

4 Método Numérico

O método numérico implementado no pacote comercial Fluent, utilizado neste trabalho, para determinar o campo de velocidade e pressão, é o método de Volumes Finitos. Este método consiste em dividir o domínio de cálculo em volumes de controle e integrar no volume \forall e no tempo (com passo de tempo Δt) as equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear e outras grandezas escalares (grandezas turbulentas, por exemplo) em cada um desses volumes, de forma a garantir conservação das grandezas de interesse. As equações resultantes são chamadas de equações de discretização, podendo ser representadas por

$$\frac{\partial \rho_n \phi_n}{\partial t} \forall + \sum_f^{N_{faces}} \rho_f \phi_f \vec{v}_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^{N_{faces}} \Gamma_\phi \nabla \phi_f \cdot \vec{A}_f + S_\phi \forall, \quad (4.1)$$

onde ϕ , é uma grandeza escalar, \vec{v} , é o vetor velocidade, \vec{A} , o vetor área, Γ_ϕ , o coeficiente de difusão do escalar, $\nabla \phi$, o gradiente do escalar, S_ϕ , a fonte por unidade de volume do escalar, e \forall um volume finito de controle.

Na equação (4.1), observa-se que ora se faz uso de valores escalares do centro dos volumes (ϕ_n), ora das faces (ϕ_f). Para obter a discretização espacial, a interpolação e a obtenção dos valores nas faces foram baseadas no esquema de segunda ordem, denominado de QUICK (Leonard, 1979). Para a face leste e do volume de controle ilustrado na Fig. (4.1), o valor da face pode ser escrito como

$$\phi_e = \theta \left[\frac{S_d}{S_c + S_d} \phi_P + \frac{S_c}{S_c + S_d} \phi_E \right] + (1 - \theta) \left[\frac{S_u + 2S_c}{S_u + S_c} \phi_P - \frac{S_c}{S_u + S_c} \phi_W \right] \quad (4.2)$$

se o escoamento é da direita para esquerda.

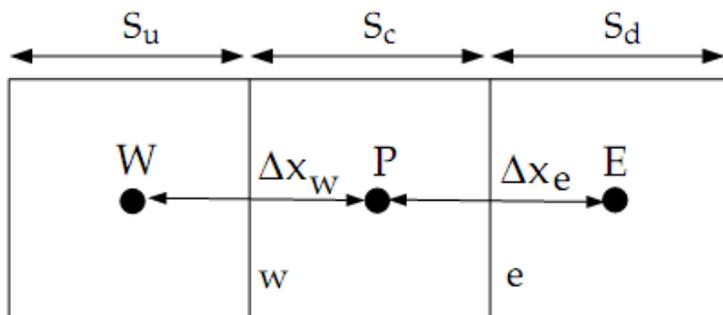


Figura 4.1 Volume de Controle

Variando-se o valor de θ é possível alterar o esquema de interpolação. θ igual a zero corresponde ao esquema *Upwind* enquanto que o valor de $1/8$ corresponde a formulação tradicional do QUICK, esquema este que foi utilizado na maioria dos casos estudados aqui. O esquema *Upwind* foi utilizado apenas para avaliar a influência do esquema de interpolação em uma comparação. Os subscritos minúsculos correspondem a valores de face e subscritos maiúsculos a valores centrais dos volumes, e S a distância entre faces.

Para a discretização temporal utilizou-se uma integração de segunda ordem, conforme é apresentado a seguir:

$$\frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}}{2\Delta t} = F(\phi) \tag{4.3}$$

onde $F(\phi)$ simboliza qualquer função de discretização espacial, e os sobrescritos $n+1$, n e $n-1$ denotam, respectivamente, o instante de tempo futuro, atual e passado.

A equação discretizada resultante para cada grandeza possui a seguinte forma:

$$a_P \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \tag{4.4}$$

sendo a e b coeficientes de linearização e os sub-escritos P e nb referentes ao valor central da grandeza ϕ no volume de controle em questão e seus vizinhos, respectivamente. O número de vizinhos é igual ao número de faces do volume, a exceção dos volumes adjacentes à fronteiras do domínio.

Como não existe uma equação de conservação para a pressão, esta necessita de um tratamento específico. De acordo com recomendação do manual do Fluent (2006), deve-se empregar o esquema PRESTO! (*PREssure STaggering Option*) no caso de escoamentos incompressíveis com números de “swirl” altos, isto é, com alta velocidade de rotação, ou com domínios com grandes curvaturas. Para corroborar esta informação foi constatado que, em todas as referências investigadas, utilizou-se o esquema PRESTO! para a pressão. Cullivan et al. (2004) utilizou este esquema para modelagem multifásica do escoamento em um hidrociclone com a turbulência modelada com RSM. Narasimha et al. (2006) também utilizou esse esquema em simulações do escoamento em hidrociclones com LES, ambos apresentaram resultados com boa concordância com experimentos. Este esquema utiliza uma equação da continuidade discretizada em um volume de controle “deslocado” para calcular uma pressão na face (deslocada), no mesmo espírito que os modelos de malhas estruturadas (Patankar, 1980).

Para resolver o acoplamento velocidade-pressão, observou-se nas referências investigadas, tanto o emprego do algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-linked Equations*) de Patankar (1980), como do algoritmo SIMPLER (SIMPLE Consistent) (van Doormaal e Raithby, 1984). Wang e Yu (2006) estudaram diferentes configurações geométricas para hidrociclones utilizando SIMPLE enquanto que, Murphy et al. (2007) fizeram uma comparação entre os dois programas comerciais de CFD mais utilizados, o Fluent e o CFX, empregando o algoritmo SIMPLER. Neste trabalho, devido à sua maior estabilidade para o caso em estudo, utilizou-se o método SIMPLE.

Em função da não linearidade das equações é necessário controlar a variação de ϕ durante a solução do sistema. Isto é feito através de coeficientes de sub-relaxação, α . Para algumas propriedades, que dependem do modelo de turbulência em, o momento e a pressão, isto é feito de forma explícita conforme:

$$\phi = \phi^* + \alpha \Delta\phi \quad (4.5)$$

onde o sobrescrito * indica valores disponíveis da iteração anterior. As equações são sub-relaxadas de forma implícita de acordo com

$$\frac{a_P}{\alpha} \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b + \frac{a_P}{\alpha} (1 - \alpha) \phi_P^* \quad (4.6)$$

Para solução do sistema linear de equações formado pela discretização das equações que governam o escoamento foi usado o método de Gauss Siedel em conjunto com um método de multi-grid algébrico (AMG – *Algebraic Multi-Grid*) (Hutchinson e Raithby, 1986).

No método Gauss Siedel as equações do sistema são resolvidas uma por vez e em seqüência. O sistema linear formado pelas equações de conservação de massa, momento e de modelagem da turbulência pode ser representado em notação indicial por:

$$A_{ij} \phi_j = B_i, \quad (4.7)$$

onde ϕ é a solução do sistema. A variável do ponto nodal P , ϕ_i , é calculada volume a volume na iteração $k+1$ até o i -ésimo ponto pela equação:

$$\phi_i^{k+1} = \frac{\left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} \phi_j^{k+1} - \sum_{j>i} a_{ij} \phi_j^k \right)}{a_{ii}}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.8)$$

O uso da solução “multi-grid” acelera o processo de transporte da “informação” das condições de contorno para o interior do domínio e proporciona o decaimento do resíduo em diferentes frequências (modos). A resolução em diferentes malhas requer que os resultados sejam transferidos de uma malha para outra, ora transferindo de uma malha mais refinada para uma mais grosseira, ora o inverso. Isto é feito com operadores matriciais \mathbf{R} (operador de restrição) e \mathbf{P} (operador de prolongamento) de acordo com Hutchinson e Raithby (1986), e brevemente descrito abaixo.

O sistema linear na forma matricial (Eq. 4,7) pode ser escrito como:

$$Resto_i = A_{ij} \phi_j^* - B_i, \quad (4.9)$$

onde ϕ^* é a solução aproximada do sistema e $Resto_i$ é o resíduo quando empregase a solução aproximada. O erro da solução é $\psi = \phi - \phi^*$, podendo ser obtido a partir

da solução de

$$A_{ij}\psi_j + Resto_i = 0. \quad (4.10)$$

É conveniente que a correção da solução seja obtida em uma malha mais grosseira do que a malha original de forma a acelerar a convergência. A correção da malha fina, ψ , deve ser obtida utilizando o operador de prolongamento \mathbf{P} a partir da correção da malha grossa, ψ^H , isto é, $\psi = \mathbf{P} \psi^H$. Para obter a correção da malha grosseira torna-se necessário aplicar o operador de Restrição \mathbf{R} . Desta forma, a Eq. (4.10) aplicada a malha grosseira é

$$A^H \psi^H + \mathbf{R} Resto = 0, \quad (4.11)$$

onde

$$A^H = \mathbf{R} A \mathbf{P}. \quad (4.12)$$

O valor corrigido na malha original é então obtido utilizando o operador de Prolongamento \mathbf{P} , como

$$\phi = \phi^* + \mathbf{P} \psi^H = 0. \quad (4.13)$$

Os operadores estão relacionados por:

$$\mathbf{P} = \mathbf{R}^T. \quad (4.14)$$

Após a etapa de pré-processamento, que será descrita na seção 4.1, pode-se resolver as equações de conservação e de turbulência. Um resumo da seqüência de solução numérica do sistema linear é apresentado na Fig. (4.2), onde pode-se observar que o algoritmo de solução SIMPLE é seqüencial.

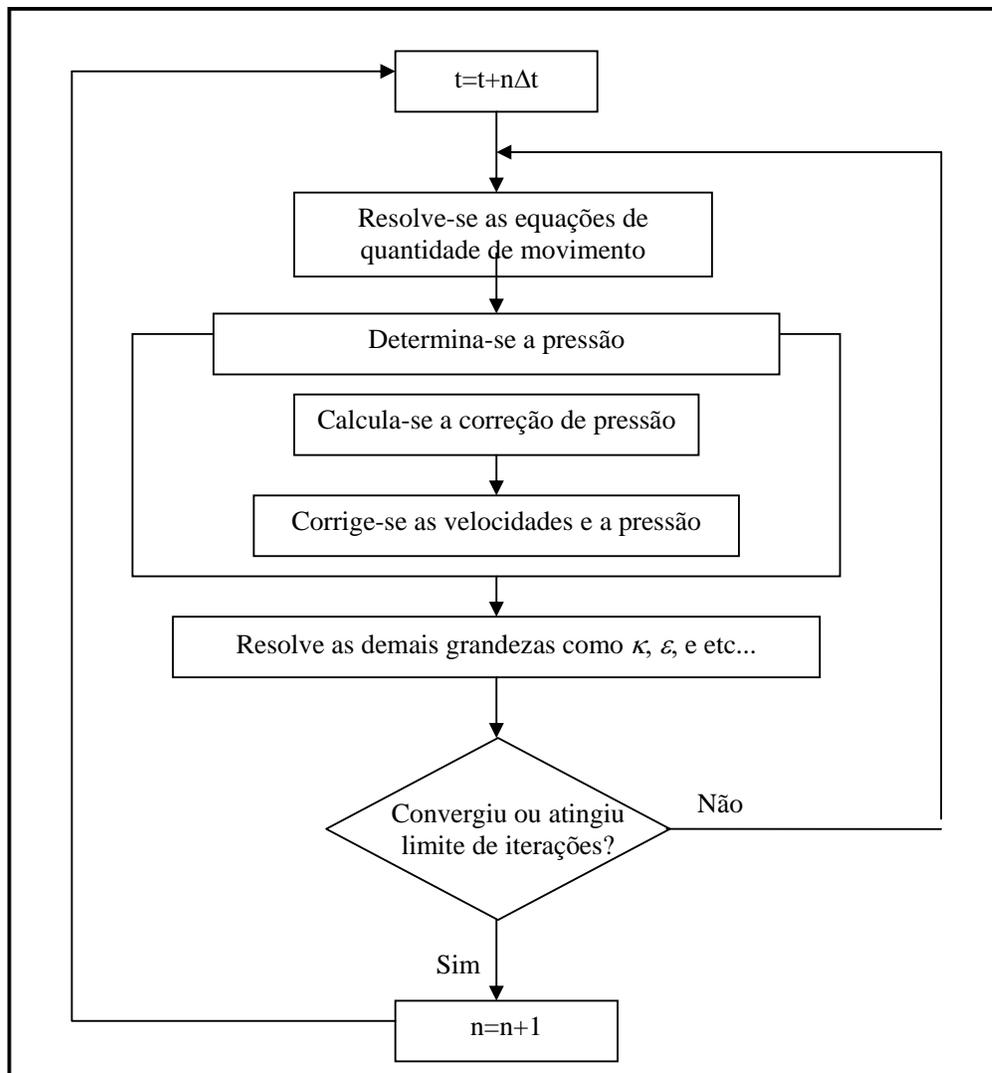


Figura 4.2: Seqüência de solução do modelo numérico do escoamento em CFD

4.1 Pré-processamento

O primeiro passo da solução numérica é a geração do domínio de cálculo computacional, juntamente com a malha a ser utilizada. No presente trabalho, a geometria e malha do hidrociclone foi realizada com o *software* GAMBIT.

A malha foi construída de forma estruturada, utilizando elementos hexaédricos ao redor de um cilindro centra à partir da projeção da saída de rejeito ou “*overflow*”). Essa malha foi projetada de cima para baixo ao longo do hidrociclone. Esse tipo de abordagem foi observada em praticamente todas as referências encontradas, como por exemplo Slack et al. (2003) e Huang (2005),

entre outros. Esse tipo de geração de malha é utilizada em ciclones por alinhar melhor a malha com o escoamento, o que é especialmente interessante com escoamentos fortemente convectivos, minimizando assim a fenômeno da falsa difusão (Patankar, 1980). As malhas hexaédricas estão menos sujeitas à difusão numérica que outras malhas baseadas em tetraedros, e, portanto mais indicadas para discretizações de maior ordem. A Fig. (4.3) apresenta um resumo de diversas malhas utilizadas em nas referências.

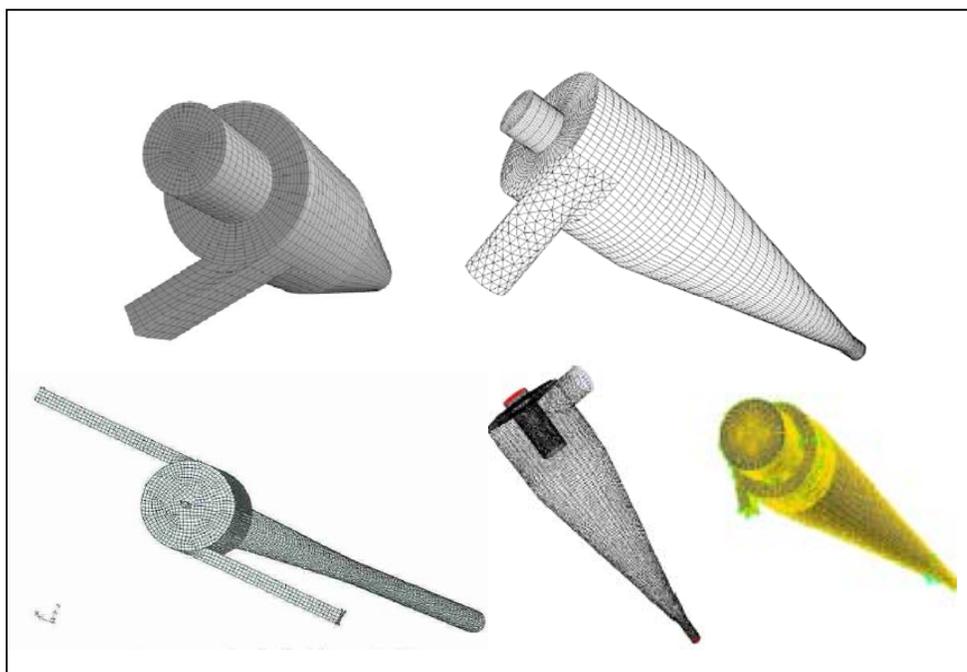


Figura 4.3 Diversos modelos de hidrociclones montados com malhas hexaédricas.

A configuração geométrica do hidrociclone, ilustrada na Fig. (3.2), foi construída baseada no trabalho de Marins (2007) utilizando-se a ferramenta GAMBIT v2.3.16.

Nas regiões da entrada tangencial de fluido, foi necessário utilizar outro tipo de volumes de controle, para minimizar a distorção dos volumes, que pode levar a erros numéricos.

Como ilustrado na Fig. (4.4), na região de entrada foram usados prismas. Outro detalhe relacionado à melhoria da qualidade da malha na entrada tangencial é que foi permitida uma pequena distorção para fora da região cilíndrica de entrada de fluidos do hidrociclone para gerar prismas mais homogêneos

(destacada nesta figura pelo círculo vermelho).

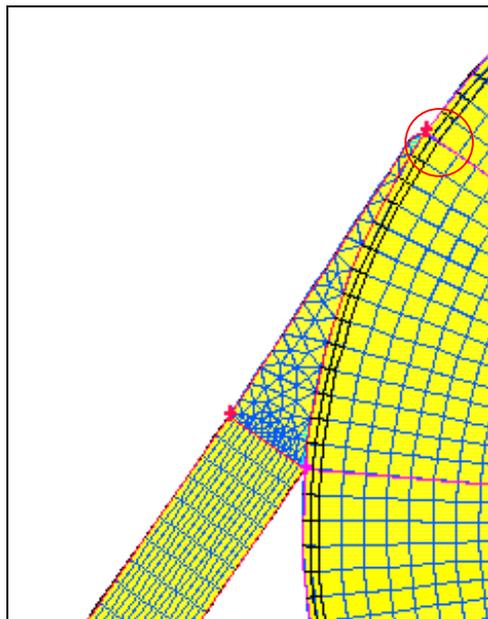


Figura 4.4: Hexaedros do modelo e detalhe dos prismas utilizados na entrada tangencial.

As malhas foram definidas de modo que a camada limite resultasse em uma altura adimensional y^+ (definida pela Eq. 3.35) de 30 a 60, situando-se assim na região logarítmica e permitindo a economia de volumes de controle no modelo, com conseqüente diminuição do custo computacional das simulações. A configuração das primeiras camadas da malha do modelo à partir das paredes é um processo iterativo, pois a definição de y^+ envolve a tensão cisalhante, τ_s , que necessita ser determinada. No entanto, pode-se determinar estimativas iniciais baseadas numa placa plana turbulenta sem gradiente de pressão, conforme ilustrado no site <http://geolab.larc.nasa.gov/APPS/YPlus/>. Mais adiante serão apresentados resultados da distribuição da altura adimensional em diferentes situações.

Para realização das simulações numéricas com as diferentes geometrias e malhas foi utilizada a ferramenta comercial Fluent v6.3.26 (“software” de propriedade da Ansys). Este “software” foi selecionado por ser sido utilizado na maioria das referências encontradas. Adicionalmente, as simulações com este “software” permitiram contrastar os resultados obtidos com os resultados de trabalhos em andamento no Cenpes (Raposo et al, 2008), realizados utilizando o

“software” CFX, também de propriedade da Ansys.

Devido às complexidades do escoamento turbulento tri-dimensional no interior do hidrociclone, as simulações foram realizadas com precisão dupla, isto é, as grandezas são arquivadas com doze algarismos significativos ao invés de seis. Para a obtenção dos resultados foi utilizada uma estação de trabalho com a seguinte configuração:

- 8 processadores Dual Core AMD Opteron 885 de 2,6 GHz
- 24 GB de memória RAM
- 4 discos SAS de 73 GB
- 4 placas de rede 10/100/1000 Mbps
- 1 placa de rede de 10 Gbps
- Ambiente Red Hat Linux

Para simulação do regime transiente, utilizou-se um passo de tempo fixo. No entanto, o passo de tempo foi alterado durante a evolução das simulações em função da malha utilizada e dos parâmetros sendo monitorados. No início das simulações utilizou-se um passo de tempo de 2×10^{-3} segundos para atingir rapidamente o regime estatisticamente permanente, quando então o passo de tempo foi reduzido para 5×10^{-5} segundos (correspondendo a número de Courant igual a 0,5) para determinar as estatísticas do escoamento.

Como mencionado, devido a não linearidades das equações de conservação, é necessário a utilização de fatores de sub-relaxação. Os valores selecionados encontram-se ilustrados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Fatores de sub-relaxação utilizados na solução com os diferentes modelos de turbulência

Grandeza	Fatores de sub-relaxação		
	$k-\epsilon$ RNG	RSM	LES
Pressão	0,3	0,3	0,3
Densidade	1	1	1
Forças de corpo	1	1	1
Quantidade de movimento	0,7	0,7	0,7
Energia cinética turbulenta	0,8	-	-
Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta	0,8	0,8	-
Viscosidade turbulenta	1	1	-
Tensores de Reynolds	-	0,5	-

4.1.1 Definição da Malha

Inicialmente, como estimativa para geração da malha, buscou-se uma comparação com as malhas das referências bibliográficas. Esse levantamento aparece na Tabela (4.2), onde as seguintes características de cada referência são apresentadas: volume do hidrociclone, número de volumes de controle, lado médio do hexágono, vazão através do hidrociclone e tempo de residência.

Tabela 4.2.: Comparativo da qualidade das malhas nas referências bibliográficas.

Referencias	volume do hidrociclone litros	volumes de controle unidades	volume finito médio mm ³	lado médio do hexágono mm	vazão pelo hidrociclone litros/s	tempo de residência, Q/vol s
Slack et al, 2000, malha para o modelo RSM	20.30	400,000	50.8	3.7	80.0	0.25
Slack et al, 2000, malha para o modelo LES	20.30	640,000	31.7	3.2	80.0	0.25
Aguirre et al, 2006, malha grossa	0.07	151,222	0.5	0.8	0.1	0.73
Aguirre et al, 2006, malha refinada	0.07	448,208	0.2	0.5	0.1	0.73
Bhaskar et al, 2007, malha grossa	0.71	50,000	14.2	2.4	1.1	0.65
Bhaskar et al, 2007, malha refinada	0.71	200,000	3.6	1.5	1.1	0.65
Delgadillo e Rajamani, 2005	0.68	162,350	4.2	1.6	1.1	0.61
Huang, 2005	0.70	156,806	4.5	1.6	0.6	1.27
malha 500	1.10	500,000	2.2	1.3	1.7	0.64
malha 1000	1.10	1,000,000	1.1	1.0	1.7	0.64
malha 1500	1.10	1,500,000	0.7	0.9	1.7	0.64

Analisando a Tabela (4.2) observa-se que o lado médio dos hexaedros possui entre 0,5 e 3,7mm. Assim foram criadas 4 malhas para o teste de malha com o modelo, onde o lado médio variou de 0,9 a 1,3mm. Estas malhas foram denominadas de 500, 1000, 1500 e 1500b. A malha 500 contém cerca de 500.000 volumes finitos, sendo 72 divisões no perímetro circular, 40 divisões radiais e 218 axiais. Para comparação no teste de malha foram construídas outras duas malhas variando o número de divisões no perímetro de 72 para 120 e 168, que possuíam cerca de 1.000.000 e 1.500.000 de volumes sendo denominadas respectivamente de 1000 e 1500b. Foi criada ainda, uma segunda malha com cerca de 1.500.000 de volumes com o número de divisões axiais aumentado em relação à malha 1000,

ou seja, 72 divisões no perímetro circular, 40 divisões radiais e 318 axiais. Na Fig. (4.5) é ilustrada uma vista superior da malha 1500b, para referência.

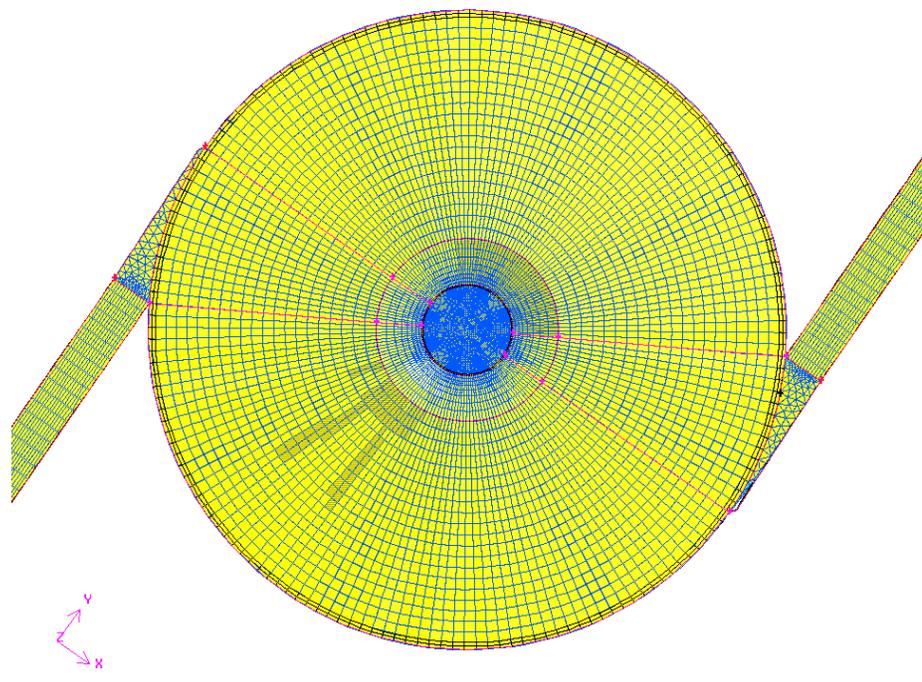


Figura 4.5: Vista superior da malha 1.500b, destacando o número de divisões ao longo do perímetro circular e do raio do hidrociclone.

O teste comparativo entre as malhas é apresentado em detalhe no Apêndice A. Em resumo, pode-se destacar que todos os casos no Apêndice A foram simulados com o modelo κ - ε RNG de turbulência por ser menos custoso computacionalmente e de convergência mais rápida. Adicionalmente, utilizou-se a lei da parede padrão (lei logarítmica para parede lisa). A vazão utilizada foi de $6,2 \text{ m}^3/\text{h}$. Obtiveram-se resultados próximos com todas as malhas, porém, foi observada uma pequena variação entre os resultados com a malha 500 e 1000 que não se repetiu na comparação entre a malha 1000 com 1500 e 1500b. Assim, a malha 1000 foi escolhida para a simulação nos outros modelos de turbulência.

No trabalho experimental de Marins (2007) foram medidos as componentes tangencial e axial da velocidade sobre a direção radial ao longo do hidrociclone em diferentes posições axiais ao longo do hidrociclone. No entanto, os resultados com o modelo κ - ε não foram utilizados para comparação com os dados experimentais uma vez que não foi observada a característica clássica da evolução

da componente tangencial de velocidade citada exhaustivamente na literatura e observada nos dados experimentais, a qual consiste de uma combinação de rotação de corpo rígido com vórtice livre. Os resultados com o modelo a duas equações mostraram apenas a rotação de corpo rígido, como pode ser constatado no Apêndice A. Resultados semelhantes para o modelo $k-\varepsilon$ aparecem também no trabalho de Grotjans (1999).

A partir da malha selecionada com um milhão de volumes de controle, investigou-se a previsão do escoamento utilizando-se o modelo de turbulência RSM.

Os primeiros resultados com esta malha mostraram uma incoerência, nos perfis de velocidade tangencial que foi atribuída à transição da malha hexaédrica para a região de projeção do rejeito, onde, além de elementos hexaédricos, havia prismas para adequar a malha a geometria circular. A Figura (4.6) mostra em detalhe esta transição da malha, onde os volumes de controle ortogonais foram coloridos de azul e volumes com qualidade questionável, devido à forte não ortogonalidade dos mesmos, encontram-se coloridos de rosa.

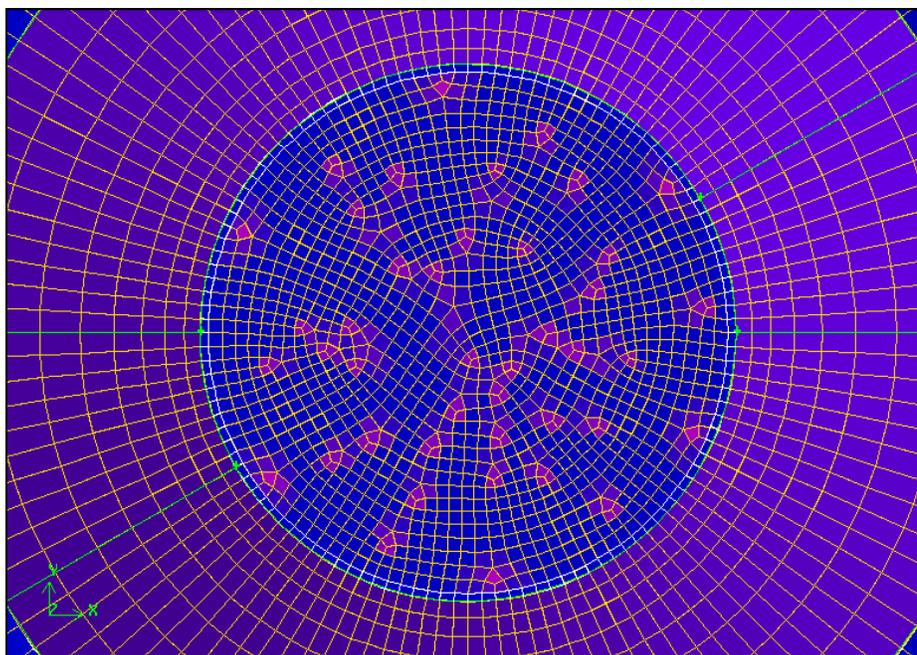


Figura 4.6 – Corte radial mostrando detalhe de transição da malha hexaédrica para a região com hexaédros e prismas.

A referida incoerência nos perfis de velocidade da componente tangencial

média, que foi atribuída à malha, é ilustrada na Fig. (4.7). O resultado esperado deveria apresentar uma linha reta entre os extremos e não a distorção destacada no primeiro gráfico com o círculo vermelho, que se repete em todos os perfis ao longo do hidrociclone.

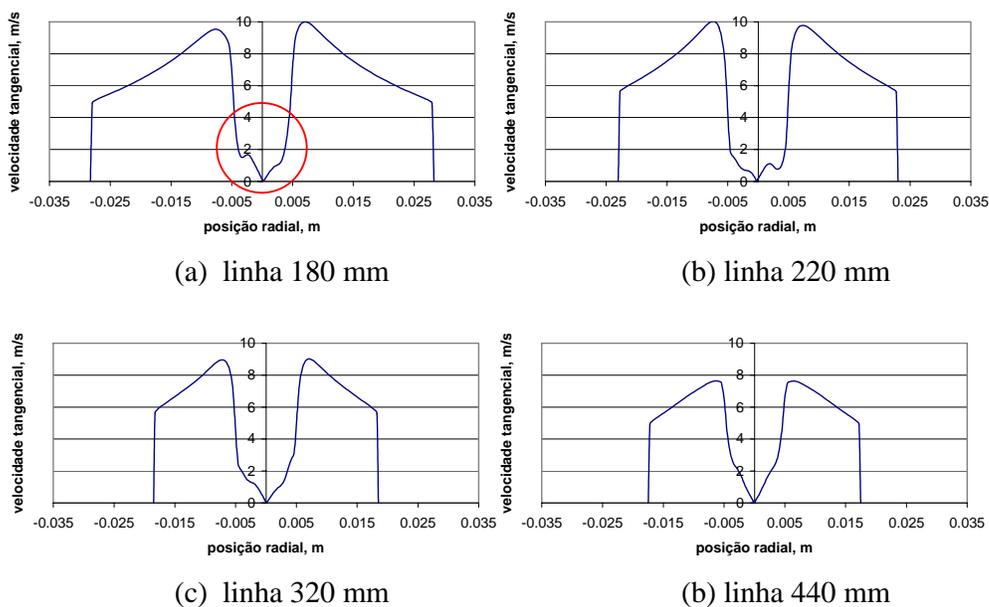


Figura 4.7 – Resultados da componente tangencial da velocidade média sobre linhas radiais ao longo do hidrociclone, obtidos com a malha de prismas e hexaedros na projeção do rejeito.

Observou-se que o problema se inicia aproximadamente na posição de transição das malhas, no raio de 5 mm. Para contornar este problema foi construída uma nova malha com um cilindro auxiliar ao redor da linha axial do hidrociclone de raio 0,1 mm, como se o eixo do hidrociclone possuísse dimensão. Esse artifício permitiu que a malha fosse perfeitamente hexaédrica até o centro. Nas simulações com essa malha aplicou-se à condição de não cisalhamento sobre esta parede interna e especulou-se que seu efeito de se anular uma pequena parte do momento normal à mesma teria pouca influência no escoamento médio, mas podendo atenuar a precessão do vórtice central. Na Fig. (4.8) é mostrado o detalhe da nova malha com o cilindro irreal, para a qual foi mantido aproximadamente o mesmo número de volumes de controle, cerca de 1.000.000.

É interessante mencionar o trabalho de Sripriya et al. (2007) que utilizou uma haste central substituindo o cone de ar em um hidrociclone para separação

sólido-líquido, mostrou que, mesmo com a redução da velocidade axial do cone reverso (pela existência de paredes, principalmente junto ao overflow) o efeito global é de uma maior eficiência de separação, uma vez que a haste reduz instabilidades do cone central, instabilidades que estariam ligadas a ineficiências de separação. Este resultado se repetiu para diferentes vazões de entrada e diferentes granulometrias de sólidos. Note que a presença do cilindro virtual utilizado no presente trabalho, também auxilia a redução de instabilidades do cone central.

Os bons resultados obtidos que consistiram na eliminação da incoerência da evolução da componente tangencial de velocidade nos perfis de velocidade tangencial junto ao eixo axial do hidrociclone foram a motivação para que o restante do trabalho fosse conduzido com base nesta malha.

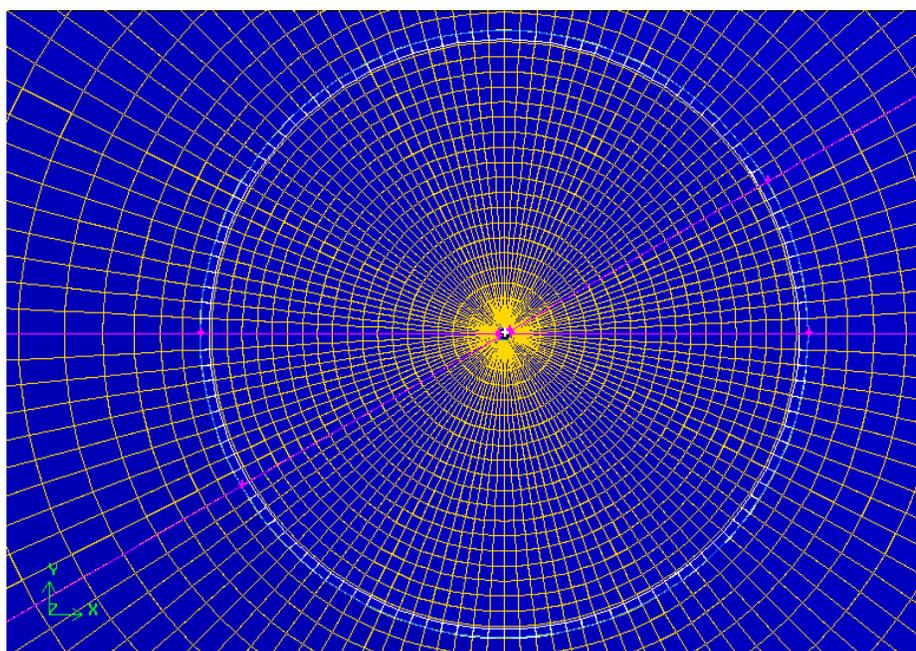


Figura 4.8 – Detalhe da nova malha com um cilindro irreal ao redor da linha axial do hidrociclone.

4.1.2 Influência da Geometria da Entrada

Uma vez que especificou-se uma geometria simplificada para a entrada, comparou-se os resultados obtidos no presente trabalho com os resultados apresentados por Raposo et al. (2008), obtidos com a geometria de entrada mais

realista, conforme ilustrado na Fig. (4.9).

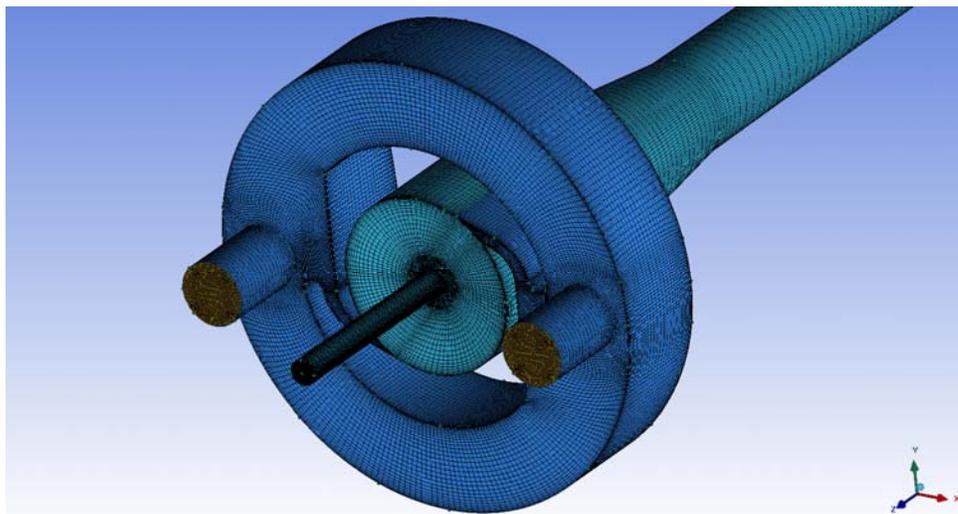


Figura 4.9 – Geometria da entrada utilizada por Raposo et al (2008)

Raposo et al. (2008) apresentaram uma investigação para o mesmo problema, utilizando o software comercial CFX e um domínio computacional com 2,8 milhões de volumes e condições semelhantes, como modelo RSM de turbulência com a aproximação quadrática no tensor pressão-deformação, vazão de $6,2 \text{ m}^3/\text{h}$, com divisão da vazão entre o rejeito e a saída de fundo iguais a 0,35 e 0,65 respectivamente. As principais diferenças nas modelagens são:

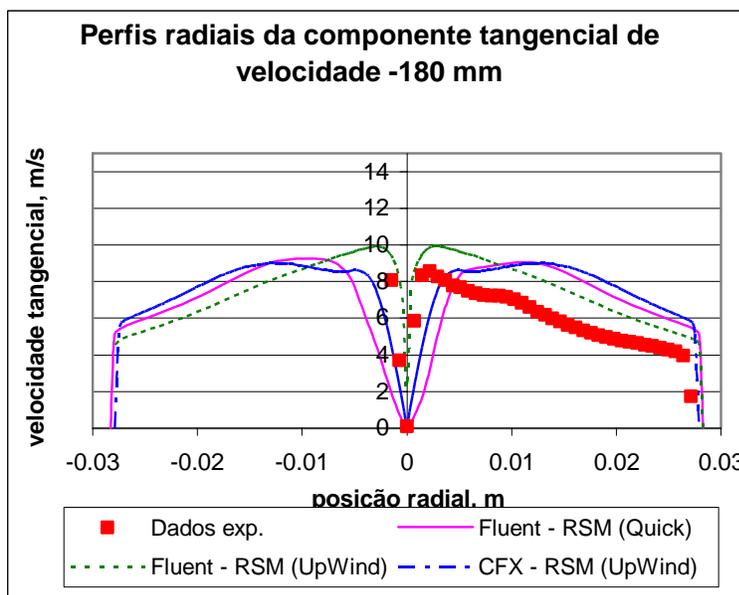
- “software”: CFX
- Solução acoplada da pressão e velocidade
- Discretização de momento com 2^{nd} order *Upwind*
- Condição de turbulência nas entradas: intensidade de turbulência igual a 3,7%, sendo o comprimento característico determinado automaticamente pelo programa.
- Modelagem junto a paredes: “leis de parede”

As Figuras (4.10) e (4.11) mostram uma comparação entre resultados obtidos com a geometria da Fig. (4.9), obtida com o software CFX, com os dados obtidos da simulação utilizando o software Fluent para a configuração geométrica simplificada da Fig. (4.5).

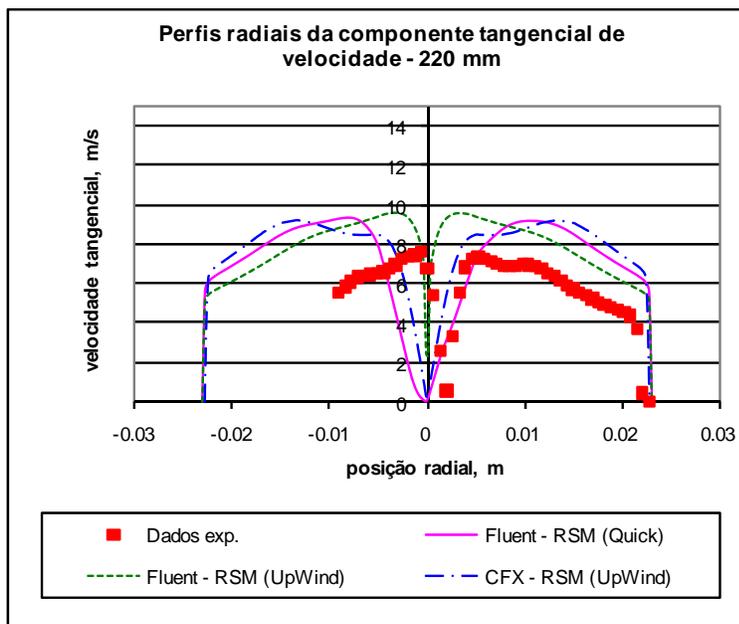
A Figura (4.10) apresenta a variação do componente tangencial ao longo do raio para duas seções transversais do hidrociclone a 180 mm e 220 mm do ponto

superior de rejeito. A Figura (4.11) apresenta o componente radial ao longo do raio para as mesmas seções. Observa-se uma boa concordância entre os resultados da modelagem, com um desvio um pouco maior na região central do cone reverso. A concordância entre os resultados indica que a geometria simplificada para a entrada não compromete a qualidade dos resultados, permitindo uma boa redução do esforço computacional para obtenção da solução.

O trabalho com CFX reporta ainda uma série de simulações onde foi variada a intensidade de turbulência e comprimento característico nas entradas, sem impacto significativo nas soluções.

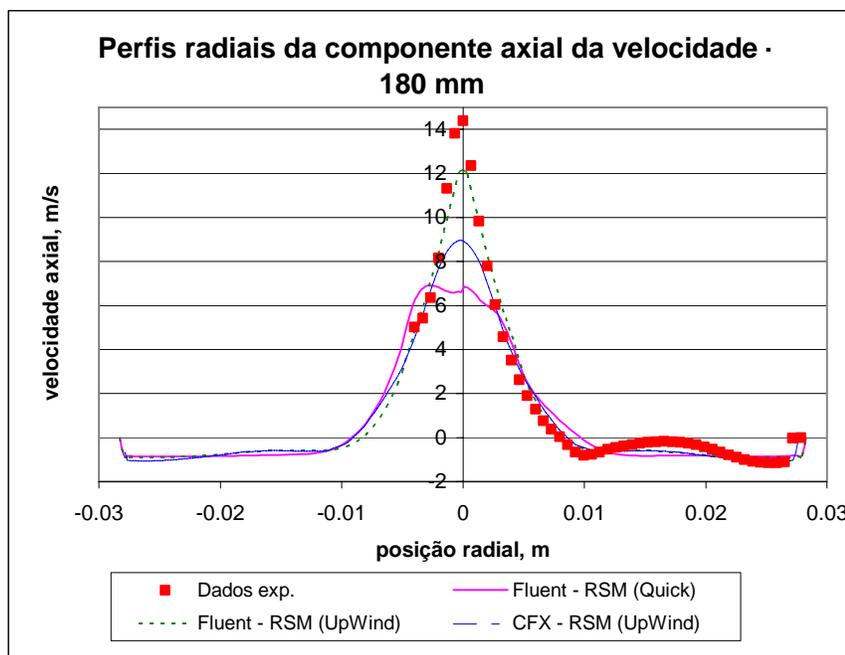


(a) linha 180 mm

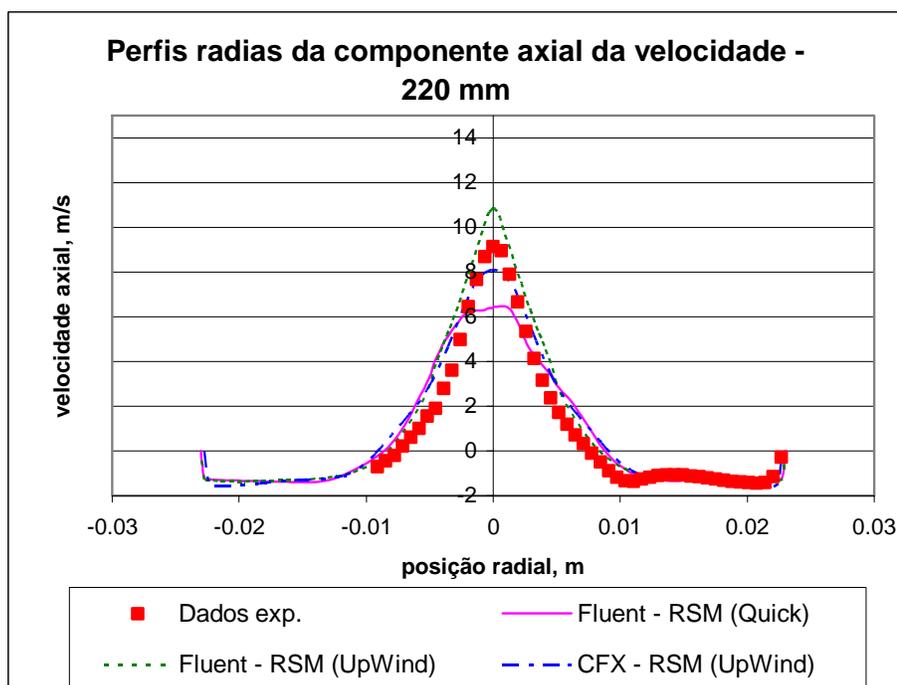


(b) linha 220 mm.

Figura 4.10: Evolução da componente tangencial de velocidade obtida experimentalmente e com o modelo RSM para geometria de entrada simplificada e RSM geometria real, para 6,2 m³/h. (a) linha 180 mm (b) linha 220 mm.



(a) linha 180 mm.



(b) linha 220 mm.

Figura 4.11: Evolução da componente axial da velocidade obtida experimentalmente e com o modelo RSM para geometria de entrada simplificada e RSM geometria real, para $6,2 \text{ m}^3/\text{h}$. (a) linha 180 mm (b) linha 220 mm.