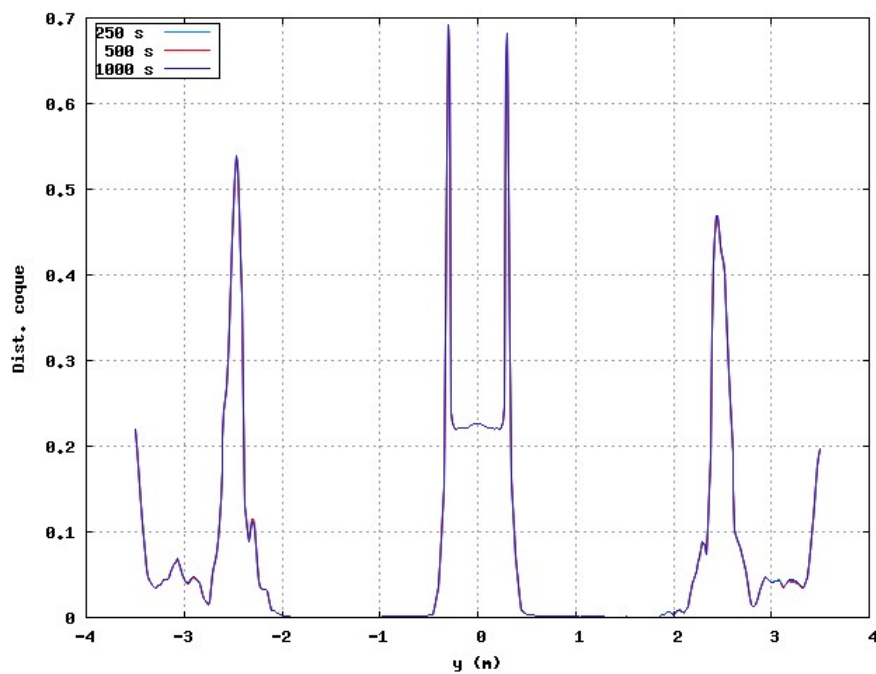


Figura 4.5: Gráfico distribuição de coque *versus* comprimento para as simulações transientes da malha 3 em 250 s, 500 s e 1000 s.

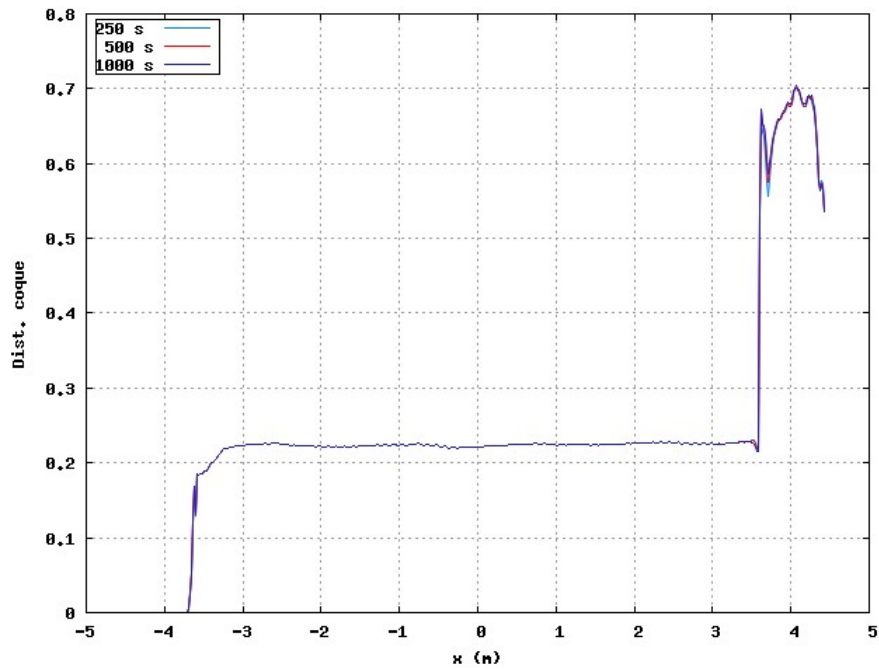


Figura 4.6: Gráfico distribuição de coque *versus* comprimento para as simulações transientes da malha 3 em 250 s, 500 s e 1000 s.

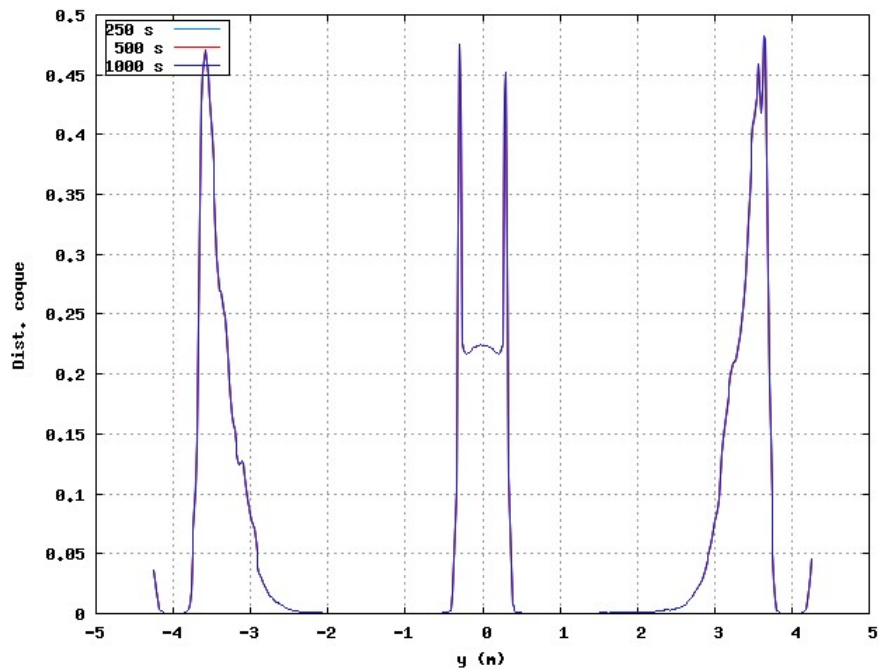


Figura 4.7: Gráfico distribuição de coque *versus* comprimento para as simulações transientes da malha 3 em 250 s, 500 s e 1000 s.

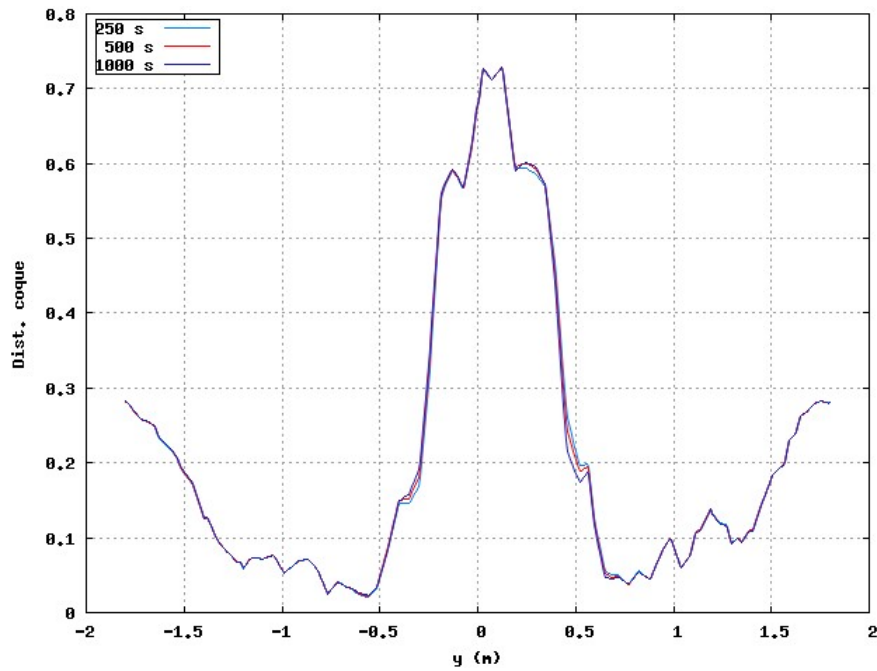


Figura 4.8: Gráfico distribuição de coque *versus* comprimento para as simulações transientes da malha 3 em 250 s, 500 s e 1000 s.

Ressalta-se que foram feitas também comparações em diferentes instantes de tempo para as variáveis coque e taxa de formação de coque. Observou-se o mesmo comportamento obtido para variável distribuição de coque. Este estudo também foi feito para as malhas 1 e 2, com conclusões similares às obtidas para a malha 3.

A variável taxa de formação de coque foi integrada no volume do domínio em diferentes intervalos de tempo. O resultado está apresentado no gráfico 4.9. A taxa de formação de coque é praticamente constante ao longo do transiente para as três malhas com desvio padrão da ordem de 10^{-06} . A diferença percentual da média da taxa de formação de coque das malhas 1 e 2 em relação à malha 3 é de 0,49% e 0,44%, respectivamente.

Uma conclusão importante nesta seção é que, como os perfis das variáveis de interesse praticamente não mudam nos diferentes instantes de tempo, poderíamos simular este problema por um tempo menor que o tempo de residência gerando resultados similares. Isto é, a estratégia de usar a simulação inicial no modo estacionário permite atingir rapidamente o regime quase-estacionário.

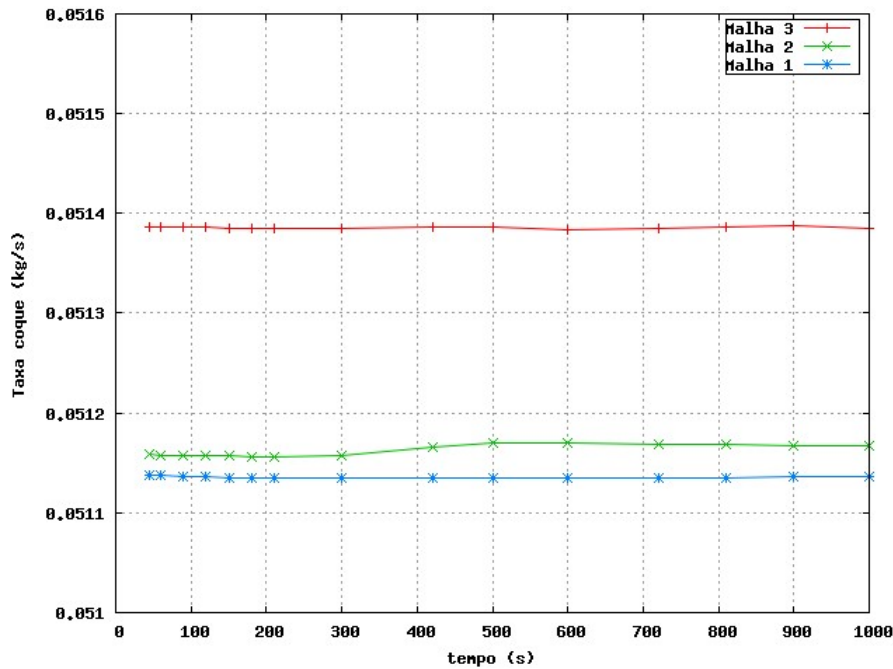


Figura 4.9: Gráfico da taxa de formação de coque em diferentes instantes de tempo para as simulações transientes da malha 1, 2 e 3.

4.1.2 Comparação dos resultados da simulação transiente com a simulação permanente

Para esta comparação foram utilizadas as mesmas linhas traçadas na figura 4.4. A verificação foi feita para a variável asfalteno, uma vez que, a simulação permanente foi rodada sem a ativação da reação de formação de coque. Os gráficos 4.10, 4.11, 4.12 e 4.13 mostram a comparação da simulação transiente no instante de 1000 s com a simulação permanente para a malha 3. Observa-se também um resultado muito similar entre a simulação transiente e a permanente com as maiores variações na região de pico, comprovando que a fluidodinâmica do problema é quase-estacionária. Ressalta-se, mais uma vez, que este estudo também foi feito para as malhas 1 e 2, obtendo conclusões similares às da malha 3.

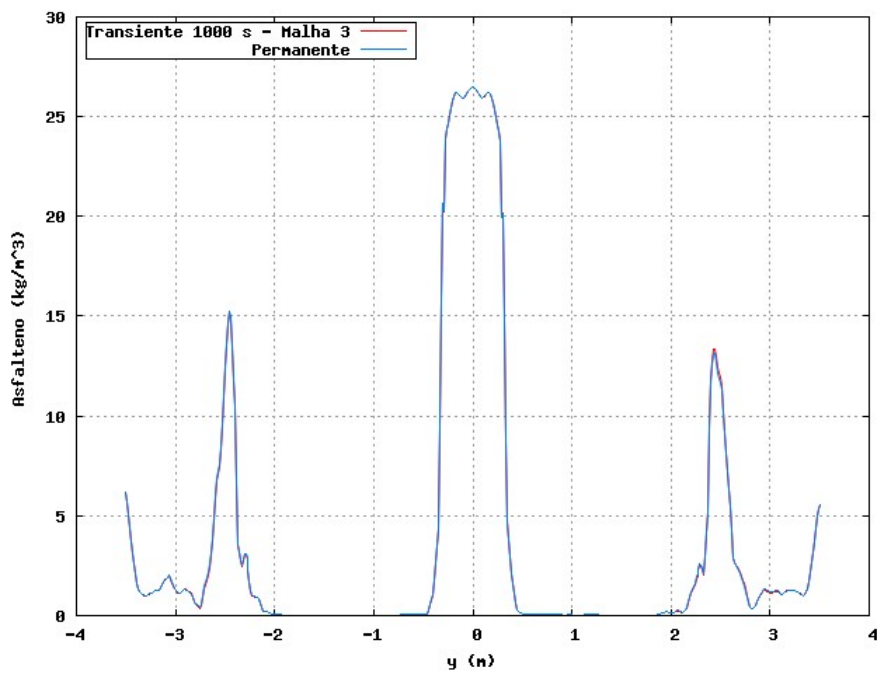


Figura 4.10: Gráfico asfalto *versus* comprimento para as simulações transiente em 1000 s e permanente para a malha 3.

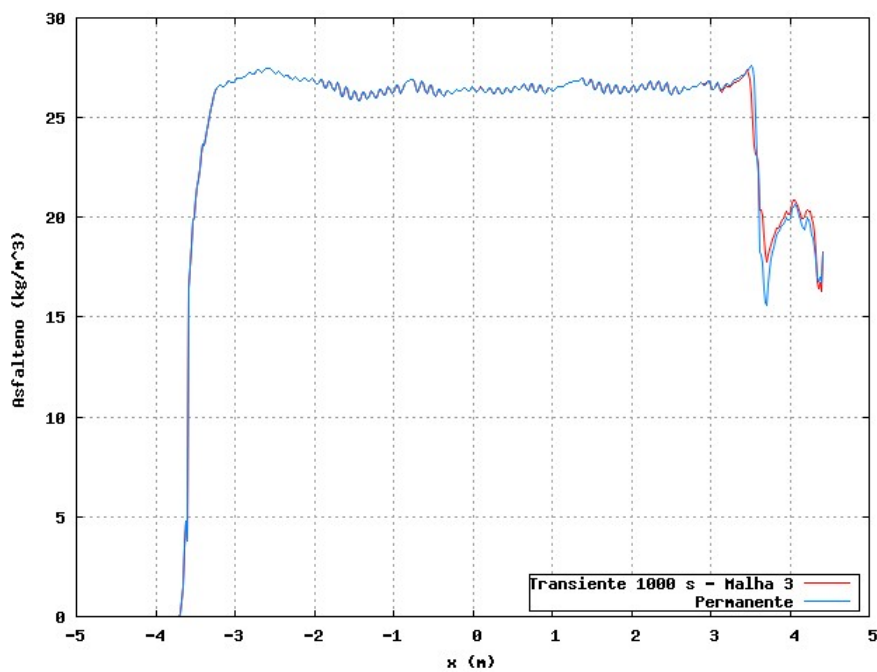


Figura 4.11: Gráfico asfalto *versus* comprimento para as simulações transiente em 1000 s e permanente para a malha 3.

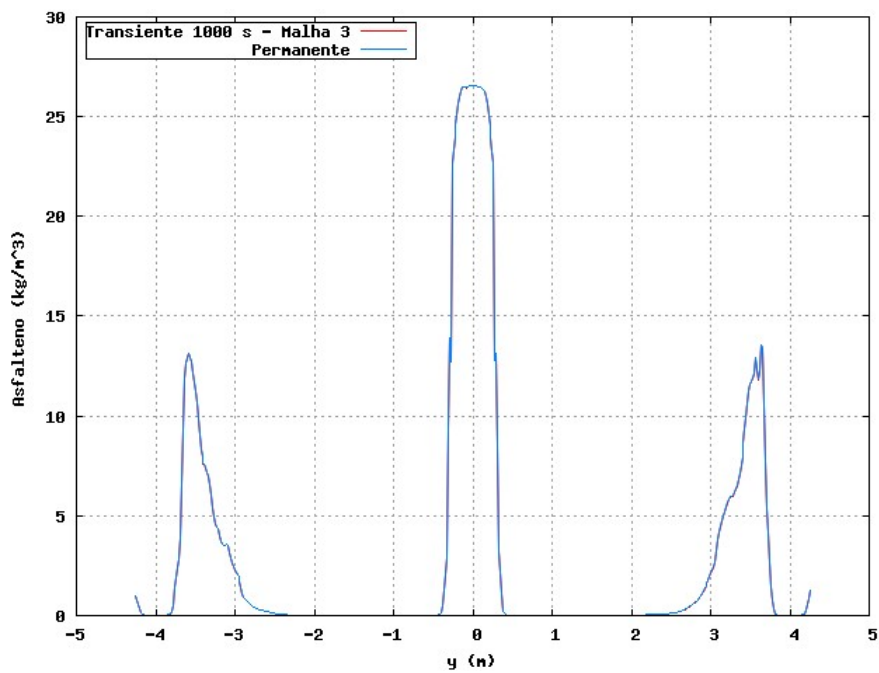


Figura 4.12: Gráfico asfalto *versus* comprimento para as simulações transiente em 1000 s e permanente para a malha 3.

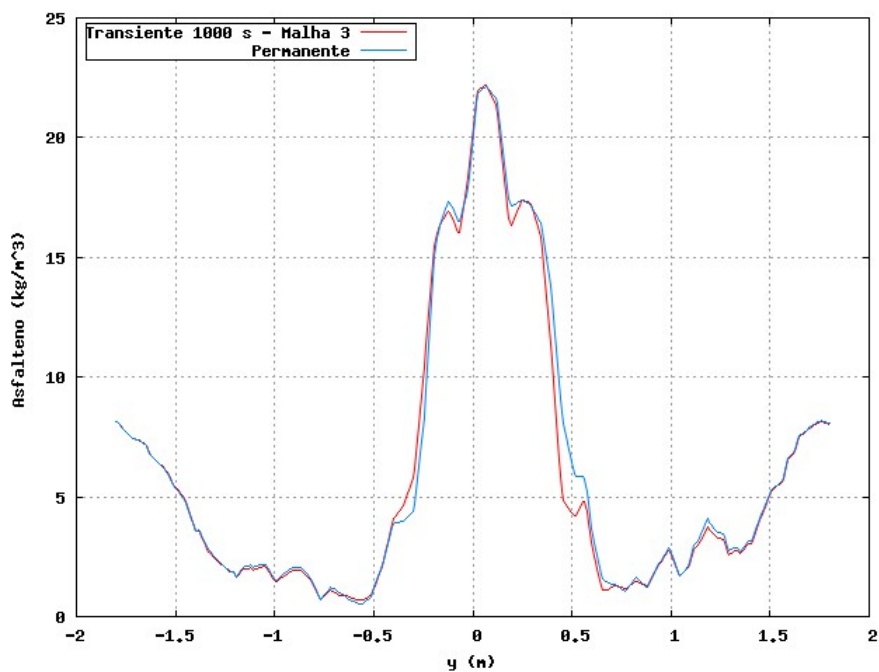


Figura 4.13: Gráfico asfalto *versus* comprimento para as simulações transiente em 1000 s e permanente para a malha 3.

4.1.3 Comparação dos resultados entre malhas de diferentes tamanhos

A verificação do teste de sensibilidade ao tamanho da malha foi feito para a variável coque. As mesmas linhas traçadas na figura 4.4 foram utilizadas para comparação. Os gráficos 4.14, 4.15, 4.16 e 4.17 foram plotados com os resultados das simulações transientes no tempo de 1000 s. Pode-se notar que o perfil da variável coque é o mesmo nas três malhas, porém não foi alcançada uma perfeita convergência em malha. Ou seja, os resultados numéricos das malhas são diferentes, embora sejam similares. O ideal seria refinar a malha até que seu resultado numérico fosse igual ao da malha anterior menos refinada. Porém, o presente escoamento tende a apresentar novos detalhes de pequena escala a cada refino de malha, sem que isto interfira no comportamento macroscópico do escoamento.

Devido ao diâmetro do coletor ser relativamente grande, seria necessário um tempo de CPU muito grande para simular uma malha mais refinada. No presente trabalho foi feita a opção de simular o problema com a geometria em tamanho real, sem forçar simetrias inexistentes para que a análise da termofluidodinâmica fosse mais próxima da realidade física do problema. O custo desta decisão foram malhas numéricas com grande números de nós ocasionando maior tempo de CPU. Porém, como o objetivo é comparar pequenas modificações no coletor, resolveu-se adotar o nível da malha 3 (mais refinada) para a análise de resultados e para comparações com novas concepções de coletor visando a minimização da formação de coque.

Ressalta-se que foram feitas também comparações entre malhas para as variáveis distribuição de coque e taxa de formação de coque *versus* comprimento. Observou-se o mesmo comportamento obtido para a variável coque.

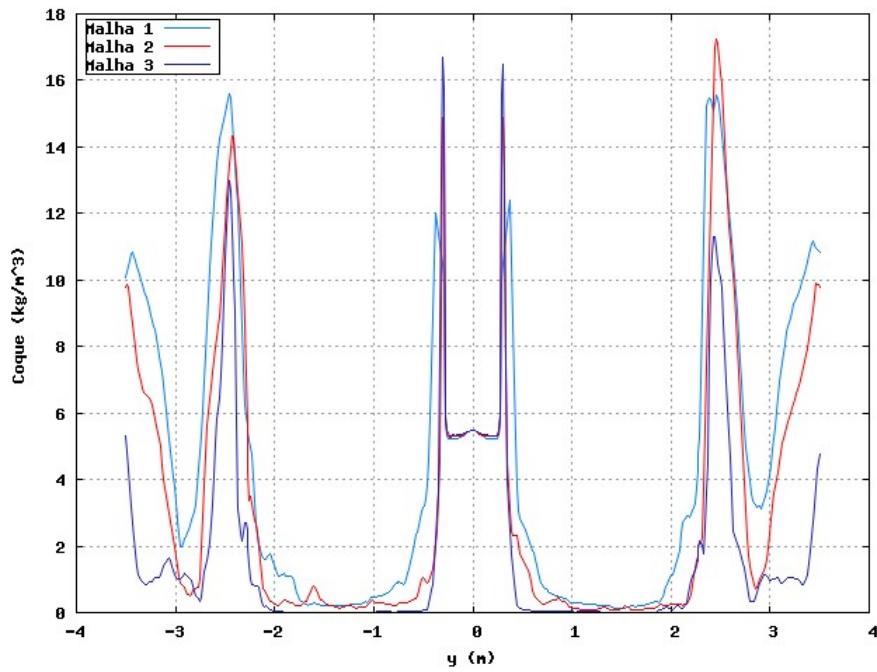


Figura 4.14: Gráfico coque *versus* comprimento das simulações transientes das malhas 1, 2 e 3 em 1000 s.

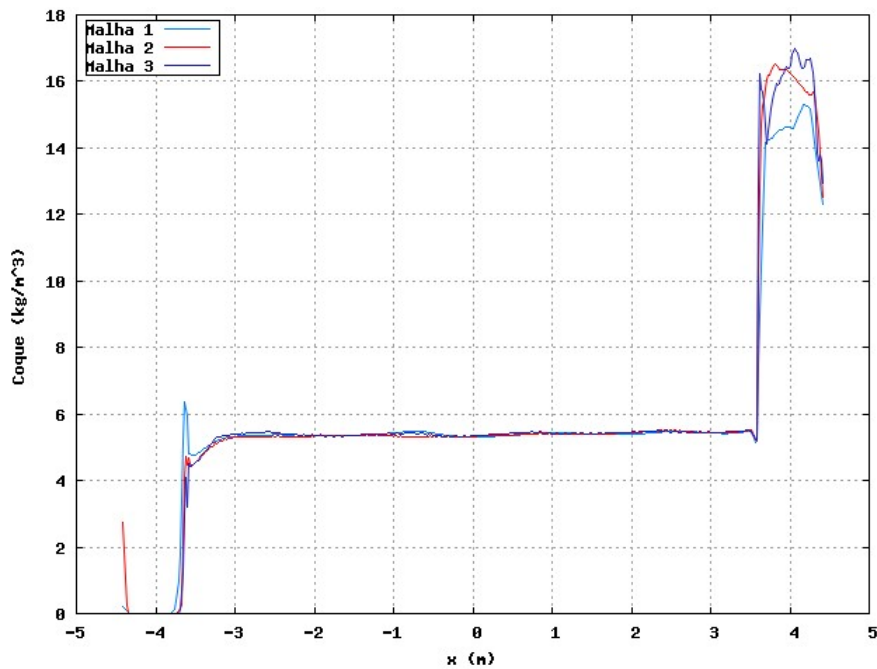


Figura 4.15: Gráfico coque *versus* comprimento das simulações transientes das malhas 1, 2 e 3 em 1000 s.

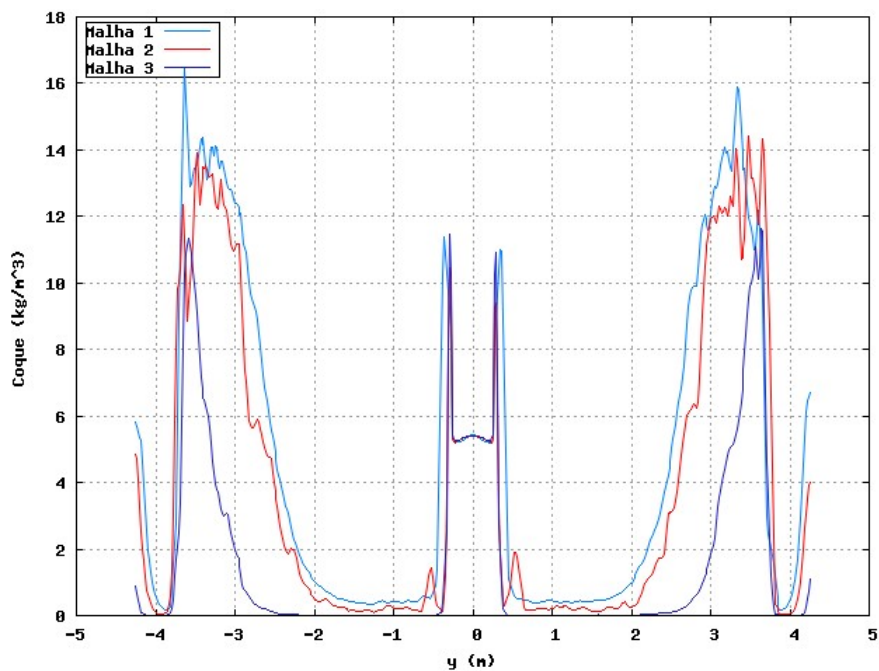


Figura 4.16: Gráfico coque *versus* comprimento das simulações transientes das malhas 1, 2 e 3 em 1000 s.

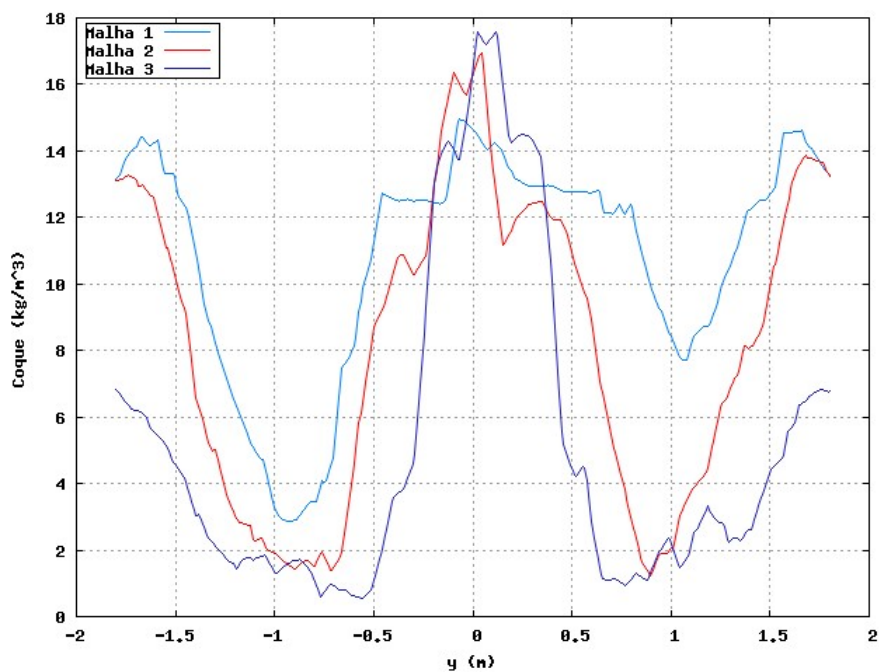


Figura 4.17: Gráfico coque *versus* comprimento das simulações transientes das malhas 1, 2 e 3 em 1000 s.

4.2 Análise de resultados do coletor de gásóleo residual

4.2.1 Resolução da camada limite

A resolução da camada limite é a questão principal para uma estimativa acurada da formação de coque. Pois é na camada limite que ocorre os maiores gradientes de temperatura e velocidade, conforme descrito na seção 2.3.4. Como já dito, a acurácia da simulação da camada limite depende da formulação do modelo de turbulência para resolver as equações da subcamada viscosa e do valor de y^+ . É necessário também que haja pelo menos 15 nós dentro da camada limite para integração das equações. A utilização de malhas grosseiras para resolver problemas de transferência de calor pode resultar em valores incorretos da tensão cisalhante e do coeficiente de calor da parede.

Na figura 4.18 pode-se observar a boa resolução da malha 3 próxima à parede mostrando que o gradiente de temperatura está sendo capturado dentro das camadas de prismas.

4.2.2 Análise da termofluidodinâmica do coletor de gásóleo residual

Neste trabalho a formação de coque é analisada apenas considerando o local onde o coque se origina, ou seja, não é considerado o arraste de coque, sendo ele apenas acumulado no domínio. Também, como já dito, não está sendo considerado o tempo de indução para formação de coque.

Observa-se pela figura 4.19 que as maiores regiões de concentrações de coque estão: 1) na extremidade do coletor do lado do bocal, 2) entre as chaminés e a calha, 3) nas faces das chaminés de frente à lateral do coletor, principalmente, nas duas chaminés laterais do lado do bocal, 4) na região central e nas extremidades da calha

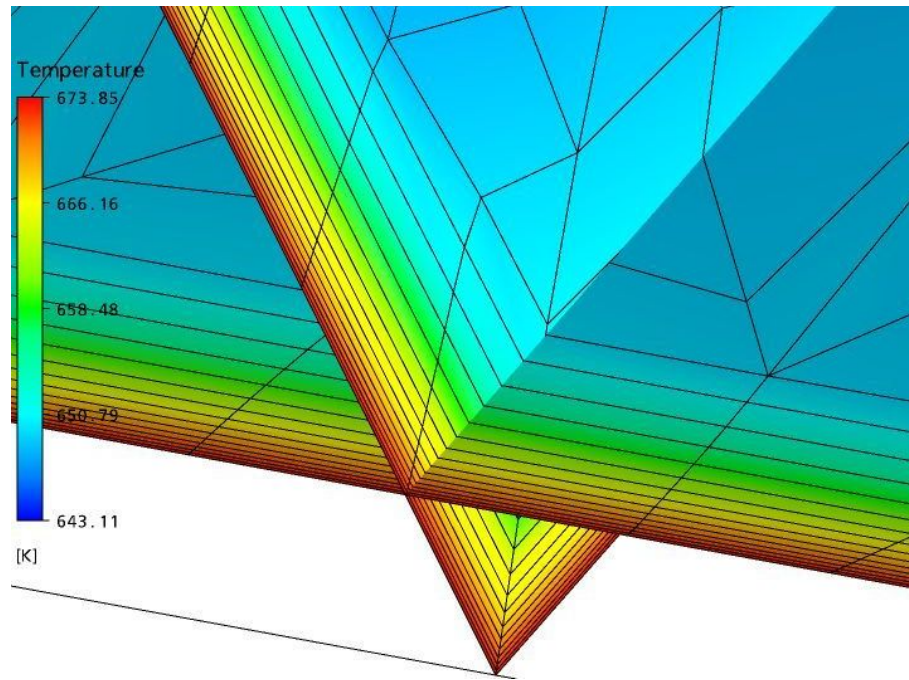


Figura 4.18: Resolução da malha 3 da simulação transiente em 1000 s.

e 5) na face do bocal.

Analisando a fluidodinâmica do coletor pela figura 4.20, nota-se que há várias zonas de recirculação no coletor provocado pelo choque do fluido com as chaminés. Porém, estas zonas de recirculação não provocam a formação de coque no coletor como pode ser observado. Ou seja, o fluido não fica aprisionado e cozinhando nas zonas de recirculação. Melhor dizendo, não há pontos de estagnação do fluido. É o aumento do coeficiente de transferência de calor entre a parede e o fluido que resulta no aumento da temperatura que leva a uma maior formação de coque. Isto pode ser visto na figura 4.21, que mostra o fluxo térmico nas paredes. Regiões onde o impacto de correntes fluidas entre si e com a parede são as que têm maior fluxo térmico.

O valor coeficiente de transferência de calor, h_c , depende de vários fatores: das propriedades físicas do fluido, das dimensões da geometria, da velocidade que o fluido passa pela superfície e do potencial de temperatura. Neste problema, o aumento do coeficiente de transferência de calor é devido principalmente ao aumento da velocidade do escoamento em direção ao bocal de saída e devido ao impacto de correntes de fluido entre si e as chaminés. Na figura 4.22 pode-se observar o aumento

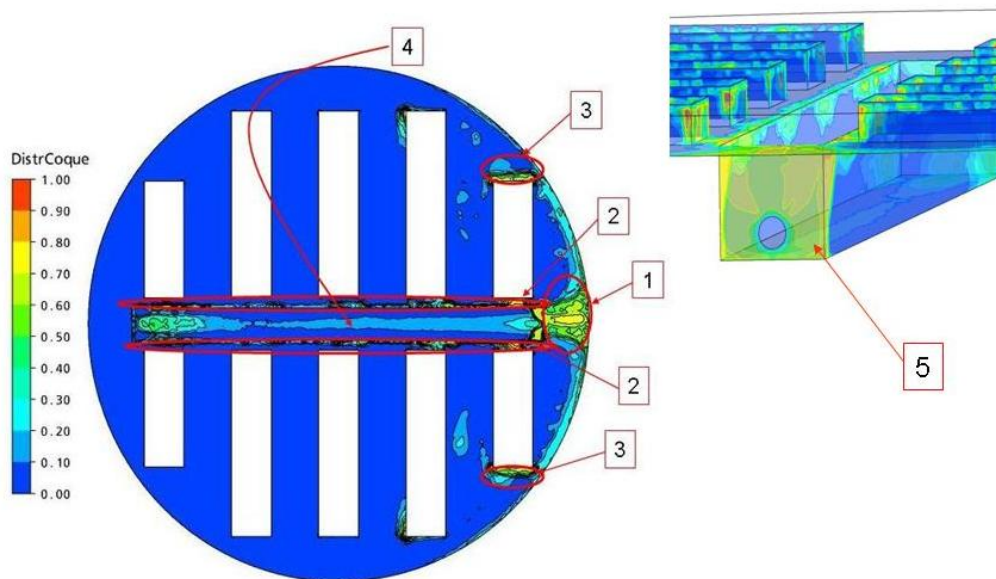


Figura 4.19: Distribuição de coque na superfície da parede aquecida da simulação transiente em 1000 s para a malha 3. Principais regiões: 1) extremidade do coletor do lado do bocal, 2) entre as chaminés e a calha, 3) nas faces das chaminés laterais, 4) na calha e 5) na face do bocal.

da velocidade do fluido na direção de saída do escoamento.

A partir da análise da simulação transiente do coletor pode-se identificar que a principal causa para a formação de coque é a presença de pontos quentes, regiões de escoamento de grande fluxo de líquido, com velocidades altas junto às superfícies, que diminuem a espessura da camada limite, aumentando a tensão cisalhante da parede e o coeficiente de transferência de calor.

Visando a alterações do coletor que minimizem a formação de coque, a custos economicamente aceitáveis, três modificações foram propostas e simuladas para comparação com o coletor original. Os casos de estudo são:

- **Caso A:** adição de mais um bocal de saída no lado oposto ao bocal original.
- **Caso B:** mudar a posição das chaminés laterais que ficam do lado do bocal.
- **Caso C:** distribuir o líquido no coletor na região central.

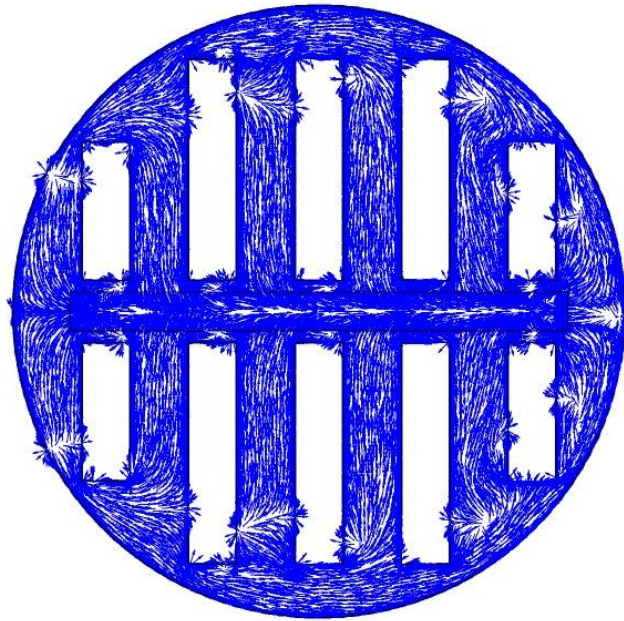


Figura 4.20: Vetores de velocidade da simulação transiente no instante de tempo de 1000 s para a malha 3, no plano xy em $z=0,01$ m.

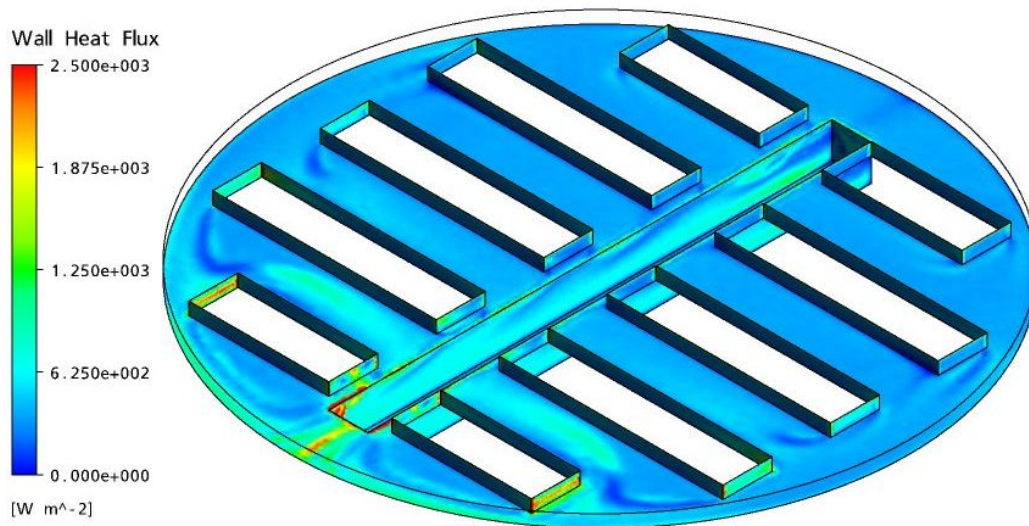


Figura 4.21: Fluxo de calor da superfície da parede aquecida da simulação transiente no instante de tempo de 1000 s para a malha 3.

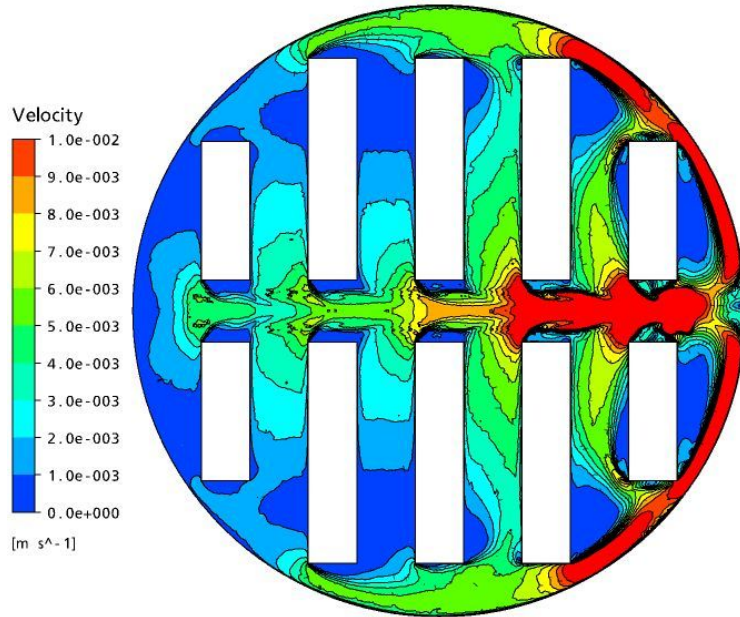


Figura 4.22: Perfil de velocidade da simulação transiente no instante de tempo de 1000 s para a malha 3, no plano xy em $z=0,01$ m.

As malhas não-estruturada híbrida com refinamento na parede aquecida de 15 camadas de elementos prismáticos foram geradas com 927866 nós para o caso A, 1286291 nós para o caso B e 1338002 nós para o caso C. Nas tabelas 4.4, 4.5 e 4.6 são mostrados os valores de y^+ para as superfícies de interesse. Estas malhas foram geradas com base nos parâmetros de refinamento da malha 3, ficando com valores de y^+ similares ao da malha 3 do coletor original.

Nestes três casos de estudo com pequenas modificações no coletor original que serão a seguir analisados, foi usada a mesma metodologia numérica aplicada no

Tabela 4.4: Análise de y^+ do coletor com 2 bocais de saída

Superfície	y^+ min	y^+ max	y^+ médio
Lateral	0,0080	0,16	0,068
Chaminés	0,0029	0,30	0,061
Fundo	0,0030	0,51	0,084
Calha	0,0093	0,78	0,14
Face da saída	0,037	5,27	0,66

Tabela 4.5: Análise de y^+ do coletor com chaminés laterais inclinadas

Superfície	y^+ min	y^+ max	y^+ médio
Lateral	0,0026	0,34	0,13
Chaminés	0,0011	0,42	0,061
Fundo	0,0024	0,97	0,086
Calha	0,0065	1,33	0,17
Face da saída	0,092	9,97	1,10

Tabela 4.6: Análise de y^+ do coletor com entrada de líquido centralizada

Superfície	y^+ min	y^+ max	y^+ médio
Lateral	0,0011	0,45	0,15
Chaminés	0,00067	0,55	0,064
Fundo	0,00086	0,99	0,084
Calha	0,0053	1,35	0,17
Face da saída	0,047	9,67	1,11

coletor original vista no capítulo 3. Com exceção que, na parte da estratégia de solução, seção 3.8, a simulação transiente foi rodada por um tempo de apenas 120 s devido à falta de tempo.

Igualmente ao coletor original, as simulações permanentes das três modificações propostas não convergiram com o critério de convergência adotado, mas os resíduos foram diminuindo até oscilar dentro de um patamar, caracterizando um estado quase-estacionário.

Nos gráficos 4.23, 4.24 e 4.25 são mostradas as comparações entre a simulação no modo permanente e a transiente para os casos A, B e C, respectivamente. Foi usada, como exemplo, a linha traçada na figura 4.4, na direção x do escoamento. As verificações feitas para a variável asfalto mostram que o resultado da simulação permanente é similar ao da simulação transiente, sendo as maiores variações nas regiões de pico, de maneira análoga à análise do coletor original.

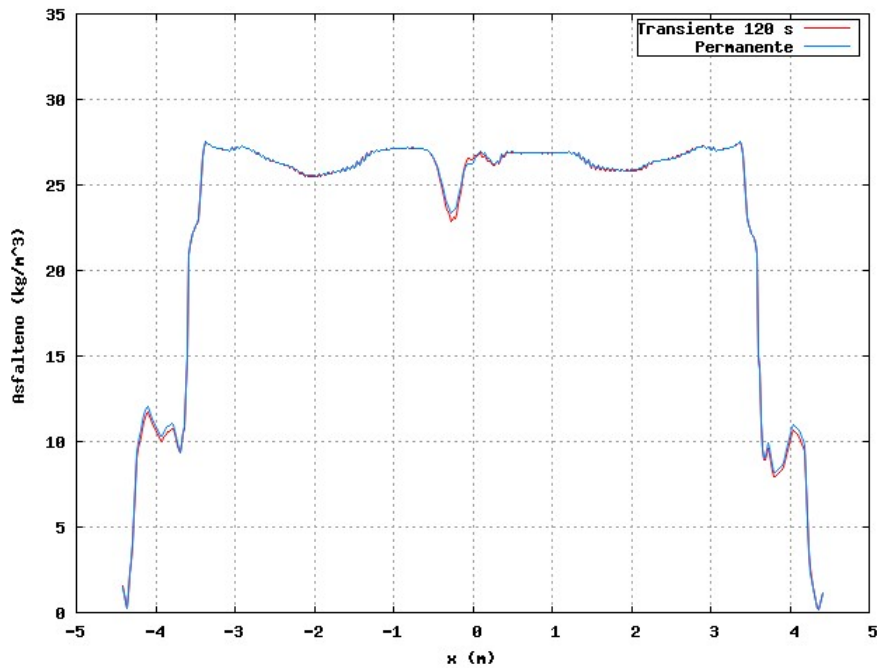


Figura 4.23: Gráfico asfalto *versus* comprimento para as simulações transiente em 120 s e permanente para o caso A.

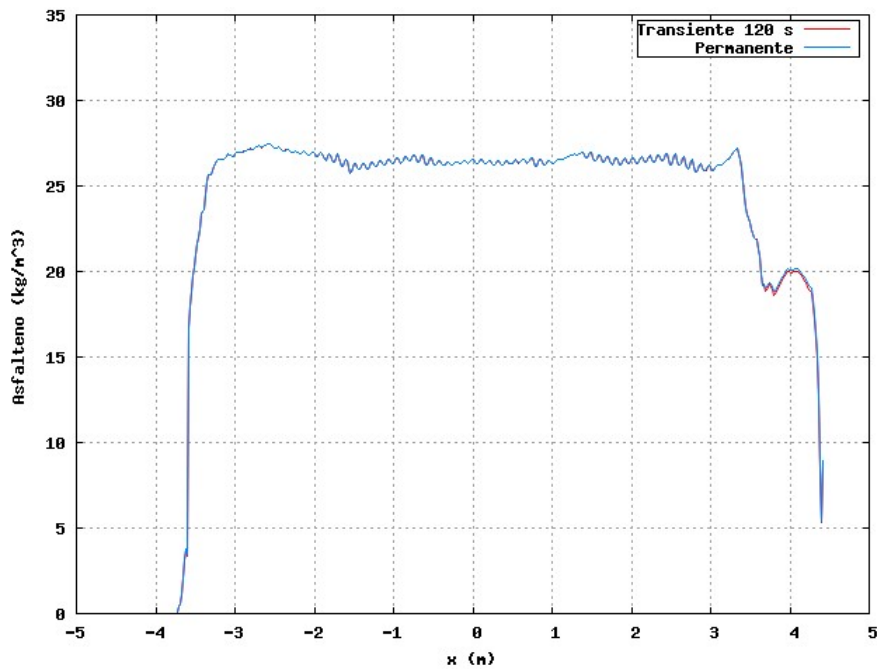


Figura 4.24: Gráfico asfalto *versus* comprimento para as simulações transiente em 120 s e permanente para o caso B.

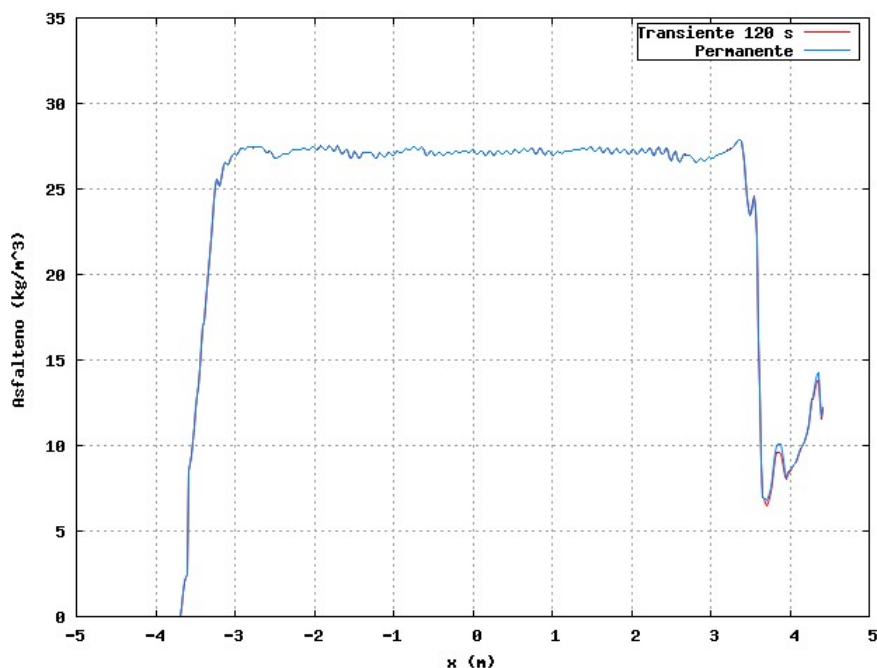


Figura 4.25: Gráfico asfalto *versus* comprimento para as simulações transiente em 120 s e permanente para o caso C.

4.3 Análise do caso A: coletor com 2 bocais de saída

A adição de mais um bocal de saída no lado oposto ao bocal original foi proposto para dividir o escoamento do fluido em direção aos dois bocais de saída e, assim, diminuir a presença de pontos quentes do lado do bocal no coletor original.

Observa-se pela figura 4.26 que a distribuição de coque concentrou-se nas faces das chaminés laterais, na lateral do coletor próximo às chaminés laterais, mas, principalmente, na região da calha. Nota-se que no centro do calha não há formação de coque devido uma grande zona de recirculação que é criada pela divisão do fluxo em direção aos dois bocais de saída. Isto pode ser visto na figura 4.27 que apresenta a fluidodinâmica do coletor através dos vetores de velocidade coloridos pela magnitude de velocidade. Verifica-se também que houve formação de coque devido ao impacto das correntes do fluido entre si no outro lado do coletor onde foi adicionado o bocal.

O campo de velocidade mostrado na figura 4.28 é bastante diferente do apresen-

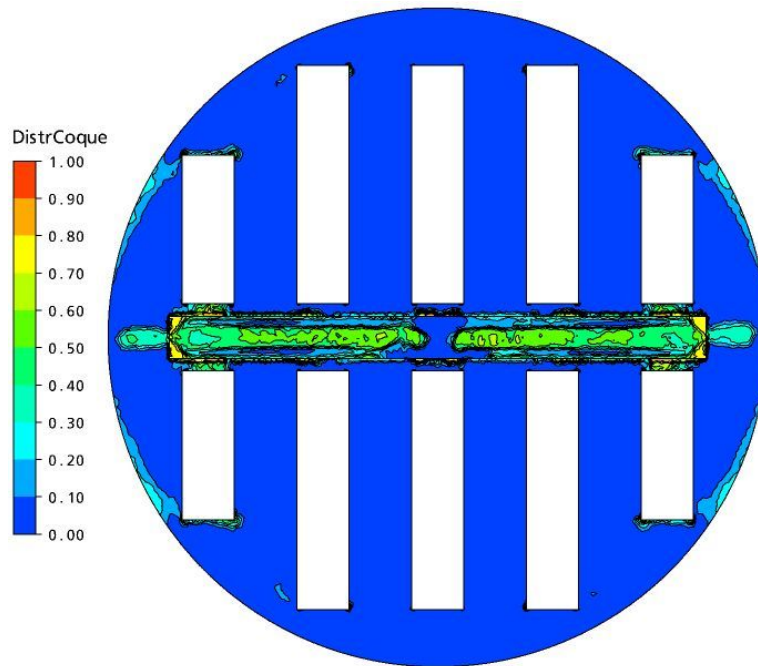


Figura 4.26: Distribuição de coque projetada na superfície da parede aquecida da simulação transiente em 120 s para o caso A.

tado na figura 4.22 para o coletor original. Há regiões de velocidade altas nas duas extremidades do coletor onde estão localizados os bocais de saída. Porém, comparando com o perfil de velocidade do coletor original observa-se que a magnitude de velocidade foi menor na extremidade do coletor do lado do bocal original, ocasionando um menor fluxo de calor nesta região, conforme pode ser visto na figura 4.29. Este foi o objetivo proposto desta modificação de dividir o fluxo de escoamento para diminuir a velocidade do escoamento do lado do bocal original.

4.4 Análise do caso B: coletor com chaminés laterais inclinadas

As chaminés laterais do lado do bocal foram inclinadas em 5° na direção da lateral do coletor. O escoamento do fluido em direção ao bocal de saída, faz com que haja um grande fluxo de líquido indo de encontro a estas chaminés laterais. Os choques destes fluxos com as laterais destas chaminés acarretam o aumento do coeficiente

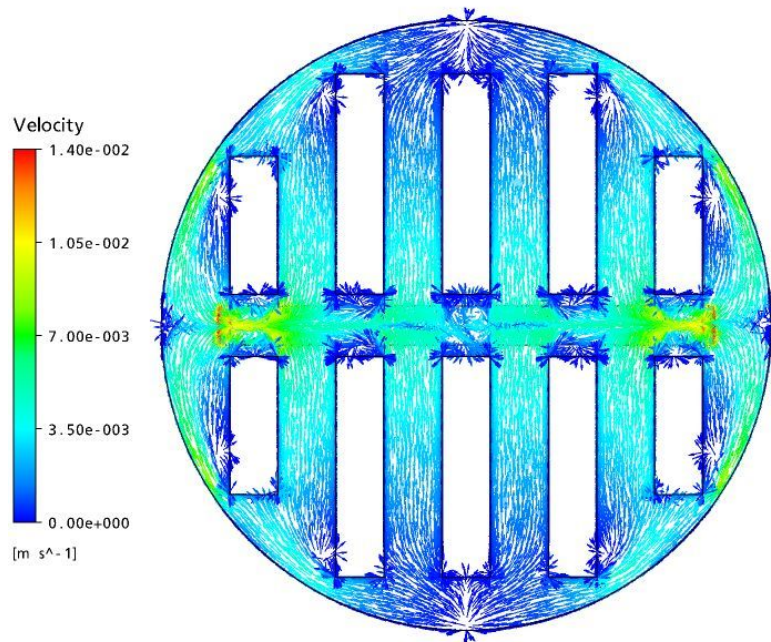


Figura 4.27: Vetores de velocidade da simulação transiente em 120 s para o caso A, no plano xy em $z=0,01$ m.

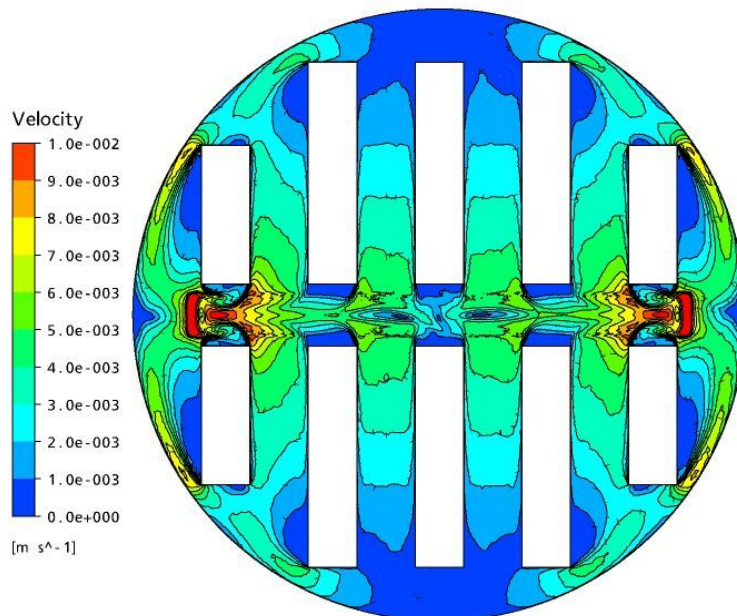


Figura 4.28: Perfil de velocidade da simulação transiente em 120 s para o caso A, no plano xy em $z=0,01$ m.

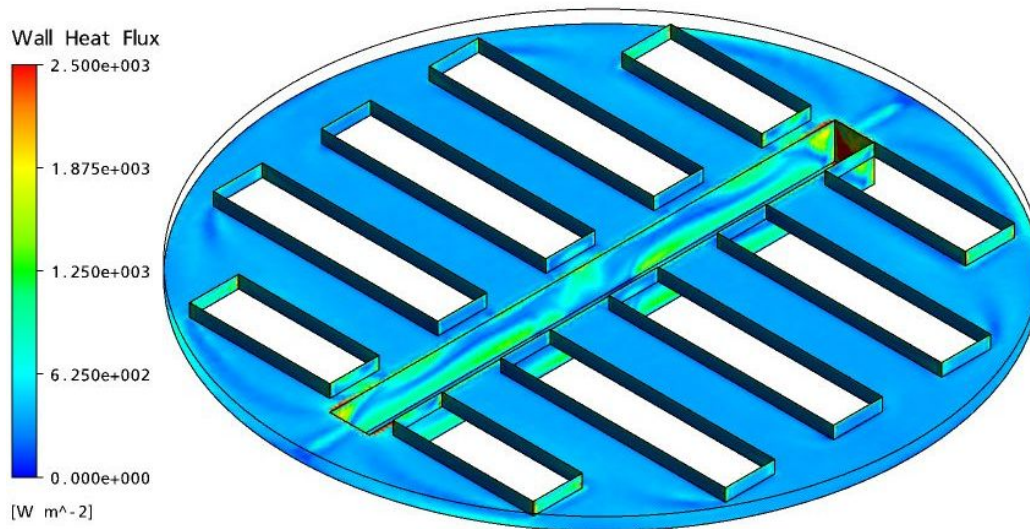


Figura 4.29: Fluxo de calor da simulação transiente em 120 s para o caso A.

de transferência de calor e, conseqüentemente, a formação de coque nas faces destas chaminés. O objetivo desta modificação é posicionar estas chaminés laterais na mesma direção do escoamento e, assim, diminuir o choque do fluxo de líquido com estas chaminés laterais.

Na figura 4.30, verifica-se que a inclinação das chaminés laterais diminuiu a formação de coque nas faces das laterais das chaminés, como esperado. Através da figura 4.31 que mostra o fluxo de calor da superfície para o fluido, observa-se que ocorreu um aumento do fluxo de calor somente nas quinas das faces das chaminés laterais, diferentemente do coletor original, figura 4.21, em que houve um aumento em toda a face das chaminés laterais.

Houve também uma menor formação de coque na lateral do coletor que se encontra do lado do bocal e também no centro onde as correntes do fluido chocam-se entre si para escoar pela calha. A nova posição das chaminés laterais diminuiu a velocidade do fluido entre as laterais das chaminés laterais e aumentou a mesma na região entre a lateral da chaminé do lado do bocal e a parede cilíndrica, como pode ser visto na figura 4.32.

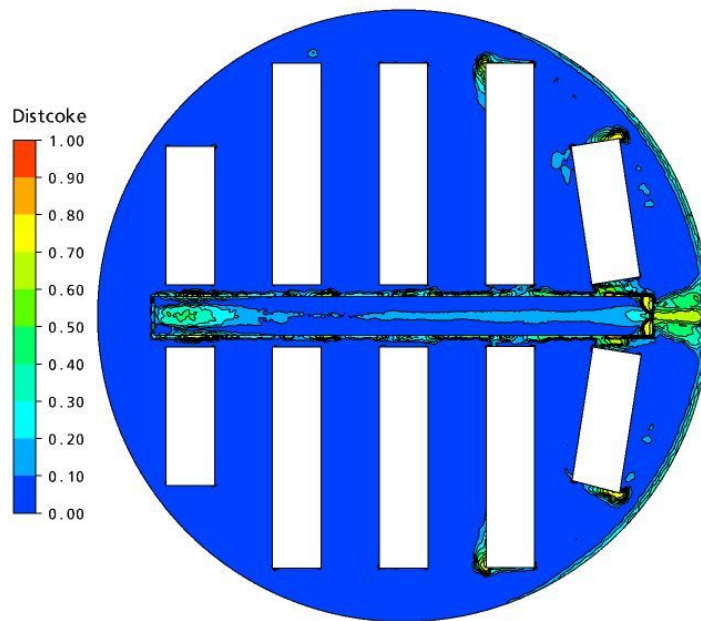


Figura 4.30: Distribuição de coque projetada na superfície da parede aquecida da simulação transiente em 120 s para o caso B.

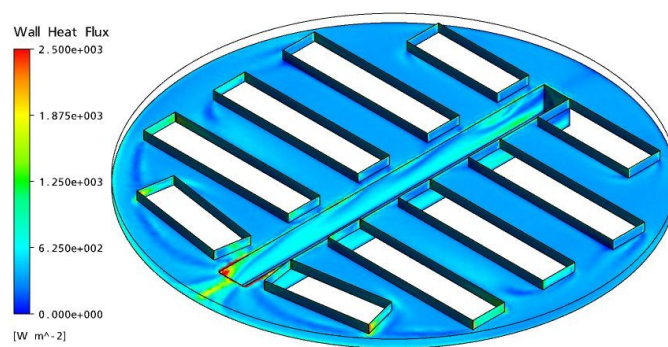


Figura 4.31: Fluxo de calor da simulação transiente em 120 s para o caso B.

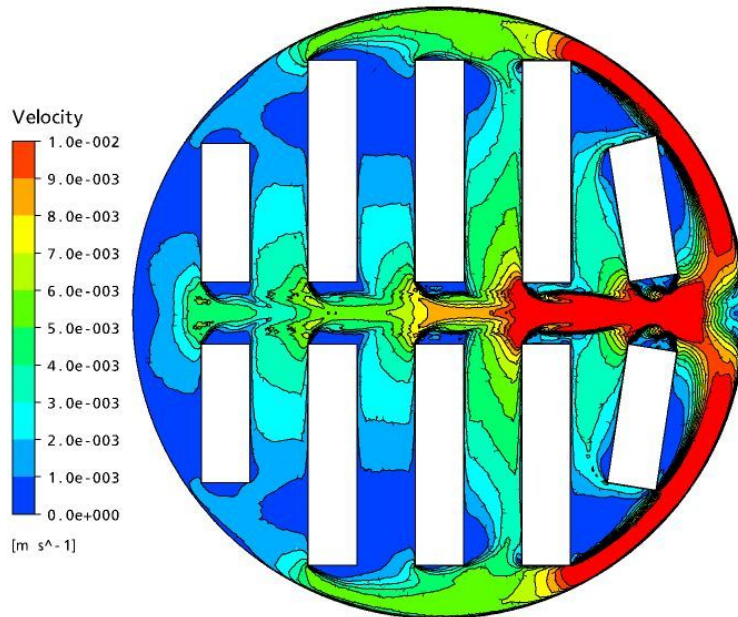


Figura 4.32: Perfil de velocidade da simulação transiente em 120 s para o caso B, no plano xy em $z=0,01$ m.

4.5 Análise do caso C: coletor com entrada de líquido centralizada

A fim de diminuir o escoamento do fluido pela lateral do coletor e evitar o choque com as quinas das chaminés foi proposto uma entrada de líquido mais centralizada. Na figura 4.33 é mostrada a distribuição de coque. Percebe-se que, para este caso, a distribuição de coque mostrou-se bastante assimétrica na região entre a calha e a lateral do coletor do lado do bocal, com menor formação de coque. Houve também uma diminuição da formação de coque na região da calha do lado oposto ao bocal e um aumento nas duas faces das chaminés laterais do lado do bocal e na região entre estas chaminés e as chaminés vizinhas.

Na figura 4.34 pode ser visto que o perfil de velocidade também é assimétrico. Embora o perfil de velocidade seja parecido ao do coletor original, observa-se que a região do lado oposto do bocal até o meio do coletor ocorreu uma diminuição da magnitude de velocidade. Na figura 4.35, nota-se que semelhante ao caso B, houve uma diminuição do fluxo de calor na face das chaminés laterais próxima à superfície

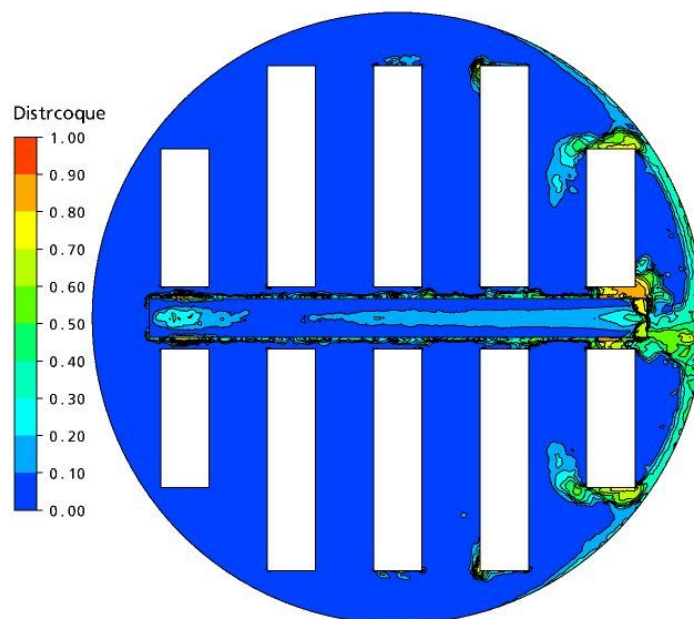


Figura 4.33: Distribuição de coque projetada na superfície da parede aquecida da simulação transiente em 120 s para o caso C.

da lateral do coletor. Porém, houve um aumento na quina da chaminé lateral de frente à calha.

4.6 Análise da taxa de formação de coque para os casos de estudo

Objetivando quantificar a formação de coque e comparar com o coletor original, a variável taxa de formação de coque foi integrada no volume do domínio nos intervalos de tempo de 45 s, 60 s, 90 s e 120 s para os três casos e também para o coletor original. O gráfico 4.36 mostra que a modificação proposta no caso A não resultou em diminuição da taxa de formação de coque. Para os casos B e C, a taxa de formação de coque diminuiu em 0,3 % e 1,3 % em relação ao coletor original, respectivamente.

As figuras 4.37, 4.38, 4.39 e 4.40 mostram a localização da taxa de formação de coque para valores maiores de $0,015 \text{ kg/m}^3\text{s}$. Os valores médios da taxa de coque para os casos A, B e C e para o coletor original são $0,0058 \text{ kg/m}^3\text{s}$, $0,0051 \text{ kg/m}^3\text{s}$,

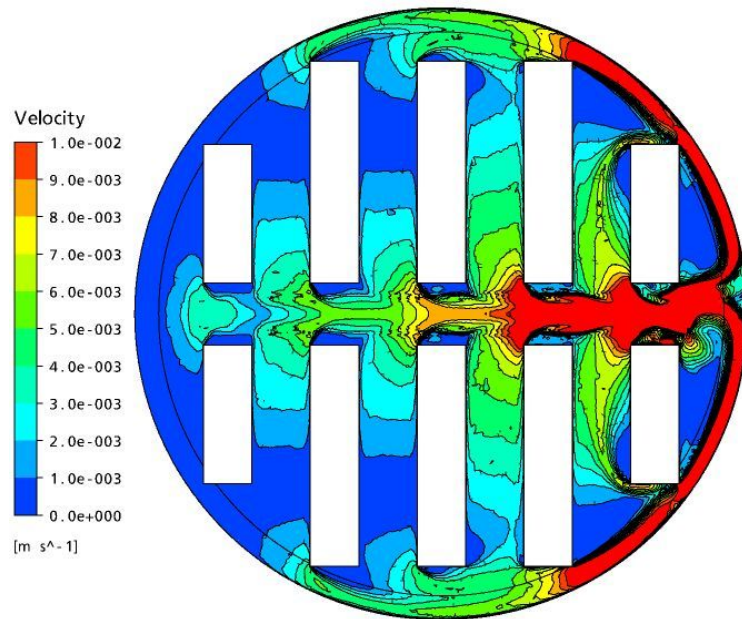


Figura 4.34: Perfil de velocidade da simulação transiente em 120 s para o caso C, no plano xy em $z=0,01$ m.

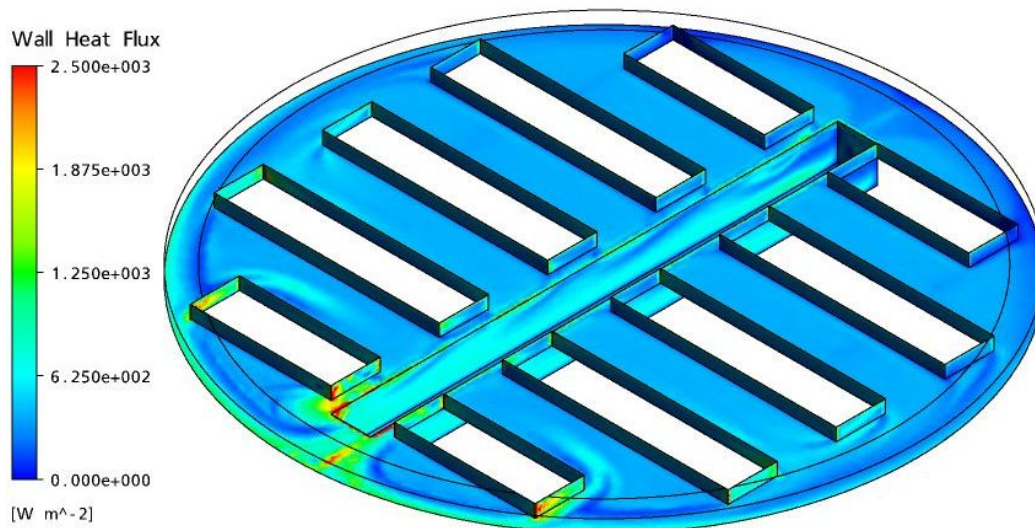


Figura 4.35: Fluxo de calor da simulação transiente em 120 s para o caso C.

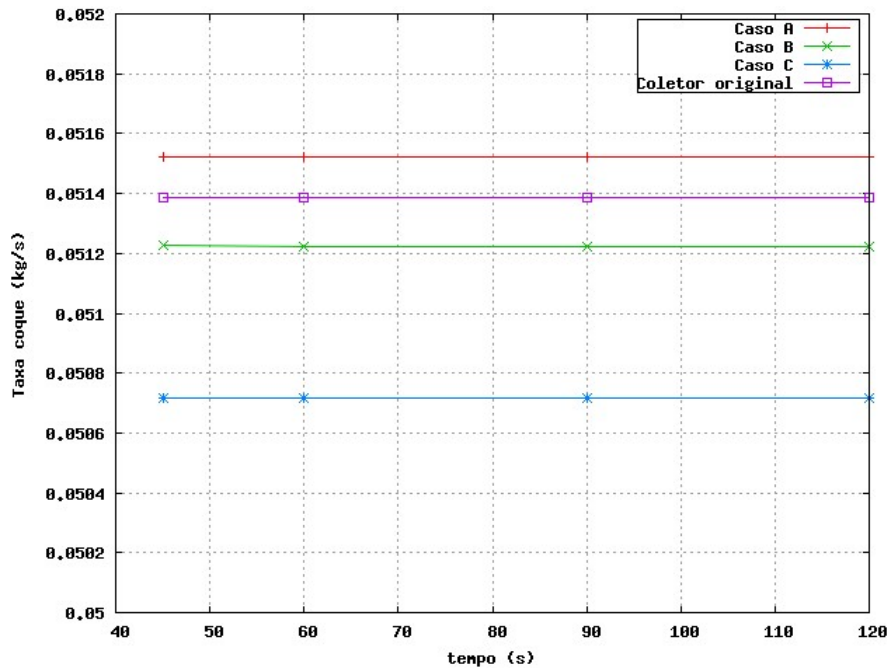


Figura 4.36: Gráfico da taxa de coque em diferentes instantes de tempo para as simulações transientes dos casos de estudo e para a simulação transiente da malha 3 do coletor original

0,0049 kg/m³s e 0,0052 kg/m³s, respectivamente. Observa-se que, em todas as simulações, a face de saída concentra uma alta taxa de formação de coque. As faces das chaminés laterais do lado do bocal também são regiões de alta concentração de coque. Verifica-se que, nos casos propostos, a região de impacto de correntes do fluido entre si não é mais uma região de alta taxa de formação de coque.

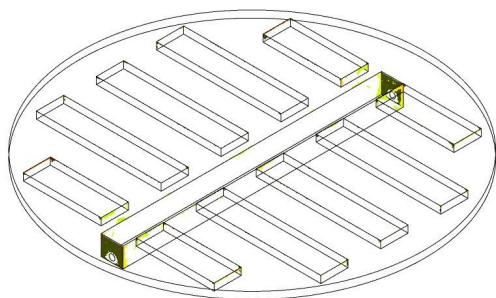


Figura 4.37: Taxa de formação de coque para valores maiores de $0,015 \text{ kg/m}^3\text{s}$ da simulação transiente em 120 s para o caso A.

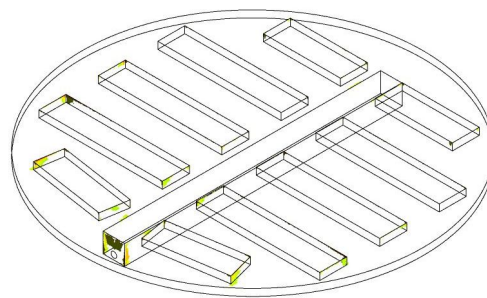


Figura 4.38: Taxa de formação de coque para valores maiores de $0,015 \text{ kg/m}^3\text{s}$ da simulação transiente em 120 s para o caso B.

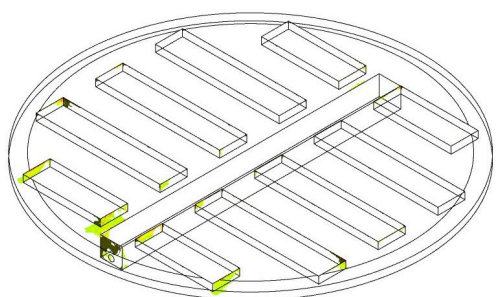


Figura 4.39: Taxa de formação de coque para valores maiores de $0,015 \text{ kg/m}^3\text{s}$ da simulação transiente em 120 s para o caso C.

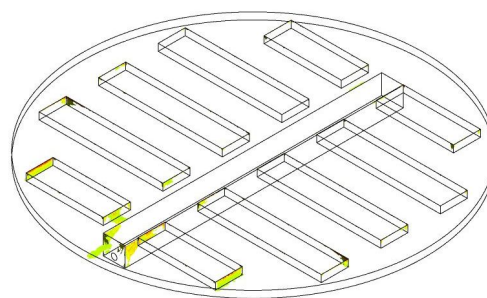


Figura 4.40: Taxa de formação de coque para valores maiores de $0,015 \text{ kg/m}^3\text{s}$ da simulação transiente em 120 s para a malha 3 do coletor original.

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões

O objetivo deste trabalho foi o estudo do comportamento térmico do coletor de líquido de gasóleo residual da fracionadora à vácuo da unidade de destilação visando à análise de formação de coque, através do uso da técnica de CFD. Um modelo cinético simplificado de coque da literatura foi implementado via CCL no programa da ANSYS CFX-11.0 para análise da formação de coque.

Na formulação do problema foi usado o modelo de turbulência SST (*Shear Stress Transport*) junto com refinamento na superfície de 15 camadas de prismas para determinação com acurácia da transferência de calor e dos perfis de temperatura e de velocidade na região próxima à parede.

A simulação transiente foi precedida por uma simulação no modo permanente. A dinâmica do escoamento apresentou característica quase-estacionária. A simulação transiente foi rodada por aproximadamente um tempo de residência (1000 s). Comparações das simulações transientes em diferentes instantes de tempo mostraram que os resultados são similares. Assim, o estudo da termofluidodinâmica deste coletor líquido pode ser realizado de maneira bastante rápida, tornando a técnica de CFD uma ferramenta poderosa para estudos com pequenas modificações na geometria e/ou das condições operacionais.

A análise da termofluidodinâmica do coletor mostrou que a formação de coque

ocorre pela existência de pontos quentes que se originam no coletor pelo aumento da velocidade do fluido, pelo choque do fluido com as chaminés, com a parede de saída e, também, em regiões próximas às de forte impacto das correntes de fluido entre si. A causa do aumento da velocidade é a aceleração do escoamento ao se aproximar do bocal de saída. Estes pontos quentes estão localizados principalmente na extremidade do coletor do lado do bocal, nas faces das chaminés mais próximas do bocal de saída, e particularmente, nas faces das chaminés laterais, na calha e na região entre a calha e as chaminés.

Há formação de várias zonas de recirculação em diferentes lugares do coletor. No entanto, estas zonas de recirculação não criam pontos estagnantes que propiciariam a formação de coque pelo aumento do tempo de residência do fluido. Neste coletor, portanto, não há formação de coque devido a pontos estagnantes, mas sim devido a pontos quentes.

Três modificações foram propostas para diminuir a formação de coque. A primeira proposta, chamada de caso A, foi adicionar um bocal de saída do lado oposto ao bocal original a fim de dividir o fluxo e diminuir os pontos quentes formados do lado do bocal original. A análise deste caso mostrou que o forte impacto das correntes de fluido entre si do lado do bocal original diminuiu, embora tenha se formado uma zona de impacto de correntes do lado oposto. Neste problema, o choque do fluido com as chaminés também foi reduzido. Isto provocou a diminuição de formação de coque na superfície do coletor, mas aumentou a formação de coque na calha, principalmente, nas duas faces onde estão localizados os bocais. Neste caso, a taxa de formação de coque foi ligeiramente maior do que no coletor original.

Outra proposta analisada, chamada de caso B, foi inclinar as chaminés laterais que ficam do lado do bocal e posicioná-las na direção do fluxo. Nesta proposta, houve diminuição do impacto das correntes de fluido entre si do lado do bocal e também do choque do fluido com as chaminés. A taxa de formação de coque foi 0,3% menor do que no coletor original.

A última modificação, chamada de caso C, foi propor uma entrada de líquido centralizada e, com isso, diminuir o escoamento pela lateral do coletor. Esta proposta

também diminuiu o impacto das correntes de fluido entre si do lado do bocal, mas aumentou o choque do fluido com as chaminés. Contudo, esta modificação reduziu a taxa de formação de coque em 1,3% em relação ao coletor original.

Deve ser comentado que o aumento da taxa de coque na superfície em torno do bocal de saída nos casos propostos pode ter mascarado os resultados na comparação com o coletor original.

Neste trabalho, a técnica de CFD mostrou-se uma ferramenta sensível e, portanto, apropriada, para análise da taxa de formação para pequenas modificações na geometria do coletor e nas condições de operação. Este estudo comprovou a eficácia e utilidade do uso da técnica de CFD para projeto e análise de desempenho de equipamentos em aplicações industriais.

Para os próximos estudos sugere-se complementar este trabalho abrangendo no domínio de simulação a área entre o coletor e o distribuidor de líquido, a fim de considerar a influência da fase vapor na turbulência e na distribuição de líquido no coletor.

Uma complementação que deve ser feita para averiguação é analisar a taxa de formação de coque para os casos propostos considerando que haja uma proteção que evite a exposição da face do bocal de saída ao vapor superaquecido.

Seria interessante também testar outros modelos cinéticos mais complexos e outras condições operacionais para verificar as diferenças no comportamento térmico do coletor.

E R R A T A

Página 28:

Modelo de Duas Equações SST (*Shear Stress Transport*)

As equações de transporte são:

$$\rho \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho \overline{v_j} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} = -\overline{\rho v_i' v_j'} \frac{\partial \overline{v_i}}{\partial x_j} - \rho \beta' \kappa \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\kappa 3}} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho \overline{v_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 3}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] - \alpha_3 \frac{\omega}{\kappa} \overline{v_i' v_j'} \frac{\partial \overline{v_i}}{\partial x_j} - \beta_3 \rho \omega^2 \\ &+ (1 - F_1) 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (5.2)$$

onde os coeficientes têm os seguintes valores: $\beta' = 0,09$, $\alpha_1 = 5/9$, $\beta_1 = 0,075$, $\sigma_{\kappa 1} = 2$, $\sigma_{\omega 1} = 2$, $\alpha_2 = 0,44$, $\beta_2 = 0,0828$, $\sigma_{\kappa 2} = 1$ e $\sigma_{\omega 2} = 1/0,856$.

Página 62:

Ressalta-se que foram feitas também comparações em diferentes instantes de tempo para as variáveis *coque* e taxa de formação de coque. Observou-se o mesmo comportamento obtido para variável distribuição de coque. Este estudo também foi feito para as malhas 1 e 2, com conclusões similares às obtidas para a malha 3.

Referências Bibliográficas

- [1] BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N., “Fenômenos de transporte”, *LTC*, 2004.
- [2] SCHLICHTING, H., GERSTEN, K., “Boundary Layer Theory”, *Springer*, 2000.
- [3] GONÇALVES, M. L. A., “Estudo de Comportamento Térmico de Asfaltenos de um Petróleo Brasileiro”, *Tese de Doutorado*, 2002.
- [4] WAINTRAUB, S., COUTINHO, R. C. C., ESPÓSITO, R. O., “Preflash drum when processing heavy oils: paradox or reality”, *A.I.Ch.E. Journal*, pp. 73–78, 2007.
- [5] WHITE, S., BARLETTA, T., “Refiners processing heavy crudes can experience crude distillation problems”, *Oil & Gas Journal*, v. 47, pp. 46–52, 2002.
- [6] WEHRLI, M., SCHAEFFER, P., KOOLJMAN, H., “Investigation of the liquid deposition of various steam distribution systems in separation columns”, *Chemie Ingenieur Technik*, 2008.
- [7] WAINTRAUB, S., TORRES, G. A. S., SERPA, A. L. W., et al., “Removing packings from heat transfer sections of vacuum towers”, *A.I.Ch.E. Journal*, pp. 73–78, 2005.
- [8] GOLDEN, S. W., VILLALANTI, D. C., MARTIN, G. R., “Feed characterization and deepcut vacuum columns: simulation, and design”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. Paper 47a, pp. 1–13, 1994.
- [9] GOLDEN, S. W., BARLETTA, T., “Designing vacuum units”, *PTQ*, v. Q2, pp. 105–110, 2006.

- [10] ZEIDAN, A., “Consider a practical approach to vacuum unit revamps”, *Hydrocarbon Processing*, pp. 73–78, 2006.
- [11] PILLING, M., PROHORENKO, N., SZYMANKI, A., “Increasing vacuum tower performance”, *PTQ*, pp. 127–133, 2004.
- [12] SPANGLER, R., HANKE, T. A., VARRAVETO, D., et al., “Design of a crude/vacuum unit revamp for refinery flexibility”, *NPRA*, v. AM-06-14, pp. 1–22, 2006.
- [13] RAHMANI, S., MCAFFREY, W., GRAY, M. R., “Coking kinetics of Asphaltenes as a function of chemical Structure”, *Energy & Fuels*, v. 17, pp. 1048–1056, 2003.
- [14] SPEIGHT, J. G., “Petroleum Asphaltenes – Part 2 – The effect of asphaltenes and resin constituents on recovery and refining processes”, *Oil & Gas Science and Technology*, v. 59, pp. 479–488, 2004.
- [15] KISTER, H. Z., “What caused tower malfunctions in the last 50 years?” *Trans IChemE*, v. 81, pp. 5–26, 2003.
- [16] WIEHE, I. A., “A phase-separation kinetic model for coke formation”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 32, pp. 2447–2454, 1993.
- [17] SPEIGHT, J. G., LONG, R. B., TROWBRIDGE, T. D., “Factors influencing the separation of asphaltenes from heavy petroleum feedstocks”, *Fuel*, v. 63, pp. 616–620, 1984.
- [18] SCHABRON, J. F., PAULI, A. T., JR, J. F. R., et al., “Predicting coke formation tendencies”, *Fuel*, v. 80, pp. 1435–1446, 2001.
- [19] LEVINTER, M. E., MEDVEDEVA, M. I., PANCHENKOV, G. M., et al., “Mechanism of coke formation in the cracking of component groups in petroleum residues”, *Khim. Tekhol. Topl. Masel.*, v. 9, pp. 31–35, 1966.
- [20] MARGARIL, R. Z., AKSENORA, E. I., “Study of the mechanism of coke formation in the cracking of petroleum resins”, *Int. Chem. Eng.*, v. 8, pp. 727–729, 1968.

- [21] SAVAGE, P. E., KLEIN, M. T., KUKES, S. G., “Asphaltenes reaction pathways. Thermolysis”, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 24, pp. 1169–1174, 1985.
- [22] SILVA, L. F., DA CUNHA LAGE, P. L., FONTES, C. E., “Introdução à Fluidodinâmica Computacional”, *apostila*, 2005.
- [23] PALADINO, E. E., RIBEIRO, D., REIS, M. V., et al., “A CFD model for the washing zone in coker fractionators”, *A.I.Ch.E. Journal*, 2005.
- [24] SOUZA, B. A., MATOS, E. M., GUIRARDELLO, R., et al., “Predicting coke formation due to thermal cracking inside tubes of petrochemical fired heaters using a fast CFD formulation”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 51, pp. 138–148, 2006.
- [25] KÖSEOGLU, R. ., PHILLIPS, C. R., “Hydrocracking of Athabasca bitumen. Kinetics of formation of gases”, *Fuel*, v. 67, pp. 552–556, 1988.
- [26] NOVIA, N., RAY, M. S., PAREEK, V., “Three-dimensional hydrodynamics and reaction kinetics analysis in FCC riser reactors”, *Chemical Product and Process Modeling*, v. 2, 2007.
- [27] ANDERSON, J. D. J., “Computational fluid dynamics: the basics with applications”, *McGraw-Hill, Inc.*, 1995.
- [28] PINTO, J. C., DA CUNHA LAGE, P. L., “Métodos numéricos em problemas de engenharia química”, *e-papers*, 2001.
- [29] MALISKA, C. R., “Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional”, *LTC*, 2004.
- [30] SU, J., “Introdução aos modelos de turbulência”, *apostila COPPE*, 2007.
- [31] WOLFSHTEIN, M., “Some comments on turbulence modelling”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 52, pp. 4103–4107, 2009.
- [32] PRANDTL, L., “Über die ausgebildete turbulenz”, *ZAMM*, v. 5, pp. 136–139, 1925.

- [33] WILCOX, D. C., “Turbulence modeling for CFD”, *DCW Industries*, 2000.
- [34] SMITH, A. M. O., CEBECI, T., “Numerical solution of the turbulent boundary-layer equations”, *Douglas Aircraft Division Report DAC 33735*, 1967.
- [35] BALDWIN, B. S., LOMAX, H., “Thin-layer approximation and algebraic model for separated turbulent flows”, *AIAA Paper 78-257*, 1978.
- [36] SPALART, P. R., ALLMARAS, S. R., “A one-equation turbulence model for aerodynamic flows”, *AIAA Paper 92-439*, 1992.
- [37] PRANDTL, L., “Über ein neues formelsystem für die ausgebildete turbulenz”, *Nacr. Akad. Wiss. Göttingen*, pp. 6–19, 1945.
- [38] BRADSHAW, P., FERRIS, D. H., ATWELL, N. P., “Calculation of boundary layer development using the turbulent energy equation”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 28, Pt. 3, pp. 593–616, 1967.
- [39] BALDWIN, B. S., BARTH, T. J., “A one-equation turbulence transport model for high Reynolds number wall-bounded flows”, *NASA TM-102847*, 1990.
- [40] CHOU, P. Y., “On the velocity correlations and the solution of the equations of turbulent fluctuation”, *Quart. Appl. Math.*, v. 3, pp. 38, 1945.
- [41] DAVIDOV, B. I., “On the statistical dynamics of an incompressible fluid”, *Doklady Akademiyi Nauk SSSR*, v. 136, pp. 47, 1961.
- [42] HARLOW, F. H., NAKAYAMA, P. I., “Transport of turbulence energy decay rate”, *Los Alamos Sci. Lab.*
- [43] JONES, P. W., LAUNDER, B. E., “The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 15, pp. 301–314, 1972.
- [44] LAUNDER, B. E., SHARMA, B. I., “Application of the energy dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc”, *Letters in Heat and Mass Transfer*, v. 1, no.2, pp. 131–138, 1974.

- [45] YAKHOT, V., ORSZAG, S. A., “Renormalization group analysis of turbulence: 1. Basic theory”, *Journal of Scientific Computing*, v. 1, pp. 3–51, 1986.
- [46] KOLMOGOROV, A. N., “Equations of turbulent motion of an incompressible fluid”, *Izvestia Academy of Sciences, USSR*, v. 6, Nos. 1 e 2, pp. 56–58, 1942.
- [47] SAFFMAN, P. G., “A model for inhomogeneous turbulent flow”, *Proc. R. Soc., Lond.*, v. A317, pp. 417–433, 1970.
- [48] LAUNDER, B. E., SPALDING, D. B., “Mathematical models of turbulence”, *Academic Press, London*.
- [49] WILCOX, D. C., “Multiscale model for turbulent flows”, *AIAA Journal*, v. 26, No.11, pp. 1311–1320, 1988.
- [50] “ANSYS CFX-Solver Manual”, *ANSYS, Inc.*, 2006.
- [51] MENTER, F. R., “Two-equations eddy-viscosity turbulence models for engineering applications”, *AIAA Journal*, v. 32, No. 8, pp. 1598–1605, 1994.
- [52] CURLE, N., DAVIES, H. J., “Modern Fluids Dynamics”, *Van Nostrand Reinhold Company*, v. 1, 1968.
- [53] DEISSLER, R. G., “Analysis of turbulent heat transfer, mass transfer, and friction in smooth tubes at high Prandtl and Schmidt numbers”, *NACA Report 1210*, 1955.
- [54] BURMEISTER, L. C., “Convective Heat Transfer”, *John Wiley & Sons, Inc.*, 1993.
- [55] DRIEST, E. R. V., *J. Aerospace Sci.*, v. 23, pp. 1007–1011, 1956.
- [56] REICHARDT, H., *Arch. Gesamte Waermetech*, v. 2, pp. 129–142, 1951.
- [57] SPALDING, D. B., “A single formula for the law of the wall”, *J. Applied Mech.*, v. 28, pp. 455–457, 1961.
- [58] FLYNN, J. H., WALL, L. A., *Polym. Lett.*, v. 4, pp. 323, 1966.

- [59] RHIE, C. M., CHOW, W. L., “A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation”, *AIAA Paper 82-0998*, 1982.
- [60] CONSULTANTS ATKINS, W., “Best practice guidelines for marine applications of computational fluid dynamics”, *Imperial College os Science & Technology*.
- [61] KAYS, W. M., CRAWFORD, M. E., “Convective Heat and Mass Transfer”, *McGraw-Hill Book Company*, 1980.
- [62] LOMAX, H., PULLIAM, T. H., ZINGG, D. W., “Fundamentals of computational fluid dynamics”, *notes*, 1999.
- [63] NEA-CSNI, “Best practice guidelines for the use of CFD in nuclear reactor safety applications”, *Manual*, 2007.