

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE REATORES DE
CRAQUEAMENTO CATALÍTICO DO PETRÓLEO UTILIZANDO
O SOFTWARE CFX

SEBASTIÃO ARAÚJO COUTINHO

CAMPINA GRANDE - PARAÍBA

2003

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE REATORES DE
CRAQUEAMENTO CATALÍTICO DO PETRÓLEO UTILIZANDO
O SOFTWARE CFX

SEBASTIÃO ARAÚJO COUTINHO

Dissertação apresentada à
Universidade Federal de
Campina Grande como parte
dos requisitos exigidos para a
obtenção do título de Mestre
em Engenharia Química

Área de Concentração: Operações e Processos

Orientador: Prof. Dr. José Jaílson Nicácio Alves

CAMPINA GRANDE - PARAÍBA

JANEIRO - 2003



C871m Coutinho, Sebastiao Araujo
Modelagem e simulacao de reatores de craqueamento catalitico do petroleo utilizando o software CFX / Sebastiao Araujo Coutinho. - Campina Grande, 2003. 161 f.

Dissertacao (Mestrado em Engenharia Quimica) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciencias e Tecnologia.

1. Engenharia Quimica 2. Modelagem e Simulacao 3. Fluidodinamica Computacional 4. Dissertacao I. Alves, Jose Jailson Nicacio II. Universidade Federal de Campina Grande - Campina Grande (PB) III. Titulo

CDU 66.0(043)

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE REATORES DE
CRAQUEAMENTO CATALÍTICO DO PETRÓLEO UTILIZANDO
O SOFTWARE CFX


SEBASTIÃO ARAÚJO COUTINHO


Dissertação aprovada em: 29 / 01 / 2003

Banca examinadora:


Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves
Orientador


Prof. Dr. Milton Mori
Examinador


Prof. Dr. Antonio Gilson B. de Lima
Examinador


Prof. Dr. Michel François Fossy
Examinador

DEDICATÓRIA

Ao Deus todo Poderoso

AGRADECIMENTOS

Ao Deus todo Poderoso por mais uma vitória.

À minha esposa Gilvaneide pelo apoio incondicional.

Aos meus pais por terem iniciado essa jornada.

Ao Professor José Jaílson Nicácio Alves pela orientação.

À PETROBRAS e ao PADCT-CAPES pelo suporte financeiro.

À Jaciane Andrade Pereira por ter sido um vaso nas mãos do Altíssimo.

A Agremis Guinho Barbosa pela ajuda indispensável na edição deste trabalho.

A todos os amigos e colegas pelo incentivo tão importante.

Resumo

No processamento do petróleo, a unidade de craqueamento catalítico é de fundamental importância. Nesta unidade, frações de baixo valor agregado são transformadas em frações de alto valor comercial.

O reator principal da unidade (riser), dependendo das condições operacionais e geométricas, pode apresentar diferentes características, tais como: alta concentração de partículas na parede com movimento descendente destas partículas na região de alta concentração, que afeta diretamente a conversão e a seletividade em gasolina, principal produto de interesse.

A previsão do comportamento fluidodinâmico e da cinética de reação é de fundamental importância no desenvolvimento e otimização do processo.

Os objetivos desta dissertação são: implementação do modelo da teoria cinética para materiais granulares no código comercial CFX, produto da AEA TECHNOLOGY; testar o modelo implementado em casos com as principais características desses reatores (risers a frio), e testar um modelo cinético que possa ser acoplado ao modelo fluidodinâmico.

Utilizou-se três casos da literatura para verificação do modelo, no estudo fluidodinâmico, e testou-se o modelo de dez grupos (Ten Lumps Model) no estudo da conversão no reator.

O modelo de dez grupos mostrou-se adequado para ser acoplado ao fluidodinâmico, enquanto este mostrou-se capaz de prevê as diferentes características dos três casos estudados.

Abstract

In the processing of the petroleum, the catalytic cracking unit is of basic importance. In this unit, the fractions of low aggregate value are transformed into fractions of high commercial value.

The main reactor of the FCC (riser), depending on the operational and geometric conditions can present different characteristics, such as: high concentration at the wall, descending movement in the area of high concentration that directly affects the conversion and the selectivity in gasoline, while is the main product of interest.

The simulation of the fluid dynamic behavior, and of the reaction kinetic, is of basic importance in the development and optimization of the process.

The objectives of this dissertation are the implementation of the kinetic theory model for the granular materials in the commercial code CFX, product of AEA TECHNOLOGY, to test the model in cases with the main characteristic differences of these reactors (cold risers), and also to test a kinetic model that can be coupled to the fluid dynamics model.

Three cases from the literature were used for verification of the model, in the fluid dynamic study, and the ten lumps model was tested in the study of the conversion in the reactor.

The ten lumps model revealed adequate to be coupled with to the fluid dynamic model, while this revealed capable of to simulate the different characteristics of the three studied cases.

Sumário

Lista de Figuras	p. iv
Lista de Tabelas	p. vii
Simbologia	p. viii
1 Introdução	p. 1
2 Estratégia de Ação	p. 2
2.1 Caracterização do Problema	p. 2
2.2 Metodologia e Estratégia de Ação	p. 4
3 Modelo Matemático: Fluidodinâmica do Riser	p. 5
3.1 Fase Gás	p. 5
3.1.1 Continuidade	p. 5
3.1.2 Quantidade de Movimento	p. 5
3.1.3 Tensões	p. 6
3.1.4 Modelo de Turbulência $\kappa - \epsilon^\kappa$	p. 6
3.1.4.1 Energia Cinética Turbulenta(κ)	p. 6
3.1.4.2 Taxa de Dissipação (ϵ^κ)	p. 7
3.2 Fase Particulada	p. 7
3.2.1 Continuidade	p. 7
3.2.2 Quantidade de Movimento	p. 7
3.2.3 Tensões	p. 8

3.2.4	Temperatura Granular	p. 8
3.3	Coeficiente de Transferência de Quantidade de Movimento entre fases	p. 9
3.4	Condições de Contorno	p. 9
4	Modelo Matemático: Craqueamento Catalítico	p. 12
4.1	Cinética do Craqueamento Catalítico	p. 13
4.1.1	Modelo dos Dez Pseudo-Grupos (Ten Lumps Model)	p. 15
5	Método Numérico	p. 18
5.1	Discretização usando Volumes Finitos	p. 18
5.2	Positividade dos Coeficientes	p. 20
5.3	Linearização do Termo Fonte	p. 20
5.4	Acoplamento Pressão - Velocidade	p. 21
6	O Simulador	p. 22
6.1	Histórico	p. 22
6.2	Estrutura do Software	p. 22
6.2.1	O Pré-Processador	p. 23
6.2.2	O Processador	p. 24
6.2.3	O Pós-Processador	p. 25
6.3	Arquivos utilizado pelo CFX	p. 26
6.4	O Arquivo de Comandos	p. 26
6.5	Incluindo Rotinas Fortran	p. 28
7	Resultados e Discussões	p. 30
7.1	Verificação do Modelo de Reação	p. 30
7.2	Fluidodinâmica do Riser	p. 36
7.2.1	Modelo Invíscido Para As Partículas	p. 38

7.2.2	Modelo Com Viscosidade Das Partículas Constante	p. 40
7.2.3	Modelo $\kappa - \epsilon^k$ para a Fase Particulada	p. 41
7.2.4	Modelo Bidimensional e Invíscido para a Fase Particulada	p. 42
7.2.5	Teoria Cinética Do Escoamento De Materiais Granulares - KTGF . .	p. 44
7.2.5.1	Caso 1	p. 44
7.2.5.2	Caso 2	p. 56
7.2.5.3	Caso 3	p. 68
8	Conclusões	p. 79
9	Sugestões para Trabalhos Futuros	p. 80
	Referências Bibliográficas	p. 81
	Apêndice A – Código Fonte do Programa da Cinética de Reação	p. 83
	Apêndice B – Arquivo de Comandos	p. 98
B.1	Caso1	p. 98
B.2	Caso 2	p. 105
B.3	Caso 3	p. 112
	Apêndice C – Subrotinas utilizadas pelo CFX	p. 119
C.1	USRVIS - Subrotina para o Cálculo da Viscosidade	p. 119
C.2	USRDIF - Subrotina para o Cálculo do Coeficiente de Difusão	p. 126
C.3	USRBCS - Subrotina para as Condições de Contorno	p. 134
C.4	USRSRC - Subrotina para o Cálculo da Termo de Geração	p. 143
C.5	USRPRT - Subrotina para Impressão dos Resultados	p. 155

Lista de Figuras

1	Diagrama simplificado do circuito regenerador riser, stripper, da unidade multipropósito de FCC U-144 da SIX/PETROBRÁS.	p. 3
2	Esquema do modelo dos dez lumps	p. 16
3	Fluxograma de conexão dos vários módulos do CFX (CFX-USER-MANUAL, 1997).	p. 23
4	Sequência do CFX-Build para criação da geometria	p. 24
5	Concentração de HFO ao logo do riser.	p. 32
6	Concentração de LFO ao longo do riser	p. 33
7	Formação de gasolina ao logo do riser.	p. 34
8	Variação de Temperatura ao longo do riser	p. 34
9	Coque depositado sobre o catalisador	p. 35
10	Efeito da temperatura de entrada na seletividade	p. 36
11	Fração volumétrica das partículas para o modelo invíscido (caso 2)	p. 39
12	Distribuição de partículas para o modelo com viscosidade constante (caso 2)	p. 40
13	Distribuição de partículas utilizando o modelo $\kappa - \epsilon^k$ aplicado a fase particulada (caso 2)	p. 41
14	Convergência para o modelo 2D e Invíscido para as partículas	p. 42
15	Distribuição de partículas para o modelo 2D e Invíscido para as partículas	p. 43
16	Resíduos das variáveis calculadas pelo CFX (caso 1)	p. 44
17	Distribuição de Sólidos (caso 1)	p. 46
18	Pressão de Sólidos (caso 1)	p. 47
19	Pressão do Gás (caso 1)	p. 48

20	Velocidade Axial do Gás (caso 1)	p. 49
21	Velocidade Radial do Gás (caso 1)	p. 50
22	Energia Cinética Turbulenta (caso 1)	p. 51
23	Taxa de Dissipação da Energia Cinética Turbulenta (caso 1)	p. 52
24	Viscosidade do Gás (caso 1)	p. 53
25	Velocidade Axial das Partículas (caso 1)	p. 54
26	Velocidade radial das Partículas (caso 1)	p. 55
27	Resíduos das Variáveis Calculadas pelo CFX (caso 2)	p. 56
28	Concentração das Partículas (caso 2)	p. 57
29	Velocidade Axial do Gás (caso 2)	p. 58
30	Velocidade Radial do Gás (caso 2)	p. 59
31	Energia Cinética Turbulenta (caso 2)	p. 60
32	Taxa de Dissipação da Energia Cinética Turbulenta (caso 2)	p. 61
33	Viscosidade Efetiva do Gás (Caso 2)	p. 62
34	Velocidade Axial das Partículas (Caso 2)	p. 63
35	Velocidade Radial das Partículas (Caso 2)	p. 64
36	Temperatura Granular (Caso 2)	p. 65
37	Pressão dos Sólidos (Caso 2)	p. 66
38	Viscosidade efetiva das Partículas (Caso 2)	p. 67
39	Resíduos das Variáveis Calculadas pelo CFX (Caso 3)	p. 68
40	Concentração das Partículas (Caso 3)	p. 69
41	Velocidade Axial do Gás (Caso 3)	p. 70
42	Velocidade Radial do Gás (Caso 3)	p. 71
43	Energia Cinética Turbulenta (Caso 3)	p. 72
44	Taxa de Dissipação da Energia Cinética Turbulenta (Caso 3)	p. 73
45	Viscosidade Efetiva do Gás (Caso 3)	p. 74

46	Velocidade Axial das Partículas (Caso 3)	p. 75
47	Velocidade Radial das Partículas (Caso 3)	p. 76
48	Pressão de Sólidos (Caso 3)	p. 77
49	Temperatura Granular (Caso 3)	p. 78

Lista de Tabelas

1	Estratégias para a abordagem do problema.	p. 4
2	Operação para o máximo de GLP (ABADIE, 19XX)	p. 13
3	Operação para o máximo de Gasolina (ABADIE, 19XX)	p. 13
4	Visão global das reações que ocorrem no craqueamento catalítico de gasóleos pesados	p. 14
5	Arquivos utilizador e criados pelo CFX.	p. 26
6	Rotinas em Fortran que o usuário podem utilizar.	p. 29
7	Características do riser (FROMENT e BISCHOFF, 1990).	p. 30
8	Constantes cinéticas do modelo de 10 grupos.	p. 31
9	Composição do gasóleo na entrada e pesos moleculares dos grupos.	p. 32
10	Características do Sistema (caso 1)	p. 37
11	Características do Sistema (caso 2)	p. 38
12	Características do Sistema (caso 3)	p. 38

Simbologia

Ar_h - Aromáticos pesados.

Ar_l - Aromáticos leves.

β_{gs} - Coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre a fase gasosa e a fase sólida.

d_p - Diâmetro da partícula (m).

e - Coeficiente de restituição partícula-partícula.

ϵ_g - Fração volumétrica da fase gasosa.

ϵ_G - Porosidade.

ϵ_s - Fração volumétrica da fase sólida.

ϵ_{smax} - Fração máxima de sólidos.

ϵ^k - Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta da fase gasosa.

g - Aceleração da gravidade (m/s^2).

γ_g - Tensor taxa de deformação da fase gasosa.

γ_s - Tensor taxa de deformação da fase sólida.

γ_1 - Dissipação da temperatura granular.

γ_2 - Taxa de transferência da energia cinética do movimento entre as fase.

Γ_T - Coeficiente de difusão da temperatura granular.

g_0 - Função de distribuição radial.

κ_g - Energia cinética turbulenta do gás.

KTGF - Teoria Cinética para o Escoamento de Materiais Granulares.

μ_g - Viscosidade efetiva da fase gasosa.

μ_g^l - Viscosidade laminar da fase gasosa.

μ_g^t - Viscosidade turbulenta da fase gasosa.

μ_s - Viscosidade efetiva da fase sólida.

N_h - Naftênicos pesados.

N_l - Naftênicos leves.

P_g - Pressão da fase gasosa.

P_h - Parafinas pesadas.

P_l - Parafinas leves.

P_s - Pressão da fase sólida.

Φ_w - Fator de atrito partícula-parede.

q_{PT} - Fluxo de temperatura granular.

R - Raio do riser.

Re - Número de Reynolds.

ρ_g - Densidade da fase gasosa ($\frac{kg}{m^3}$).

ρ_s - Densidade da fase sólida ($\frac{kg}{m^3}$).

τ_g - Tensor tensão da fase gasosa.

τ_s - Tensor tensão da fase sólida.

t - Tempo.

T_{Gran} - Temperatura granular ($\frac{m^2}{s^2}$).

$u_{s,g}$ - Velocidade superficial do gás ($\frac{m}{s}$).

v_g - Velocidade da fase gasosa ($\frac{m}{s}$).

v_s - Velocidade da fase sólida ($\frac{m}{s}$).

v_{gz} - Velocidade axial da fase gasosa ($\frac{m}{s}$).

v_{gr} - Velocidade radial da fase gasosa ($\frac{m}{s}$).

v_{sz} - Velocidade axial da fase sólida ($\frac{m}{s}$).

v_{sr} - Velocidade radial da fase sólida ($\frac{m}{s}$).

\overline{v}_g - Flutuação da velocidade média volumétrica do gás ($\frac{m}{s}$).

ξ_s - Viscosidade do conjunto.

1 *Introdução*

O projeto, desenvolvimento e otimização dos processos químicos, em geral, e a capacidade em se prever a performance dos equipamentos de processos, dependem de modelos representativos, ferramentas para resolução dos modelos e da disponibilidade de dados experimentais/analíticos para validação dos modelos usados.

Para prever as condições ótimas de operação em reatores químicos, ferramentas de simulação numérica são indispensáveis, pois de um modo geral, os métodos analíticos são aplicáveis apenas aos problemas mais simples de escoamento, enquanto os métodos experimentais requerem alto investimento do que a simulação numérica. No entanto os resultados experimentais são necessários para verificar a validade e precisão dos resultados numéricos. Por isso, a modelagem matemática e a simulação numérica são, atualmente, ferramentas indispensáveis para o desenvolvimento e otimização dos processos químicos, particularmente, dos Reatores de Leito Fluidizado Circulante (CFB) (ALVES, 1998).

Reatores do tipo gás-sólido são bastante utilizados na indústria química e petroquímica principalmente nos processos de craqueamento catalítico, combustão e incineração de resíduos. Muitas vezes os reatores do tipo gás-sólido são pontos críticos nestes processos, do ponto de vista econômico e ambiental. O conhecimento da fluidodinâmica destes reatores é fundamental para o seu desenvolvimento e otimização.

O objetivo final da disserta é a implementa do modelo da teoria cinética no CFX e a definição de um modelo cinético do craqueamento catalítico, visando sua utilização na simulação do riser.

2 *Estratégia de Ação*

2.1 Caracterização do Problema

Quando um gás flui verticalmente para cima através de um leito de partículas sólidas, diferentes regimes fluidodinâmicos podem ser observados, dependendo da velocidade do gás e das características do sistema de gás-partícula, que vão desde o escoamento através do leito fixo de partículas, até o transporte pneumático vertical. Muitos estudos foram desenvolvidos com o objetivo de caracterizar os regimes de escoamento (KWAUK e LI, 1996).

Entre os regimes de turbulência e transporte pneumático, está o chamado “Fluidização Rápida”, regime de escoamento utilizado nos reatores de leito fluidizado circulante. Os reatores de leito fluidizado circulante caracterizam-se por apresentarem um escoamento anular com uma parte da mistura gás-sólido movendo-se verticalmente para cima, no centro, e outra descendo próxima a parede. Uma alta concentração de partículas próxima a parede é comumente observada. Basicamente existem dois tipos de reatores de leito fluidizado circulante: os combustores (CFBC) e os utilizados em unidades de craqueamento catalítico (FCC).

A operação de craqueamento catalítico do petróleo, para produção de frações de maior valor agregado pode ser conduzida em diversos regimes de escoamento. No craqueamento operando no regime de transporte, as partículas do catalisador são arrastadas do reator pelo gás, separadas em ciclones e estes, por sua vez entram no regenerador para serem recuperadas.

O petróleo usado em uma refinaria é enviado à destilação atmosférica, onde são separadas as frações mais leves. O produto de fundo da torre de destilação atmosférica é destilado sob vácuo. O gasóleo de vácuo, a fração mais pesada da destilação à vácuo, é tratada na unidade de craqueamento catalítico (FCC).

No riser ocorrem as reações de craqueamento catalítico, as quais produzem gasolina, GLP, gasóleo leve de reciclo, óleo clarificado, gases leves e coque.

O coque, que é um composto sólido, que se deposita na superfície do catalisador desativando-

o, é queimado no regenerador. O calor gerado pelas reações de combustão é levado pelo catalisador ao riser na forma de calor sensível, sendo a fonte de energia necessária às reações de craqueamento que são endotérmicas (LANSARIN, 1997). Este processo é utilizado em todo o mundo, uma vez que a demanda de gasolina em vários países é superior à dos óleos combustíveis. O craqueamento catalítico corrige a produção de gasolina e GLP, suplementando a diferença entre a quantidade obtida diretamente do petróleo e a requerida pela refinaria, de modo a atender o mercado consumidor.

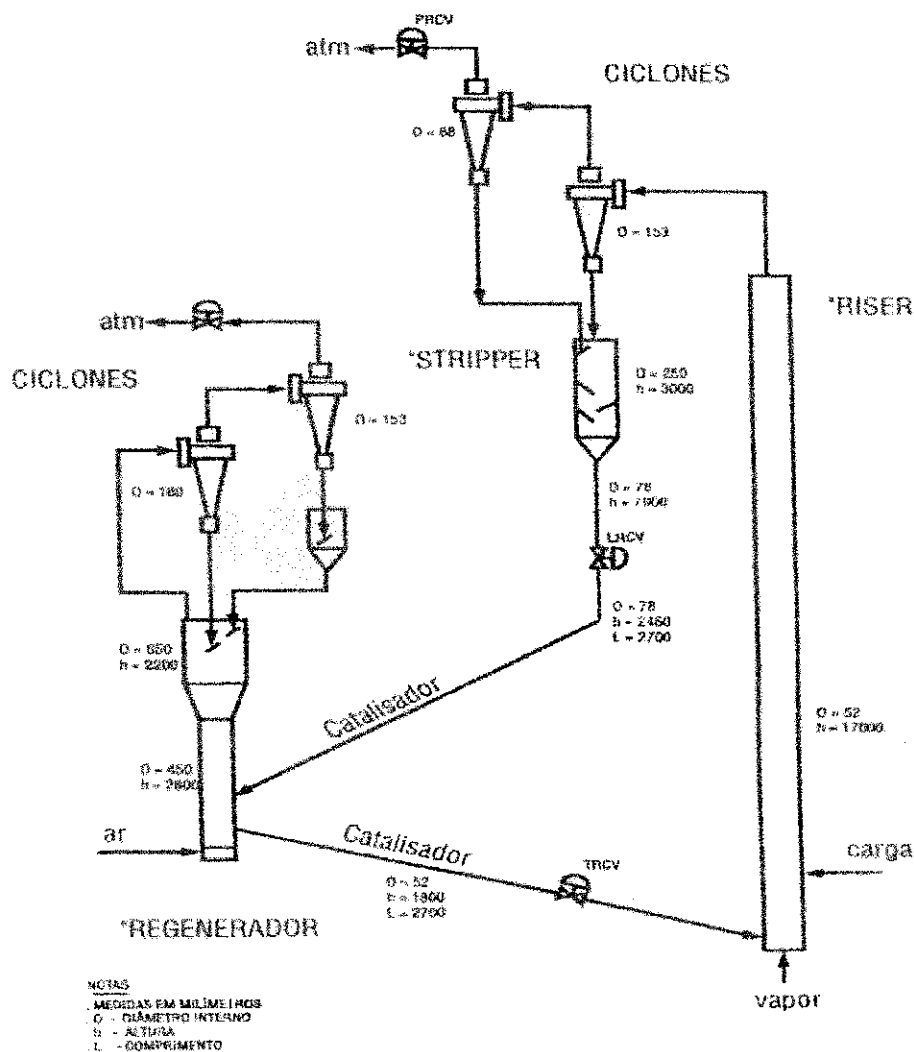


Figura 1: Diagrama simplificado do circuito regenerador riser, stripper, da unidade multipropósito de FCC U-144 da SIX/PETROBRÁS.

A figura 1 mostra um diagrama esquemático da unidade multipropósito de FCC completa, existente na SIX/PETROBRÁS, em São Mateus do Sul-PR, que é utilizada para obtenção

de dados reais para validação experimental dos resultados de simulações numérica. Dentre os equipamentos da figura 1, será dedicado atenção apenas ao tubo de elevação (riser), que é o elemento principal da unidade, i.e., onde ocorrem as reações de craqueamento dos hidrocarbonetos pesados (gasóleo), para a formação dos hidrocarbonetos leves. Numa planta rentável atualmente, apenas 45% da carga de entrada se transforma em gasolina. Há, portanto, uma grande margem a melhorar neste processo para maximizar a produção de gasolina e GLP (gás liquefeito de petróleo).

O objetivo final da dissertação é a implementação do modelo da teoria cinética no CFX e a definição de um modelo cinético do craqueamento catalítico, visando sua utilização na simulação do riser.

2.2 Metodologia e Estratégia de Ação

A estratégia adotada consistiu em resolver problemas com hipóteses simplificadoras para facilitar a resolução. Obtido a solução para cada caso específico, os resultados serão utilizados para resolução do modelo completo, apresentado na tabela 1, como o caso objetivo futuro.

Tabela 1: Estratégias para a abordagem do problema.

Caso	Dimensões	Energia	Reação	Turbulência (Gás)	KTGF	Aplicativo
A	1D	Não isot.	10 Lumps	Não	Não	Fortran
B	3D	isot.	Não	$\kappa - \epsilon$	Não	CFX 4.4
C	3D	isot.	Não	$\kappa - \epsilon$	Sim	CFX 4.4
Etapa Futura	3D	Não isot.	Sim	Sim	Sim	CFX 4.4

O objetivo futuro do projeto de pesquisa é implementar no CFX o modelo de 2 fases, tridimensional, não isotérmico, com reação química; modelo de turbulência para a fase gás e o modelo da Teoria Cinética para a fase particulada. A dissertação delineará alguns passos para se atingir este objetivo.

O trabalho será realizado utilizando um software comercial para simulação da fluidodinâmica computacional, CFX. Este software utiliza o método dos Volumes Finitos para para a discretização do modelo matemático.

3 *Modelo Matemático: Fluidodinâmica do Riser*

O modelo matemático consiste de duas etapas distintas. Uma para a descrição de um modelo para a cinética do craqueamento (caso A, tabela 1) e outra para a descrição de um modelo da fluidodinâmica do riser (caso B e C, tabela 1).

Este capítulo trata do modelo fluidodinâmico do riser e o capítulo seguinte, do modelo para a cinética de craqueamento catalítico.

As equações que descrevem o processo são as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia, aplicadas as fases sólida e gasosa.

3.1 Fase Gás

As equações básicas para a fase gasosa, bem como as equações de conservação das propriedades do escoamento turbulento, são:

3.1.1 Continuidade

$$\frac{\partial(\rho_g \epsilon_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \epsilon_g v_g) = 0 \quad (3.1)$$

onde ρ é a densidade da fase, ϵ é a fração volumétrica e v_g é o vetor velocidade média volumétrica do gás.

3.1.2 Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial(\rho_g \epsilon_g v_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \epsilon_g v_g v_g) = \nabla \cdot (\epsilon_g \tau_g) + \beta_{gs}(v_s - v_g) + \epsilon_g \rho_g g + P_g \nabla \epsilon_g - \frac{2}{3} \nabla \rho_g k_g \quad (3.2)$$

o termo $P_g \nabla \epsilon_g$ representa um termo adicional da força de pressão devido a variação de área efetiva da fase em função da presença da outra fase ALVES (1998), ALVES et al (2001).

3.1.3 Tensões

$$\tau_g = -P_g I + \sigma_g \quad (3.3)$$

onde,

$$\sigma_g = 2\mu_g \gamma_g \quad (3.4)$$

sendo μ_g a viscosidade efetiva da fase gás, γ_g é o tensor taxa de deformação da fase gás, dado por:

$$\gamma_g = \frac{1}{2}(\nabla v_g + \nabla v_g^T) - \frac{1}{3}(\nabla \cdot v_g)I \quad (3.5)$$

3.1.4 Modelo de Turbulência $\kappa - \epsilon^\kappa$

A viscosidade da fase gasosa pode ser estimada a partir de qualquer modelo de turbulência (ALVES, 1998). Os modelos mais completos são os modelos de duas equações. Entre estes, o modelo $\kappa - \epsilon^\kappa$ é o mais utilizado. A vantagem deste modelo é a possibilidade da inclusão do termo de transferência de energia cinética do movimento flutuante entre as fases.

3.1.4.1 Energia Cinética Turbulenta(κ)

A equação da energia cinética turbulenta da fase gasosa é obtida subtraindo-se a equação média temporal do momento linear da equação local instantânea, e esta diferença é multiplicada pela flutuação da velocidade do gás, resultando, após algumas simplificações (ALVES, 1998) em:

$$\frac{\partial(\epsilon_g \rho_g \kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \epsilon_g v_g \kappa) = \nabla \cdot (\epsilon_g \Gamma_\kappa \nabla \kappa) - (\tau_g : \nabla v_g - \rho_g \epsilon^\kappa) \epsilon_g + \beta_{ki} \overline{v'_g v'_g} - 2\kappa \quad (3.6)$$

onde κ é energia do movimento turbulento da fase gás (relacionada as flutuações da velocidade média volumétrica do gás), definida por:

$$\kappa = \frac{1}{2} \left(\sum_{\eta} \overline{v'^2_{g,\eta}} \right) \quad (3.7)$$

3.1.4.2 Taxa de Dissipação (ϵ^κ)

A equação da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta da fase gasosa é:

$$\frac{\partial(\epsilon_g \rho_g \epsilon^\kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \epsilon_g v_g \epsilon^\kappa) = \nabla \cdot (\epsilon_g \Gamma_\kappa \nabla \epsilon^\kappa) - [C_1 \tau_g : \nabla v_g - C_2 \rho_g \epsilon^\kappa + \beta_{ik} (\overline{v'_s v'_g} - 2\kappa)] \frac{\kappa}{\epsilon^\kappa} \epsilon_g \quad (3.8)$$

onde ϵ^κ é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.

Os parâmetros do modelo $\kappa - \epsilon^\kappa$ são: $\Gamma_\kappa = \frac{\mu_g}{\sigma_\kappa}$, $\Gamma_\epsilon = \frac{\mu_g}{\sigma_\epsilon}$, $\sigma_\kappa = 1,00$, $\sigma_\epsilon = 1,30$, $C_1 = 1,44$, $C_2 = 1,92$. A viscosidade turbulenta da fase gás foi calculada pelo modelo de turbulência $\kappa - \epsilon^\kappa$. No modelo $\kappa - \epsilon^\kappa$, a viscosidade turbulenta é calculada pela relação de Kolmogorov-Prandtl.

$$\mu_g^t = C_\mu \rho_g \frac{\kappa^2}{\epsilon^\kappa} \quad (3.9)$$

e

$$\mu_g = \mu_g^l + \mu_g^t \quad (3.10)$$

3.2 Fase Particulada

Para a fase particulada, a difusão molecular de momento não existe, pois esta é formada de partículas sólidas, sem gradientes internos de velocidade. Portanto, $\tau_s^l = 0$. As propriedades desta fase são valores médios do conjunto de partículas. As equações finais são:

3.2.1 Continuidade

$$\frac{\partial(\rho_s \epsilon_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s v_s) = 0 \quad (3.11)$$

onde ρ_s é a densidade da fase, ϵ_s é a fração volumétrica e v_s é o vetor velocidade média volumétrica das partículas.

3.2.2 Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial(\epsilon_s \rho_s v_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon_s \rho_s v_s v_s) = \nabla \cdot (\epsilon_s \tau_s) + \beta_{gs} (v_g - v_s) + \epsilon_s \rho_s g + \epsilon_s \nabla P_g \quad (3.12)$$

onde P_g é a pressão do gás, τ_s é o tensor tensão, β é o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases e g é a aceleração da gravidade. O termo devido a pressão do gás é a força "buoyant" (força de empuxo) agindo sobre a partícula.

3.2.3 Tensões

$$\tau_s = (-P_s + \xi_s \nabla \cdot v_s)I + \sigma_s \quad (3.13)$$

onde ,

$$\sigma_s = 2\mu_s \gamma_s \quad (3.14)$$

donde μ_s é a viscosidade efetiva, P_s é a pressão efetiva e γ_s é o tensor taxa de deformação da fase particulada, dado por:

$$\gamma_s = \frac{1}{2} (\nabla v_s + \nabla v_s^T) - \frac{1}{3} (\nabla \cdot v_s)I \quad (3.15)$$

3.2.4 Temperatura Granular

O modelo de temperatura granular ou energia pseudo-térmica foi utilizado por ALVES (1998), NERI e GIDASPOW (2000) e ALVES et al (2001), onde a temperatura granular, por analogia com a temperatura termodinâmica na teoria cinética dos gases, é definida como sendo:

$$T_{Gran} = \frac{1}{3} \overline{v'_s v'_s} \quad (3.16)$$

onde T_{Gran} é a temperatura granular, $v'_s = v'_z = v'_r$ e v'_s é a flutuação das velocidades das partículas.

O termo de dispersão de momento para a fase particulada e que dependem desta temperatura é dado por:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial \epsilon_s \rho_s T_{Gran}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \epsilon_s v_s T_{Gran}) \right] = \nabla \cdot (\Gamma_{T_{Gran}} \nabla T_{Gran}) - \tau_s : \nabla v_s - \gamma_1 + \gamma_2 \quad (3.17)$$

onde

$$\gamma_1 = 3(1 + e^2) \epsilon_s^2 g_0 \left[\frac{4}{d_p} \frac{\overline{T_{Gran}}}{\pi} - \nabla \cdot v_s \right] \quad (3.18)$$

é a dissipação de energia pseudo-térmica, devido às colisões inelásticas entre as partículas, e "e" é o coeficiente de restituição partícula-partícula, que assume o valor 1 para colisões elásticas e 0 (zero) para colisões plásticas e ϵ_s é a fração volumétrica de sólidos.

$$\gamma_2 = \beta_{gs} (\overline{v'_g v'_s} - 3T_{Gran}) \quad (3.19)$$

é a taxa de transferência de energia cinética do movimento turbulento entre as fases, onde

$$\overline{v'_g v'_s} = \kappa + \frac{3}{2} T_{Gran} \quad (3.20)$$

A pressão efetiva dos sólidos, a função de distribuição radial, a viscosidade do conjunto, a viscosidade efetiva da fase particulada e o coeficiente de difusão da energia pseudo-térmica são dados pelas equações 3.21, 3.22, 3.23, 3.24 e 3.26, respectivamente.

$$P_s = \epsilon_s \rho_s [1 + 2(1 + e)\epsilon_s g_0] T_{Gran} \quad (3.21)$$

$$g_0 = \frac{3}{5} \left[1 - \left(\frac{\epsilon_s}{\epsilon_{smax}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} \quad (3.22)$$

$$\xi_s = \frac{4}{3} \epsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \frac{\sqrt{T_{Gran}}}{\pi} \quad (3.23)$$

$$\mu_s = \frac{2\mu_{Sdil}}{(1 + e)g_0} \left[1 + \frac{4}{5}(1 + e)g_0 \epsilon_s \right]^2 + \frac{4}{5} \epsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \frac{\sqrt{T_{Gran}}}{\pi} \quad (3.24)$$

com

$$\mu_{Sdil} = \frac{4}{96} \rho_s d_p \sqrt{\pi T_{Gran}} \quad (3.25)$$

$$\Gamma_{T_{Gran}} = \frac{2\Gamma_{T_{Grandil}}}{(1 + e)g_0} \left[1 + \frac{6}{5}(1 + e)g_0 \epsilon_s \right]^2 + 2\epsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \frac{\sqrt{T_{Gran}}}{\pi} \quad (3.26)$$

sendo

$$\Gamma_{T_{Grandil}} = \frac{75}{384} \rho_s d_p \sqrt{\pi T_{Gran}} \quad (3.27)$$

3.3 Coeficiente de Transferência de Quantidade de Movimento entre fases

Finalmente, o último parâmetro do modelo é o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases gasosa e particulada, válida para todas as frações de sólido.

$$\beta_{gs} = \left(\frac{17,3}{Re} + 0,336 \right) \frac{\rho_g}{d_p} |v_g - v_s| (1 - \epsilon_g) \epsilon_g^{-2,8} \quad (3.28)$$

onde Re é o número de Reynolds e é definido como:

$$Re = \frac{d_p |v_g - v_s| \rho_g}{\mu_g} \quad (3.29)$$

3.4 Condições de Contorno

Neste trabalho as seguintes condições de contorno foram utilizadas:

- **Condição na Entrada:** exceto para a pressão, a qual é obtida por extrapolação, todas as outras variáveis têm valores conhecidos na entrada;

$$\phi_{ent} = \phi_{conhecido} \quad (3.30)$$

- **Energia Cinética Turbulenta:**

$$\kappa_0 = 0,005v_{g0}^2 \quad (3.31)$$

- **Taxa de Dissipação de Energia Cinética Turbulenta**

$$\epsilon_0 = \frac{0,09\kappa_0^{\frac{3}{2}}}{0,03R} \quad (3.32)$$

- **Temperatura Granular**

$$T_{Gran0} = \frac{1}{3}v_s^2 \quad (3.33)$$

- **Centro do Tubo:** A condição de simetria é utilizada para todas as variáveis (utilizada somente no caso simétrico)

$$\frac{\partial \phi}{\partial r} = 0 \quad (3.34)$$

- **Condição na Parede:** para os componentes de velocidades da fase gás, a condição de não-deslizamento é aplicada:

$$v_{gz} = v_{gr} = 0 \quad (3.35)$$

- Para as partículas, a velocidade radial é $v_{sr} = 0$, pois não há fluxo através da parede. O valor da velocidade axial v_{sz} está compreendido entre a velocidade de arraste do gás e a velocidade terminal da partícula. Para o modelo cinético do escoamento de materiais granulares a velocidade axial na parede é obtida de um balanço para a taxa de transferência de tensão viscosa das partículas para a parede e que colidem com esta (ALVES, 1998), (ALVES et al, 2001), como segue:

$$\tau_{rz}|_w = \frac{\Phi_w \sqrt{3} \pi \rho_s \epsilon_s T_{Gran}^{1/2} v_{sz}}{6 \epsilon_{smax} \left[1 - \left(\frac{\epsilon_s}{\epsilon_{smax}} \right)^{1/3} \right]} \Big|_w \quad (3.36)$$

onde Φ_w é um fator de atrito partícula-parede, que varia de 0 (parede lisa) a 1 (parede rugosa).

- κ e ϵ^* são calculados a partir de funções de parede (ALVES, 1998) e (ALVES et al, 2001).

- A temperatura granular é calculada a partir do fluxo de energia pseudo-térmica, como

segue:

$$q_{PT}|_w = \gamma_w - v_{sr} \tau_{rz}|_w \quad (3.37)$$

onde

$$\gamma_w = \frac{\sqrt{3} \epsilon_s^2 \rho_s T_{Gran}^{3/2} (1 - e_w^2)}{4 \epsilon_{smax} \left[1 - \left(\frac{\epsilon_s}{\epsilon_{smax}} \right) \right]} \Big|_w \quad (3.38)$$

- A concentração de partículas é calculada a partir de um balanço de quantidade de movimento na direção radial, isto é:

$$\frac{\partial}{\partial r} (r \epsilon_s T_{Gran}) \Big|_w - \epsilon_s T_{Gran} \Big|_w = \gamma \frac{\partial \epsilon_s}{\partial r} \Big|_w \quad (3.39)$$

4 *Modelo Matemático: Craqueamento Catalítico*

No capítulo 3, apresentou-se o modelo fluidodinâmico para o riser a frio, sem reação química. Neste capítulo 4, apresenta-se um modelo para a cinética do craqueamento, o qual será posteriormente, no capítulo 7, aplicado a um sistema unidimensional, em fluxo pistonado, no qual as características fluidodinâmicas do riser foram desprezadas.

O craqueamento catalítico é um processo de refino que visa a aumentar a produção de gasolina e GLP de uma refinaria, através da conversão de cortes pesados provenientes da destilação do petróleo (gasóleo e resíduos), em frações leves. É um processo largamente utilizado em todo o mundo, uma vez que a demanda de gasolina em vários países é superior à dos óleos combustíveis. O craqueamento catalítico corrige a produção de gasolina e GLP, suplementando a diferença entre a quantidade obtida diretamente do petróleo e a requerida pela refinaria de modo a atender o mercado em sua área de influência.

Originalmente, os processos de craqueamento surgiram da necessidade de produção de gasolina em quantidade e qualidade suficiente de modo a atender à crescente demanda desse combustível, em face ao crescimento da indústria automobilística dos Estados Unidos no início do século.

Até 1913, toda a gasolina produzida era obtida por destilação direta do petróleo, portanto, tanto a qualidade como a quantidade dependiam unicamente do tipo de óleo cru refinado. Como havia grande variedade de petróleos, havia também uma grande variação no rendimento e na qualidade das gasolinas. Em média, o rendimento situava-se em torno de 20% em volume, para um produto como um índice de octanagem de 50.

À partir da segunda década do século 20, começaram a surgir processos comerciais de craqueamento, objetivando suprir as necessidades da indústria automobilística. Iniciando com o craqueamento térmico, o processo mais tarde passou a utilizar a versão catalítica, em leitos fixo, móvel ou fluidizado, desenvolvendo-se de forma notável esta última concepção, até atingir

o estágio onde hoje nos encontramos(o Brasil), o craqueamento catalítico fluido é praticamente um processo imprescindível às modernas refinarias.

O FCC é hoje um processo largamente difundido em todo o mundo, devido principalmente a dois fatores. O primeiro deles consiste no fator de contribuir eficazmente com a refinaria no sentido de ajustar sua produção às reais necessidades do mercado consumidor local, devido à sua grande flexibilidade operacional. O segundo fator, que tornou consagrado o processo, está ligado ao aspecto econômico. Transformando as frações residuais, de baixo valor comercial, em derivados nobres de alta valor, tais como gasolina e GLP, o craqueamento catalítico aumenta em muito os lucros da refinaria, devido à sua extraordinária rentabilidade (ABADIE, 19XX).

As tabelas 2 e 3 apresentam rendimentos típicos volumétricos e ponderais tomados em relação à carga, quando a unidade opera, visando a maximização de gasolina ou de GLP, craqueando apenas gásóleo puro, ou seja, sem adição de resíduos.

Tabela 2: Operação para o máximo de GLP (ABADIE, 19XX)

Corrente	% Volume	% Peso
Carga Fresca	100,00	100,00
Gás Combustível	-	8,04
Gás Liquefeito	39,75	24,00
Gasolina (NAFTA)	52,50	44,21
Diesel de FCC	9,50	10,25
Óleo Decantado	5,50	6,70
Coque	-	6,80

Tabela 3: Operação para o máximo de Gasolina (ABADIE, 19XX)

Corrente	% Volume	% Peso
Carga Fresca	100,00	100,00
Gás Combustível	-	4,30
Gás Liquefeito	28,90	17,90
Gasolina (NAFTA)	65,20	53,70
Diesel de FCC	10,00	11,70
Óleo Decantado	5,00	6,00
Coque	-	6,40

4.1 Cinética do Craqueamento Catalítico

Craquear um hidrocarboneto significa submetê-lo a uma reação de cisão da molécula. O craqueamento catalítico ocorre sobre os sítios ácidos da superfície do catalisador sólido, que

contribuem para a formulação de uma espécie intermediária de fundamental importância, o íon carbônico, que é um cátion orgânico (LANSARIN, 1997).

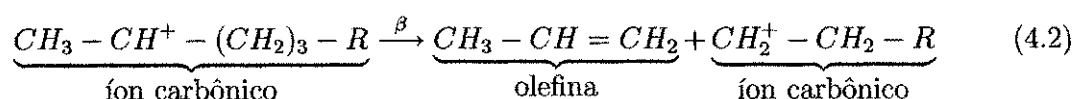
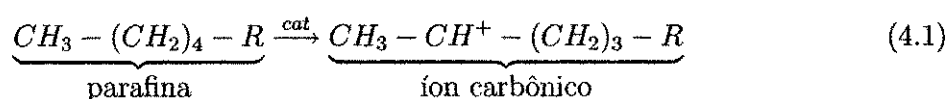
A carga da unidade de FCC é uma mistura contendo em torno de 10^4 hidrocarbonetos, principalmente parafinas, naftenos e aromáticos, que originam inúmeras reações, algumas delas indesejáveis, tais como reações de polimerização, ciclização e condensação, geralmente associadas a gênese do coque que se deposita sobre o catalisador reduzindo sua atividade.

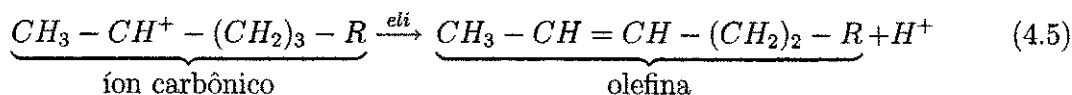
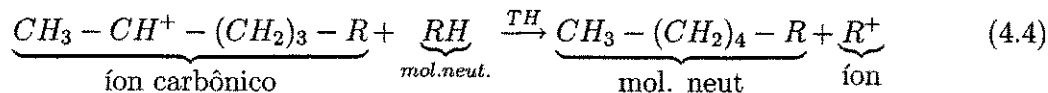
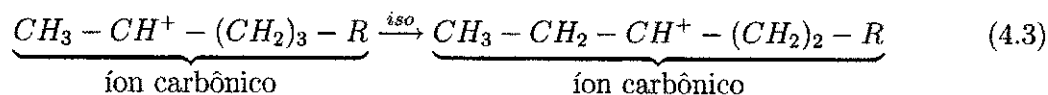
A tabela 4 apresenta uma síntese das reações que ocorrem no craqueamento catalítico (LANSARIN, 1997).

Tabela 4: Visão global das reações que ocorrem no craqueamento catalítico de gasóleos pesados

Hidrocarboneto	Principais Reações	Principais Produtos
n-Parafinas e isoparafinas	Quebra do hidrocarboneto em diferentes pontos. Não é usual a quebra das pontas da cadeia.	Parafinas ramificadas e olefinas com mais de três carbonos. Pequenas quantidades de metano.
Naftenos	Quebra de anéis e cadeias laterais	Parafinas e olefinas. Pequena quantidade de compostos aromáticos.
Compostos nafteno-aromáticos	Quebra da cadeia lateral dos anéis aromáticos. Quebra do anel naftênico.	Parafinas, olefinas e aromáticos
Compostos aromáticos sem cadeia lateral	Craqueamento negligenciável	Coque
Compostos aromáticos com cadeia lateral	Quebra de cadeia lateral dos anéis aromáticos.	Olefinas e compostos aromáticos.
Olefinas	Quebra da cadeia em vários pontos.	Olefinas ramificadas e pequenas quantidades de parafinas

O craqueamento de uma parafina de cadeia reta, por exemplo, inicia com a formação do íon carbono sobre sítios ácidos (de Lewis ou de Brønsted) na superfície do catalisador. Uma vez formado, este íon pode reagir de várias maneiras, como mostram as reações a seguir:





A reação 4.2 é a cisão heterolítica da ligação $C - C$ (o par de elétrons da ligação fica pertencendo a um dos átomos) com a formação de uma olefina menor que a parafina que lhe deu origem. A isomerização (reação 4.3) ocorre devido a fácil migração do hidreto no íon carbônico. A transferência de hidrogênio, reação 4.4, é o principal mecanismo de craqueamento das parafinas, enquanto a eliminação de hidrogênio raramente ocorre, estando associada a presença de envenenamento por metais.

As concentrações de parafinas, naftenos e aromáticos na carga de uma unidade de FCC têm consequência direta nos seus produtos. De uma maneira geral, a produção de gasolina é alta quando se craqueia cortes ricos em naftenos ou alquilbenzenos, média para cortes parafínicos e baixa para compostos aromáticos polinucleares. A formação de leves varia de modo similar ao da gasolina e a formação de coque é muito maior quando a alimentação é rica em compostos aromáticos polinucleados (LANSARIN, 1997).

A complexidade da carga de uma unidade de FCC é um dos principais obstáculos a vencer quando se deseja modelar a unidade. É impossível escrever balanços de massa para cada espécie reagente, uma vez que não reagem apenas as moléculas alimentadas, mas também seus produtos. A solução para esse problema é agrupar os reagentes com características semelhantes e tratá-los como se fossem uma única espécie (pseudo-espécie). A partir de 1969 foram propostos modelos cinéticos que envolvem conversões e efeitos globais, bem como pseudo-espécies, chamados "lumping models" (WEEKMAN, 1969).

4.1.1 Modelo dos Dez Pseudo-Grupos (Ten Lumps Model)

O modelo dos dez lumps foi desenvolvido por pesquisadores da Mobil (MARTIGNONI, 1998). Este modelo divide o gasóleo em frações pesadas e leves, de acordo com sua temperatura de ebulição.

As frações leves entram em ebulição entre 221 e 341,3°C e as pesadas acima de 341,1°C. De

um modo geral, pseudo-componentes leves, por sua vez, também originam gasolina e coque. Como mostra a figura 2,

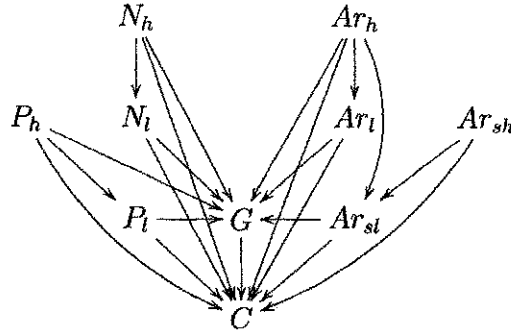


Figura 2: Esquema do modelo dos dez lumps

Os pseudo-componentes do modelo de dez lumps são parafinas leves P_l e pesadas P_h ; naftenos leves N_l e pesados N_h ; gasolina G ; coque C ; aromáticos leves Ar_l e pesados Ar_h ; aromáticos substituídos leves Ar_{sl} e pesados Ar_{sh} , que são anéis aromáticos desprovidos de cadeia lateral e com um átomo de hidrogênio substituído por outro qualquer. Os pseudo-grupos de aromáticos substituídos não formam gasolina, mas contribuem para a formação de coque. Não há interação entre os grupos de parafinas, naftenos e aromáticos.

A equação de conservação da massa para cada grupo do modelo cinético é dado por (FROMENT e BISCHOFF, 1990):

$$u_{s,g} \frac{dC_i}{dz} = \sum_j \frac{k_{ij} C_j}{1 + K_{Ar_h} C_{Ar_h}} \rho_s \epsilon_s \phi \quad (4.6)$$

A velocidade superficial do gás $u_{s,g}$ e a fração de gás são calculadas em cada Δz usado na integração numérica.

A equação de conservação da massa para o coque no catalisador é dada por:

$$m_s \frac{dC_c}{dz} = \left(\frac{k_{coquej}}{1 + K_{Ar_h} C_{Ar_h}} \right) \rho_s M_s \epsilon_s \beta \phi \Omega \quad (4.7)$$

O balanço de energia no riser é dada por:

$$(m_{GO} c_{pg} + m_s c_{ps}) \frac{dT}{dz} = \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{i-1} \frac{k'_{ij}}{1 + K_{Ar_h} C_{Ar_h}} \rho_s (-\Delta H_{ij}) \epsilon_s \phi \Omega \quad (4.8)$$

onde $k_{ij} = k_{ij}^0 e^{-\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right)}$ são as constantes cinéticas e $\beta = 0,33$ é a razão em massa de coque depositado sobre o catalisador em relação ao grupo C.

A desativação catalítica acontece devido à deposição de coque no catalisador é dada por:

$$\phi(C_c) = \frac{1}{1 + 69,47(100C_c)^{0,38}} \quad (4.9)$$

As características do leito são dadas por:

$$\epsilon_G = \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4u_{s,g}u_t}}{2u_t} \quad (4.10)$$

onde

$$\alpha = u_t + u_{s,g} + u_{s,P} \quad (4.11)$$

$$u_{s,g} = \frac{m_{GO}}{\rho_{GO}\Omega} \quad (4.12)$$

$$u_{s,P} = \frac{m_s}{\rho_s\Omega} \quad (4.13)$$

$$u_t = \sqrt{\frac{4(\rho_s - \rho_g)gd_P}{3\rho_g C_D}} \quad (4.14)$$

$$\epsilon_s + \epsilon_g = 1 \quad (4.15)$$

onde ϵ_G é a porosidade u_t é a velocidade terminal da partícula, $u_{s,P}$ é a velocidade superficial da fase particulada, g a aceleração da gravidade, Ω é a área da secção transversal do riser, M_c o peso molecular do coque e C_D , o coeficiente de arraste que é função do número de Reynolds. Dois casos limites podem ser citados:

$$u_t = \frac{(\rho_s - \rho_g)gd_P^2}{18\mu} \quad \text{se } Re < 0,4 \quad (4.16)$$

$$u_t = \sqrt{\frac{3,1(\rho_s - \rho_g)gd_P}{\rho_g}} \quad \text{se } Re > 10^3 \quad (4.17)$$

Para $0,4 < Re < 10^3$, o C_D é calculado em função do Reynolds pela equação 4.14.

A cinética da reação de craqueamento foi estudada porque a mesma é um termo que aparecerá nas equações de conservação da massa e da energia.

5 Método Numérico

O código do CFX utiliza o método dos volumes finitos para a discretização do modelo.

No método dos volumes finitos as equações diferenciais aproximadas são obtidas através de balanços de conservação da propriedade envolvida (massa, quantidade de movimento, entalpia, etc.) no volume elementar (MALISKA, 1995).

Existem duas maneiras de se obter as equações aproximadas neste método.

- Balanço da propriedade nos volumes elementares.
- Integração da equação diferencial na forma conservativa no volume elementar e no tempo.

5.1 Discretização usando Volumes Finitos

As equações diferenciais podem ser escritas de forma generalizada para uma variável ϕ qualquer como:

$$\frac{\partial(\rho_i \epsilon_i \phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \epsilon_i v_i \phi - \epsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi) = S_\phi \quad (5.1)$$

onde o termo S_ϕ contém o termo fonte de ϕ no interior do volume de controle e todos os outros fluxos de ϕ através das faces do volume de controle que não foram ordenados no segundo termo do lado esquerdo da equação 5.1. Aplicando a integral na equação 5.1 sobre um volume de controle ϑ qualquer, obtém-se:

$$\int_{\vartheta} \frac{\partial(\rho_i \epsilon_i \phi)}{\partial t} d\vartheta + \int_{\vartheta} \nabla \cdot (\epsilon_i \rho_i v_i \phi - \epsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi) d\vartheta = \int_{\vartheta} S_\phi d\vartheta \quad (5.2)$$

Usando o teorema de Leibnitz (BIRD et al, 1978) para diferenciação de uma integral para permutar a derivada com a integral do primeiro termo do lado esquerdo, obtém-se:

$$\int_{\vartheta} \frac{\partial(\rho_i \epsilon_i \phi)}{\partial t} d\vartheta = \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\vartheta} \epsilon_i \rho_i \phi d\vartheta \right) - \int_S \rho_i \epsilon_i \phi (v_S \cdot n) dS \quad (5.3)$$

onde n é o vetor normal unitário e externo a superfície de contorno do volume de controle e

v_S é a velocidade de deslocamento da superfície.

Como o volume de controle não muda com o tempo ($v_s \equiv 0$), então tem-se:

$$\int_{\vartheta} \frac{\partial(\rho_i \epsilon_i \phi)}{\partial t} d\vartheta = \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\vartheta} \epsilon_i \rho_i \phi d\vartheta \right) \quad (5.4)$$

Usando-se, agora, o teorema da divergência de Gauss para transformar a segunda integral de volume do lado esquerdo da equação 5.2 numa integral se superfície, obtém-se:

$$\int_{\vartheta} \nabla \cdot (\epsilon_i \rho_i v_i \phi - \epsilon_i \Gamma_{\phi} \nabla \phi) d\vartheta = \int_S (\epsilon_i \rho_i v_i \phi - \epsilon_i \Gamma_{\phi} \nabla \phi) \cdot ndS \quad (5.5)$$

Substituindo-se as equações 5.4, 5.5 na equação 5.2, tem-se que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{\vartheta} (\epsilon_i \rho_i \phi) d\vartheta \right] + \int_A (\epsilon_i \rho_i v_i \phi - \epsilon_i \Gamma_{\phi} \nabla \phi) \cdot ndA = \int_{\vartheta} S_{\phi} d\vartheta \quad (5.6)$$

Estas integrais para o volume de controle finito $\Delta\vartheta$ são aproximadas da seguinte forma:

- **Termo transiente**

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\vartheta} \epsilon_i \rho_i \phi d\vartheta \right) \cong \frac{\partial(\rho_i \epsilon_i \phi)}{\partial t} \vartheta_P \cong \frac{(\rho_i \epsilon_i \phi) - (\rho_i \epsilon_i \phi)^0}{\Delta t} \vartheta_P \quad (5.7)$$

- **Termo fonte**

$$\int_{\vartheta} S_{\phi} d\vartheta \cong S_{\phi} \vartheta_P \quad (5.8)$$

- **Termo de fluxo nas faces**

$$\begin{aligned} \int_A (\rho_i \epsilon_i v_i \phi - \epsilon_i \Gamma_{\phi} \nabla \phi) \cdot ndA &= A_w \left(\rho_i \epsilon_i v_{i,x} \phi - \epsilon_i \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \\ &+ A_e \left(\rho_i \epsilon_i v_{i,x} \phi - \epsilon_i \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \\ &+ A_s \left(\rho_i \epsilon_i v_{i,y} \phi - \epsilon_i \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \\ &+ A_n \left(\rho_i \epsilon_i v_{i,y} \phi - \epsilon_i \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \\ &+ A_f \left(\rho_i \epsilon_i v_{i,z} \phi - \epsilon_i \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_f \\ &+ A_b \left(\rho_i \epsilon_i v_{i,z} \phi - \epsilon_i \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b \end{aligned} \quad (5.9)$$

ou numa notação mais compacta,

$$\int_A (\rho_i \epsilon_i v_i \phi - \epsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi) \cdot n dA = \sum_{j=1}^6 (\rho_i \epsilon_i v_i \phi - \epsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi)_j \cdot n dA_j \quad (5.10)$$

onde os A_j são áreas. Substituindo-se as aproximações dadas pelas equações 5.7 a 5.10 na equação 5.6, tem-se a forma discreta das equações de conservação, para um variável genérica ϕ em um ponto P da malha:

$$\frac{(\epsilon_i \rho_i \phi)_P - (\epsilon_i \rho_i \phi)_P^0}{\Delta t} \vartheta_P + \sum_{j=1}^6 (\rho_i \epsilon_i v_i \phi - \epsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi)_j \cdot n A_j = S_\phi \vartheta_P \quad (5.11)$$

5.2 Positividade dos Coeficientes

A positividade dos coeficientes é de fundamental importância para que a solução obtida seja fisicamente coerente. Considere-se um problema bidimensional cujas temperaturas dos volumes vizinhos sejam maiores do que a temperatura do volume P . Considere-se ainda que os coeficientes de conexão de P com seus vizinhos sejam negativos e A_P positivo. A física correta do problema requer o aumento de Φ_P . Pela expressão

$$A_P \Phi_P = A_e \Phi_E + A_w \Phi_W + A_n \Phi_N + A_s \Phi_S + A_f \Phi_F + A_b \Phi_B + B \quad (5.12)$$

que é a equação aproximada para o ponto P , não existe esta garantia.

A não positividade dos coeficientes leva a uma resposta fisicamente incoerente.

5.3 Linearização do Termo Fonte

O termo fonte deve ser usado o mais implicitamente possível. Uma forma de fazer isto é lineariza-lo. Isto é necessário para reduzir a complexidade das equações onde a variável principal de uma equação aparece no termo fonte da outra.

Muitas vezes, dependendo da importância do termo fonte, a linearização não é suficiente, sendo necessário atualizá-lo mais frequentemente do que o restante dos coeficientes. Uma forma de linearizar o termo fonte é dada por:

$$S = S_P \Phi_P + S_c \quad (5.13)$$

onde o coeficiente $S_P \leq 0$. Quando a derivada do termo fonte em relação a variável Φ é

negativa, o método recomendado é expandir o termo fonte em série de Taylor como:

$$S = S^* + \left. \frac{dS}{d\Phi} \right|_P^* (\Phi_P - \Phi_P^*) \quad (5.14)$$

e determinar S_P e S_c .

Quando $\left. \frac{dS}{d\Phi} \right|_P >$, é necessário criar um artifício em que $S_P \Phi_P$ se torne negativo. Um artifício usado é aumentar o S_c , dificultando a convergência.

Sempre é possível fazer $S_P = 0$. Esta prática, entretanto, não utiliza as possibilidades de melhorar o esquema numérico via tratamento implícito de todo ou de parte do termo fonte.

5.4 Acoplamento Pressão - Velocidade

A discretização apresentada até então serve para todas as variáveis, exceto para a pressão do gás a qual é obtida através de um acoplamento do campo de velocidades desta fase com a equação da continuidade para a fase gás, num procedimento análogo aquele utilizado para os sistemas monofásicos (CFX-USER-MANUAL, 1997). O CFX oferece a opção de vários métodos de acoplamento entre eles o SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations).

6 O Simulador

6.1 Histórico

O Solver do CFX-4 é um programa para predição de fluxo laminar e turbulento, transferência de calor, junto com modelos adicionais para fluxo multifásico, combustão e transporte de partículas. A primeira versão do código (originalmente FLOW3D) era limitada a simples geometrias, tais como cilíndricas e cartesianas. A versão 2 superou estas limitações através do uso do sistema de coordenadas “body-fitted”. As versões 3 e 4 entendem a capacidade do código através do uso de multi-blocos ou bloco de malha não estruturada; isto é, a malha pode ser construída pela união de um número arbitrário de blocos de malha topologicamente retangular, ou por blocos. Neste período outras melhorias foram incorporadas ao software CFX (CFX-USER-MANUAL, 1997).

6.2 Estrutura do Software

O conjunto de programas que constituem o CFX-4 é formado pelo Pré-Processador, Processador e pelo Pós-Processador.

A figura 3 descreve todas as possíveis entradas e saídas para uma aplicação completa. Um problema típico pode envolver primeiro o uso do pré-processador CFX-MeshBuild ou CFX-Build para construção do arquivo de geometria. O CFX-Solver para resolução do problema e o pós-processador composto pelo CFX-View e CFX-Visualyse, conforme CFX-USER-MANUAL (1997).

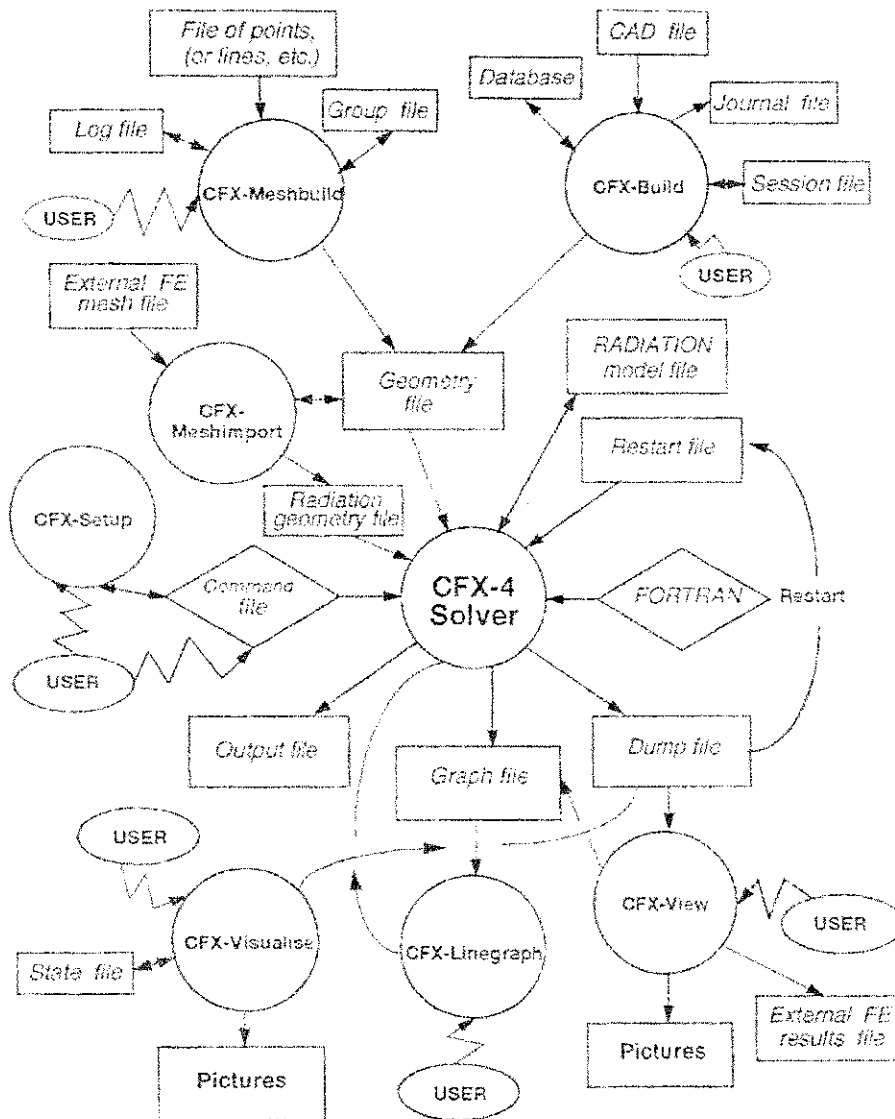


Figura 3: Fluxograma de conexão dos vários módulos do CFX (CFX-USER-MANUAL, 1997).

6.2.1 O Pré-Processador

O pré-processador, também conhecido como o gerador de malhas, pode ser usado para definir o domínio de cálculo e para gerar a malha propriamente dita. Detalhes da topologia e sistema de coordenadas são gravados no disco em um arquivo de comandos (command file), lido posteriormente pelo Módulo Frontend do Processador. O uso desses módulos é opcional.

Malhas e topologias simples podem ser definidas com o uso do módulo CFX-Setup. Os geradores de malha e de geometria incluem geradores de malha iterativos tais como: o CFX-Meshbuild e o CFX-Build, que podem ser usados para especificar as características da geome-

tria e converter elementos finitos para malha multi-blocos com o CFX-Meshimport.

O CFX-Setup é um programa interativo usado para gerar e editar o arquivo de comandos. Este programa exhibe comandos, subcomandos e palavras-chave numa sequência lógica. O CFX-Setup oferece três facilidades para ajudar na construção e edição do arquivo de comandos, que são:

- A facilidade de adicionar complexidade de acordo com o nível que usar (iniciante, intermediário e avançado).
- Exibe em uma janela o arquivo de comandos em tempo de construção.
- Tem a opção de checar o arquivo de comandos em busca de erro de sintaxe e/ou de lógica.

O CFX-Build é um dos geradores de geometrias do CFX. Suporta pacotes inclusos do CATIA, EUCLID3, CADD5, Unigraphics, ProENGINEER e IGES. Porém para este último é necessário licenças adicionais.

Para a criação da geometria usando o pré-processo deve-se seguir a sequência mostrada na figura 4.

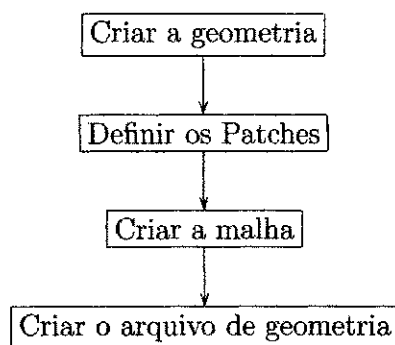


Figura 4: Sequência do CFX-Build para criação da geometria

6.2.2 O Processador

Este é dividido em dois módulos: o Frontend e o Solver.

- **Módulo Frontend** - tem a finalidade de converter o arquivo de comandos produzidos pelo usuário para uma execução eficiente e promover ajuda necessária para resolução de problemas. O arquivo de comandos é um arquivo de texto simples (ASCII) composto

de comando escritos em inglês e é dividido em comandos, subcomandos e palavras-chave. Permite ainda inserir subrotinas em Fortran.

- **Módulo Solver** - tem como finalidade resolver as equações discretizadas que representam o problema. O solver recebe informações do arquivo de comandos, que permite a máxima eficiência, em diferentes tipos de computadores, incluindo processamento paralelo e vetorial. As informações da resolução do problema são escritas num arquivo de dump.

6.2.3 O Pós-Processador

Tem a função de produzir gráficos para visualização da resposta do problema, lidos a partir do arquivo de dump produzido pelo solver. O uso deste módulo é opcional.

O CFX tem alguns programas de pós-processamento: o CFX-View, CFX-Linegraph e o CFX-Visualise. Destes três destacam-se:

- **CFX-View**: tem como função principal ler os resultados contidos no arquivo de dump e exibir em forma de mapa de contornos, superfícies e etc., de acordo com a necessidade do usuário. Tem como principal vantagem sobre o CFX-Analyse, a opção de aplicar um fator de escala para qualquer direção, isoladamente.
- **CFX-Analyse**: tem a mesma função do CFX-View, sendo mais simples de ser utilizado.

6.3 Arquivos utilizador pelo CFX

A tabela 5 lista e descreve os arquivos utilizados e gerados pelo CFX. Os ** representam um número que inicia em 01 e termina em 99 e indica a simulação corrente. Quando a simulação é iniciada, o CFX lê os arquivos necessários fornecidos pelo usuário e faz uma cópia com esse número incrementado. Quando chegar a 99, a próxima cópia produzida será 01.

Tabela 5: Arquivos utilizador e criados pelo CFX.

Nome do Arquivo	Descrição
m**.fc	Arquivo de comandos (Command File), escritos pelo usuário.
m**.dmp	Arquivo onde a resposta encontrada é armazenada (Dump File)
m**.fo	Arquivo de texto simples que contém uma lista de todos os possíveis erros que impediram a execução do CFX-Solver
m**.ft	Arquivo que contém o diagnóstico e histórico de execução do CFX-Solver
m**.geo	Arquivo que contém a geometria construída pelo pré-processor.
m**.f	Arquivo que contém subrotinas escritas pelo usuário em Fortran 77.

6.4 O Arquivo de Comandos

Este arquivo contém o máximo de oito comandos principais. A estrutura básica do arquivo de comandos é dada pelo exemplo a seguir:

```
>> CFX4
  >>OPTIONS
    TREE DIMENSIONS
    BODY FITTED GRID
    CARTESIAN COORDINATES
    LAMINAR FLOW
    ISOTHERMAL FLOW
    INCOMPRESSIBLE FLOW
```

```
STEADY STATE
>>MODEL DATA
  >>SET INITIAL GUESS
    >>SET CONSTANT GUESS
      PHASE NAME 'PHASE1'
      U VELOCITY 1.56
  >>TITLE
    PROBLEM TITLE 'EXEMPLO'
  >>PHYSICAL PROPERTIES
    >>FLUID PARAMETERS
      PHASE NAME 'PHASE1'
      VISCOSITY 1.8500E-05
      DENSITY 1.16
  >>SOLVER DATA
    >>PROGRAM CONTROL
      MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS 200
      MASS SOURCE TOLERANCE 1.0000E-07
  >>MODEL BOUNDARY CONDITIONS
    >>SET VARIABLES
      PHASE NAME 'PHASE1'
      PATCH NAME 'ENTRADA'
      NORMAL VELOCITY 1.5600E+01
  >>STOP
```

O exemplo acima serve para a simulação do escoamento de um fluido. A geometria por onde escoar é lida em um arquivo m01.geo criado com a ajuda do CFX-Build por exemplo.

O escoamento é dito laminar, isotérmico, incompressível, estacionário. O fluido tem velocidade normal U de $1,56 \text{ m/s}$, viscosidade de $1,85 \cdot 10^{-5}$ e densidade de $1,16 \text{ kg/m}^3$.

O máximo de iteração é de 200 e a tolerância de massa de $1,0 \cdot 10^{-7} kg$ ou seja, o programa vai parar os cálculos quando uma dessas duas condições for satisfeita.

6.5 Incluindo Rotinas Fortran

O CFX possibilita ao usuário a utilização de rotinas predefinidas escritas em Fortran 77. A utilização destas rotinas se torna necessária quando o problema apresentar características mais complexas que às implementadas no arquivo de comandos. A tabela 6 apresenta uma lista das subrotinas predefinidas (iniciadas com `USR`) que o usuário pode utilizar. Uma descrição detalhada destas subrotinas pode ser encontrada em `CFX-USER-MANUAL (1997)`.

Tabela 6: Rotinas em Fortran que o usuário podem utilizar.

Subrotinas	Descrição
USRBCS	Para o usuário calcular as condições de contorno. Esta subrotinas é chamada em cada iteração e em cada passo de tempo.
USRBF	Para o usuário calcular as forças envolvidas no problema.
USRCND	Para o usuário calcular a condutividade de fluidos e sólidos.
USRCVG	Para o usuário monitorar a resolução e especificar o teste de convergência.
USRDEN	Para o usuário calcular a densidade e as derivadas parciais da densidade com suas respectivas pressões.
USRDIF	Para o usuário calcular o coeficiente de difusão.
USRDMP	Para o usuário especifica quais dados serão gravados no arquivo dump.
USRDRG	Para o usuário calcular o fator de arraste no modelo de transporte de partículas.
USREOS	Para o usuário especificar as equações de estado em entradas completamente compressíveis.
USRFDS	Para o usuário especificar esquemas de diferenças finitas.
USRGRD	Para o usuário especificar o fator de arraste de partículas no modelo de transporte.
USRINT	Para o usuário especificar o valor inicial das variáveis.
USRIPM	Para o usuário especificar e calcular a transferência de massa entre fases.
USRIPT	Para o usuário especificar ou calcular o coeficiente de transferência de massa.
USRNUS	Para o usuário calcular o número de Nusselt no model de transporte de partículas.
USRPBC	Para o usuário especificar as condições de contorno das partículas.
USRPBM	Para o usuário monitorar o domínio de fluxo.
USRPMT	Para o usuário especificar a taxa de transferência de massa no modelo de transporte para as partículas.
USRPOR	Para o usuário especificar a porosidade.
USRPRT	Para o usuário especificar quando e quais dados serão impressos no arquivo de saída quando o programa realizar todos os cálculos.
USRRAC	Para o usuário inspecionar ou mudar a taxas de reação constante e suas derivadas.
USRRAT	Para o usuário inspecionar ou mudar a taxa de reação e suas derivadas.
USRRD	Para o usuário ler dados de um arquivo dump.
USRSLP	Para o usuário especificar a velocidade de deslizamento no modelo algébrico de deslizamento.
USRSPH	Para o usuário especificar ou calcular o calor específico
USRSRC	Para o usuário adicionar ou calcular o termo fonte.
USRTPL	Para o usuário adicionar blocos, entradas, saídas, unir blocos.
USRTRN	Para o usuário monitorar a resolução do problema em função do tempo e também para especificar o próximo passo de tempo.
USRVIS	Para o usuário especificar ou calcular a viscosidade de cada fase.
USRWRK	Para o usuário reservar um espaço de trabalho permanente (reservar memória).
USRWTM	Para o usuário atribuir multiplicadores turbulentos nas parede.

7 Resultados e Discussões

Neste capítulo apresentam-se resultados referentes a aplicação do modelo cinético do craqueamento (caso A, tabela 1), onde os aspectos fluidodinâmicos foram desprezados e os resultados da fluidodinâmica do riser (casos B e C, tabela 1). Inicia-se por apresentar a aplicação do modelo cinético, aplicado a um caso-estudo. Em seguida apresentam-se e discutem-se os resultados de simulação da fluidodinâmica do riser a frio.

7.1 Verificação do Modelo de Reação

Como caso estudo, simulou-se um riser com as características apresentadas na tabela 7.

Tabela 7: Características do riser (FROMENT e BISCHOFF, 1990).

Diâmetro do Reator	$D = 0,85 \text{ m}$
Altura do Reator	$H = 30 \text{ m}$
Diâmetro part. catalisador	$d_p = 8,0 \cdot 10^{-5} \text{ m}$
Densidade do catalisador	$\rho_s = 1500 \text{ kg/m}^3$
Calor específico catalisador	$cp_s = 1003 \text{ J/kgK}$
Calor específico do gasóleo	$cp_g = 3403 \text{ J/kgK}$
Vazão mássica do gasóleo	$m_s = 13,6 \text{ kg/s}$
Vazão mássica do catalisador	$m_{CO} = 272,2 \text{ kg/s}$
Temperatura de entrada	$T_i = 770 \text{ K}$
Pressão	$1,2 \cdot 10^5 \text{ Pa}$

O gasóleo simulado tem a composição e características dos constituintes dados na tabela 9, enquanto que suas constantes cinéticas, energias de ativação (SAPRE et al, 1995) e entalpia de reação na temperatura de referência tomada de acordo com FROMENT e BISCHOFF (1990) utilizadas na simulação numérica, são dadas na tabela 8. Nas tabelas 9 e 8, HFO representa o óleo pesado; LFO o óleo leve; Coque representa coque + $C_1 - C_4$; Ar, os grupos aromáticos; Ar_s , aromáticos substituídos; P, as parafinas; N, os naftênicos; G, a gasolina; C, o coque; h significa pesado e l, leve.

Tabela 8: Constantes cinéticas do modelo de 10 grupos.

De		Para		Energia de ativação (J/mol)	Taxa de reação a 482°C ($\frac{10^{-3}m^3}{kg_{catalisador.s}$)	Calor de reação ($\frac{J}{mol}$)	
HFO	Ph	LFO	Pl	33939	5,75	19711	
	Nh		Nl		6,25		
	Ash		Asl		5,278		
	Ash		Arl		13,89		
	Arh		Arl		1,628		
HFO	Ph	Gasolina	G	23045	15,28	51294	
	Nh		G		23,53		
	Ash		G		60755		15,50
HFO	Ph	Coque	C	35615	2,181	177403	
	Nh		C		4,131		
	Ash		C		73325		9,50
	Arh		C		4,064		
LFO	Pl	Gasolina	G	23045	6,625	21025	
	Nl		G		18,37		
	Asl		G		60755		5,139
LFO	Pl	Coque	C	35615	2,622	105127	
	Nl		C		2,272		
	Asl		C		73325		1,008
	Arl		C		0,277		
Gasolina	G	Coque	C	83800	1,222	42423	

Tabela 9: Composição do gasóleo na entrada e pesos moleculares dos grupos.

Grupo	Fração mássica	Peso molecular
Ph	0,17	339
Nh	0,20	339
Ash	0,24	339
Arh	0,12	339
Pl	0,14	226
Nl	0,19	226
Asl	0,02	226
Arl	0,02	226
G	0,00	114
C	0,00	34

As figuras de 5 a 10 mostram o comportamento da concentração dos pesados ao longo do reator, decorrente do craqueamento do gasóleo.

A figura 5 mostra a variação dos componentes pesados do óleo ao longo do riser. Observa-se nesta figura a diminuição na fração mássica nos constituintes pesados. Este consumo ocorre devido ao craqueamento dos constituintes pesados do gasóleo. Como se vê, a taxa de conversão é alta na entrada do riser, diminuindo ao longo do reator.

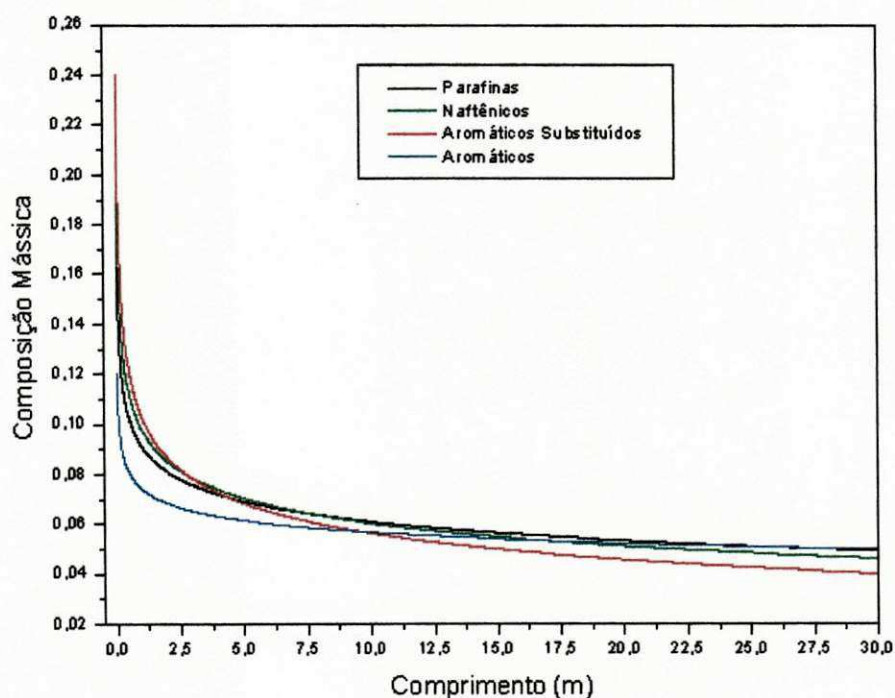


Figura 5: Concentração de HFO ao longo do riser.

A figura 6 mostra a variação dos componentes leves ao longo do riser. Nota-se uma redução na concentração de parafinas e naftênicos e um aumento na concentração de aromáticos. Este comportamento deve-se as taxas de reação dos grupos e as composições na entrada. Os aromáticos leves possuem uma baixa fração na entrada.

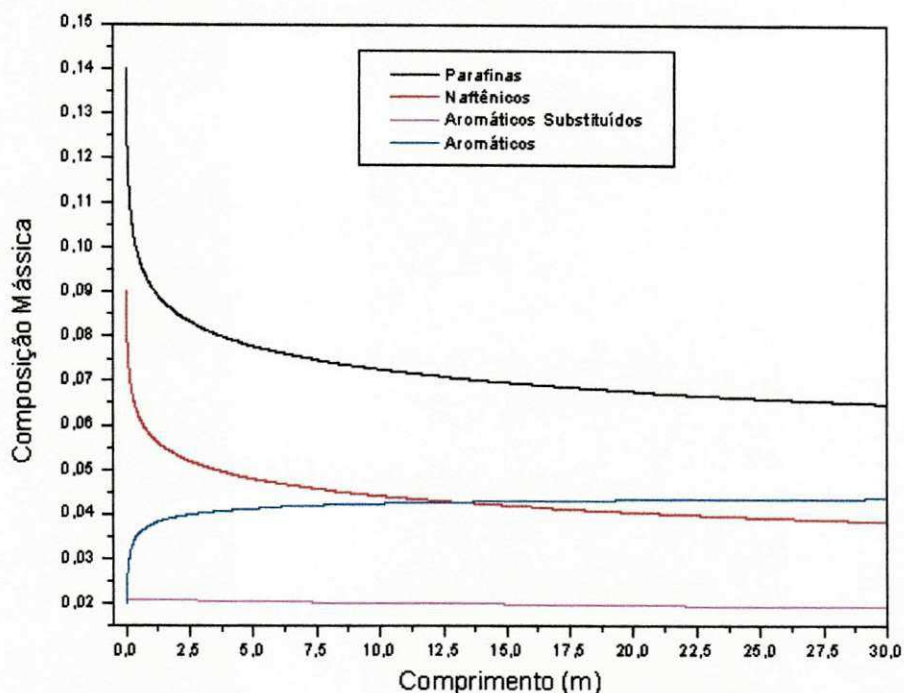


Figura 6: Concentração de LFO ao longo do riser

A figura 7 mostra a formação de gasolina ao longo do riser a partir do craqueamento ocorrido nas frações pesadas e leves do gasóleo. Para o caso-estudo considerado, previu-se uma fração na saída do riser pouco inferior a 30%. Este valor está dentro dos limites das plantas industriais, embora sejam dependentes do tipo de carga.

A figura 8 ilustra a variação de temperatura ao longo do riser. Como o processo é endotérmico e o riser foi considerado adiabático, tem-se uma queda de temperatura. Como pode-se observar, a taxa de variação da temperatura na entrada do riser é grande e diminui gradualmente com a posição.

A figura 9 mostra que houve um aumento da quantidade de coque depositada sobre o catalisador, ao longo do riser. No caso real, isto ocasiona uma diminuição de seu poder catalítico.

O coque depositado sobre o catalisador é removido por combustão do mesmo no regenerador, o que não foi tratado nesta dissertação.

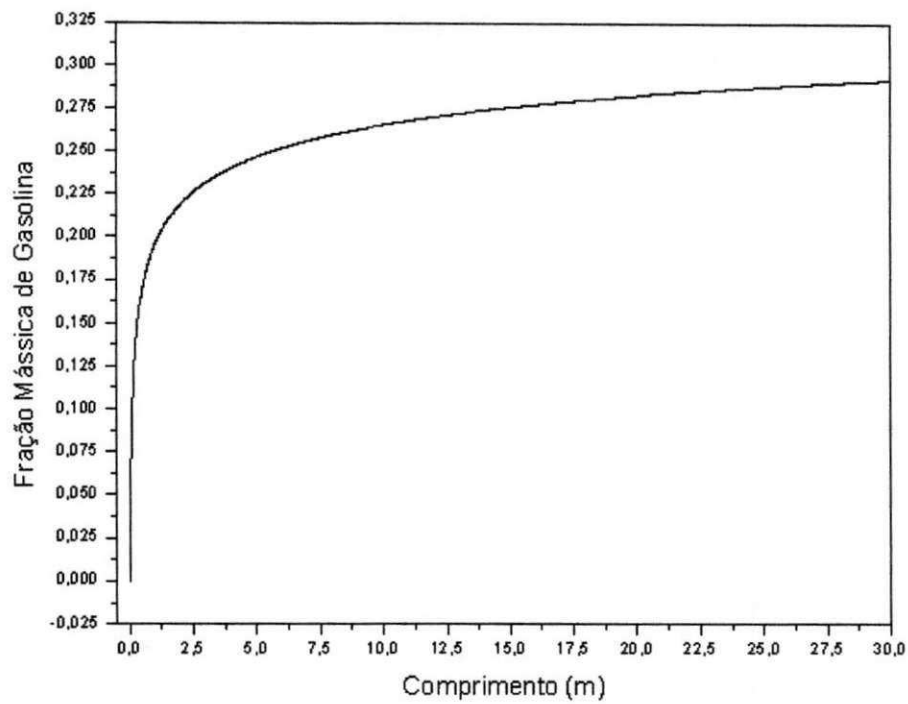


Figura 7: Formação de gasolina ao longo do riser.

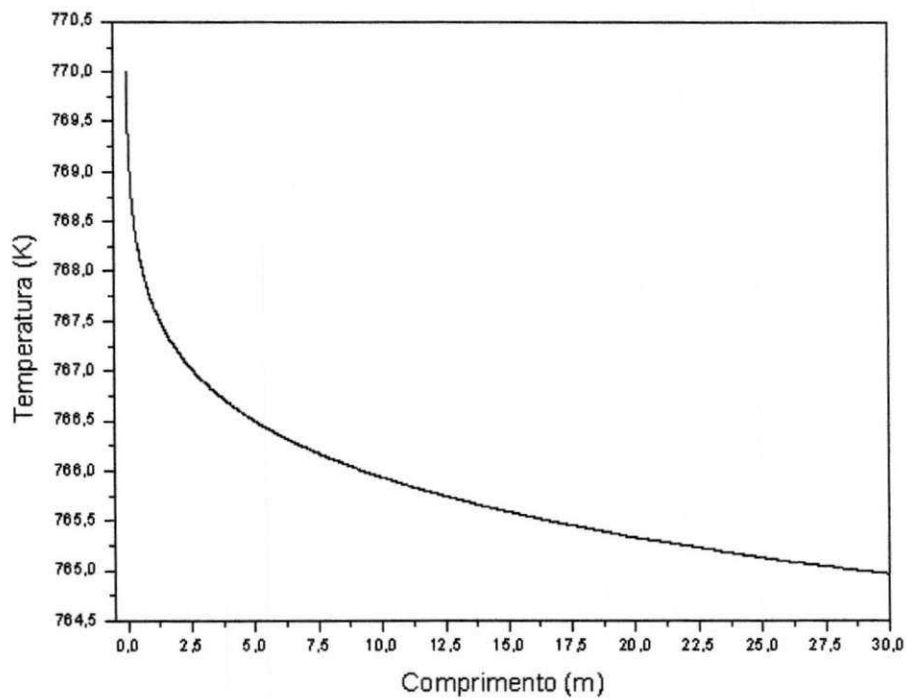


Figura 8: Variação de Temperatura ao longo do riser

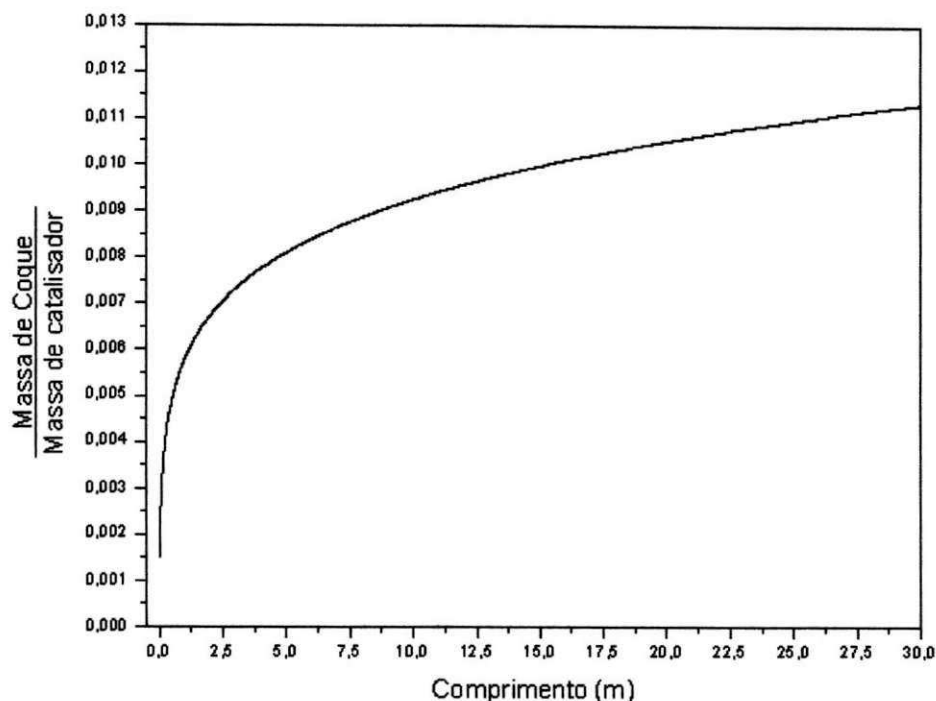


Figura 9: Coque depositado sobre o catalisador

A figura 10 mostra o efeito da temperatura de entrada sobre a produção de gasolina no reator. Como pode ser observado, um máximo de 60% de gasolina é obtido para uma temperatura de entrada da carga de catalisador de aproximadamente 400 K. Vale salientar que a esta temperatura, o gásóleo se quer estar totalmente vaporizado, então o modelo cinético não pode ser aplicado, pois as taxas de reação são para um gásóleo na fase vapor. Como, quanto menor for a temperatura de entrada, maior será a fração de gasolina, pode-se afirmar que o riser deve operar com uma temperatura mínima para vaporizar todo o gásóleo. A 1,0 atm esta temperatura é em torno de 700K (THEOLOGOS e MARKATOS, 1993). Como a temperatura cai ao longo do reator, deve-se alimentar o riser com gásóleo numa temperatura acima dos 700K.

Neste estudo, a temperatura da entrada é 10% maior que a saída, para garantir que o gásóleo esteja na fase vapor em todo o reator.

Conclui-se que o modelo de dez lumps, que foi testado, deverá ser incorporado ao CFX quando o modelo da teoria cinética dos materiais granulares for implementado.

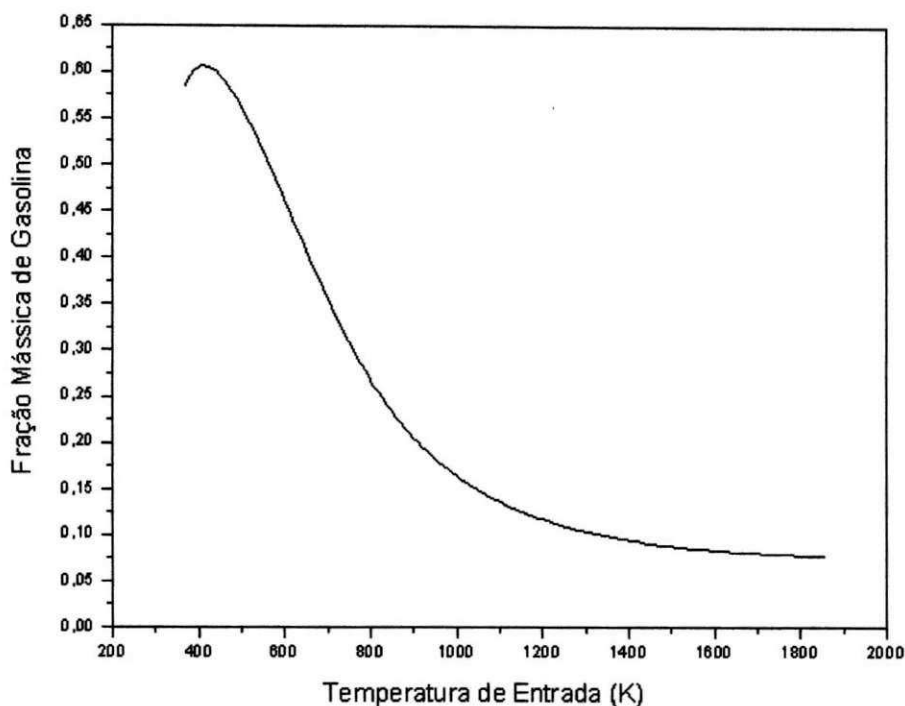


Figura 10: Efeito da temperatura de entrada na seletividade

7.2 Fluidodinâmica do Riser

Como mencionado no Capítulo 3, utilizou-se o modelo de dois fluidos, no qual o gás e as partículas são tratados como dois fluidos interpenetrantes. Definiu-se 3 casos para estudo:

Caso 1 - Sistema com baixa concentração de partículas e com partículas de $200, 0.10^{-6}m$ de diâmetro.

Caso 2 - Sistema com alta concentração de partículas e com partículas de $76, 0.10^{-6}m$ de diâmetro.

Caso 3 - Sistema com baixa concentração de partículas e com partículas de $520, 0.10^{-6}m$ de diâmetro.

Deseja-se estudar os efeitos de entrada e do modelo sobre a formação do perfil de concentração e velocidade das fases.

O caso 2 foi usado para a verificação dos efeitos de entrada, por ser um caso onde os dados experimentais mostram uma alta concentração na parede.

Os casos 1, 2 e 3 foram utilizados para verificar se o modelo da teoria cinética dos materiais granulares implementada no CFX prevê, de forma coerente, as diferentes concentrações e

velocidade das fases desprezando-se os efeitos de entrada.

Para a fase gasosa utilizou-se o modelo de turbulência $\kappa - \epsilon^\kappa$. Para fase particulada utilizou-se os modelos invíscido, viscosidade constante, $\kappa - \epsilon^\kappa$ e da teoria cinética dos materiais granulares.

Para o sistema (caso 1) com o modelo da teoria cinética foram utilizado: uma malha de 40 x 26 x 1 volumes; critério de convergência de $1,0 \cdot 10^{-12}$, false time de $1,0 \cdot 10^{-9}$ devido as dificuldades de estabilização.

As tabelas 10, 11 e 12 mostram as características do sistema simulado para os casos 1, 2 e 3, respectivamente.

Tabela 10: Características do Sistema (caso 1)

Raio do Tubo	0,0162 m
Altura	5,11 m
Velocidade do Gás	15,6 m/s
Densidade do Gás	1,16 kg/m ³
Viscosidade do Gás	$1,85 \cdot 10^{-5}$ kg/ms
Fração Volumétrica de Sólidos	0,0013
Velocidade dos Sólidos	13,9 m/s
Densidade do Sólido	1020,0 kg/m ³
Diâmetro das Partículas	$200,0 \cdot 10^{-6}$ m
Máxima Fração Volumétrica de Partículas	0,5

As características numéricas (caso 2) utilizadas para o sistema tridimensional foram: uma malha de 5650 volumes com critério de convergência de $5,0 \cdot 10^{-5}$, estado estacionário obtido via falso transiente com passo de tempo de $1,0 \cdot 10^{-4}$ s.

Para o sistema bidimensional (caso 2) sem os efeitos de entrada, e o caso 3, foram utilizados: uma malha de 40 x 26 x 1 volumes, critério de convergência de $1,0 \cdot 10^{-12}$, false time de $1,0 \cdot 10^{-9}$ devido as dificuldades de estabilização.

Para verificar os efeitos da geometria de entrada, utilizou-se o caso 2, com os modelos disponíveis no CFX: Invíscido, viscosidade constante e $\kappa - \epsilon^\kappa$ para a fase particulada.

Tabela 11: Características do Sistema (caso 2)

Raio do Tubo	0,152 m
Altura	10,00 m
Velocidade do Gás	3,78 m/s
Densidade do Gás	1,22 kg/m ³
Viscosidade do Gás	4,0.10 ⁻⁵ kg/ms
Fração Volumétrica de Sólidos	0,0218
Velocidade dos Sólidos	2,62 m/s
Densidade do Sólido	1714,0 kg/m ³
Diâmetro das Partículas	76,0.10 ⁻⁶ m
Máxima Fração Volumétrica de Partículas	0,65

Tabela 12: Características do Sistema (caso 3)

Raio do Tubo	0,0381 m
Altura	5,50 m
Velocidade do Gás	4,979 m/s
Densidade do Gás	1,16 kg/m ³
Viscosidade do Gás	1,85.10 ⁻⁵ kg/ms
Fração Volumétrica de Sólidos	0,0246
Velocidade dos Sólidos	0,386 m/s
Densidade do Sólido	2620,0 kg/m ³
Diâmetro das Partículas	520.10 ⁻⁶ m
Máxima Fração Volumétrica de Partículas	0,45

7.2.1 Modelo Invíscido Para As Partículas

Inicialmente, simulou-se o escoamento no riser utilizando-se o modelo de turbulência $\kappa - \epsilon^k$ para a fase gasosa e a hipótese de fluido invíscido para a fase particulada, desprezando-se as interações partícula-partícula.

A figura 11 mostra a distribuição das partículas ao longo do riser. Com o efeito da curva (joelho), as partículas tendem a se concentrar na parede do lado oposto. Ao longo do riser essa concentração diminui, voltando a se concentrar, com intensidade reduzida, na parede no segundo joelho.

Ao longo de todo o riser, a concentração das partículas é maior na parede do lado oposta à entrada. Isto explica-se pela inércia das partículas e pelo fato de o modelo não conter nenhuma força que disperse estas partículas.

Uma concentração máxima de 10% foi prevista, onde na prática, sabe-se que, neste caso, a concentração é próxima a máxima.

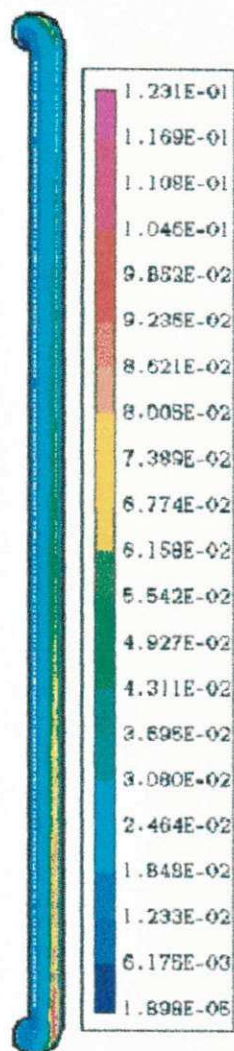


Figura 11: Fração volumétrica das partículas para o modelo invíscido (caso 2)

7.2.2 Modelo Com Viscosidade Das Partículas Constante

Neste caso, utilizou-se na simulação o modelo de tensões para um fluido newtoniano, para a fase particulada, com viscosidade efetiva constante e igual a $0,724 \frac{kg}{m \cdot s}$, conforme reportado por TSUO e GIDASPOW (1990). Estes autores, utilizando um modelo de tensões para a fase particulada, análoga a de um fluido newtoniano, obtiveram este valor de viscosidade efetiva experimentalmente. Entretanto este resultado é específico para este escoamento e sistema, tendo que ser recalculado para outras condições de escoamento.

A figura 12 mostra a distribuição de concentração volumétrica das partículas ao longo do riser. Qualitativamente é análogo aos resultados obtidos com o modelo invíscido, evidenciando que o modelo de tensões precisa ser melhorado para se obter maiores concentrações na parede, como mostram os dados experimentais em ALVES (1998).

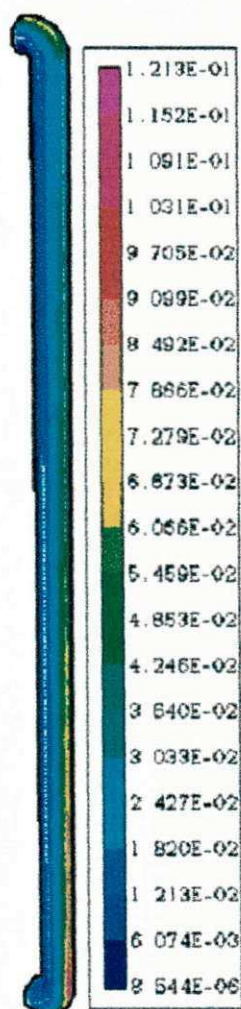


Figura 12: Distribuição de partículas para o modelo com viscosidade constante (caso 2)

7.2.3 Modelo $\kappa - \epsilon^k$ para a Fase Particulada

Considerando-se que a fase particulada seja uma fase fluida, utilizou-se o modelo de turbulência $\kappa - \epsilon^k$. Na figura 13 esta representada a distribuição das partículas ao longo de todo o riser. Os resultados obtidos com o modelo de turbulência para a fase particulada tem comportamento qualitativo muito semelhante aos obtidos com o modelo invíscido e de viscosidade constante, apresentando perfis de concentração de partículas muito próximos aos anteriores. Mesmo assim, as partículas ainda se concentram do lado oposto ao da entrada, não havendo uma dispersão das partículas do lado de menor concentração.

Comparando-se as figuras 11, 12 e 13, observa-se que os três modelos prevêm o mesmo perfil de concentração. Não conseguem detectar a alta concentração de partículas ao longo da parede na direção angular, para uma dada posição axial e, por isto, estes modelos precisam ser melhorados.

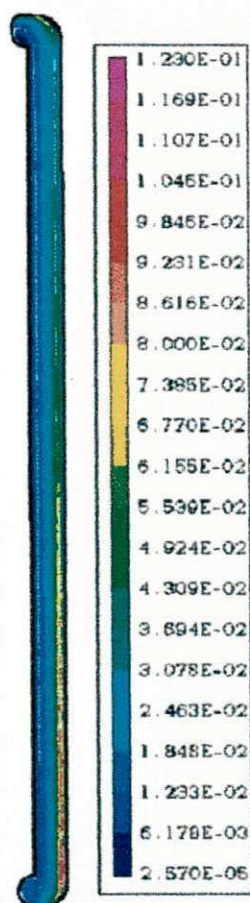


Figura 13: Distribuição de partículas utilizando o modelo $\kappa - \epsilon^k$ aplicado a fase particulada (caso 2)

7.2.4 Modelo Bidimensional e Invíscido para a Fase Particulada

Com o objetivo de verificar se a concentração na face oposta a entrada é, de fato, um efeito da geometria de entrada, simulou-se o mesmo caso (Caso 2), invíscido para a fase particulada e $\kappa - \epsilon^{\kappa}$ para o gás, com entrada axial, para que o efeito da geometria sobre o padrão do escoamento seja eliminado.

A figura 14 mostra o comportamento do resíduo das variáveis calculadas pelo solver do CFX. Como vê-se, os resíduos apresentam uma forte tendência de queda. O critério de convergência de massa foi estabelecido em $1,0 \cdot 10^{-9} kg$.

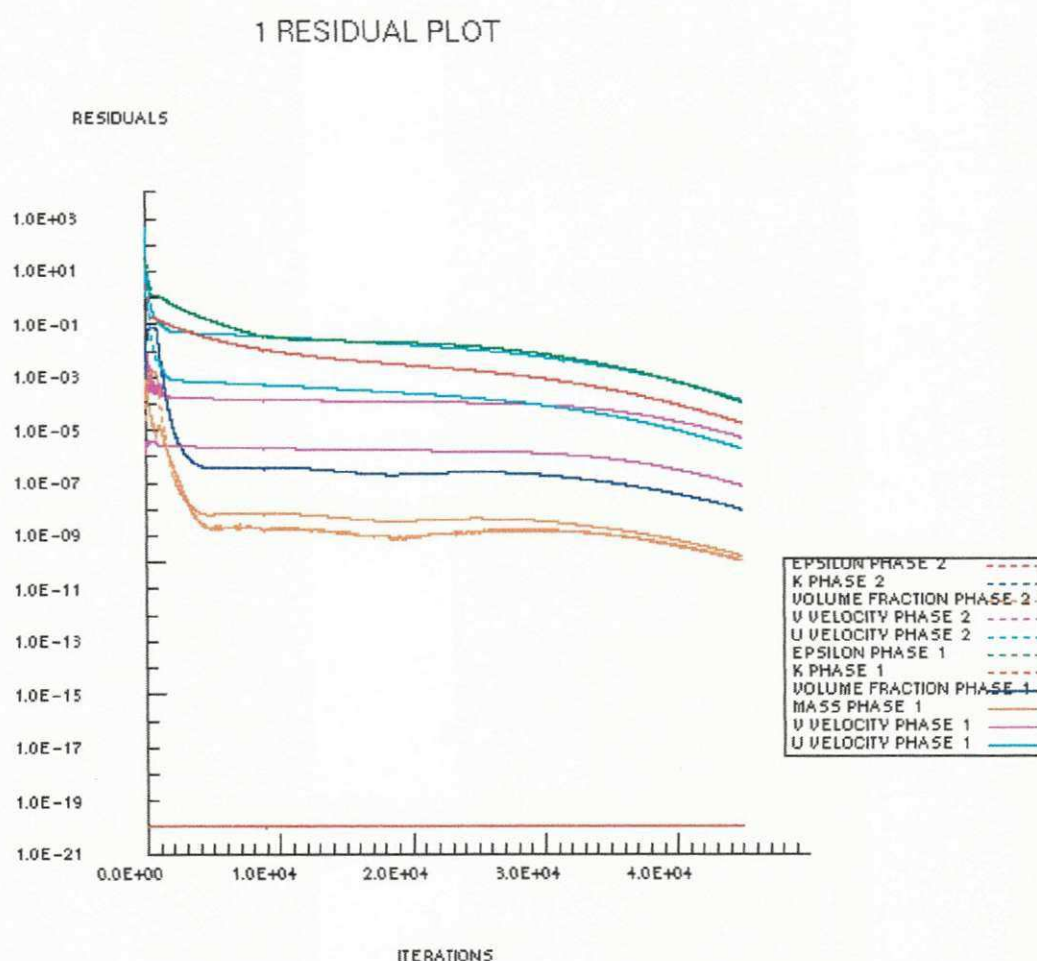


Figura 14: Convergência para o modelo 2D e Invíscido para as partículas

A figura 15 mostra a distribuição de partículas ao longo do riser bidimensional em três regiões distintas. A região 15.a mostra todo o riser, a 15.c a região de entrada e a 15.b a região de saída. Como vê-se, neste riser, o perfil de concentração é plano com maior valor de concentração de partículas igual a 2%, aproximadamente. Isto mostra que o modelo invíscido para a fase particulada no riser bidimensional não prevê a alta concentração (SWAAIJ, 1996)

na parede, sendo portanto, inadequado ao estudo.

Comparando-se a figura 11 com a figura 15, pode-se afirmar que os efeitos geométricos da entrada sobrepõem-se aos efeitos dos modelos.

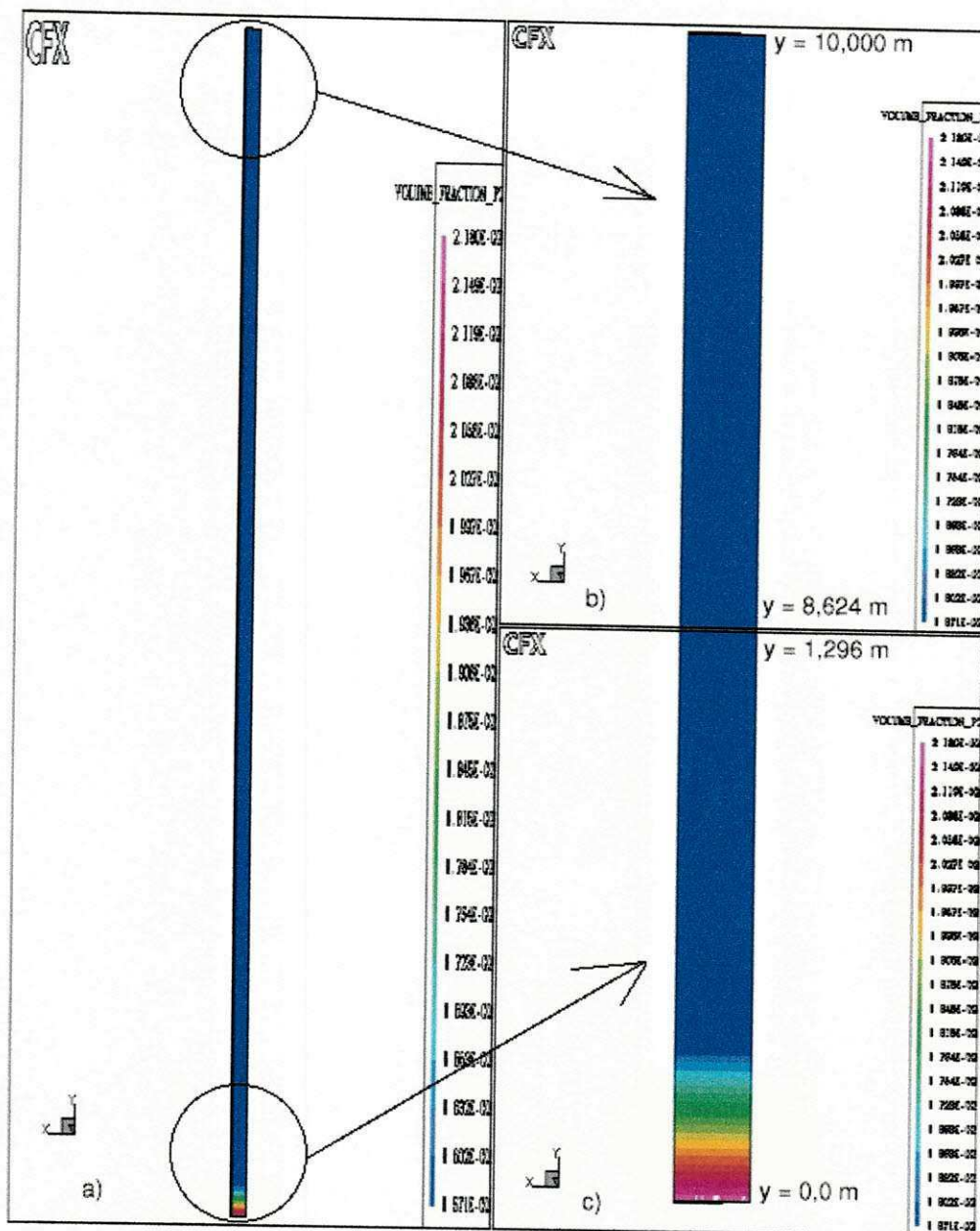


Figura 15: Distribuição de partículas para o modelo 2D e Invíscido para as partículas

7.2.5 Teoria Cinética Do Escoamento De Materiais Granulares - KTGF

Com os modelos disponíveis no CFX, as principais características do Caso 2, não foram detectadas, justificando portanto a utilização modelo da KTGF, foi implementada e testada.

Após a implementação do modelo da teoria cinética no CFX, simulou-se os casos 1, 2 e 3 já definidos, porém com entrada e saída axial, para que os efeitos geométricos sejam eliminados e, de forma, que a formação do padrão de escoamento seja devido ao modelo matemático apenas.

Para a visualização dos resultados em algumas regiões do riser, com a entrada, saída ou uma parte intermediária do reator, utilizou-se o “analyse”, o pós-processador do CFX.

7.2.5.1 Caso 1

A figura 16 mostra o comportamento do resíduo das variáveis calculadas pelo CFX, para a última simulação. Como o resíduo de massa estava em $1,0 \cdot 10^{-10}$ e sem apresentar grandes oscilações, o problema foi assumido como convergido.

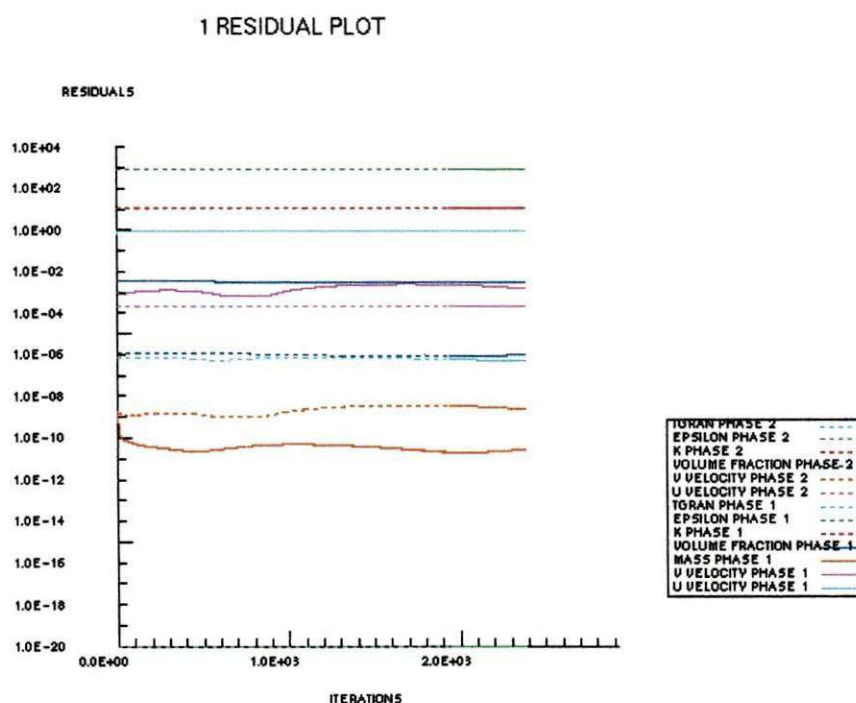


Figura 16: Resíduos das variáveis calculadas pelo CFX (caso 1)

A primeira simulação teve como estimativa inicial os próprios valores de entrada. Da segunda simulação em diante foi utilizado o resultado da simulação anterior como estimativa inicial. Este procedimento foi necessário devido as dificuldades em alcançar a estabilidade numérica e a limitações de máquina.

As figuras de 17 a 26, de 28 a 38 e 40 a 49 mostram os padrões do escoamento para os casos 1, 2 e 3, respectivamente. Estas figuras foram divididas em três regiões distintas. A região "a" mostra uma visão geral do riser, a "b" mostra a região de saída e a "c" mostra a região de entrada.

A figura 17 apresenta o perfil de fração de sólidos ao longo do riser. O perfil de concentração é praticamente plano, com a tendência de um leve aumento em direção ao centro.

Como não havia dados experimentais disponíveis sobre a concentração de sólidos para este caso, os resultados foram comparados com os obtidos via simulação por ALVES (1998) e MILITZER (1986), que em ambos os casos previram um perfil plano de concentração de sólidos na ordem de $1,3 \cdot 10^{-3}$ para $Z = 1\text{m}$.

A figura 18 mostra o perfil da pressão de sólidos ao longo do riser. A pressão de sólido calculada a partir do uso da teoria cinética é baixa em todo o reator. Isto deve-se provavelmente a baixa concentração de sólidos prevista pelo modelo.

No limite, quando a concentração de sólidos tende a zero, evidentemente a pressão de sólidos do modelo da teoria cinética também tende a zero.

A figura 19 ilustra a distribuição da pressão do gás ao longo do riser. Este perfil se mostra coerente com os resultados de ALVES (1998), apresentando um maior valor para a pressão na entrada do riser e menor valor na saída.

A pressão em uma dada posição é com relação ao ponto (1, 1, 1) (CFX-USER-MANUAL, 1997), ao qual atribuiu-se, no algoritmo SIMPLE, a pressão de referência um valor igual a zero. Isto não altera os resultados porque o que entra na equação do movimento é a diferença de pressão e não a pressão propriamente dita. Entretanto, esse procedimento só pode ser aplicado para escoamento incompressível. Para escoamento compressível, a densidade do gás é função do valor da pressão. Mesmo assim, a pressão pode ainda ser calculada, somando-se a cada ponto, o valor da pressão correspondente ao zero no ponto de referência.

As demais figuras de 20 a 26, cuja legenda identifica a variável, foram apresentadas para se ter uma visão completa do escoamento, embora, os destaques sejam dados apenas a concentração de sólidos, que caracteriza e diferencia os três casos estudados.

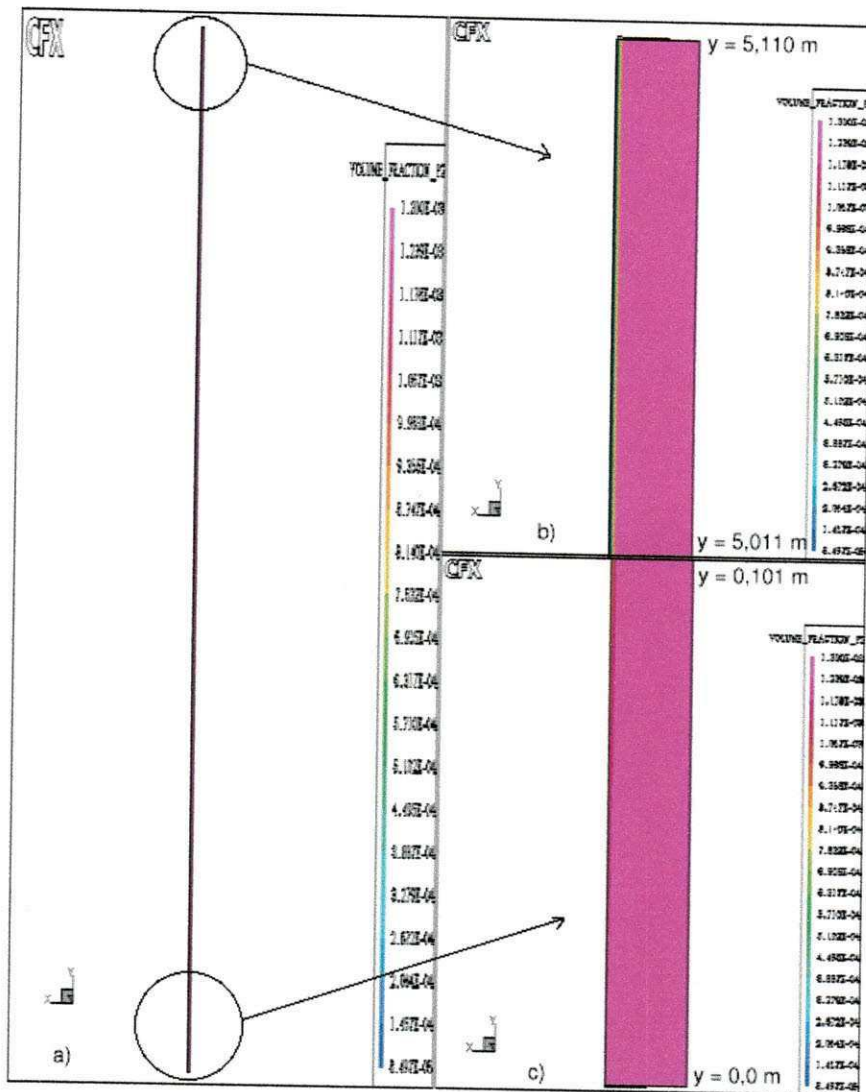


Figura 17: Distribuição de Sólidos (caso 1)

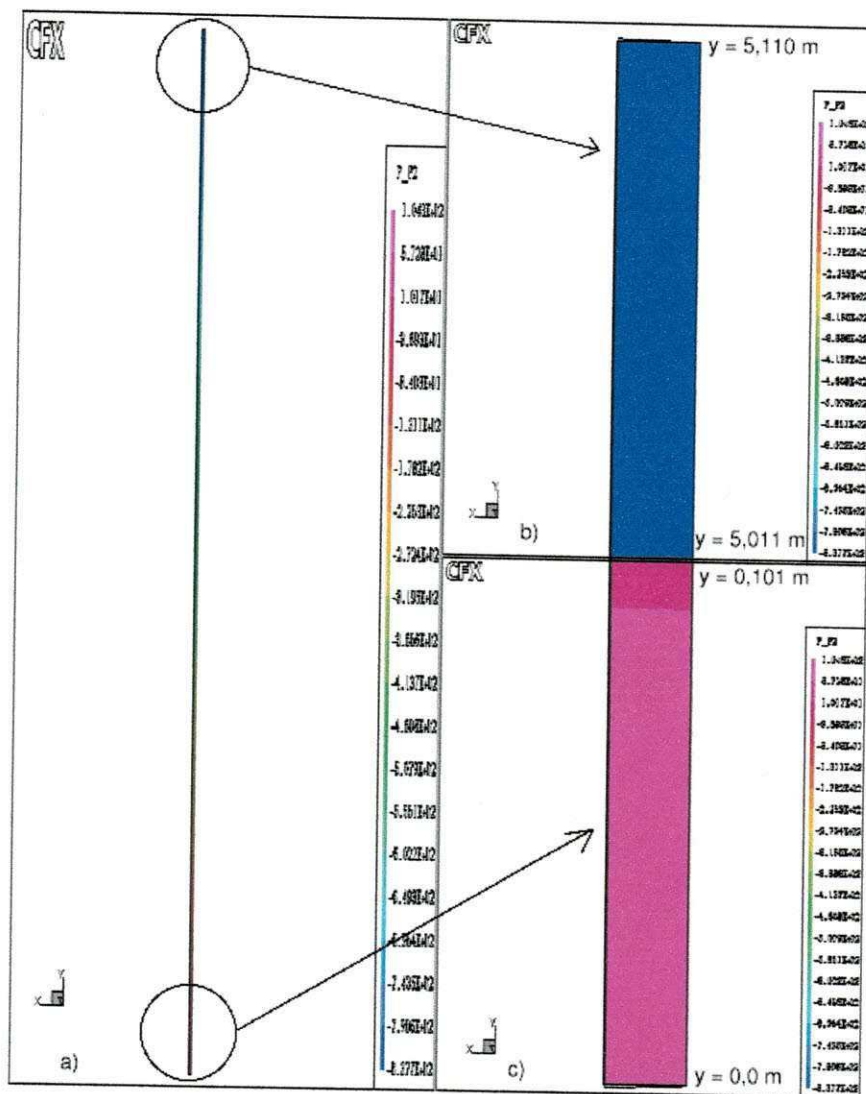


Figura 18: Pressão de Sólidos (caso 1)

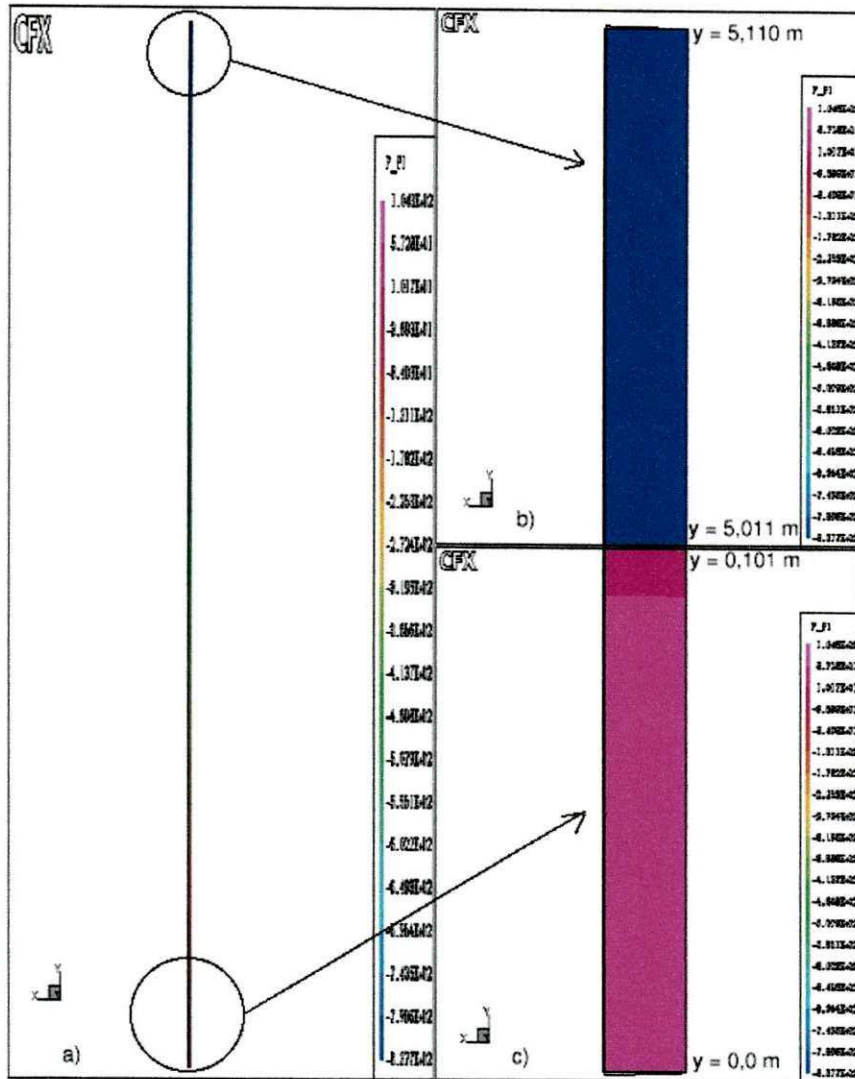


Figura 19: Pressão do Gás (caso 1)

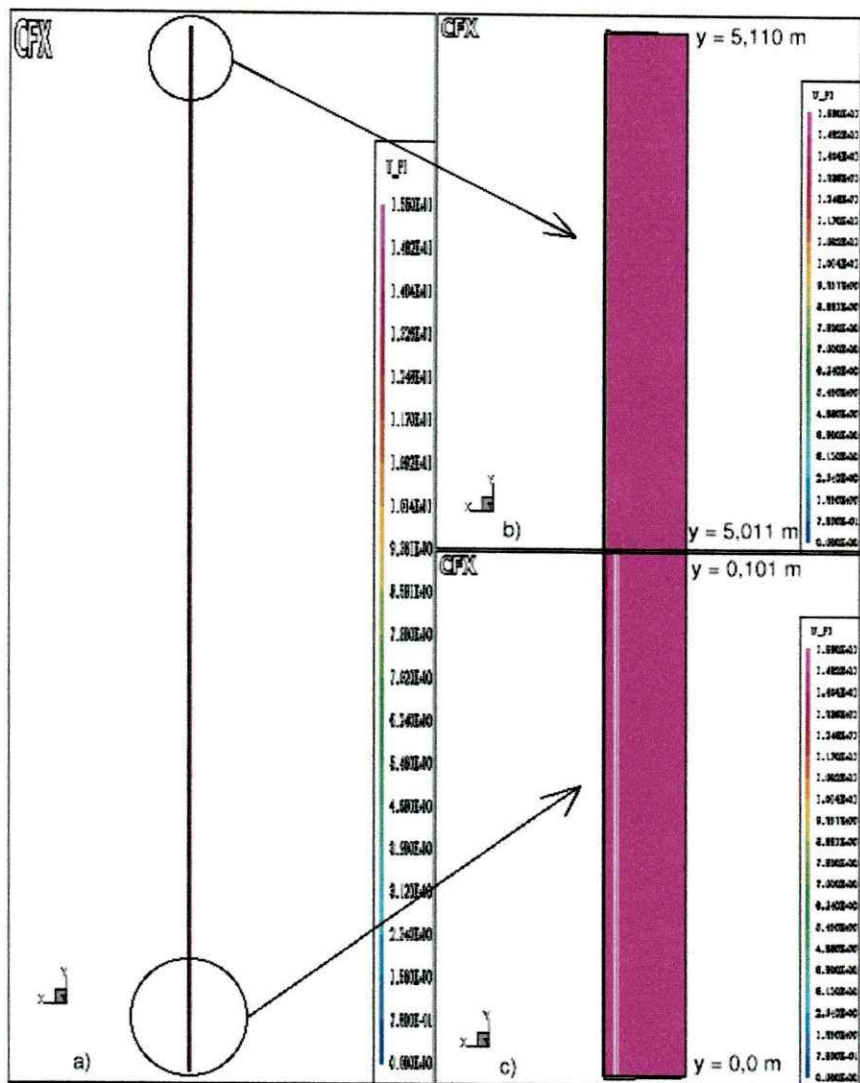


Figura 20: Velocidade Axial do Gás (caso 1)

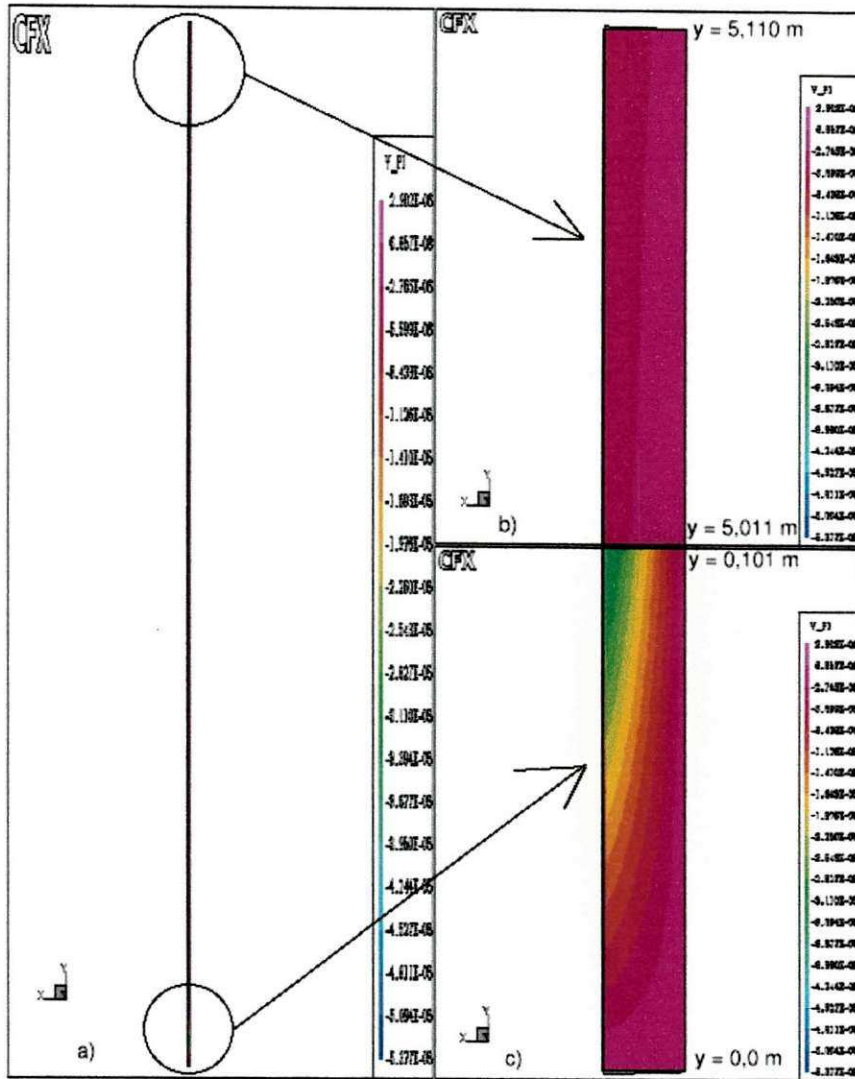


Figura 21: Velocidade Radial do Gás (caso 1)

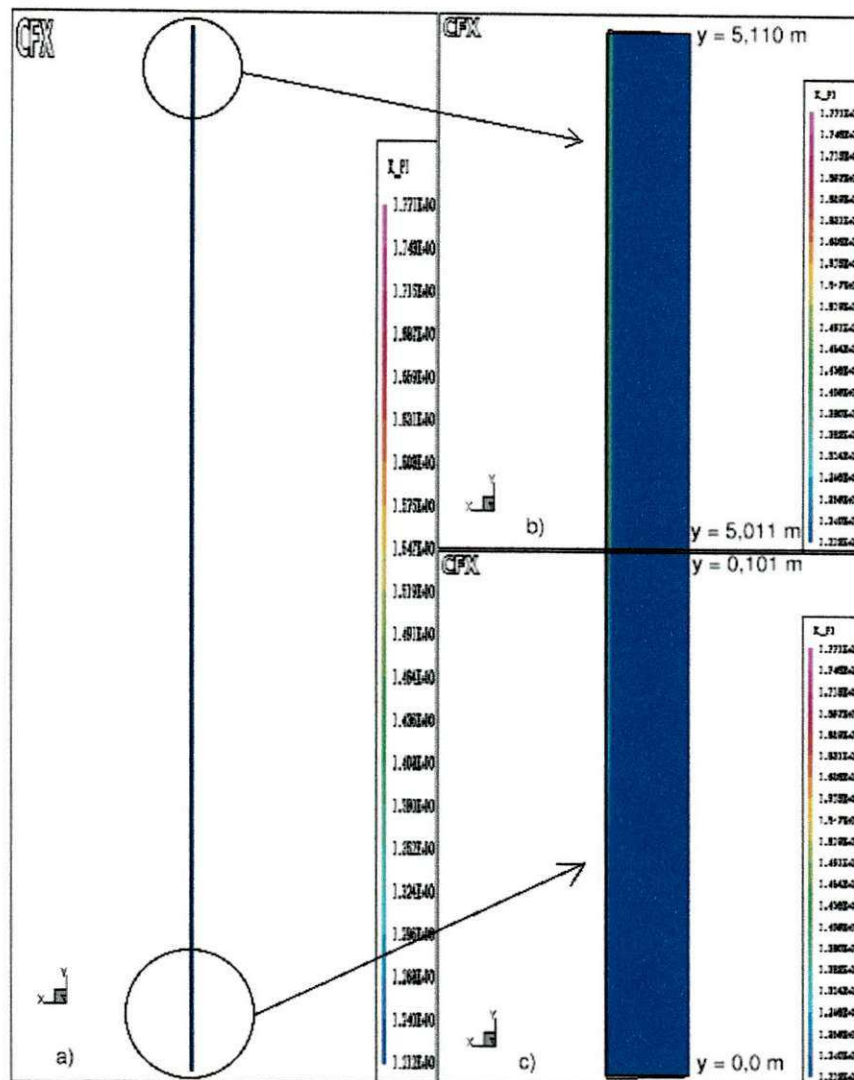


Figura 22: Energia Cinética Turbulenta (caso 1)

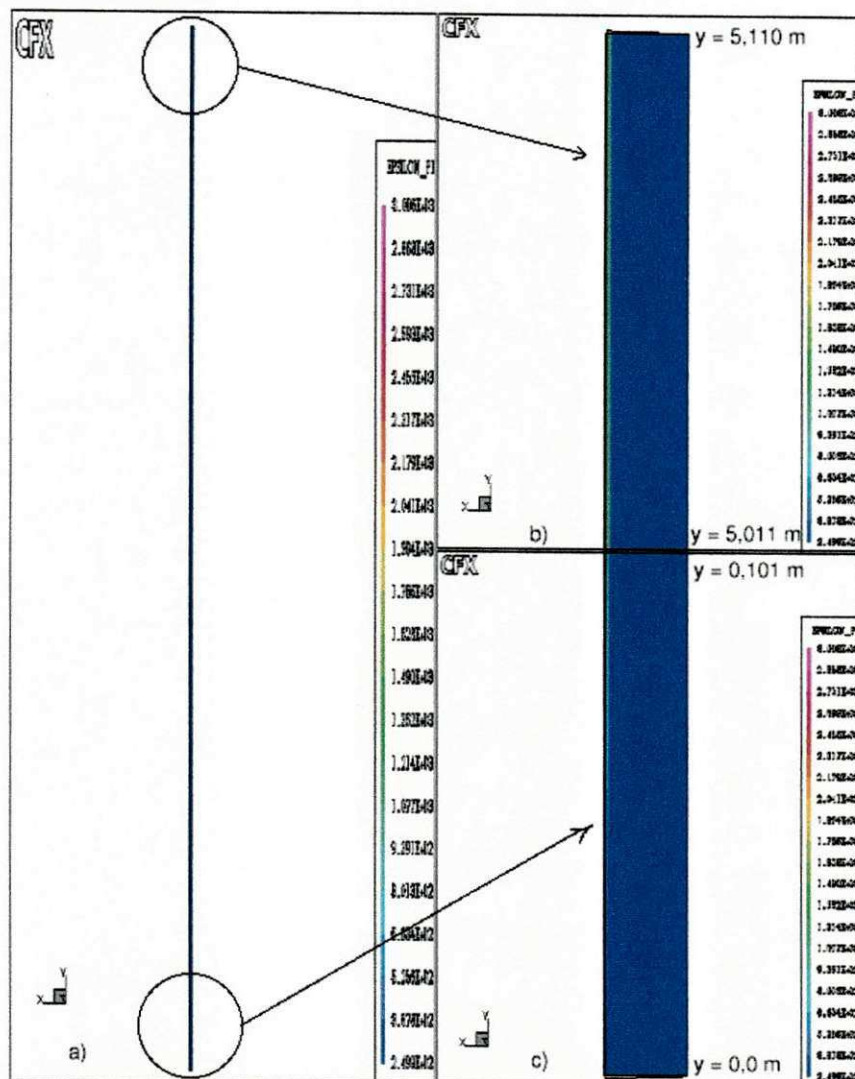


Figura 23: Taxa de Dissipação da Energia Cinética Turbulenta (caso 1)

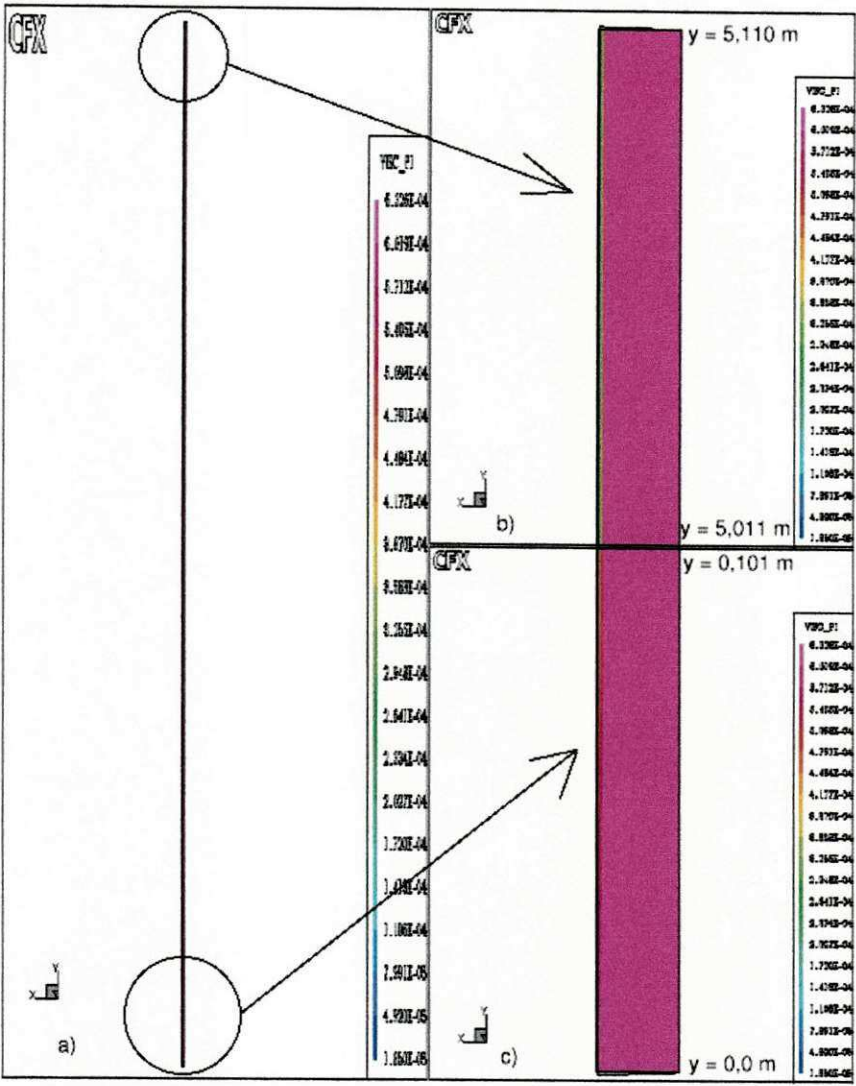


Figura 24: Viscosidade do Gás (caso 1)

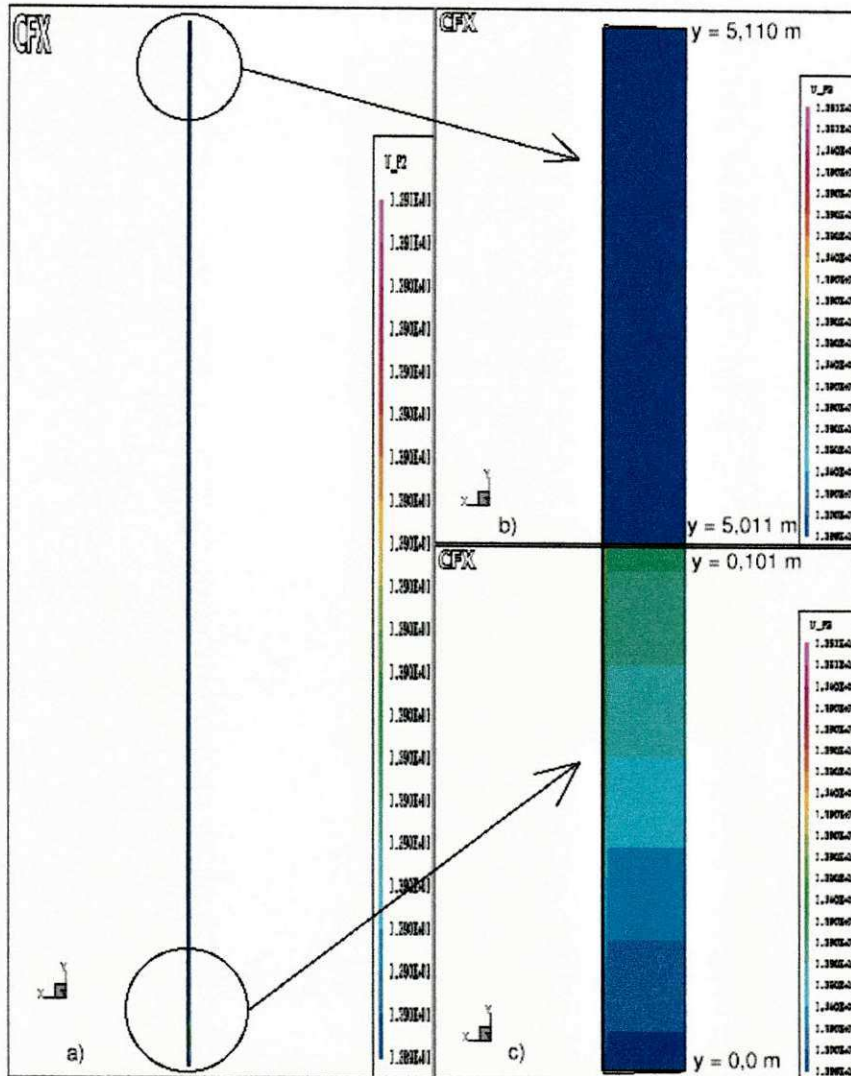


Figura 25: Velocidade Axial das Partículas (caso 1)

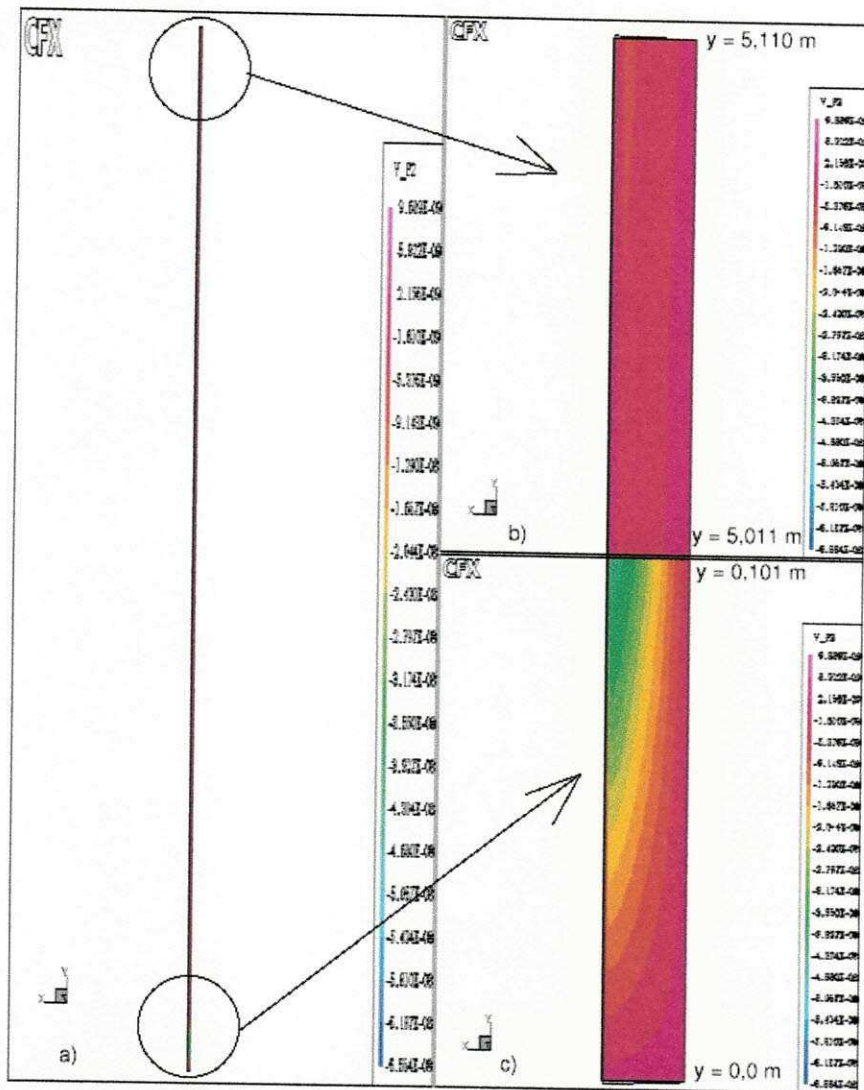


Figura 26: Velocidade radial das Partículas (caso 1)

7.2.5.2 Caso 2

A figura 27 mostra o comportamento do resíduo das variáveis calculadas pelo CFX, para a última simulação. Ela foi gerada na última simulação deste caso. A primeira simulação teve como estimativa inicial os próprios valores de entrada. Da segunda simulação em diante foi utilizado o resultado da simulação anterior como estimativa inicial. Este procedimento foi necessário devido as dificuldades de convergência e as limitações de máquina (após 50000 iterações, o CFX gerava um arquivo que crescia muito, tomando todo o disco rígido e causando assim o travamento do software).

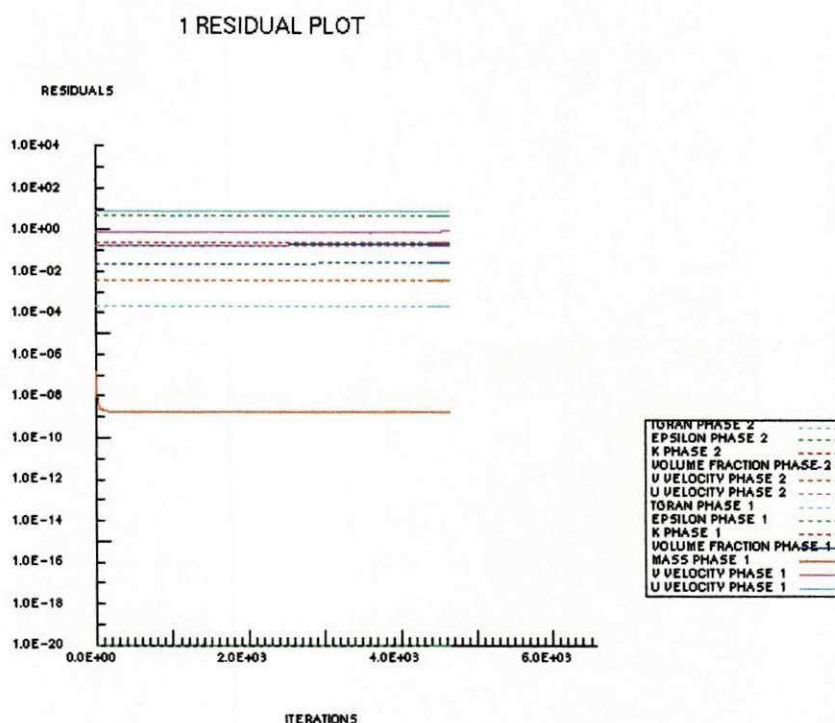


Figura 27: Resíduos das Variáveis Calculadas pelo CFX (caso 2)

A figura 28 mostra o perfil de concentração das partículas ao longo do riser e nas regiões de entrada e saída.

Observa-se na figura 28, uma alta concentração de partículas próxima da parede na entrada do riser. Os dados experimentais apresentados por TSUO e GIDASPOW (1990) e (1996) mostram que a concentração varia de 0,025 no centro até 0,30 na parede, para uma altura de 9,0 m a partir da base. Comparando-se os resultados para o caso 2, com aqueles do caso 1, observa-se que as principais diferenças entre os mesmos, é exatamente uma alta concentração de partículas na parede para o caso 2. Fato não observado para o caso 1 que foi previsto pelo

CFX com o modelo da teoria cinética.

Comparando-se as figura 28 e 15, observa-se claramente o efeito do modelo da teoria cinética (KTGF) numa melhor previsão das características do escoamento. Neste caso, a alta concentração de partículas na parede foi prevista apenas com o modelo da KTGF.

As figura de 29 a 38 mostram as demais características do escoamento. Novamente, destaca-se apenas a distribuição de partículas, por se dispor dispor de informações da literatura (SWAAIJ, 1996) para esta variável.

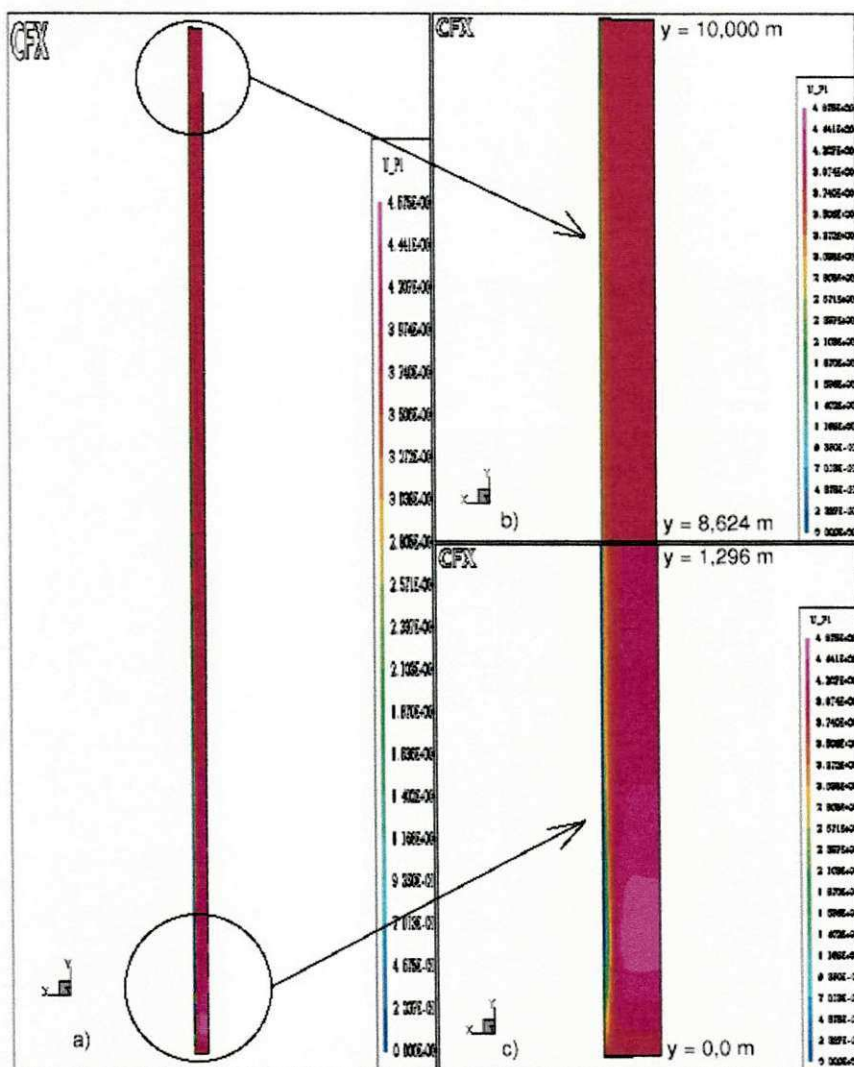


Figura 29: Velocidade Axial do Gás (caso 2)

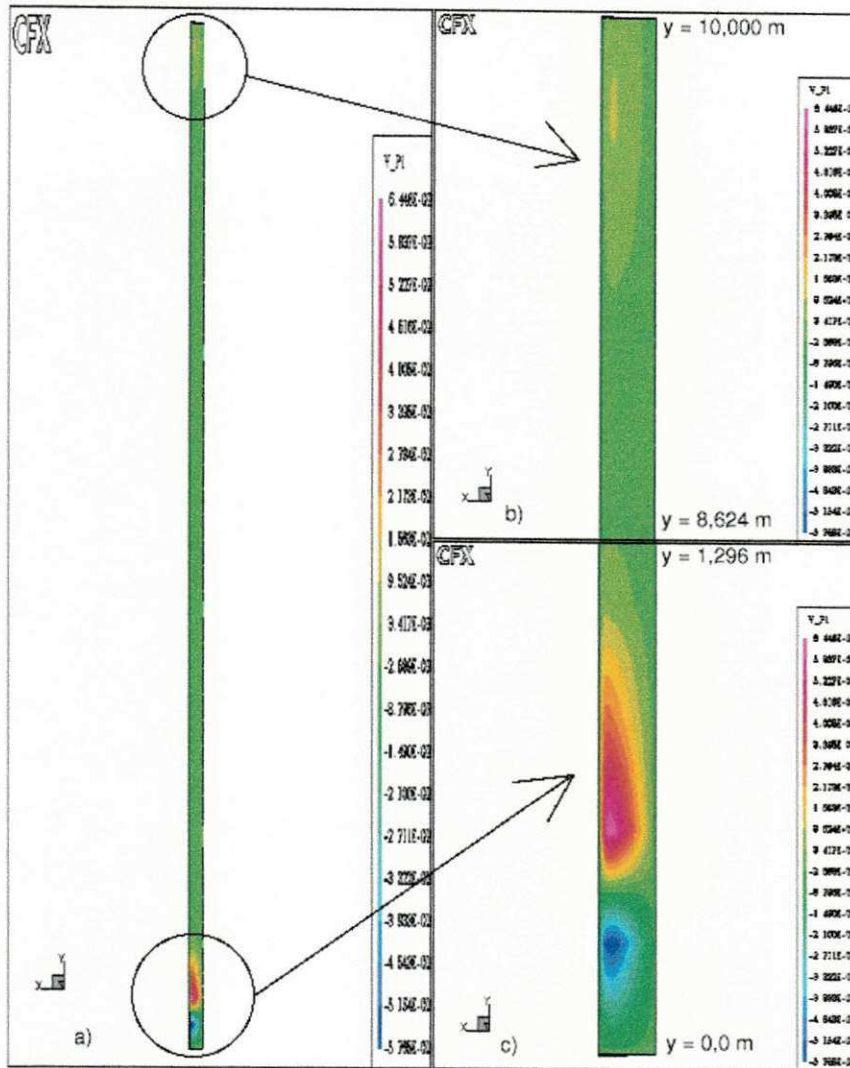


Figura 30: Velocidade Radial do Gás (caso 2)

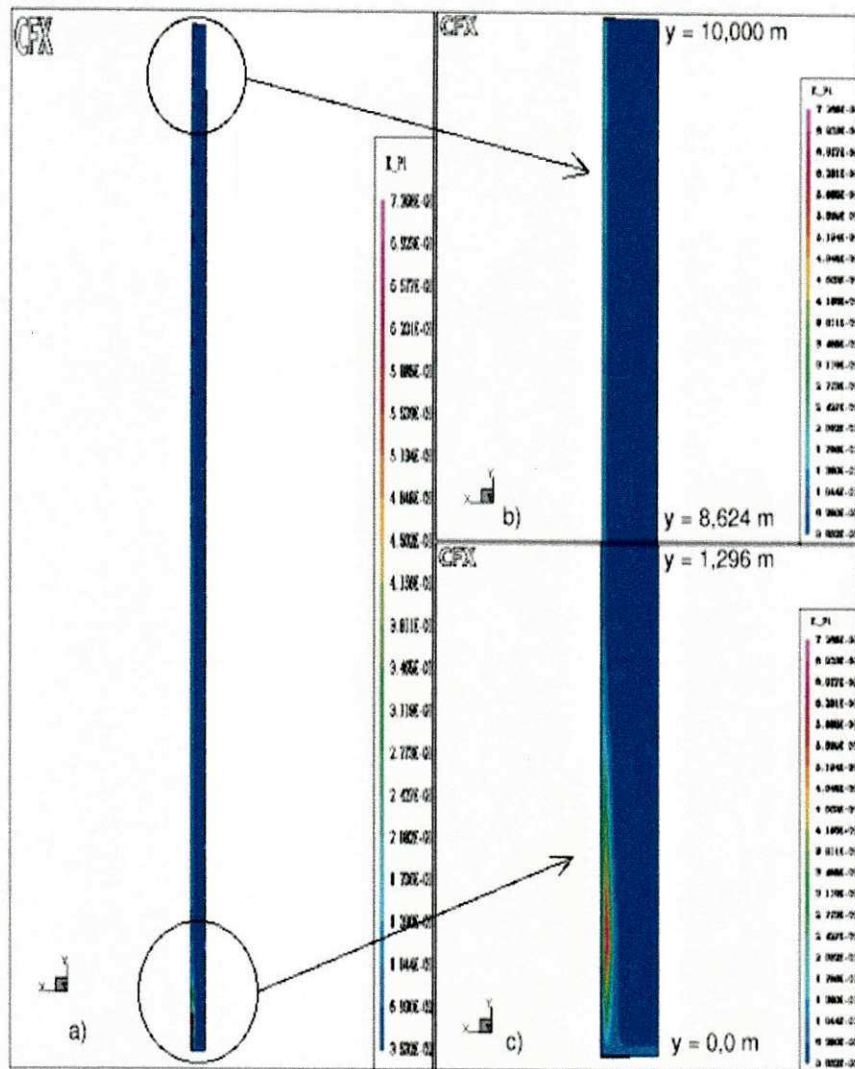


Figura 31: Energia Cinética Turbulenta (caso 2)

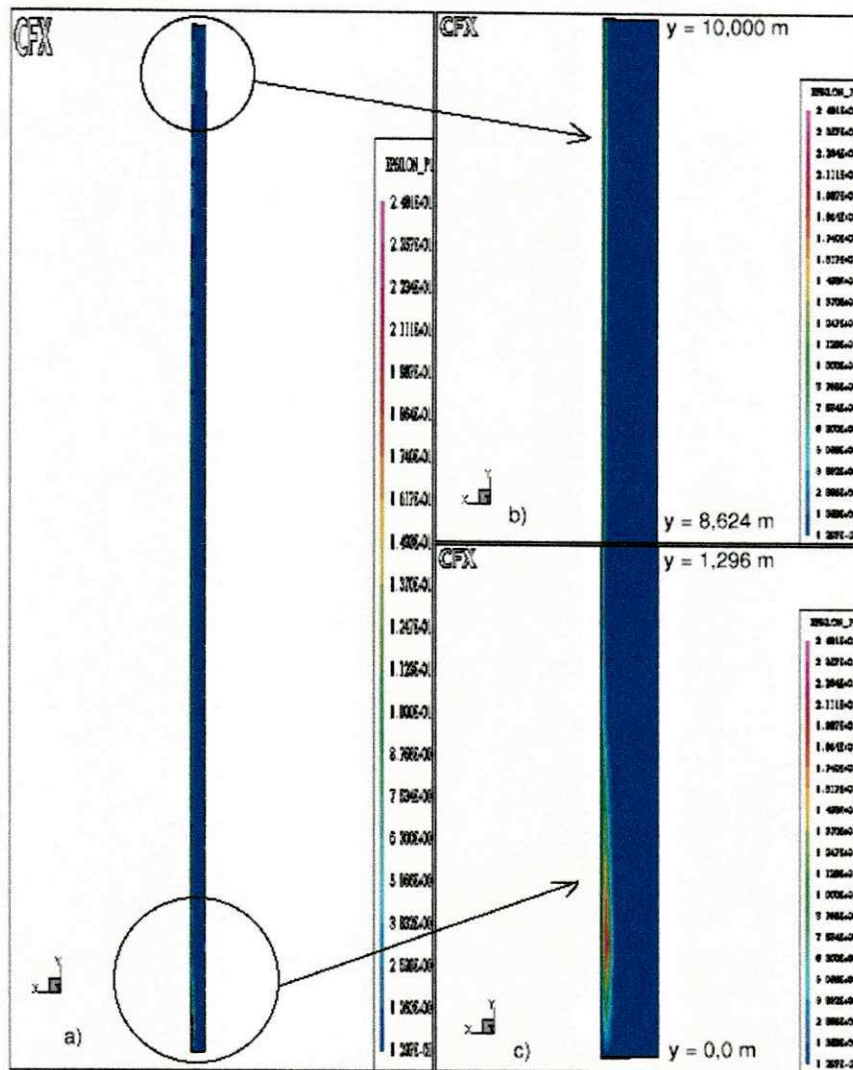


Figura 32: Taxa de Dissipação da Energia Cinética Turbulenta (caso 2)

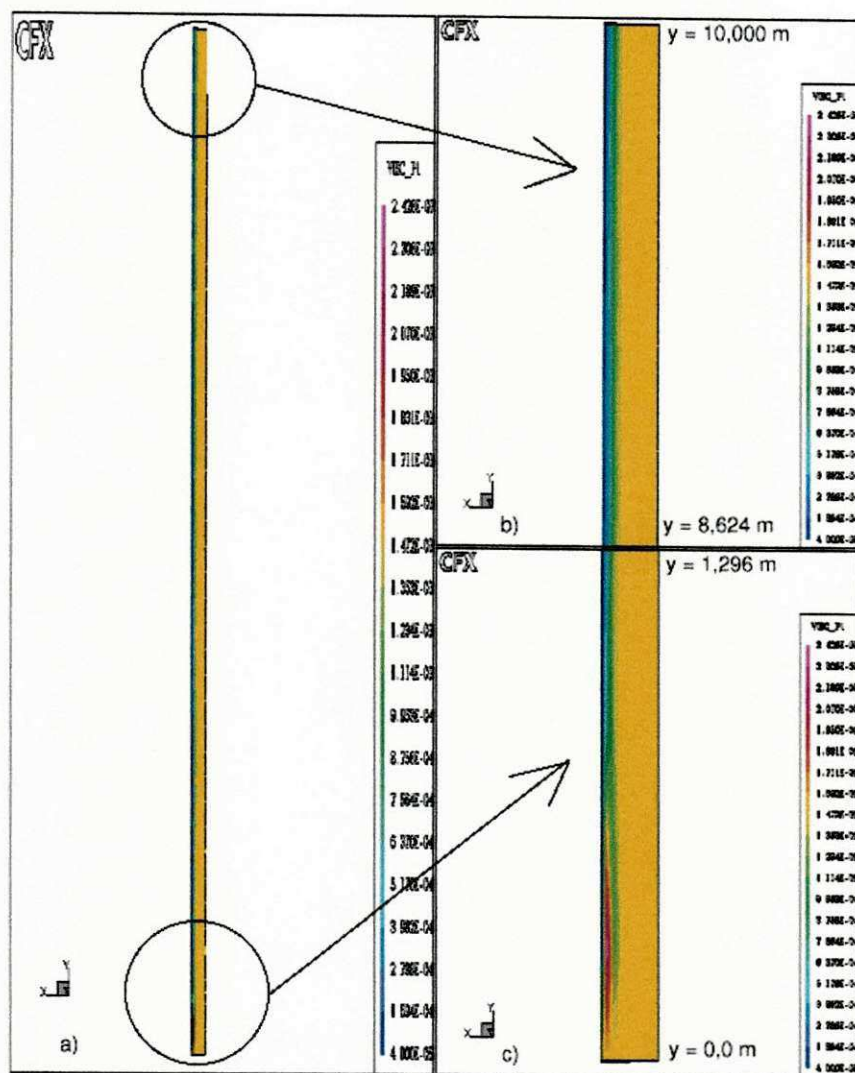


Figura 33: Viscosidade Efetiva do Gás (Caso 2)

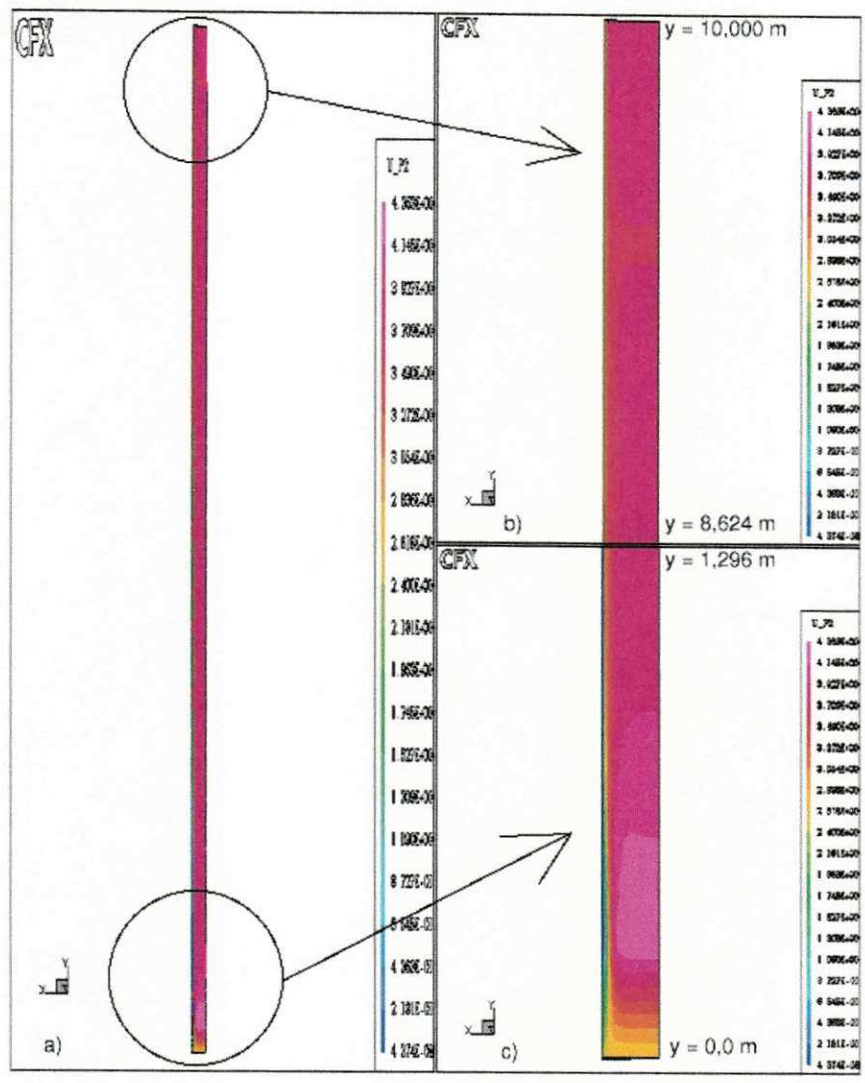


Figura 34: Velocidade Axial das Partículas (Caso 2)

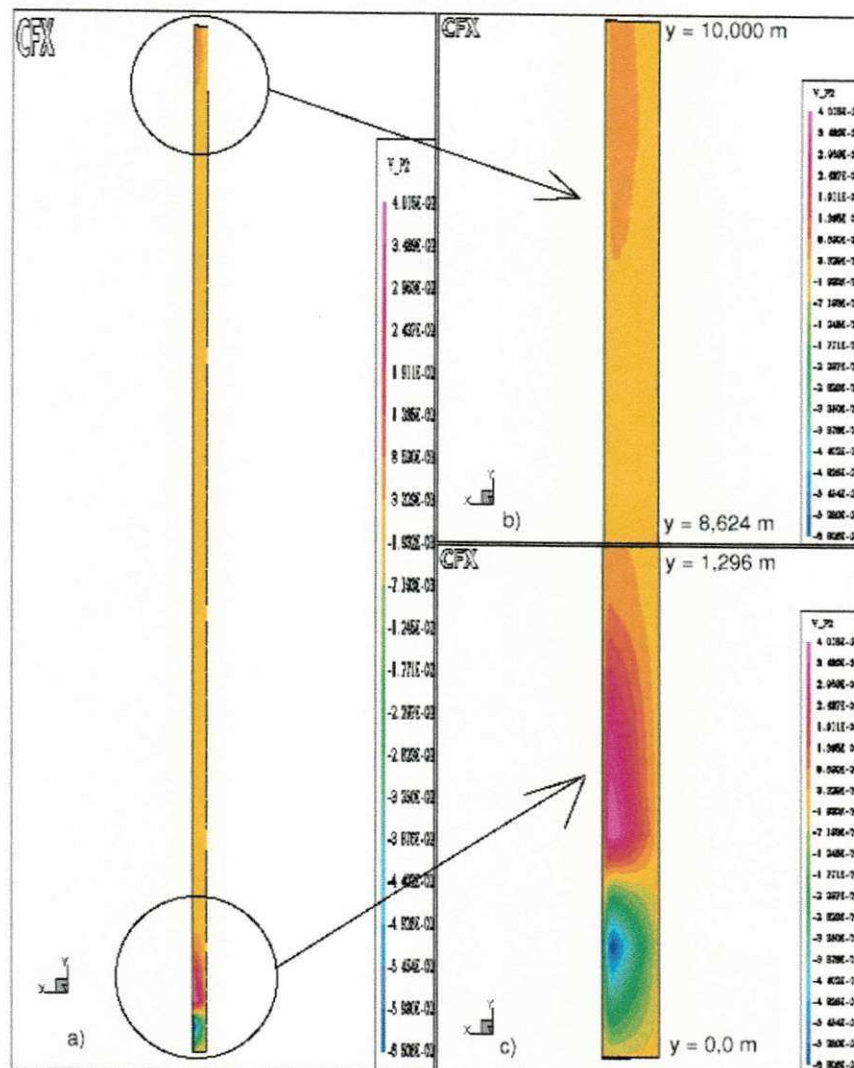


Figura 35: Velocidade Radial das Partículas (Caso 2)

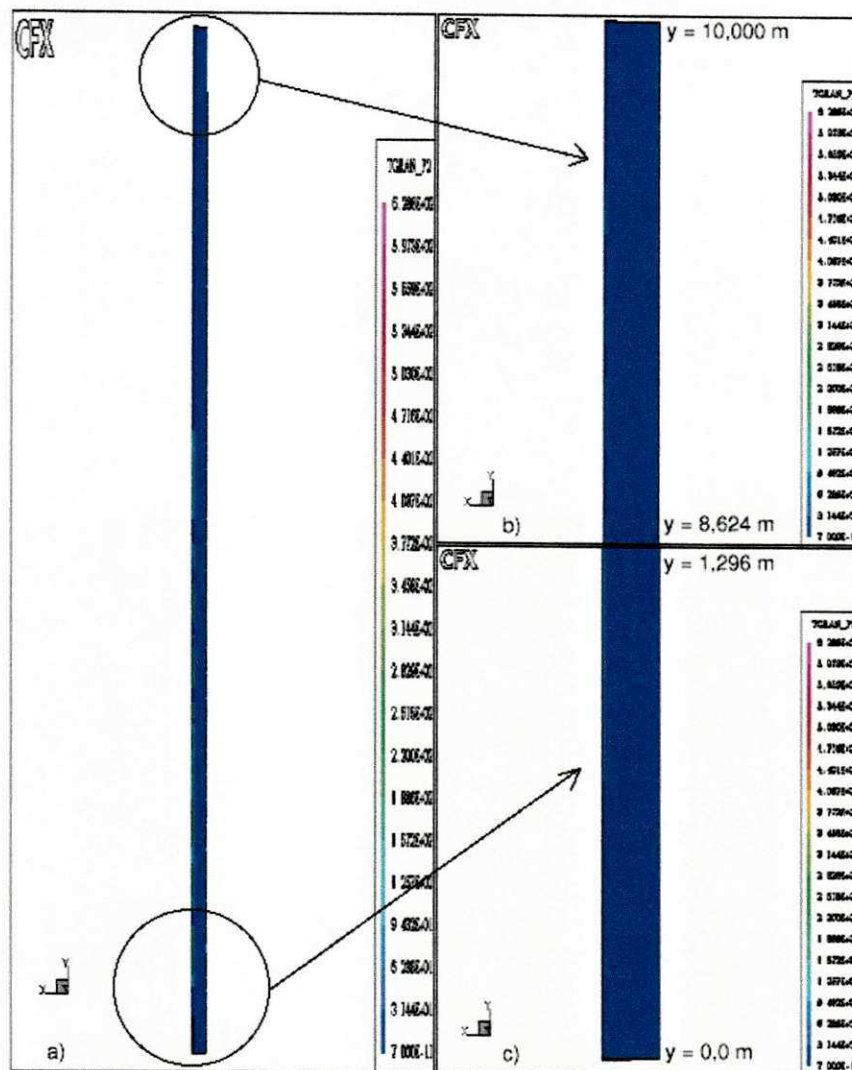


Figura 36: Temperatura Granular (Caso 2)

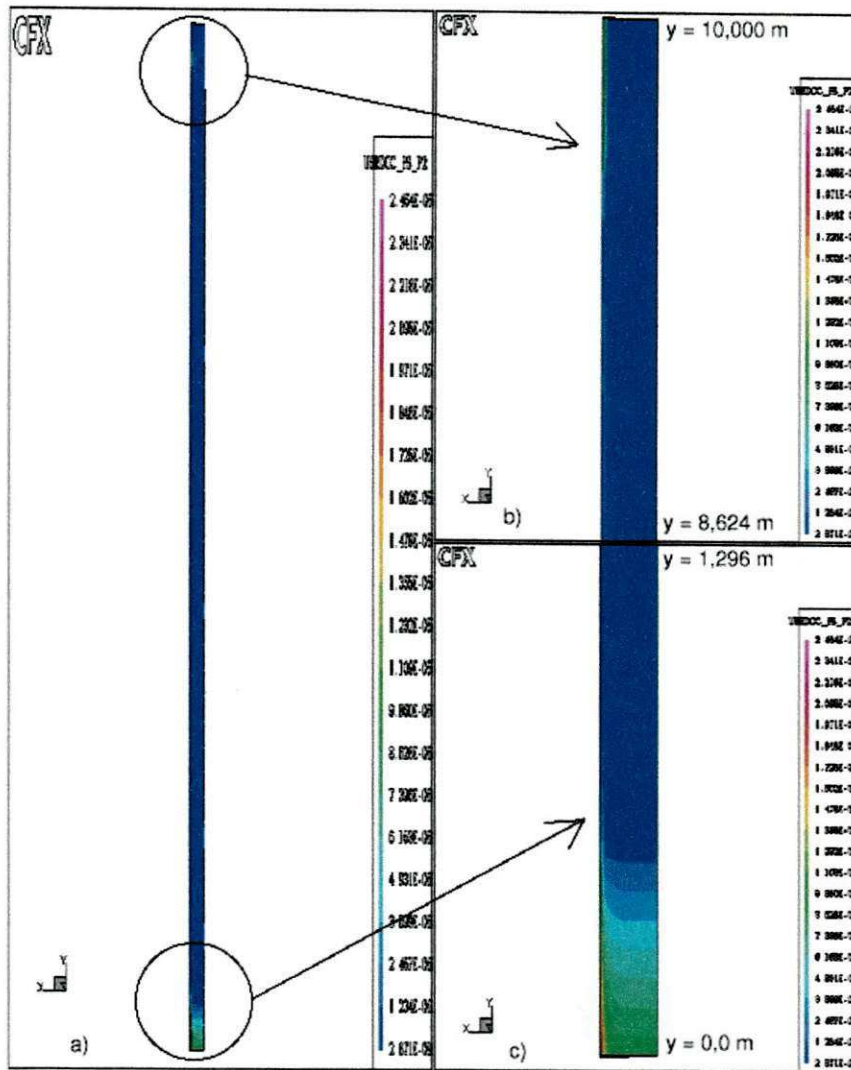


Figura 37: Pressão dos Sólidos (Caso 2)

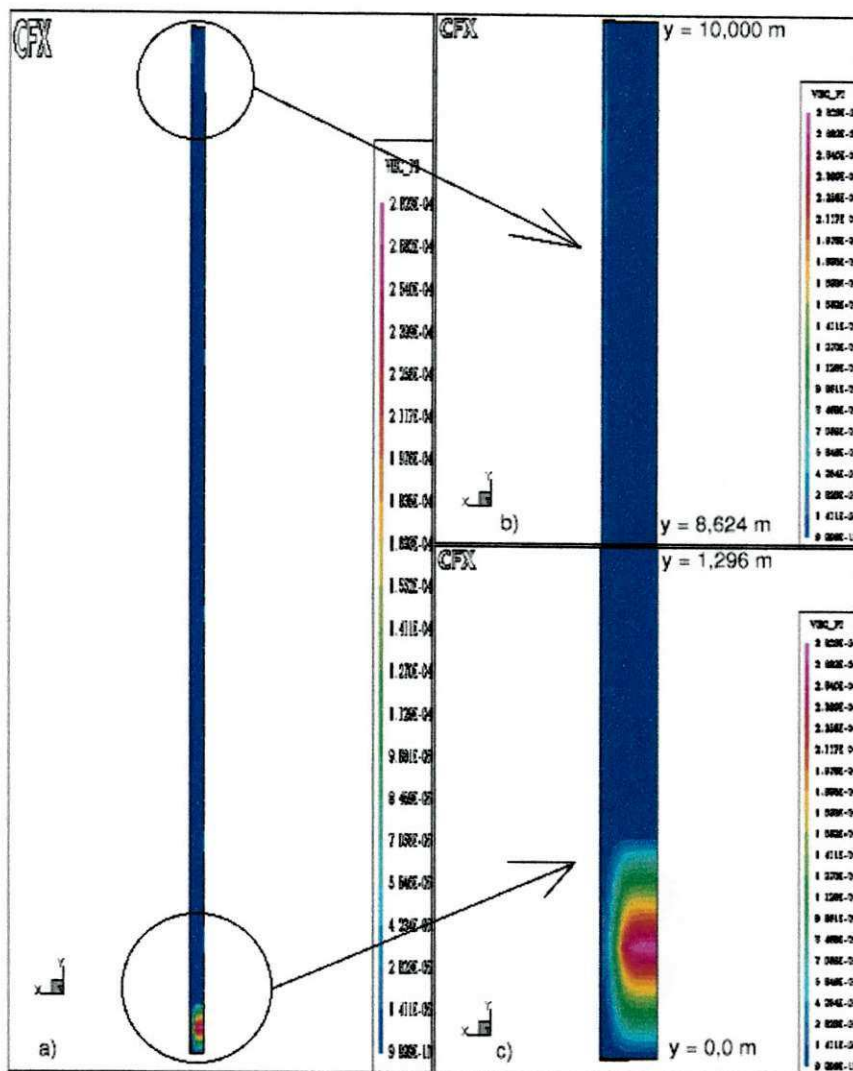


Figura 38: Viscosidade efetiva das Partículas (Caso 2)

7.2.5.3 Caso 3

A figura 39 mostra o comportamento do resíduo das variáveis calculadas pelo CFX. Como o resíduo de massa estava constante a quase 1900 iterações, em aproximadamente $1,0 \cdot 10^{-12}$, o problema foi considerado convergido. O caso 3 foi o único em que não houve a necessidade de iniciar uma simulação tomando um dump com estimativa inicial.

Para confirmar se o modelo da KTGF pode ser generalizado, um terceiro caso foi testado.

Comparando-se os caso 1, 2 e 3, observa-se mais uma vez que o modelo implementado no CFX foi capaz de prever as principais características de mais este 3º caso. Apesar de ser um caso onde a concentração de sólido na entrada é relativamente alta, os dados experimentais da literatura (TSUO e GIDASPOW, 1990) mostram que a concentração de sólidos para a posição $Z = 3,4\text{m}$, varia de 0,005 a 0,04. Apesar de se ter na parede uma concentração quase dez vezes maior que no centro, não há regiões de concentrações de partículas próximas a de leito fixo ($\cong 0,45$), como aconteceu no caso 2. O CFX conseguiu ainda prevê um perfil praticamente plano, embora, neste caso 3 os resultados não tenham sido muitos bons, o modelo da KTGF é o que melhor representou a maioria dos casos.

As figura de 40 a 49 mostram as demais características do escoamento. Novamente, destaca-se apenas a distribuição de partículas.

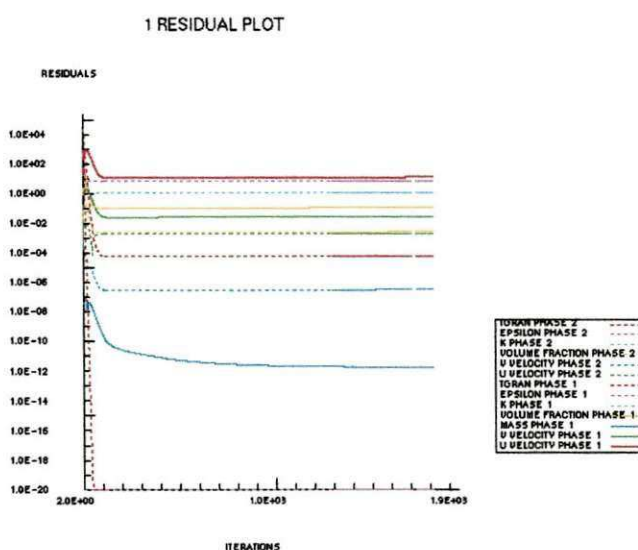


Figura 39: Resíduos das Variáveis Calculadas pelo CFX (Caso 3)

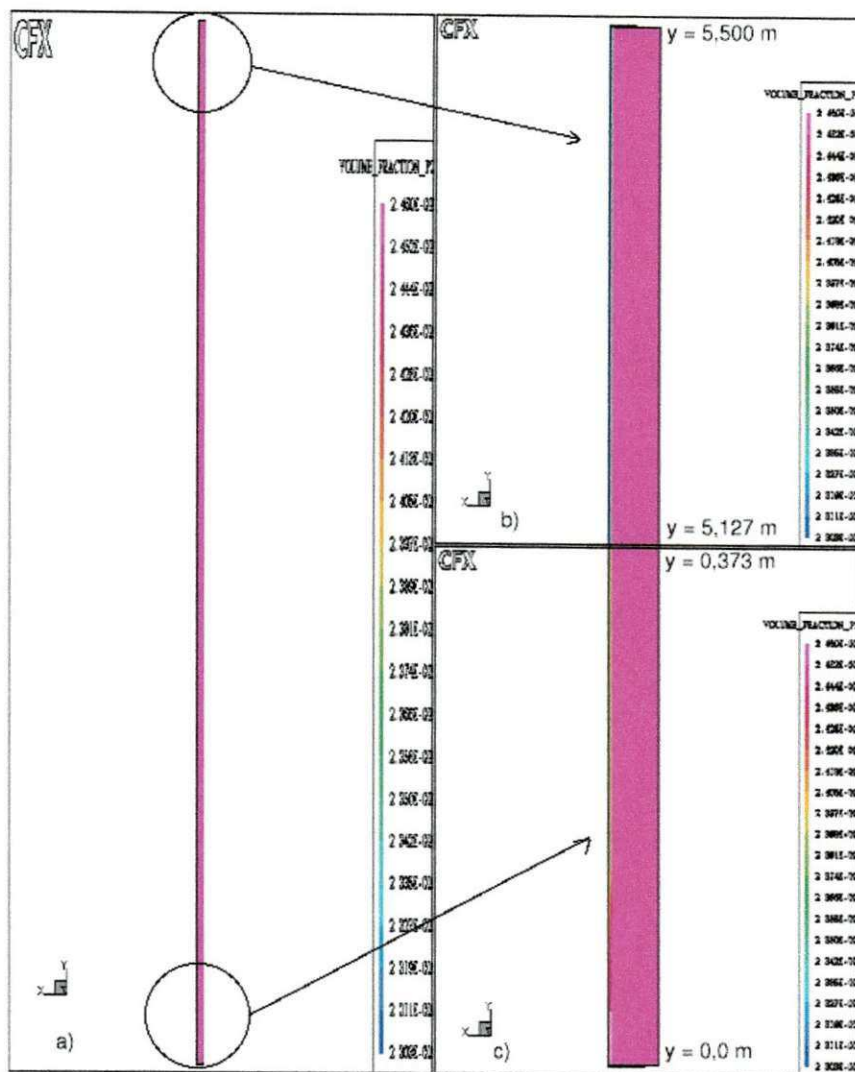


Figura 40: Concentração das Partículas (Caso 3)

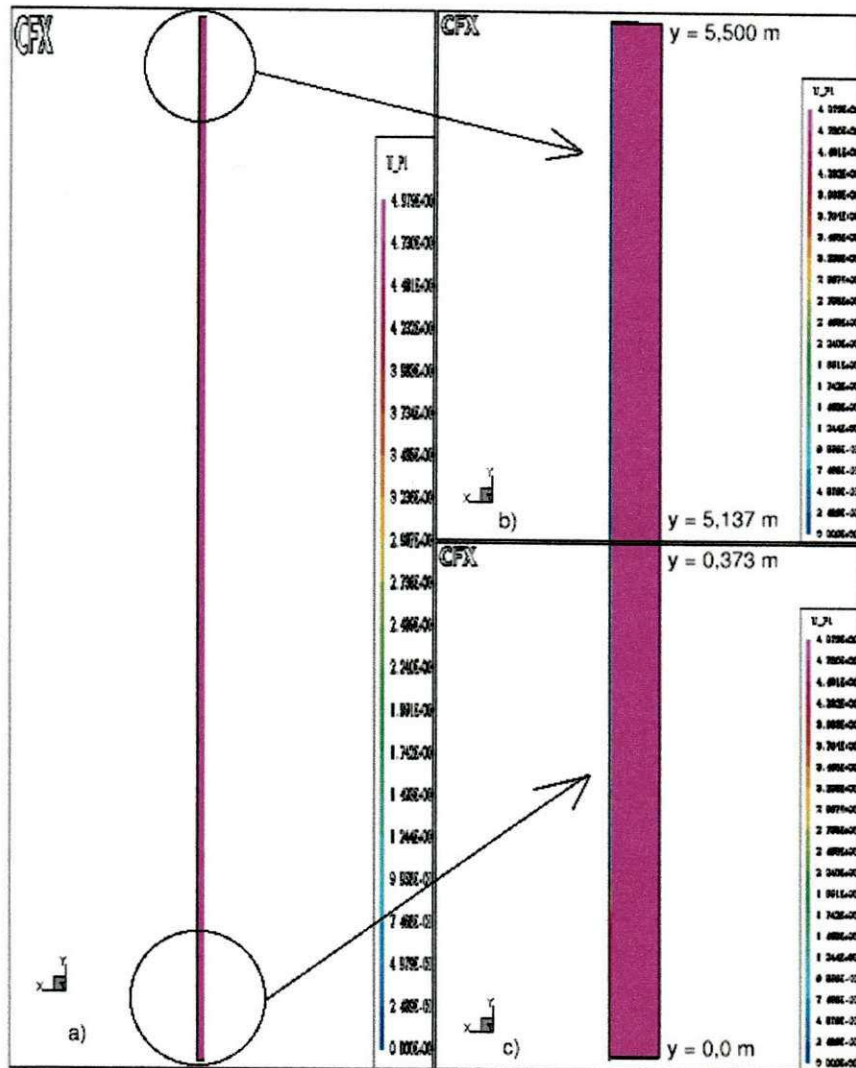


Figura 41: Velocidade Axial do Gás (Caso 3)

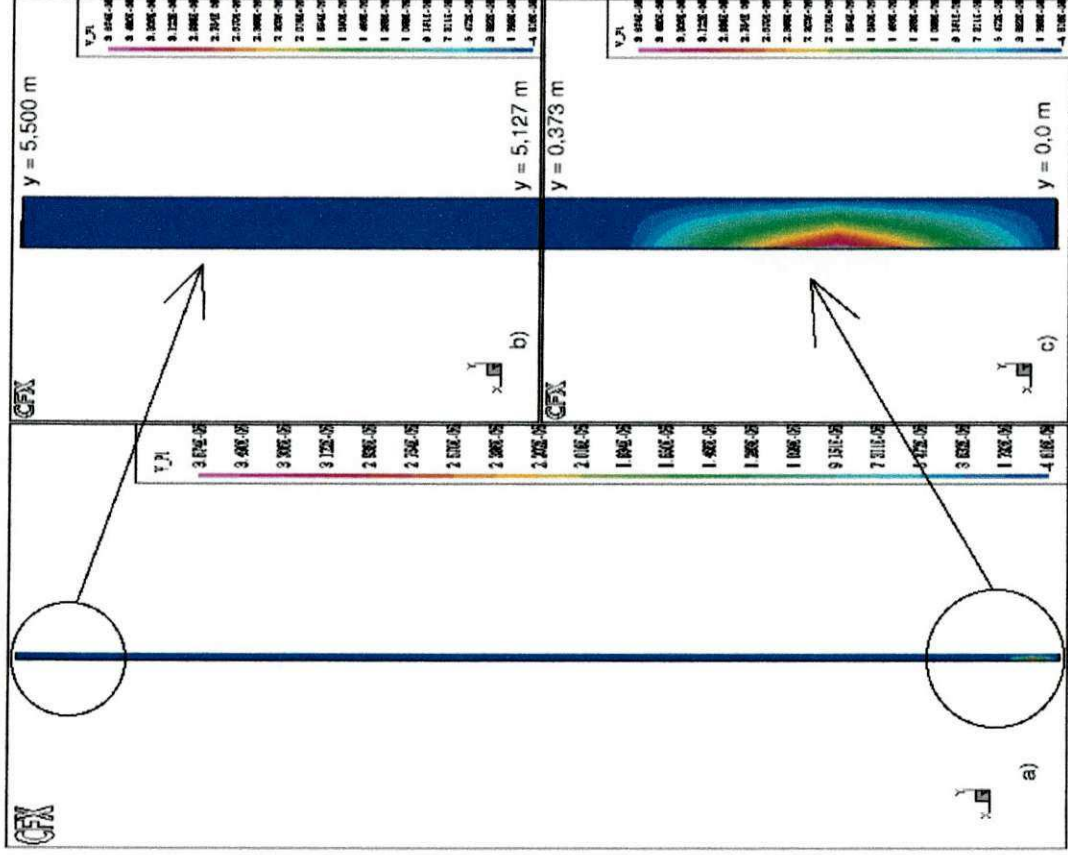


Figura 42: Velocidade Radial do Gás (Caso 3)

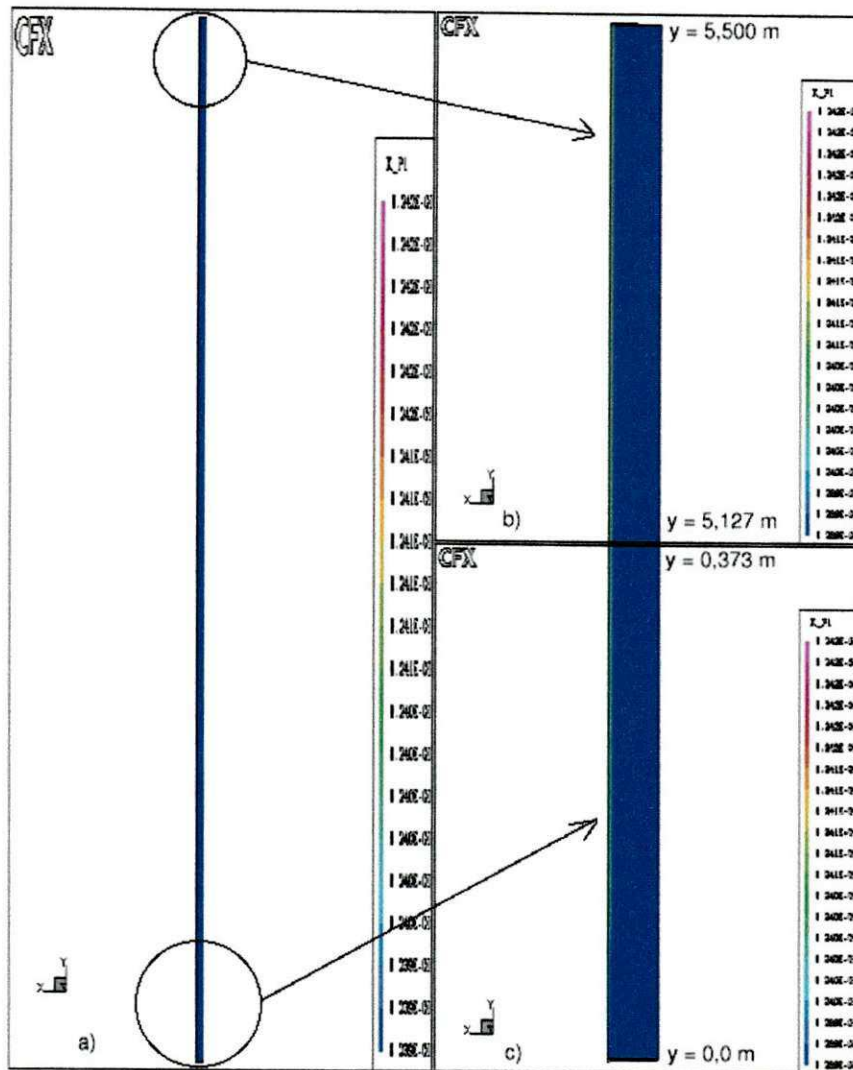


Figura 43: Energia Cinética Turbulenta (Caso 3)

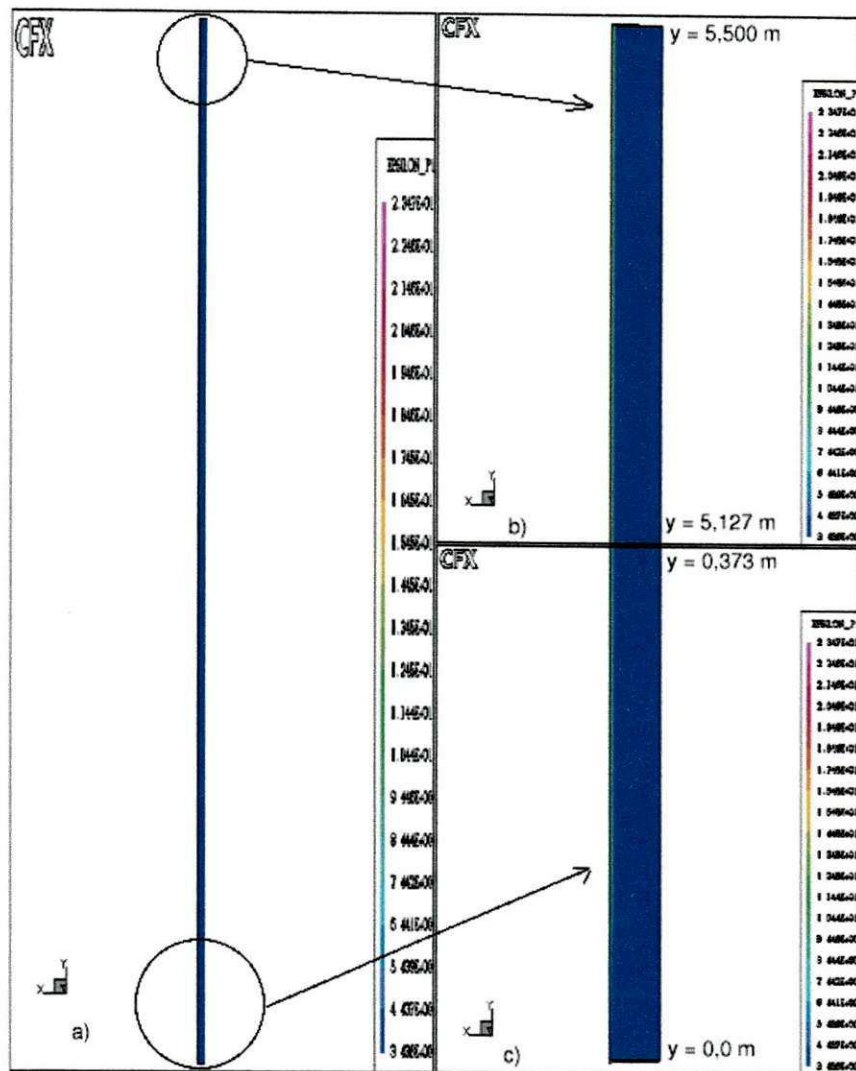


Figura 44: Taxa de Dissipação da Energia Cinética Turbulenta (Caso 3)

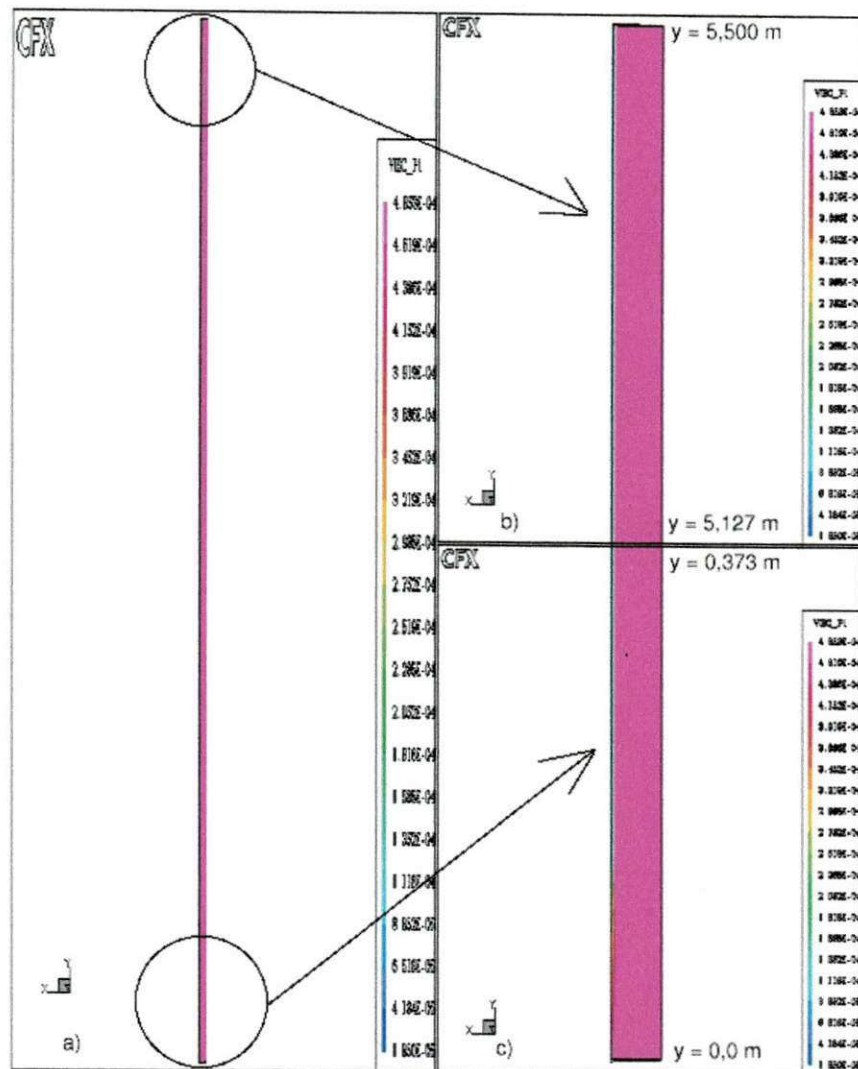


Figura 45: Viscosidade Efetiva do Gás (Caso 3)

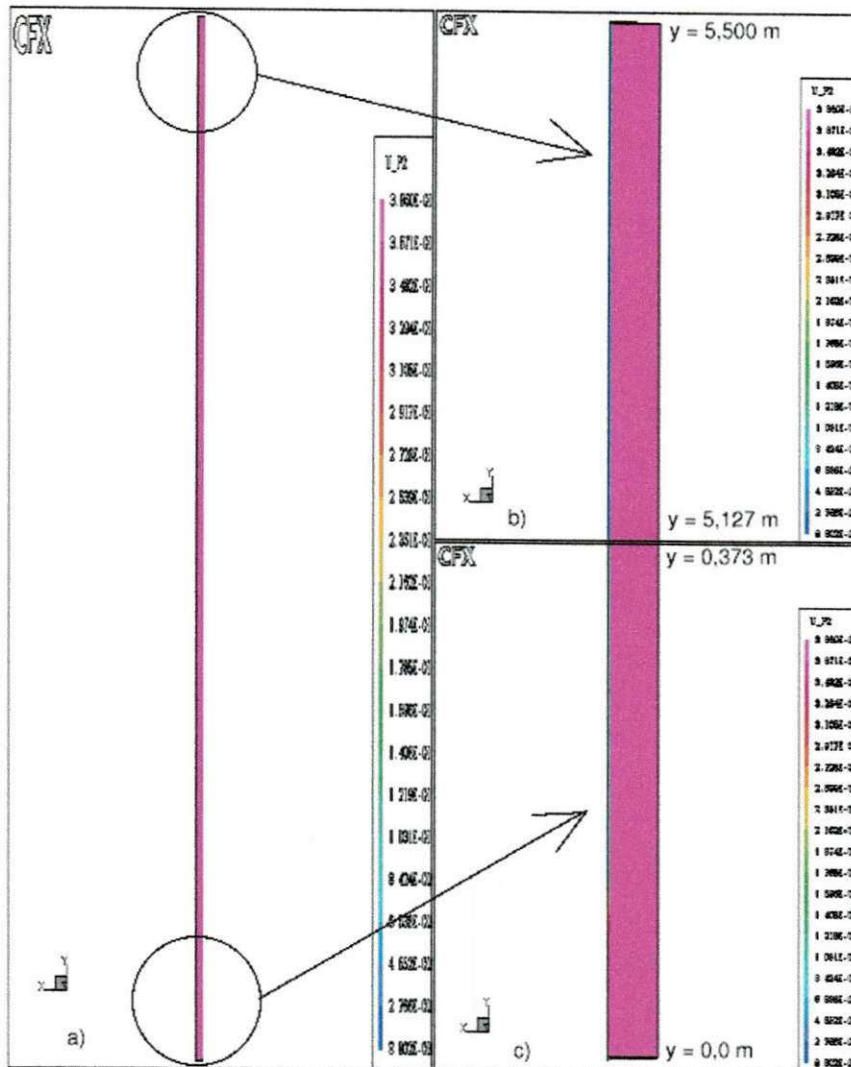


Figura 46: Velocidade Axial das Partículas (Caso 3)

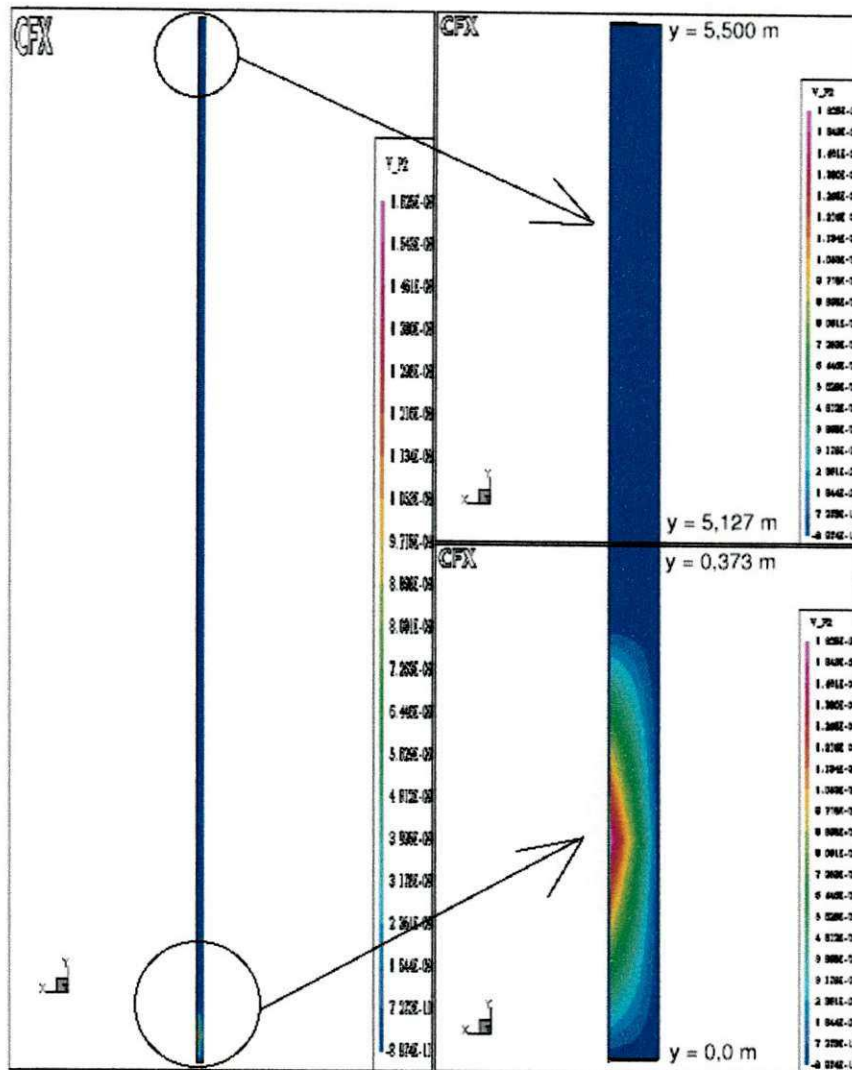


Figura 47: Velocidade Radial das Partículas (Caso 3)

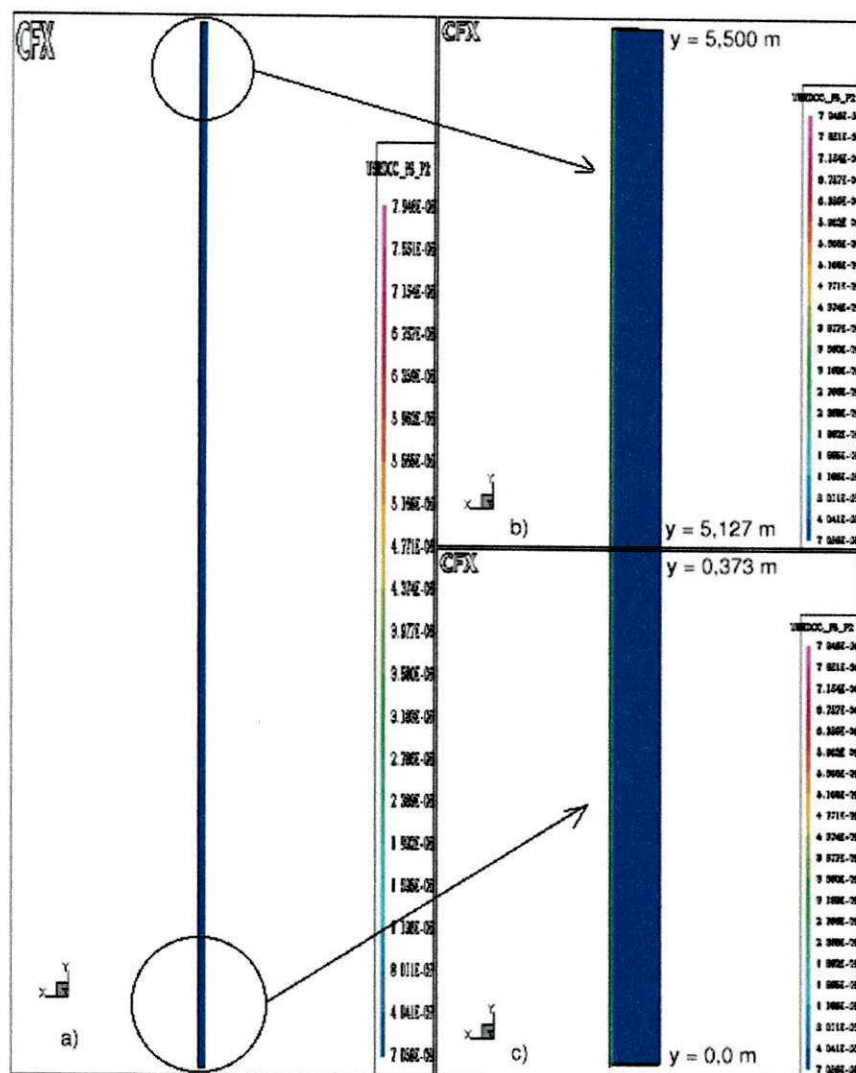


Figura 48: Pressão de Sólidos (Caso 3)

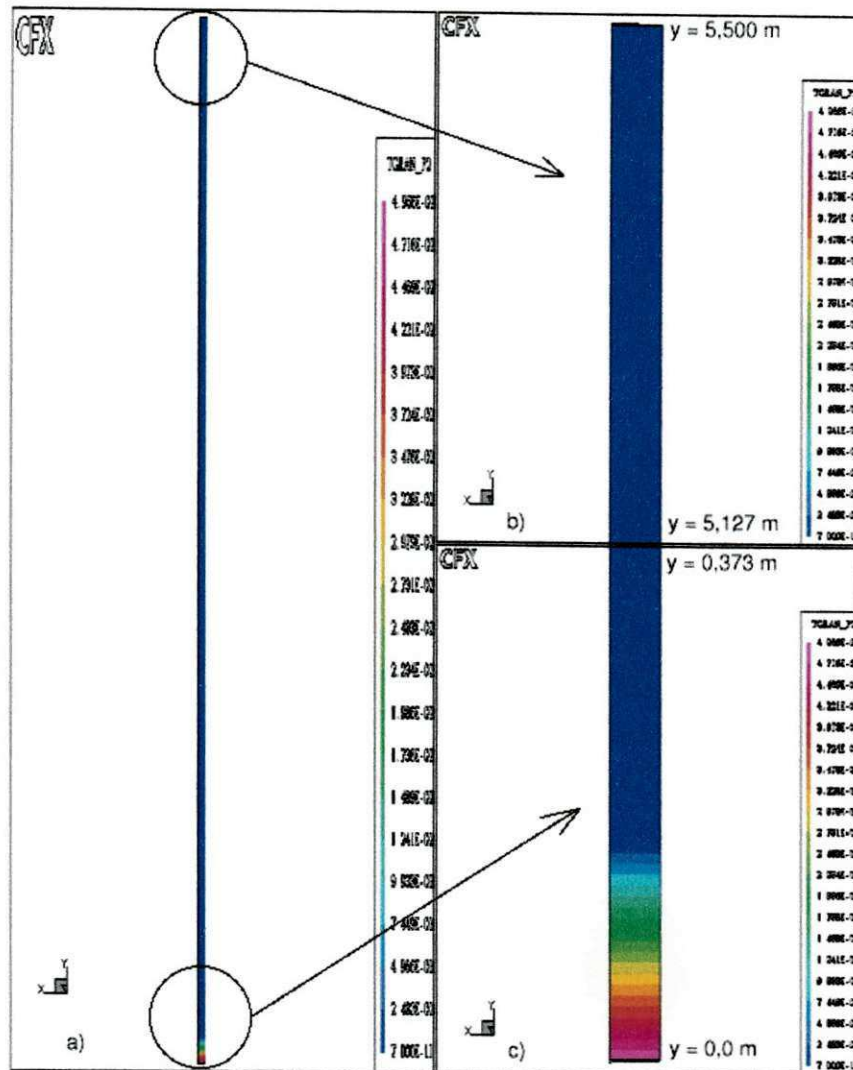


Figura 49: Temperatura Granular (Caso 3)

8 Conclusões

Tendo em vista os objetivos alcançados concluiu-se que:

O software CFX-F3D, da AEA TECHNOLOGY é, de fato, viável para a implementação do modelo da teoria cinética dos materiais granulares.

O modelo foi implementado nas subrotinas abertas ao usuário pelo software (apêndices C.1 a C.2).

Os testes com os modelos fluidodinâmicos, mostraram que:

- Os modelos invíscido, com viscosidade constante e $\kappa - \epsilon^{\kappa}$ para as partículas, previram uma concentração na parede em torno de 12%, concentração esta, apenas no lado oposto à entrada do riser, e numa pequena região próxima à entrada, o que dá a entender que é um efeito de geometria de entrada apenas.
- O modelo da teoria cinética, utilizado para este mesmo caso, (caso2) prevê uma concentração de 58% em qualquer posição angular na parede, próximo a região de entrada. Isto mostra a importância do modelo na previsão da formação do perfil, pois os resultados experimentais de TSUO e GIDASPOW (1990) e (1996), mostram uma concentração aproximadamente 30% em um plano próximo a parede.

O modelo de dez grupos utilizado na simulação do craqueamento (apêndice A), está pronto para ser acoplado ao fluidodinâmico.

Convém lembrar que os parâmetros cinéticos dependem do tipo de carga. Testou-se apenas uma carga.

Por fim, o modelo da teoria cinética para materiais granulares adotado foi implementado no CFX-4.4, e este modelo representou qualitativamente bem aos casos estudados, onde previu satisfatoriamente o comportamento do escoamento de partículas e gás no interior do riser.

9 *Sugestões para Trabalhos Futuros*

As soluções apresentadas, demoraram muito tempo e foram obtidas mediante falso transiente e tratada como solução estacionária, a partir do momento em que o resíduo de massa estabilizava em um baixo valor. Como o passo de tempo foi sempre muito pequeno, de 10^{-8} a 10^{-9} (apêndice B.1, B.2 e B.3), seria interessante que se tentasse atingir o estacionário utilizando-se passos de tempo maiores, fato não conseguido durante este trabalho. Por isto, outros métodos de resolução do sistema, do próprio software, devem ser testados.

Como o software não permite a aplicação de das condições de contorno para a fração volumétrica das fases, da forma como esta condição na parede foi implementada, ela é aplicável apenas quando a geometria for construída com um bloco apenas. Para uma estrutura multi-blocos, a aplicação destas condições de contorno, precisa ser adaptada a nova estrutura.

Simular o riser 3D, não simétrico utilizando o modelo da teoria cinética.

Acoplar ao modelo fluidodinâmico o modelo de cinética de reação, que poderá ser o modelo de dez grupos, testado aqui, sem os efeitos fluidodinâmicos (apêndice A), ou um outro modelo cinético disponível na literatura.

Testar outros casos e simular com o CFX.

Comparar os resultados das simulações com o CFX utilizando o mesmo modelo, com os resultados de outros simuladores utilizando o mesmo modelo.

Referências Bibliográficas

- ABADIE, E. Craqueamento catalítico. Petrobrás/SEREC/CEN-SUD, 19XX.
- ALVES, J. J. N. *Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante*. Tese de Doutorado. Unicamp - São Paulo, 1998.
- ALVES, J. J. N.; MARTIGNONI, W. P.; MORI, M. Fluid dynamic modelling and simulation of circulating fluidized bed reactors: Importance of the interface turbulence transfer. *Journal of the Braz. Soc. Mechanical Sciences*, Vol. XXIII, No. 1, pp.91-104, 2001.
- BIRD, R. B.; STUWART, W. E.; LIGHFOOT, E. N. Fenómenos de transporte. Reverté, Barcelona, 1978.
- CFX-USER-MANUAL. AEA Tenchnology, Unidted Kingdom, 1997.
- FROMENT, G. F.; BISCHOFF, K. B. Chemical reactor analysis and design. 2nd Ed., John Wiley & Sons, 1990.
- KWAUK, M.; LI, J. Fluidization regimes. *Powder Tecnology*, vol. 87,193-202, 1996.
- LANSARIN, M. A. *Modelagem e Simulação da Seção de Conversão de uma Unidade de FCC*. Campinas - SP, 1997.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional - Fundamentos e Coordenadas Generalizadas*. [S.l.], 1995.
- MARTIGNONI, W. P. *Modelling and Simulation of FCC Riser Reactors: An Heterogeneous Approach*. Tese de Doutorado. Ontario - Canadá, 1998.
- MILITZER, J. Numerical prediction of the fully developed two-phase (air-solids) flow in a pipe. 1986.
- NERI, A.; GIDASPOW, D. Riser hydrodynamics: Simulation using kinetic theory. *AIChE Journal*, Vol. 46, No. 1, 2000.
- ARBEL, A.; HUANG, Z.; RINARD, I. H.; SHINNAR, R.; SAPRE A. V.. Dynamic and control of fluidized catalytic crackers. 1 modeling of the current generation of fcc's. *Ind. Eng. Res.*, 1995.
- NIEUWLAND, J. J; van SINT ANNALAND, KUIPERS, M. M.; van SWAAIJ, W. P. M.. Hydrodynamic modeling of gas/particle flows in riser reactors. *AIChE Journal*, Vol. 42, N. 6, pp. 1569-1582, 1996.
- THEOLOGOS, N. K.; MARKATOS, N. C. Advanced modeling of fluid catalytic cracking riser-type reactors. *AIChE Journal*, Vol. 39, N. 6, pp. 1007-1017, 1993.

TSUO, Y. P.; GIDASPOW, D. Computation of flow patterns in circulating fluidized beds. *AIChE Journal*, Vol. 36, N. 6, pp. 885-896, 1990.

WEEKMAN, V. W. *Kinetics and Dynamics of Catalytic Cracking Selectivity in Fixed-Bed Reactors*. [S.l.], 1969.

APÊNDICE A - Código Fonte do Programa da Cinética de Reação

```
PROGRAM RISER
C PROGRAMA QUE CALCULA A CONVERSÃO NO RISER
      parameter(n=5000)
implicit real (a-z)
c
      real z(n), cph(n), CNH(n), CASH(n), CARH(n), CPL(n), CNL(n),
      +CASL(n), CARL(n), CG(n),CC(n), T(n),usg(n) , phi(n), f(n)
      +,Xph(n), XNH(n), XASH(n), XARH(n), XPL(n), XNL(n),
      +XASL(n), XARL(n), XG(n),XC(n),rhog(n),Ccont(n)
      integer i,j
C
C IDENTIFICACAO DOS ELEMENTOS
C 1 = PH
C 2 NH
C 3 ASH
C 4 ARH
C 5 PL
C 6 NL
C 7 ASL
C 8 AR
C 9 G
C 10 C
C
C CONstante dos gases
R=8.3150d+0
```

C ENERGIAS DE ATIVACAO

C

C

open(unit=3,file='resultado1.txt')

open(unit=4,file='resultado2.txt')

open(unit=7,file='resultado3.txt')

open(unit=9,file='resultado4.txt')

C PARAFINAS PESADAS

EA15=33939.0

c ea15=60704.4

EA19=23045.0

c ea19=23025.0

EA110=35615.0

c ea110=73263.9

C

C NAFTENICOS PESADOS

EA26=33939.0

c ea26=60704.4

EA29=23045.0

c ea29=23025.1

EA210=35615.0

c ea210=73263.9

C

C AROMATICOS PESADOS GRUPOS SUBSTITUENTES

EA37=33939.0

c ea37=60704.4

EA38=33939.0

c ea38=60704.4

EA39=60755.0

c ea39=60704.4

EA310=73325.0

c ea310=73263.9

C

C AROMATICOS PESADOS

EA48=33939.0

c ea48=60704.4

EA410=73325.0

c ea410=73263.9

C PARAFINAS LEVES

EA59=23045.0

c ea59=23025.1

EA510=35615.0

c ea510=73263.9

C

C NAFTENICOS LEVES

EA69=23045.0

c ea69=23025.1

EA610=35615.0

c ea610=73263.9

C

C AROMATICOS GRUPOS SUBSTITUINTES LEVES

EA79=60755.0

c ea79=60704.4

EA710=73325.0

c ea710=73263.9

C

C AROMATICOS LEVES

EA810=73325.0

c ea810=73263.9

C

C GASOLINA

EA910=83800.0

c ea910=41865.1

C

l=30.0d+0

DT=0.85d+0

dz=1/n

rhos=1500.d+0

beta=1.0

ohmega=3.14d0*DT**2.d+0/4.d+0

MS=272.2d+0

MGO=13.6D+0

TGO=770

CPS=1003.0D+0

TS=tgo

CPGO=3403.0D+0

Kad=0.0

Tref=482.0+273.15

c condicao inicial

c

c fração massica (Froment e Bisshof))

Xph(1)=0.17d+0

XNH(1)=0.20d+0

XASH(1)=0.24d+0

XARH(1)=0.12d+0

XPL(1)=0.14D+0

XNL(1)=0.090D+0

XASL(1)=0.02D+0

XARL(1)=0.02D+0

XG(1)=0.0

XC(1)=0.0

c fração massica(Dewachter, Froment e outros)

c Xph(1)=0.420d+0

cXNH(1)=0.226d+0

cXASH(1)=0.182d+0


```
cXARH(1)=0.122d+0
cXPL(1)=0.005D+0
c    XNL(1)=0.010D+0
cXASL(1)=0.014D+0
cXARL(1)=0.021D+0
cXG(1)=0.0
cXC(1)=0.0
c
c pesos moleculares
pmpH=339.0
pmnH=339.0
pmasH=339.0
pmarH=339.0
pmpL=226.0
pmnL=226.0
pmasL=226.0
pmarL=226.0
pmg=114.0
pmc=34.0
pmccont=12.d+0
c calculo da fracao molar
soma= Xph(1)*pmpH+XNH(1)*pmnH+XASH(1)*pmasH+XARH(1)*pmarH+
      +XPL(1)*pmpL+XNL(1)*pmnL+XASL(1)*pmasL+XARL(1)*pmarL+XG(1)*pmg
      ++XC(1)*pmc
c
      cph(1)=(XPH(1)*pmpH)/soma
CNH(1)=(XNH(1)*pmnH)/soma
CASH(1)=(XASH(1)*pmasH)/soma
CARH(1)=(XARH(1)*pmarH)/soma
CPL(1)=(XPL(1)*pmpL)/soma
      CNL(1)=(XNL(1)*pmnL)/soma
CASL(1)=(XASL(1)*pmasL)/soma
CARL(1)=(XARL(1)*pmarL)/soma
CG(1)=(XG(1)*pmg)/soma
CC(1)=(XC(1)*pmc)/soma
```

```

c T(1)=770.0d+0
T(1)=(mgo*cpgo*Tgo+ms*cps*Ts)/(mgo*cpgo+ms*cps)
c efeito da temperatura
  T(1)=360.0
  do 30 j=1,150
T(1)=T(1)+10
c propriedades do tubo
PMTOTAL= cph(1)*pmpH+CNH(1)*pmnh+CASH(1)*pmash+CARH(1)*pmarh
  ++CPL(1)*pmp1+CNL(1)*pmn1+CASL(1)*pmas1+CARL(1)*pmar1+
  +CG(1)*pmg+CC(1)*pmc

c
c pressao
P=1.2D+5
densidade do gas
  rhog(1)=P/(R*T(1))*PMTOTAL/1000.d+0
rhomolar=P/(R*T(1))
c   rhog=1.0
usg(1)=mgo/(rhog(1)*ohmega)
z(1)=0.0d+0
Ccont(1)=0.0015
phi(1)=1.d+0/(1.d+0+69.47*(100.0*CCont(1))**3.8D+0)
c   phi(1)=exp(-385*Ccont(1))
c velocidade superficial do solido
usp=ms/(rhos*ohmega)
dp=8.0d-5
visco=1.078d-5
cc ut=9.81*dp**2.0*(rhos-rhog(1))/(18.0*visco)
  ut=sqrt(3.1*dp*9.81*(rhos-rhog(1))/rhog(1))
aux1=(ut+usg(1)+usp)
  aux2=sqrt((ut+usg(1)+usp)**2.d+0-4.d+0*usg(1)*ut)
c f(1)=0.97
f(1)=(aux1-aux2)/(2.d+0*ut)
c f(1)=(mgo/rhog(1))/(mgo/rhog(1)+ms/rhos)
c

```

```

c
C CALCULO DAS FRACOES MOLARES
  do 10 i=1,n-1
z(i+1)=z(i)+dz
PMTOTAL= cph(i)*pmpH+CNH(i)*pmnh+CASH(i)*pmash+CARH(i)*pmarh
  ++CPL(i)*pmpL+CNL(i)*pmnl+CASL(i)*pmasl+CARL(i)*pmarL+
  +CG(i)*pmg+CC(i)*pmc
  rhog(i+1)=P/(R*T(i))*PMTOTAL/1000.d+0
usg(i+1)=mgo/(rhog(i+1)*ohmega)
c usg(i+1)=usg(1)
cc ut=9.81*dp**2.0*(rhos-rhog(i))/(18.0*visco)
  ut=sqrt(3.1*dp*9.81*(rhos-rhog(i+1))/rhog(i+1))
aux1=(ut+usg(i+1)+usp)
  aux2=sqrt((ut+usg(i+1)+usp)**2.d+0-4.d+0*usg(i+1)*ut)
f(i+1)=(aux1-aux2)/(2.d+0*ut)
c f(i+1)=(mgo/rhog(i))/(mgo/rhog(i)+ms/rhos)
c f(i+1)=f(1)
c   tc=(z(i+1)-z(1))/(usp/(1.0-F(i)))
c Ccont(i+1)=Ccont(1)+2.43d-3*tc**0.2d+0
phi(i+1)=1.d+0/(1.d+0+69.47*(100.0*CCont(I))**3.8d+0)
c   phi(i+1)=exp(-385*Ccont(i+1))
C MATRIZES DOS COEFICIENTES
  T2=482.0+273.15
K15=5.75D-3*EXP(-EA15/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K19=15.28D-3*EXP(-EA19/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K110=2.181D-3*EXP(-EA110/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K26=6.25D-3*EXP(-EA26/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K29=23.53D-3*EXP(-EA29/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K210=4.131D-3*EXP(-EA210/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K37=5.278D-3*EXP(-EA37/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K38=13.89D-3*EXP(-EA38/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K39=17.50D-3*EXP(-EA39/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K310=9.50D-3*EXP(-EA310/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K48=1.628D-3*EXP(-EA48/R*(1.0/T(i)-1/T2))
K49=0.0d+0

```

$K410=4.064D-3*EXP(-EA410/R*(1.0/T(i)-1/T2))$
 $K59=6.625D-3*EXP(-EA59/R*(1.0/T(i)-1/T2))$
 $K510=2.622D-3*EXP(-EA510/R*(1.0/T(i)-1/T2))$
 $K69=18.37D-3*EXP(-EA69/R*(1.0/T(i)-1/T2))$
 $K610=2.272D-3*EXP(-EA610/R*(1.0/T(i)-1/T2))$
 $K79=5.139D-3*EXP(-EA79/R*(1.0/T(i)-1/T2))$
 $K710=1.008D-3*EXP(-EA710/R*(1.0/T(i)-1/T2))$
 $K810=0.277D-3*EXP(-EA810/R*(1.0/T(i)-1/T2))$
 $K910=1.222D-3*EXP(-EA910/R*(1.0/T(i)-1/T2))$

kad=0.0d+0

C

C CALCULO DAS CONCENTRACOES

C

C PARAFINAS PESADAS

$CPH(I+1)=(CPH(I)-(K15+K19+K110)*CPH(I)*$
 $*DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)$
 $//(1.d+0+Kad*CARH(i))$

C*rhog(i)/rhog(i+1)

C

C NAFTENICOS PESADOS

$CNH(I+1)=(CNH(I)-(K26+K29+K210)*CNH(I)*$
 $*DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)$
 $//(1.d+0+Kad*CARH(i))$

C*rhog(i)/rhog(i+1)

C

C AROMATICOS PESADOS GRUPOS SUBSTITUINTES

$CASH(I+1)=(CASH(I)-(K37+K38+K39+K310)*CASH(I)*$
 $*DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)$
 $//(1.d+0+Kad*CARH(i))$

C *rhog(i)/rhog(i+1)

C

C AROMATICOS PESADOS

$CARH(I+1)=(CARH(I)-(K48+K410)*CARH(I)*$
 $*DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)$
 $//(1.d+0+Kad*CARH(i))$

C *rhog(i)/rhog(i+1)

C

C PARAFINAS LEVES

CPL(I+1)=(CPL(I)+(K15*CPH(I)-(K59+K510)*CPL(I))*
 *DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)
 //(1.d+0+Kad*CARH(i)))

C *rhog(i)/rhog(i+1)

C

C NAFTENICOS LEVES

CNL(I+1)=(CNL(I)+(K26*CNH(I)-(K69+K610)*CNL(I))*
 *DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)
 //(1.d+0+Kad*CARH(i)))

C *rhog(i)/rhog(i+1)

C

C AROMATICOS GRUPOS SUBSTITUENTES LEVES

CASL(I+1)=(CASL(I)+(K37*CASH(I)-(K79+K710)*CASL(I))*
 *DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)
 //(1.d+0+Kad*CARH(i)))

C *rhog(i)/rhog(i+1)

C

C AROMATICOS LEVES

CARL(I+1)=(CARL(I)+(K38*CASH(I)+K48*CARH(I)-K810*CARL(I))*
 *DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)
 //(1.d+0+Kad*CARH(i)))

C *rhog(i)/rhog(i+1)

C

C GASOLINA

CG(I+1)=(CG(I)+(K19*CPH(I)+K29*CNH(I)+K39*CASH(I)+K49*CARH(I)+
 +K59*CPL(I)+K69*CNL(I)+K79*CASL(I)-K910*CG(I))*
 *DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)
 //(1.d+0+Kad*CARH(i)))

C *rhog(i)/rhog(i+1)

C

C COQUE + gases c1-c5

CC(I+1)=(CC(I)+(K110*CPH(I)+K210*CNH(I)+K310*CASH(I)+

```

+K410*CARH(I)+K510*CPL(I)+K610*CNL(I)+K710*CASL(I)+K810*CARL(I)+
+K910*CG(I))*
*DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)
//(1.d+0+Kad*CARH(i))
C   *rhog(i)/rhog(i+1)
c
C COQUE no catalizador
CCont(I+1)=(CCont(I)+(K110*CPH(I)+K210*CNH(I)+K310*CASH(I)+
+K410*CARH(I)+K510*CPL(I)+K610*CNL(I)+K710*CASL(I)+K810*CARL(I)+
+K910*CG(I))*DZ/MS*RHOS*PMCcont*(1-F(I))*PHI(I)*BETA*OHMEGA
//(1.d+0+Kad*CARH(i))
C   *rhog(i)/rhog(i+1)
C
C TEMPERATURA
C
C
      cpg=cpg0/1000.0*339.0
C   PARAFINAS PESADAS
DH15=19711.0+cpg*(T(i)-Tref)
DH19=51249.0+cpg*(T(i)-Tref)
DH110=177403.0+cpg*(T(i)-Tref)
C   PARAFINAS PESADAS
c dh15=33939.0
c ea15=60704.4
c dh19=23045.0
c ea19=23025.0
c dh110=35615.0
c   ea110=73263.9
cccc AUX1=(K15*CPL(I)*DH15+K19*CG(I)*DH19+K110*CC(I)*DH110)
      AUX1=(K15*DH15+K19*DH19+K110*DH110)*CPH(I)
c   **DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)
C
C NAFTENICOS PESADOS
DH26=19711.0+cpg*(T(i)-Tref)
DH29=51249.0+cpg*(T(i)-Tref)

```

DH210=177403.0+cpg*(T(i)-Tref)

C NAFTENICOS PESADOS

c dh26=33939.0

c ea26=60704.4

c dh29=23045.0

c ea29=23025.1

c dh210=35615.0

c ea210=73263.9

AUX2=(K26*DH26+K29*DH29+K210*DH210)*CNH(I)

c **DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)

C

C AROMATICOS PESADOS GRUPOS SUBSTITUENTES

DH37=19711.0+cpg*(T(i)-Tref)

DH38=19711.0+cpg*(T(i)-Tref)

DH39=51249.0+cpg*(T(i)-Tref)

DH310=177403.0+cpg*(T(i)-Tref)

C AROMATICOS PESADOS GRUPOS SUBSTITUENTES

c dh37=33939.0

c ea37=60704.4

c dh38=33939.0

c ea38=60704.4

c dh39=60755.0

c ea39=60704.4

c dh310=73325.0

c ea310=73263.9

AUX3=(K37*DH37+K38*DH38+K39*DH39+

*K310*DH310)*CASH(I)

c **DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)

C

C AROMATICOS PESADOS

DH48=19711.0+cpg*(T(i)-Tref)

dh49=0.0+cpg*(T(i)-Tref)

DH410=177403.0+cpg*(T(i)-Tref)

C AROMATICOS PESADOS

c dh48=33939.0

c ea48=60704.4

c dh49=33939.0

c ea49=60704.4

c dh410=73325.0

c ea410=73263.9

AUX4=(K48*DH48+K410*DH410)*CARH(I)

c **DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)

C

cpg=cpg0/1000.0*226.0

C PARAFINAS LEVES

DH59=21025.0+cpg*(T(i)-Tref)

DH510=105127.0+cpg*(T(i)-Tref)

C PARAFINAS LEVES

c dh59=23045.0

c ea59=23025.1

c dh510=35615.0

c ea510=73263.9

AUX5=(K59*DH59+K510*DH510)*CPL (I)

c **DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)

C

C NAFTENICOS LEVES

DH69=21025.0+cpg*(T(i)-Tref)

DH610=105127.0+cpg*(T(i)-Tref)

C NAFTENICOS LEVES

c dh69=23045.0

c ea69=23025.1

c dh610=35615.0

c ea610=73263.9

AUX6=(K69*DH69+K610*DH610)*CNL(I)

c **DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)

C

C AROMATICOS GRUPOS SUBSTITUENTES LEVES

DH79=21025.0+cpg*(T(i)-Tref)

DH710=105127.0+cpg*(T(i)-Tref)

C AROMATICOS GRUPOS SUBSTITUENTES LEVES

c dh79=60755.0

c ea79=60704.4

c dh710=73325.0

c ea710=73263.9

AUX7=(K79*DH79+K710*DH710)*CASL(I)

c **DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)

C

C AROMATICOS LEVES

DH810=105127.0+cpg*(T(i)-Tref)

C AROMATICOS LEVES

c dh810=73325.0

c ea810=73263.9

AUX8=(K810*DH810)*CARL(I)

c **DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)

C

cpg=cpg0/1000.0*114.0

C GASOLINA

DH910=42423.0+cpg*(T(i)-Tref)

C GASOLINA

c dh910=83800.0

c ea910=41865.1

AUX9=(K910*DH910)*CG(I)

c **DZ/USG(I)*RHOS*(1-F(I))*PHI(I)

C

C

C TEMPERATURA

c

c T(I+1)=T(I)-(aux1*CPH(I)+aux2*CNH(I)+aux3*CASH(I)+

c +aux4*CARH(I)+aux5*CPL(I)+aux6*CNL(I)+aux7*CASL(I)+

c +aux8*CARL(I)+aux9*CG(I))*DZ/(MS*CPS+MGO*CPGO)

c **RHOS*PMC*(1-F(I))*PHI(I)*BETA*OHMEGA

T(I+1)=T(I)-(aux1+aux2+aux3+

+aux4+aux5+aux6+aux7+

+aux8+aux9)*DZ/(MS*CPS+MGO*CPGO)

```

**RHOS*(1-F(I))*PHI(I)*OHMEGA
c conversao para mol e de fracao para concentracao
**rhog(i+1)*1000.d+0/PMTOTAL
//(1.d+0+Kad*CARH(i))
c t(i+1)=t(i)
c calculo da fracao massica
soma2=(cph(I+1)/pmph+CNH(I+1)/pmmh+CASH(I+1)/pmash+
+CARH(I+1)/pmarh
++CPL(I+1)/pmp1+CNL(I+1)/pmnl+CASL(I+1)/pmasl+CARL(I+1)/pmar1+
+CG(I+1)/pmg+CC(I+1)/pmc)
c
c
Xph(I+1)=(cph(I+1)/pmph)/soma2
XNH(I+1)=(CNH(I+1)/pmmh)/soma2
XASH(I+1)=(CASH(I+1)/pmash)/soma2
XARH(I+1)=(CARH(I+1)/pmarh)/soma2
XPL(I+1)=(CPL(I+1)/pmp1)/soma2
XNL(I+1)=(CNL(I+1)/pmnl)/soma2
XASL(I+1)=(CASL(I+1)/pmasl)/soma2
XARL(I+1)=(CARL(I+1)/pmar1)/soma2
XG(I+1)=(CG(I+1)/pmg)/soma2
XC(I+1)=(CC(I+1)/pmc)/soma2
c
10 continue
c
c impressao dos resultados da saida

write(9,100) T(1), Xph(n), XNH(n), XASH(n), XARH(n), XPL(n),
+ XNL(n), XASL(n), XARL(n), XG(n),XC(n), Ccont(n), T(n),f(n),usg(n)
+,rhog(n)
30 continue
write(3,*)'altura ', 'ph ', ' nh ', 'ash ', 'arh ', 'pl ',
*'nl ', 'asl ', ' arl ', 'g ', ' c ', 'cont ',
*'t ', ' f ', 'usg ', 'rhog '
do 20 i=1,n

```

C

```
write(3,100) z(i), Xph(i), XNH(I), XASH(I), XARH(I), XPL(I),XNL(I)
+,XASL(I), XARL(I), XG(I),XC(I), Ccont(i), T(i),f(i),usg(i),rhog(i)
```

```
write(4,100) z(i), Cph(i), CNH(I), CASH(I), CARH(I), CPL(I),
+ CNL(I), CASL(I), CARL(I), CG(I),CC(I), Ccont(i), T(i),phi(i),
+f(i),usg(i),rhog(i)
```

```
20 continue
```

```
write(7,200) f(1),usg(1),rhog
```

```
100 format(1x,17(1x,f14.8))
```

```
200 format(1x,3(1x,f10.4))
```

```
close(3)
```

C

stop

end

APÊNDICE B – Arquivo de Comandos

B.1 Caso1

Arquivo de comandos para o caso 1.

```
>>CFX4
  >>OPTIONS
    TWO DIMENSIONS
    BODY FITTED GRID
    CYLINDRICAL COORDINATES
    AXIS INCLUDED
    TURBULENT FLOW
    ISOTHERMAL FLOW
    INCOMPRESSIBLE FLOW
    BUOYANT FLOW
    STEADY STATE
    USER SCALAR EQUATIONS 2
    NUMBER OF PHASES 2
  >>USER FORTRAN
    USRBCS
    USRDIF
    USRPRT
    USRSRC
    USRVIS
  >>VARIABLE NAMES
    U VELOCITY 'U VELOCITY'
    V VELOCITY 'V VELOCITY'
```

```
W VELOCITY 'W VELOCITY'  
PRESSURE 'PRESSURE'  
VOLUME FRACTION 'VOLUME FRACTION'  
DENSITY 'DENSITY'  
VISCOSITY 'VISCOSITY'  
K 'K'  
EPSILON 'EPSILON'  
USER SCALAR1 'TGRAN'  
USER SCALAR2 'USRDCC PS'  
>>PHASE NAMES  
  PHASE1 'GAS'  
  PHASE2 'SOLIDO'  
>>MODEL TOPOLOGY  
>>CREATE BLOCK  
  BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
  BLOCK DIMENSIONS 40 26 1  
>>CREATE PATCH  
  PATCH NAME 'ENTRANCE'  
  BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
  PATCH TYPE 'INLET'  
  LOW I  
>>CREATE PATCH  
  PATCH NAME 'SAIDA'  
  BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
  PATCH TYPE 'OUTLET'  
  HIGH I  
>>CREATE PATCH  
  PATCH NAME 'PIPE AXIS'  
  BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
  PATCH TYPE 'SYMMETRY PLANE'  
  LOW J  
>>CREATE PATCH  
  PATCH NAME 'WALL1'  
  BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
  PATCH TYPE 'WALL'
```

HIGH J

>>MODEL DATA

>>AMBIENT VARIABLES

PHASE NAME 'GAS'

U VELOCITY 0.0000E+00

V VELOCITY 0.0000E+00

PRESSURE 0.0000E+00

VOLUME FRACTION 9.9900E-01

TGRAN 1.0000E-09

>>AMBIENT VARIABLES

PHASE NAME 'SOLIDO'

U VELOCITY 0.0000E+00

V VELOCITY 0.0000E+00

PRESSURE 0.0000E+00

VOLUME FRACTION 1.0000E-03

TGRAN 1.0000E-09

>>DIFFERENCING SCHEME

ALL EQUATIONS 'CCCT'

>>SET INITIAL GUESS

>>INPUT FROM FILE

READ DUMP FILE

UNFORMATTED

>>RHIE CHOW SWITCH

STANDARD

LINEAR EXTRAPOLATION

MULTIPHASE DAMPING

STANDARD RESISTANCE TREATMENT

RECTANGULAR VELOCITY CORRECTIONS

HARMONIC AVERAGING OF COEFFICIENTS

>>TITLE

PROBLEM TITLE 'TESE DE JAILSON CASO 1'

>>WALL TREATMENTS

PHASE NAME 'GAS'

NO SLIP

>>WALL TREATMENTS

PHASE NAME 'SOLIDO'
WALL PROFILE 'LINEAR'
NO SLIP

>>PHYSICAL PROPERTIES

>>BUOYANCY PARAMETERS

PHASE NAME 'GAS'
GRAVITY VECTOR -9.800000E+00 0.000000E+00 0.000000E+00
BUOYANCY REFERENCE DENSITY 1.2900E+00

>>BUOYANCY PARAMETERS

PHASE NAME 'SOLIDO'
GRAVITY VECTOR -9.800000E+00 0.000000E+00 0.000000E+00
BUOYANCY REFERENCE DENSITY 1.2900E+00

>>FLUID PARAMETERS

PHASE NAME 'GAS'
VISCOSITY 1.8500E-05
DENSITY 1.1600E+00

>>FLUID PARAMETERS

PHASE NAME 'SOLIDO'
VISCOSITY 1.0000E-09
DENSITY 1.0200E+03

>>MULTIPHASE PARAMETERS

>>PHASE DESCRIPTION

PHASE NAME 'GAS'
GAS
CONTINUOUS

>>PHASE DESCRIPTION

PHASE NAME 'SOLIDO'
SOLID
DISPERSE
MEAN DIAMETER 2.0000E-04
MODIFY EMPTY CELL VELOCITY 1.0000E-08

>>MULTIPHASE MODELS

>>MOMENTUM

INTER PHASE TRANSFER
SINCE

```
>>TURBULENCE
>>INTER PHASE TRANSFER MODELS
>>MOMENTUM
  FIRST PHASE NAME 'GAS'
  SECOND PHASE NAME 'SOLIDO'
>>PARTICLE MODEL
  STANDARD DRAG CURVE
  DRAG COEFFICIENT 4.4000E-01
>>PARTICLE DRAG MODEL
  FLOW REGIME 'AUTOMATIC'
  VISCOUS REGIME CORRELATION 'SCHILLER-NAUMANN'
  STOKES COEFFICIENT 2.4000E+01
  DENSE PARTICLE EFFECTS 'GIDASPOW'
  VOLUME FRACTION CORRECTION EXPONENT -1.6500E+00
  DILUTE TO DENSE TRANSITION 2.0000E-01
>>SCALAR PARAMETERS
>>DIFFUSIVITIES
  PHASE NAME 'GAS'
  TGRAN 1.0000E-01
>>DIFFUSIVITIES
  PHASE NAME 'SOLIDO'
  TGRAN 1.0000E-01
>>TURBULENCE PARAMETERS
>>TURBULENCE MODEL
  PHASE NAME 'GAS'
  TURBULENCE MODEL 'K-EPSILON'
>>TURBULENCE MODEL
  PHASE NAME 'SOLIDO'
  TURBULENCE MODEL 'LAMINAR'
>>SOLVER DATA
>>PROGRAM CONTROL
  MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS 50000
  MASS SOURCE TOLERANCE 1.0000E-19
  ITERATIONS OF TURBULENCE EQUATIONS 1
  ITERATIONS OF VELOCITY AND PRESSURE EQUATIONS 1
```


ITERATIONS OF TEMPERATURE AND SCALAR EQUATIONS 1

ITERATIONS OF HYDRODYNAMIC EQUATIONS 1

SOLVER DEBUG PRINT STREAM 20

>>DEFERRED CORRECTION

K START 1

K END 40

EPSILON START 1

EPSILON END 40

>>EQUATION SOLVERS

U VELOCITY 'STONE'

V VELOCITY 'STONE'

PRESSURE 'ICCG'

VOLUME FRACTION 'STONE'

K 'LINE SOLVER'

EPSILON 'LINE SOLVER'

TGRAN 'LINE SOLVER'

USRDCC PS 'LINE SOLVER'

>>FALSE TIMESTEPS

ALL PHASES

ALL EQUATIONS 1.0000E-09

>>PRESSURE CORRECTION

SIMPLEC

>>UNDER RELAXATION FACTORS

ALL EQUATIONS 1.50000E-01

>>CREATE GRID

>>SIMPLE GRID

BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'

DX 40* 1.277500E-01

DY 26* 6.153800E-04

DZ 1* 6.283185E+00

X START 0.0000E+00

Y START 0.0000E+00

Z START 0.0000E+00

>>MODEL BOUNDARY CONDITIONS

>>INLET BOUNDARIES

PHASE NAME 'GAS'
PATCH NAME 'ENTRANCE'
NORMAL VELOCITY 1.5600E+01
VOLUME FRACTION 9.9870E-01
K 1.2168E+00
EPSILON 2.5167E+02
TGRAN 1.1000E-04

>>INLET BOUNDARIES

PHASE NAME 'SOLIDO'
PATCH NAME 'ENTRANCE'
NORMAL VELOCITY 1.3900E+01
VOLUME FRACTION 1.3000E-03
TGRAN 6.4400E+01

>>OUTPUT OPTIONS

>>PRINT OPTIONS

>>WHAT

ALL PHASES

ALL VARIABLES

>>WHERE

ALL BLOCKS

>>WHEN

FINAL SOLUTION

>>DUMP FILE FORMAT

UNFORMATTED

SINGLE PRECISION

>>STOP

B.2 Caso 2

Arquivo de Comandos para o caso 2.

>>CFX4

>>OPTIONS

TWO DIMENSIONS

BODY FITTED GRID

CYLINDRICAL COORDINATES

AXIS INCLUDED

TURBULENT FLOW

ISOTHERMAL FLOW

INCOMPRESSIBLE FLOW

BUOYANT FLOW

STEADY STATE

USER SCALAR EQUATIONS 4

NUMBER OF PHASES 2

>>USER FORTRAN

USRBCS

USRDIF

USRPRF

USRSRC

USRVIS

>>VARIABLE NAMES

U VELOCITY 'U VELOCITY'

V VELOCITY 'V VELOCITY'

W VELOCITY 'W VELOCITY'

PRESSURE 'PRESSURE'

VOLUME FRACTION 'VOLUME FRACTION'

DENSITY 'DENSITY'

VISCOSITY 'VISCOSITY'

K 'K'

EPSILON 'EPSILON'

USER SCALAR1 'TGRAN'

USER SCALAR2 'USRDCC PS'

USER SCALAR3 'USRDCC DPART'

```
USER SCALAR4 'USRDCC FVMAX'  
>>PHASE NAMES  
  PHASE1 'GAS'  
  PHASE2 'SOLIDO'  
>>MODEL TOPOLOGY  
  >>CREATE BLOCK  
    BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
    BLOCK DIMENSIONS 40 26 1  
  >>CREATE PATCH  
    PATCH NAME 'ENTRANCE'  
    BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
    PATCH TYPE 'INLET'  
    LOW I  
  >>CREATE PATCH  
    PATCH NAME 'SAIDA'  
    BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
    PATCH TYPE 'OUTLET'  
    HIGH I  
  >>CREATE PATCH  
    PATCH NAME 'PIPE AXIS'  
    BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
    PATCH TYPE 'SYMMETRY PLANE'  
    LOW J  
  >>CREATE PATCH  
    PATCH NAME 'WALL1'  
    BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
    PATCH TYPE 'WALL'  
    HIGH J  
>>MODEL DATA  
  >>AMBIENT VARIABLES  
    PHASE NAME 'GAS'  
    U VELOCITY 0.0000E+00  
    V VELOCITY 0.0000E+00  
    PRESSURE 0.0000E+00  
    VOLUME FRACTION 9.9900E-01
```

```
TGRAN 1.0000E-09
>>AMBIENT VARIABLES
  PHASE NAME 'SOLIDO'
  U VELOCITY 0.0000E+00
  V VELOCITY 0.0000E+00
  PRESSURE 0.0000E+00
  VOLUME FRACTION 1.0000E-03
  TGRAN 1.0000E-09
>>DIFFERENCING SCHEME
  ALL EQUATIONS 'CCCT'
>>SET INITIAL GUESS
  >>INPUT FROM FILE
    READ DUMP FILE
    UNFORMATTED
>>RHIE CHOW SWITCH
  STANDARD
  LINEAR EXTRAPOLATION
  MULTIPHASE DAMPING
  STANDARD RESISTANCE TREATMENT
  RECTANGULAR VELOCITY CORRECTIONS
  HARMONIC AVERAGING OF COEFFICIENTS
>>TITLE
  PROBLEM TITLE 'TESE DE JAILSON CASO 2'
>>WALL TREATMENTS
  PHASE NAME 'GAS'
  NO SLIP
>>WALL TREATMENTS
  PHASE NAME 'SOLIDO'
  WALL PROFILE 'LINEAR'
  NO SLIP
>>PHYSICAL PROPERTIES
  >>BUOYANCY PARAMETERS
    PHASE NAME 'GAS'
    GRAVITY VECTOR -9.800000E+00 0.000000E+00 0.000000E+00
    BUOYANCY REFERENCE DENSITY 1.2900E+00
```

>>BUOYANCY PARAMETERS

PHASE NAME 'SOLIDO'

GRAVITY VECTOR -9.800000E+00 0.000000E+00 0.000000E+00

BUOYANCY REFERENCE DENSITY 1.2900E+00

>>FLUID PARAMETERS

PHASE NAME 'GAS'

VISCOSITY 4.0000E-05

DENSITY 1.2200E+00

>>FLUID PARAMETERS

PHASE NAME 'SOLIDO'

VISCOSITY 1.0000E-09

DENSITY 1.7140E+03

>>MULTIPHASE PARAMETERS

>>PHASE DESCRIPTION

PHASE NAME 'GAS'

GAS

CONTINUOUS

>>PHASE DESCRIPTION

PHASE NAME 'SOLIDO'

SOLID

DISPERSE

MEAN DIAMETER 7.6000E-05

MODIFY EMPTY CELL VELOCITY 1.0000E-08

>>MULTIPHASE MODELS

>>MOMENTUM

INTER PHASE TRANSFER

SINCE

>>TURBULENCE

>>INTER PHASE TRANSFER MODELS

>>MOMENTUM

FIRST PHASE NAME 'GAS'

SECOND PHASE NAME 'SOLIDO'

>>PARTICLE MODEL

STANDARD DRAG CURVE

DRAG COEFFICIENT 4.4000E-01

>>PARTICLE DRAG MODEL

FLOW REGIME 'AUTOMATIC'

VISCIOUS REGIME CORRELATION 'SCHILLER-NAUMANN'

STOKES COEFFICIENT 2.4000E+01

DENSE PARTICLE EFFECTS 'GIDASPOW'

VOLUME FRACTION CORRECTION EXPONENT -1.6500E+00

DILUTE TO DENSE TRANSITION 2.0000E-01

>>SCALAR PARAMETERS

>>DIFFUSIVITIES

PHASE NAME 'GAS'

TGRAN 1.0000E-01

>>DIFFUSIVITIES

PHASE NAME 'SOLIDO'

TGRAN 1.0000E-01

>>TURBULENCE PARAMETERS

>>TURBULENCE MODEL

PHASE NAME 'GAS'

TURBULENCE MODEL 'K-EPSILON'

>>TURBULENCE MODEL

PHASE NAME 'SOLIDO'

TURBULENCE MODEL 'LAMINAR'

>>SOLVER DATA

>>PROGRAM CONTROL

MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS 50000

MASS SOURCE TOLERANCE 1.0000E-19

ITERATIONS OF TURBULENCE EQUATIONS 1

ITERATIONS OF VELOCITY AND PRESSURE EQUATIONS 1

ITERATIONS OF TEMPERATURE AND SCALAR EQUATIONS 1

ITERATIONS OF HYDRODYNAMIC EQUATIONS 1

SOLVER DEBUG PRINT STREAM 20

>>DEFERRED CORRECTION

K START 1

K END 40

EPSILON START 1

EPSILON END 40

```
>>EQUATION SOLVERS
  ALL PHASES
  U VELOCITY 'LINE SOLVER'
  V VELOCITY 'LINE SOLVER'
  PRESSURE 'STONE'
  VOLUME FRACTION 'LINE SOLVER'
  K 'LINE SOLVER'
  EPSILON 'LINE SOLVER'
  TGRAN 'LINE SOLVER'
  USRDCC PS 'LINE SOLVER'
>>FALSE TIMESTEPS
  ALL PHASES
  ALL EQUATIONS 1.0000E-08
>>PRESSURE CORRECTION
  SIMPLEC
>>UNDER RELAXATION FACTORS
  ALL EQUATIONS 3.0000E-01
>>CREATE GRID
>>SIMPLE GRID
  BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'
  DX 40* 2.500000E-01
  DY 26* 5.846153E-03
  DZ 1* 6.283185E+00
  X START 0.0000E+00
  Y START 0.0000E+00
  Z START 0.0000E+00
>>MODEL BOUNDARY CONDITIONS
>>INLET BOUNDARIES
  PHASE NAME 'GAS'
  PATCH NAME 'ENTRANCE'
  NORMAL VELOCITY 3.7800E+00
  VOLUME FRACTION 9.7820E-01
  K 7.1442E-02
  EPSILON 3.7688E-01
  TGRAN 1.1000E-04
```



```
>>INLET BOUNDARIES
  PHASE NAME 'SOLID0'
  PATCH NAME 'ENTRANCE'
  NORMAL VELOCITY 2.6200E+00
  VOLUME FRACTION 2.1800E-02
  TGRAN 2.2881E+00
>>OUTPUT OPTIONS
>>PRINT OPTIONS
  >>WHAT
    ALL PHASES
    ALL VARIABLES
  >>WHERE
    ALL BLOCKS
  >>WHEN
    FINAL SOLUTION
>>DUMP FILE FORMAT
  UNFORMATTED
  SINGLE PRECISION
>>STOP
```

B.3 Caso 3

Arquivo de comandos para o caso 3.

```
>>CFX4
  >>OPTIONS
    TWO DIMENSIONS
    BODY FITTED GRID
    CYLINDRICAL COORDINATES
    AXIS INCLUDED
    TURBULENT FLOW
    ISOTHERMAL FLOW
    INCOMPRESSIBLE FLOW
    BUOYANT FLOW
    STEADY STATE
    USER SCALAR EQUATIONS 2
    NUMBER OF PHASES 2
  >>USER FORTRAN
    USRBCS
    USRDIF
    USRPRT
    USRSRC
    USRVIS
  >>VARIABLE NAMES
    U VELOCITY 'U VELOCITY'
    V VELOCITY 'V VELOCITY'
    W VELOCITY 'W VELOCITY'
    PRESSURE 'PRESSURE'
    VOLUME FRACTION 'VOLUME FRACTION'
    DENSITY 'DENSITY'
    VISCOSITY 'VISCOSITY'
    K 'K'
    EPSILON 'EPSILON'
    USER SCALAR1 'TGRAN'
    USER SCALAR2 'USRDCC PS'
  >>PHASE NAMES
```

```
PHASE1 'GAS'  
PHASE2 'SOLIDO'  
>>MODEL TOPOLOGY  
>>CREATE BLOCK  
BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
BLOCK DIMENSIONS 40 26 1  
>>CREATE PATCH  
PATCH NAME 'ENTRANCE'  
BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
PATCH TYPE 'INLET'  
LOW I  
>>CREATE PATCH  
PATCH NAME 'SAIDA'  
BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
PATCH TYPE 'OUTLET'  
HIGH I  
>>CREATE PATCH  
PATCH NAME 'PIPE AXIS'  
BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
PATCH TYPE 'SYMMETRY PLANE'  
LOW J  
>>CREATE PATCH  
PATCH NAME 'WALL1'  
BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'  
PATCH TYPE 'WALL'  
HIGH J  
>>MODEL DATA  
>>AMBIENT VARIABLES  
PHASE NAME 'GAS'  
U VELOCITY 0.0000E+00  
V VELOCITY 0.0000E+00  
PRESSURE 0.0000E+00  
VOLUME FRACTION 9.9900E-01  
TGRAN 1.0000E-09  
>>AMBIENT VARIABLES
```

```
PHASE NAME 'SOLIDO'  
U VELOCITY 0.0000E+00  
V VELOCITY 0.0000E+00  
PRESSURE 0.0000E+00  
VOLUME FRACTION 1.0000E-03  
TGRAN 1.0000E-09  
>>DIFFERENCING SCHEME  
  ALL EQUATIONS 'CCCT'  
>>SET INITIAL GUESS  
  >>SET CONSTANT GUESS  
    PHASE NAME 'GAS'  
    U VELOCITY 4.979  
    V VELOCITY 0.0000E+00  
    VOLUME FRACTION 0.9754  
    K 0.1239522  
    EPSILON 3.4361939  
    TGRAN 1.0000E-04  
    USRDCC PS 1.0000E-02  
  >>SET CONSTANT GUESS  
    PHASE NAME 'SOLIDO'  
    U VELOCITY 0.386  
    V VELOCITY 0.0000E+00  
    VOLUME FRACTION 0.0246  
    TGRAN 0.04966533  
    USRDCC PS 1.0000E-02  
>>RHIE CHOW SWITCH  
  STANDARD  
  LINEAR EXTRAPOLATION  
  MULTIPHASE DAMPING  
  STANDARD RESISTANCE TREATMENT  
  RECTANGULAR VELOCITY CORRECTIONS  
  HARMONIC AVERAGING OF COEFFICIENTS  
>>TITLE  
  PROBLEM TITLE 'TESE DE JAILSON CASO 3'  
>>WALL TREATMENTS
```

```
PHASE NAME 'GAS'  
NO SLIP  
>>WALL TREATMENTS  
  PHASE NAME 'SOLIDO'  
  WALL PROFILE 'LINEAR'  
  NO SLIP  
>>PHYSICAL PROPERTIES  
  >>BUOYANCY PARAMETERS  
    PHASE NAME 'GAS'  
    GRAVITY VECTOR -9.800000E+00 0.000000E+00 0.000000E+00  
    BUOYANCY REFERENCE DENSITY 1.2900E+00  
  >>BUOYANCY PARAMETERS  
    PHASE NAME 'SOLIDO'  
    GRAVITY VECTOR -9.800000E+00 0.000000E+00 0.000000E+00  
    BUOYANCY REFERENCE DENSITY 1.2900E+00  
  >>FLUID PARAMETERS  
    PHASE NAME 'GAS'  
    VISCOSITY 1.8500E-05  
    DENSITY 1.1600E+00  
  >>FLUID PARAMETERS  
    PHASE NAME 'SOLIDO'  
    VISCOSITY 1.0000E-09  
    DENSITY 2620  
  >>MULTIPHASE PARAMETERS  
    >>PHASE DESCRIPTION  
      PHASE NAME 'GAS'  
      GAS  
      CONTINUOUS  
    >>PHASE DESCRIPTION  
      PHASE NAME 'SOLIDO'  
      SOLID  
      DISPERSE  
      MEAN DIAMETER 520.0000E-06  
      MODIFY EMPTY CELL VELOCITY 1.0000E-08  
  >>MULTIPHASE MODELS
```

```
>>MOMENTUM
  INTER PHASE TRANSFER
  SINCE
  >>TURBULENCE
>>INTER PHASE TRANSFER MODELS
  >>MOMENTUM
    FIRST PHASE NAME 'GAS'
    SECOND PHASE NAME 'SOLIDO'
  >>PARTICLE MODEL
    STANDARD DRAG CURVE
    DRAG COEFFICIENT 4.4000E-01
  >>PARTICLE DRAG MODEL
    FLOW REGIME 'AUTOMATIC'
    VISCOUS REGIME CORRELATION 'SCHILLER-NAUMANN'
    STOKES COEFFICIENT 2.4000E+01
    DENSE PARTICLE EFFECTS 'GIDASPOW'
    VOLUME FRACTION CORRECTION EXPONENT -1.6500E+00
    DILUTE TO DENSE TRANSITION 2.0000E-01
>>SCALAR PARAMETERS
  >>DIFFUSIVITIES
    PHASE NAME 'GAS'
    TGRAN 1.0000E-01
  >>DIFFUSIVITIES
    PHASE NAME 'SOLIDO'
    TGRAN 1.0000E-01
>>TURBULENCE PARAMETERS
  >>TURBULENCE MODEL
    PHASE NAME 'GAS'
    TURBULENCE MODEL 'K-EPSILON'
  >>TURBULENCE MODEL
    PHASE NAME 'SOLIDO'
    TURBULENCE MODEL 'LAMINAR'
>>SOLVER DATA
  >>PROGRAM CONTROL
    MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS 50000
```

```
MASS SOURCE TOLERANCE 1.0000E-19
ITERATIONS OF TURBULENCE EQUATIONS 1
ITERATIONS OF VELOCITY AND PRESSURE EQUATIONS 1
ITERATIONS OF TEMPERATURE AND SCALAR EQUATIONS 1
ITERATIONS OF HYDRODYNAMIC EQUATIONS 1
SOLVER DEBUG PRINT STREAM 20
>>DEFERRED CORRECTION
  K START 1
  K END 40
  EPSILON START 1
  EPSILON END 40
>>EQUATION SOLVERS
  U VELOCITY 'STONE'
  V VELOCITY 'STONE'
  PRESSURE 'ICCG'
  VOLUME FRACTION 'STONE'
  K 'LINE SOLVER'
  EPSILON 'LINE SOLVER'
  TGRAN 'LINE SOLVER'
  USRDCC PS 'LINE SOLVER'
>>FALSE TIMESTEPS
  ALL PHASES
  ALL EQUATIONS 1.0000E-09
>>PRESSURE CORRECTION
  SIMPLEC
>>UNDER RELAXATION FACTORS
  ALL EQUATIONS 3.0000E-01
>>CREATE GRID
  >>SIMPLE GRID
    BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'
    DX 40* 0.1375
    DY 26* 1.4653846E-03
    DZ 1* 6.283185E+00
    X START 0.0000E+00
    Y START 0.0000E+00
```

Z START 0.0000E+00

>>MODEL BOUNDARY CONDITIONS

>>INLET BOUNDARIES

PHASE NAME 'GAS'

PATCH NAME 'ENTRANCE'

NORMAL VELOCITY 4.979

VOLUME FRACTION 0.9754

K 0.1239522

EPSILON 3.4361939

TGRAN 1.1000E-04

>>INLET BOUNDARIES

PHASE NAME 'SOLIDO'

PATCH NAME 'ENTRANCE'

NORMAL VELOCITY 0.386

VOLUME FRACTION 0.0246

TGRAN 0.04966533

>>OUTPUT OPTIONS

>>DUMP FILE FORMAT

UNFORMATTED

SINGLE PRECISION

>>STOP

APÊNDICE C – Subrotinas utilizadas pelo CFX

C.1 USRVIS - Subrotina para o Cálculo da Viscosidade

```
SUBROUTINE USRVIS(VISN,U,V,W,P,VFRAC,DEN,VIS,TE,ED,RS,T,H,RF,SCAL,
```

```
+          XP,YP,ZP,VOL,AREA,VPOR,ARPOR,WFACT,DIFLAM,
```

```
+          URFVAR,IPT,IBLK,IPVERT,IPNODN,IPFACN,IPNODEF,
```

```
+          IPNODEB,IPFACB,WORK,IWORK,CWORK)
```

C

C SUBROUTINE ARGUMENTS

C

```
C * VISN  - NEW VALUE OF VISCOSITY
C   U     - U COMPONENT OF VELOCITY
C   V     - V COMPONENT OF VELOCITY
C   W     - W COMPONENT OF VELOCITY
C   P     - PRESSURE
C   VFRAC - VOLUME FRACTION
C   DEN   - DENSITY OF FLUID
C   VIS   - OLD VALUE OF VISCOSITY
C   TE    - TURBULENT KINETIC ENERGY
C   ED    - EPSILON
```

C RS - REYNOLD STRESSES
C T - TEMPERATURE
C H - ENTHALPY
C RF - REYNOLD FLUXES
C SCAL - SCALARS (THE FIRST 'NCONC' OF THESE ARE MASS FRACTIONS)
C XP - X COORDINATES OF CELL CENTRES
C YP - Y COORDINATES OF CELL CENTRES
C ZP - Z COORDINATES OF CELL CENTRES
C VOL - VOLUME OF CELLS
C AREA - AREA OF CELLS
C VPOR - POROUS VOLUME
C ARPOR - POROUS AREA
C DIFLAM - LAMINAR DIFFUSIVITY
C URFVAR - UNDER RELAXATION FACTORS
C IPT - 1D POINTER ARRAY
C IBLK - BLOCK SIZE INFORMATION
C IPVERT - POINTER FROM CELL CENTERS TO 8 NEIGHBOURING VERTICES
C IPNODN - POINTER FROM CELL CENTERS TO 6 NEIGHBOURING CELLS
C IPFACN - POINTER FROM CELL CENTERS TO 6 NEIGHBOURING FACES
C IPNODF - POINTER FROM CELL FACES TO 2 NEIGHBOURING CELL CENTERS
C IPNODB - POINTER FROM BOUNDARY CENTERS TO CELL CENTERS
C IPFACB - POINTER FROM BOUNDARY CENTERS TO BOUNDARY FACES
C
C WORK - REAL WORKSPACE ARRAY
C IWORK - INTEGER WORKSPACE ARRAY
C CWORK - CHARACTER WORKSPACE ARRAY
C
C SUBROUTINE ARGUMENTS PRECEDED WITH A '*' ARE ARGUMENTS THAT MUST

C BE SET BY THE USER IN THIS ROUTINE.

C

DOUBLE PRECISION VISN,U,V,W,P,VFRAC,DEN,VIS,TE,ED,RS,T,H,RF,SCAL

DOUBLE PRECISION XP,YP,ZP,VOL,AREA,VPOR,ARPOR,WFACT,DIFLAM,URFVAR

DOUBLE PRECISION WORK,SMALL,SORMAX,TIME,DT,DTINVF,TPARM

LOGICAL LDEN,LVIS,LTURB,LTEMP,LBUOY,LSCAL,LCOMP,LRECT,LCYN,LAXIS,

+ LPOROS,LTRANS

C

CHARACTER*(*) CWORK

C

C+++++++ USER AREA 1 ++++++

C---- AREA FOR USERS EXPLICITLY DECLARED VARIABLES

C Variaveis criadas por Sebastiao

DOUBLE PRECISION g0,FVMax,VSDil,DPart,Pi,CRest,TGRANaux

INTEGER NoI,IFase,INTGra

C Fim da lista de variáveis criadas por Sebastiao

C+++++++ END OF USER AREA 1 ++++++

C

```
COMMON /ALL/NBLOCK, NCELL, NBDRY, NNODE, NFACE, NVERT, NDIM,  
  
+ /ALLWRK/NRWS, NIWS, NCWS, IWRFRE, IWIFRE, IWCFRE, /ADDIMS/NPHASE,  
  
+ NSCAL, NVAR, NPROP, NDVAR, NDPROP, NDXNN, NDGEOM, NDCOEF, NILIST,  
  
+ NRLIST, NTOPOL, /CHKUSR/IVERS, IUCALL, IUSED, /DEVICE/NREAD,  
  
+ NWRITE, NRDISK, NWDISK, /IDUM/ILEN, JLEN, /LOGIC/LDEN, LVIS,  
  
+ LTURB, LTEMP, LBUOY, LSCAL, LCOMP, LRECT, LCYN, LAXIS, LPOROS,  
  
+ LTRANS, /MLTGRD/MLEVEL, NLEVEL, ILEVEL, /SGLDBL/IFLGPR, ICHKPR,  
  
+ /SPARM/SMALL, SORMAX, NITER, INDPRI, MAXIT, NODREF, NODMON,  
  
+ /TRANSI/NSTEP, KSTEP, MF, INCORE, /TRANSR/TIME, DT, DTINVF, TPARM
```

C

C+++++ USER AREA 2 ++++++

C---- AREA FOR USERS TO DECLARE THEIR OWN COMMON BLOCKS

C THESE SHOULD START WITH THE CHARACTERS 'UC' TO ENSURE

C NO CONFLICT WITH NON-USER COMMON BLOCKS

C

C+++++ END OF USER AREA 2 ++++++

C

```
DIMENSION DIFLAM(NVAR,NPHASE),URFVAR(NVAR,NPHASE)
```

C

```
DIMENSION VISM(NNODE,NPHASE),U(NNODE,NPHASE),V(NNODE,NPHASE),
+
W(NNODE,NPHASE),P(NNODE,NPHASE),VFRAC(NNODE,NPHASE),
+
DEN(NNODE,NPHASE),VIS(NNODE,NPHASE),TE(NNODE,NPHASE),
+
ED(NNODE,NPHASE),RS(NNODE,NPHASE,6),T(NNODE,NPHASE),
+
H(NNODE,NPHASE),RF(NNODE,NPHASE,4),
+
SCAL(NNODE,NPHASE,NSCAL)
```

C

```
DIMENSION XP(NNODE),YP(NNODE),ZP(NNODE),VOL(NCELL),AREA(NFACE,3),
+
VPOR(NCELL),ARPOR(NFACE,3),WFACT(NFACE),IPT(*),
+
IBLK(5,NBLOCK),IPVERT(NCELL,8),IPNODN(NCELL,6),
+
IPFACN(NCELL,6),IPNODF(NFACE,4),IPNODB(NBDRY,4),
+
IPFACB(NBDRY),IWORK(*),WORK(*),CWORK(*)
```

C

```
C+++++++ USER AREA 3 ++++++
```

```
C---- AREA FOR USERS TO DIMENSION THEIR ARRAYS
```

```
C---- AREA FOR USERS TO DEFINE DATA STATEMENTS
```

```
C+++++++ END OF USER AREA 3 ++++++
```

C---- STATEMENT FUNCTION FOR ADDRESSING

IP(I,J,K) = IPT((K-1)*ILEN*JLEN+ (J-1)*ILEN+I)

C----VERSION NUMBER OF USER ROUTINE AND PRECISION FLAG

IVERS = 4

ICLKPR = 2

C

C+++++ USER AREA 4 ++++++

C---- TO USE THIS USER ROUTINE FIRST SET IUSED=1

IUSED = 1

C

C+++++ END OF USER AREA 4 ++++++

C

IF (IUSED.EQ.0) RETURN

C

C---- FRONTEND CHECKING OF USER ROUTINE

c

IF (IUCALL.EQ.0) RETURN

C

C+++++ USER AREA 5 ++++++

C

FVMax = 0.5d0

c Dpart = diametro da particula

DPart = 200.0E-6

C IFase diz qual a fase (1 - gas; 2 - solido)

IFase = 2

Pi = 3.14159265359D0

CRest = 1.000

C Fim da seção de inicialização Codigos de Sebastião

C Pega o Numero do elemento (Escalar TGRAN) do vetor SCAL

CALL GETSCA('TGRAN',INTGra,CWORK)

C Usa IPALL para buscar o endereço 1D de Todos os Centros das Volumes

CALL IPALL('*','*', 'BLOCK', 'CENTRES', IPT, NPT, CWORK, IWORK)

C Laço para o R ALL INTERIOR CELLS

DO 110 I=1,NCELL

NoI=I

c NoI=IPT(I)

TGRANaux = SCAL(NoI,IFase,INTGra)

C FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO RADIAL g0 - TESE DE JAILSON PAGINA 44

g0 = 3.000/5.000*(1.000-(VFRAC(NoI,IFase)/FVMax)**(1.000

+/3.000))**(-1.000)

C VISCOSIDADE DILUIDA DO SOLIDO Misdil - TESE DE JAILSON PAGINA 44

VSDil = 5.000/96.000*DEN(I,2)*DPart*DSQRT(Pi*TGRANaux)

C VISCOSIDADE EFETIVA DA FASE PARTIACULADA - TESE DE JAILSON PAGINA 44

```

VISN(NoI,IFase) = 2.0D0*VSDi1/((1.0D0+CRest)*g0)*
  *(1.0D0+4.0D0/5.0D0*(1.0D0+CRest)*g0*VFRAC(NoI,IFase))**2.0D0+
  +4.0D0/5.0D0*VFRAC(NoI,IFase)**2.0d+0*DEN(NoI,2)*DPart*g0*
  *(1.0D0+CRest)*DSQRT(TGRANaux/Pi)

```

C correção: dividindo pela fração volumétrica por que na eq. do momentum esta multiplic

```

VISN(NoI,IFase)=VISN(NoI,IFase)/VFRAC(NoI,IFase)

```

c

110 Continue

RETURN

END

C.2 USRDIF - Subrotina para o Cálculo do Coeficiente de Difusão

C*****

```

SUBROUTINE USRDIF(IEQN,CNAME,CALIAS,CTROP,GAMMA,DIFLAM,PRT,U,V,W,
+
+          P,VFRAC,DEN,VIS,TE,ED,RS,T,H,RF,SCAL,XP,YP,ZP,
+
+          VOL,AREA,VPOR,ARPOR,WFACT,IPT,IBLK,IPVERT,
+
+          IPNODN,IPFACN,IPNODF,IPNODB,IPFACB,WORK,IWORK,
+
+          CWORK)

```

C

C SUBROUTINE ARGUMENTS

C IEQN - EQUATION NUMBER
C CNAME - EQUATION NAME
C CALIAS - ALIAS OF EQUATION NAME
C CTROP - ISOTROPIC/ANISORTROPIC FLAG
C * GAMMA - EFFECTIVE DIFFUSIVITY TO BE SET
C DIFLAM - CONSTANT LAMINAR DIFFUSIVITY
C PRT - PRANDTL NUMBER
C U - U COMPONENT OF VELOCITY
C V - V COMPONENT OF VELOCITY
C W - W COMPONENT OF VELOCITY
C P - PRESSURE
C VFRAC - VOLUME FRACTION
C DEN - DENSITY OF FLUID
C VIS - VISCOSITY OF FLUID
C TE - TURBULENT KINETIC ENERGY
C ED - EPSILON
C RS - REYNOLD STRESSES
C T - TEMPERATURE
C H - ENTHALPY
C RF - REYNOLD FLUXES
C SCAL - SCALARS (THE FIRST 'NCONC' OF THESE ARE MASS FRACTIONS)
C XP - X COORDINATES OF CELL CENTRES
C YP - Y COORDINATES OF CELL CENTRES
C ZP - Z COORDINATES OF CELL CENTRES
C VOL - VOLUME OF CELLS
C AREA - AREA OF CELLS
C VPOR - POROUS VOLUME
C ARPOR - POROUS AREA
C WFACT - WEIGHT FACTORS

C IPT - 1D POINTER ARRAY
C IBLK - BLOCK SIZE INFORMATION
C IPVERT - POINTER FROM CELL CENTERS TO 8 NEIGHBOURING VERTICES

```

C   IPNODN - POINTER FROM CELL CENTERS TO 6 NEIGHBOURING CELLS
C   IPFACN - POINTER FROM CELL CENTERS TO 6 NEIGHBOURING FACES
C   IPNODF - POINTER FROM CELL FACES TO 2 NEIGHBOURING CELL CENTERS
C   IPNODB - POINTER FROM BOUNDARY CENTERS TO CELL CENTERS
C   IPFACB - POINTER FROM BOUNDARY CENTERS TO BOUNDARY FACES
CC  WORK   - REAL WORKSPACE ARRAY
C   IWORK  - INTEGER WORKSPACE ARRAY
C   CWORK  - CHARACTER WORKSPACE ARRAY
C
C   SUBROUTINE ARGUMENTS PRECEDED WITH A '*' ARE ARGUMENTS THAT MUST
C
C   BE SET BY THE USER IN THIS ROUTINE.
C
C   NOTE THAT OTHER DATA MAY BE OBTAINED FROM CFX-4 USING THE
C   ROUTINE GETADD, FOR FURTHER DETAILS SEE THE VERSION 4
C   USER MANUAL.
C*****
C
C   DOUBLE PRECISION GAMMA,DIFLAM,PRT,U,V,W,P,VFRAC,DEN,VIS,TE,ED,RS
C   DOUBLE PRECISION T,H,RF,SCAL,XP,YP,ZP,VOL,AREA,VPOR,ARPOR,WFACT
C   DOUBLE PRECISION WORK,SMALL,SORMAX,TIME,DT,DTINV,TPARM
C   LOGICAL LDEN,LVIS,LTURB,LTEMP,LBOUY,LSCAL,LCOMP,LRECT,LCYN,LAXIS,
C   +       LPORDS,LTRANS
C
C   CHARACTER*(*) CWORK
C   CHARACTER CNAME*6,CALIAS*24,CTROP*6
C
C***** USER AREA 1 *****
C
C   DOUBLE PRECISION TGranAux,GamaTDil,Pi,g0,CRest,FVMax
C   DOUBLE PRECISION DPart
C   INTEGER NoI,IFase,ITG,INTGra

```

C

C+++++ END OF USER AREA 1 ++++++

C

```
COMMON /ALL/NBLOCK,NCELL,NBDRY,NNODE,NFACE,NVERT,NDIM,  
  
+      /ADDIMS/NPHASE,NSCAL,NVAR,NPROP,NDVAR,NDPROP,NDXNN,NDGEOM,  
  
+      NDCOEF,NILIST,NRLIST,NTOPOL,/CHKUSR/IVERS,IUCALL,IUSED,  
  
+      /DEVICE/NREAD,NWRITE,NRDISK,NWDISK,/IDUM/ILEN,JLEN,  
  
+      /LOGIC/LDEN,LVIS,LTURB,LTEMP,LBUOY,LSCAL,LCOMP,LRECT,LCYN,  
  
+      LAXIS,LPOROS,LTRANS,/MLTGRD/MLEVEL,NLEVEL,ILEVEL,  
  
+      /SGLDBL/IFLGPR,ICHPR,/SPARM/SMALL,SORMAX,NITER,INDPRI,  
  
+      MAXIT,NODREF,NODMON,/TRANSI/NSTEP,KSTEP,MF,INCORE,  
  
+      /TRANSR/TIME,DT,DTINV,TPARM
```

C

C+++++ USER AREA 2 ++++++

C---- AREA FOR USERS TO DECLARE THEIR OWN COMMON BLOCKS

C THESE SHOULD START WITH THE CHARACTERS 'UC' TO ENSURE

C NO CONFLICT WITH NON-USER COMMON BLOCKS

C

C+++++ END OF USER AREA 2 ++++++

C

DIMENSION GAMMA(NCELL,NPHASE,*),DIFLAM(NVAR,NPHASE),

+ PRT(NVAR,NPHASE)

DIMENSION U(NNODE,NPHASE),V(NNODE,NPHASE),W(NNODE,NPHASE),

+ P(NNODE,NPHASE),VFRAC(NNODE,NPHASE),DEN(NNODE,NPHASE),

+ VIS(NNODE,NPHASE),TE(NNODE,NPHASE),ED(NNODE,NPHASE),

+ RS(NNODE,NPHASE,6),T(NNODE,NPHASE),H(NNODE,NPHASE),

+ RF(NNODE,NPHASE,4),SCAL(NNODE,NPHASE,NSCAL)

DIMENSION XP(NNODE),YP(NNODE),ZP(NNODE),VOL(NCELL),AREA(NFACE,3),

+ VPOR(NCELL),ARPOR(NFACE,3),WFACT(NFACE),IPT(*),

+ IBLK(5,NBLOCK),IPVERT(NCELL,8),IPNODN(NCELL,6),

+ IPFACN(NCELL,6),IPNODF(NFACE,4),IPNODB(NBDRY,4),

+ IPFACB(NBDRY),IWORK(*),WORK(*),CWORK(*)

C

C+++++ USER AREA 3 ++++++

C---- AREA FOR USERS TO DIMENSION THEIR ARRAYS

C---- AREA FOR USERS EXPLICITLY DECLARED VARIABLES

C---- AREA FOR USERS TO DEFINE DATA STATEMENTS

C+++++ END OF USER AREA 3 ++++++

C---- STATEMENT FUNCTION FOR ADDRESSING

IP(I,J,K) = IPT((K-1)*ILEN*JLEN+ (J-1)*ILEN+I)

C----VERSION NUMBER OF USER ROUTINE AND PRECISION FLAG

C

IVERS = 3

ICKPR = 2

C

C+++++ USER AREA 4 ++++++

C---- TO USE THIS USER ROUTINE FIRST SET IUSED=1

IUSED = 1

C

C+++++ END OF USER AREA 4 ++++++

C

IF (IUSED.EQ.0) RETURN

C

C---- FRONTEND CHECKING OF USER ROUTINE

IF (IUCALL.EQ.0) RETURN

IF (CTROP.EQ.'ISO ') THEN

C+++++ USER AREA 5 ++++++

C Inicio da Seção de Inicialização das variáveis

```
FVMax = 0.5d0
DPart = 200.0E-6
C IFase diz qual a fase (1 - gas; 2 - solido)
IFase = 2
Pi = 3.14159265359D0
CRest = 1.0D0

C CALL GETVAR('USRDIF','SCAL ',ISC)
C CALL GETSCA('TGRAN',IS, cwork)
C ITG = IS+ISC-1

CALL GETSCA('TGRAN',INTGra,CWORK)

CALL GETVAR('USRDIF','SCAL ',ITE)

ITG = INTGra+ITE-1

c IF (INTGra.EQ.IEQN) THEN
C CALL GETVAR('USRDIF','TGRAN ',ITGG)

IF(IEQN.EQ.ITG) THEN

C Pega o Numero do Primeiro Escalar TGRAN
C CALL GETSCA('TGRAN',ICS1,CWORK)

C Usa IPALL para buscar o endereço 1D de Todos os Centros das Volumes
C
C CALL IPALL('*','*','BLOCK','CENTRES',IPT,NPT,CWORK,IWORK)
C
C Laço para o R ALL INTERIOR CELLS

DO 110 NoI=1,NCELL
C NoI=IPT(I)
```

TGranAux = SCAL(NoI, IFase, INTGra)

C COEFICIENTE DE DIFUSÃO TURBULENTO DILUIDO - TESE DE JAILSON PAGINA 45

GamaTDil = 75.000/384.000*DEN(NoI,2)*DPart*DSQRT(Pi*TGranAux)

C FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO RADIAL g0 - TESE DE JAILSON PAGINA 44

g0 = 3.000/5.000*(1.000-(VFRAC(NoI, IFase)/FVMax)**(1.000
 +/3.000))**(-1.000)

C COEFICIENTE DE DIFUSÃO GAMMA - TESE DE JAILSON PAGINA 44

GAMMAAux = 2.000*GamaTDil/((1.000+CRest)*g0)*
 +(1.000+6.000/5.000*(1.000+CRest)*g0*VFRAC(NoI, IFase))**2.000+
 +2.000*VFRAC(NoI, IFase)**2.000*DEN(NoI,2)*DPart*g0*(1.000+CRest)*
 *DSQRT(TGranAux/Pi)

GAMMA(NoI, IFase, 1)=2.000*GAMMAAux/
 +(3.000*VFRAC(NoI,2))

GAMMA(NoI, IFase, 2)=GAMMA(NoI, IFase, 1)

GAMMA(NoI, IFase, 3)=GAMMA(NoI, IFase, 1)

GAMMA(NoI, IFase, 4)=GAMMA(NoI, IFase, 1)

GAMMA(NoI, IFase, 5)=GAMMA(NoI, IFase, 1)

GAMMA(NoI, IFase, 6)=GAMMA(NoI, IFase, 1)

110 Continue

END IF

END IF

RETURN

END

C *****

C.3 USRBCS - Subrotina para as Condições de Contorno

```

SUBROUTINE USRBCS(VARBCS, VARAMB, A, B, C, ACND, BCND, CCND, IWGVEL,
+               NDVWAL, FLOUT, NLABEL, NSTART, NEND, NCST, NCEN, U, V, W,
+               P, VFRAC, DEN, VIS, TE, ED, RS, T, H, RF, SCAL, XP, YP, ZP,
+               VOL, AREA, VPOR, ARPOR, WFACT, IPT, IBLK, IPVERT,
+               IPNODN, IPFACN, IPNODF, IPNODEB, IPFACB, WORK, IWORK,
+               CWORK)
C
C*****
C
C USER ROUTINE TO SET REALS AT BOUNDARIES.
C
C >>> IMPORTANT <<<
C >>> <<<
C >>> USERS MAY ONLY ADD OR ALTER PARTS OF THE SUBROUTINE WITHIN <<<
C >>> THE DESIGNATED USER AREAS <<<
C
C*****
C
C THIS SUBROUTINE IS CALLED BY THE FOLLOWING SUBROUTINE
C CUSR SRLIST
C
C SUBROUTINE ARGUMENTS
C
C VARBCS - REAL BOUNDARY CONDITIONS
C VARAMB - AMBIENT VALUE OF VARIABLES
C A - COEFFICIENT IN WALL BOUNDARY CONDITION
C B - COEFFICIENT IN WALL BOUNDARY CONDITION
C C - COEFFICIENT IN WALL BOUNDARY CONDITION
C ACND - COEFFICIENT IN CONDUCTING WALL BOUNDARY CONDITION
C BCND - COEFFICIENT IN CONDUCTING WALL BOUNDARY CONDITION

```


C CCND - COEFFICIENT IN CONDUCTING WALL BOUNDARY CONDITION
C IWGVEL - USAGE OF INPUT VELOCITIES (0 = AS IS,1 = ADD GRID MOTION)
C NDVWAL - FIRST DIMENSION OF ARRAY IWGVEL
C FLOUT - MASS FLOW/FRACTIONAL MASS FLOW
C NLABEL - NUMBER OF DISTINCT OUTLETS
C NSTART - ARRAY POINTER
C NEND - ARRAY POINTER
C NCST - ARRAY POINTER
C NCEN - ARRAY POINTER
C U - U COMPONENT OF VELOCITY
C V - V COMPONENT OF VELOCITY
C W - W COMPONENT OF VELOCITY
C P - PRESSURE
C VFRAC - VOLUME FRACTION
C DEN - DENSITY OF FLUID
C VIS - VISCOSITY OF FLUID
C TE - TURBULENT KINETIC ENERGY
C ED - EPSILON
C RS - REYNOLD STRESSES
C T - TEMPERATURE
C H - ENTHALPY
C RF - REYNOLD FLUXES
C SCAL - SCALARS (THE FIRST 'NCONC' OF THESE ARE MASS FRACTIONS)
C XP - X COORDINATES OF CELL CENTRES
C YP - Y COORDINATES OF CELL CENTRES
C ZP - Z COORDINATES OF CELL CENTRES
C VOL - VOLUME OF CELLS
C AREA - AREA OF CELLS
C VPOR - POROUS VOLUME
C ARPOR - POROUS AREA
C WFACT - WEIGHT FACTORS
C
C IPT - 1D POINTER ARRAY
C IBLK - BLOCK SIZE INFORMATION
C IPVERT - POINTER FROM CELL CENTERS TO 8 NEIGHBOURING VERTICES

```

C   IPNODN - POINTER FROM CELL CENTERS TO 6 NEIGHBOURING CELLS
C   IPFACN - POINTER FROM CELL CENTERS TO 6 NEIGHBOURING FACES
C   IPNODF - POINTER FROM CELL FACES TO 2 NEIGHBOURING CELL CENTERS
C   IPNOB - POINTER FROM BOUNDARY CENTERS TO CELL CENTERS
C   IPFACB - POINTER TO NODES FROM BOUNDARY FACES
C
C   WORK  - REAL WORKSPACE ARRAY
C   IWORK - INTEGER WORKSPACE ARRAY
C   CWORK - CHARACTER WORKSPACE ARRAY
C
C   SUBROUTINE ARGUMENTS PRECEDED WITH A '*' ARE ARGUMENTS THAT MUST
C   BE SET BY THE USER IN THIS ROUTINE.
C
C   NOTE THAT OTHER DATA MAY BE OBTAINED FROM CFX-4 USING THE
C   ROUTINE GETADD, FOR FURTHER DETAILS SEE THE VERSION 4
C   USER MANUAL.
C
C*****
C   DOUBLE PRECISION VARBCS,VARAMB,A,B,C,ACND,BCND,CCND,FLOUT,U,V,W,P
C   DOUBLE PRECISION VFRAC,DEN,VIS,TE,ED,RS,T,H,RF,SCAL,XP,YP,ZP,VOL
C   DOUBLE PRECISION AREA,VPOR,ARPOR,WFACT,WORK,SMALL,SORMAX,TIME,DT
C   DOUBLE PRECISION DTINVF,TPARM
C   LOGICAL LDEN,LVIS,LTURB,LTEMP,LBOUY,LSCAL,LCOMP,LRECT,LCYN,LAXIS,
+     LPOROS,LTRANS
C
C   CHARACTER*(*) CWORK
C
C+++++++ USER AREA 1 ++++++++
C---- AREA FOR USERS EXPLICITLY DECLARED VARIABLES
C   INTEGER IWALL
C
C+++++++ END OF USER AREA 1 ++++++++
C
C   COMMON /ALL/NBLOCK,NCELL,NBDRY,NNODE,NFACE,NVERT,NDIM,
+     /ALLWRK/NRWS,NIWS,NCWS,IWRFRE,IWIFRE,IWCFRE,/ADDIMS/NPHASE,

```

```

+ NSCAL, NVAR, NPROP, NDVAR, NDPROP, NDXNN, NDGEOM, NDCOEFF, NILIST,
+ NRLIST, NTOPOL, /BCSOUT/IFLOUT, /CHKUSR/IVERS, IUCALL, IUSED,
+ /DEVICE/NREAD, NWRITE, NRDISK, NWDISK, /IDUM/ILEN, JLEN,
+ /IMFBMP/IMFBMP, JMFBMP, /LOGIC/LDEN, LVIS, LTURB, LTEMP, LBUOY,
+ LSCAL, LCOMP, LRECT, LCYN, LAXIS, LPOROS, LTRANS, /MLTGRD/MLEVEL,
+ NLEVEL, ILEVEL, /SGLDBL/IFLGPR, ICHKPR, /SPARM/SMALL, SORMAX,
+ NITER, INDPRI, MAXIT, NODREF, NODMON, /TRANSI/NSTEP, KSTEP, MF,
+ INCORE, /TRANSR/TIME, DT, DTINV, TPARM, /UBCSFL/IUBCSF

```

C

C+++++++ USER AREA 2 ++++++

C---- AREA FOR USERS TO DECLARE THEIR OWN COMMON BLOCKS

C THESE SHOULD START WITH THE CHARACTERS 'UC' TO ENSURE

C NO CONFLICT WITH NON-USER COMMON BLOCKS

C

C+++++++ END OF USER AREA 2 ++++++

C

```

DIMENSION VARBCS(NVAR, NPHASE, NCELL+1:NNODE), VARAMB(NVAR, NPHASE),
+ A(4+NSCAL, NPHASE, NSTART:*), B(4+NSCAL, NPHASE, NSTART:*),
+ C(4+NSCAL, NPHASE, NSTART:*), FLOUT(*), ACND(NCST:*),
+ BCND(NCST:*), CCND(NCST:*), IWGVEL(NDVWAL, NPHASE)

```

C

```

DIMENSION U(NNODE, NPHASE), V(NNODE, NPHASE), W(NNODE, NPHASE),
+ P(NNODE, NPHASE), VFRAC(NNODE, NPHASE), DEN(NNODE, NPHASE),
+ VIS(NNODE, NPHASE), TE(NNODE, NPHASE), ED(NNODE, NPHASE),
+ RS(NNODE, NPHASE, 6), T(NNODE, NPHASE), H(NNODE, NPHASE),
+ RF(NNODE, NPHASE, 4), SCAL(NNODE, NPHASE, NSCAL)

```

c +, IP(NNODE, NNODE, NNODE)

C

```

DIMENSION XP(NNODE), YP(NNODE), ZP(NNODE), VOL(NCELL), AREA(NFACE, 3),
+ VPOR(NCELL), ARPOR(NFACE, 3), WFACT(NFACE), IPT(*),
+ IBLK(5, NBLOCK), IPVERT(NCELL, 8), IPNODN(NCELL, 6),
+ IPFACN(NCELL, 6), IPNODF(NFACE, 4), IPNODB(NBDRY, 4),
+ IPFACB(NBDRY), IWORK(*), WORK(*), CWORK(*)

```

C

C+++++++ USER AREA 3 ++++++

```

C---- AREA FOR USERS TO DIMENSION THEIR ARRAYS
C
C---- AREA FOR USERS TO DEFINE DATA STATEMENTS
C
C+++++ END OF USER AREA 3 ++++++
C
C---- STATEMENT FUNCTION FOR ADDRESSING
      IP(I,J,K) = IPT((K-1)*ILEN*JLEN+ (J-1)*ILEN+I)
C
C----VERSION NUMBER OF USER ROUTINE AND PRECISION FLAG
C
      IVERS = 5
      ICHKPR = 2
C
C+++++ USER AREA 4 ++++++
C---- TO USE THIS USER ROUTINE FIRST SET IUSED=1
C      AND SET IUBCSF FLAG:
C      BOUNDARY CONDITIONS NOT CHANGING           IUBCSF=0
C      BOUNDARY CONDITIONS CHANGING WITH ITERATION IUBCSF=1
C      BOUNDARY CONDITIONS CHANGING WITH TIME      IUBCSF=2
C      BOUNDARY CONDITIONS CHANGING WITH TIME AND ITERATION IUBCSF=3
C
      IUSED = 1
      IUBCSF = 1
C
C+++++ END OF USER AREA 4 ++++++
C
      IF (IUSED.EQ.0) RETURN
C
C---- FRONTEND CHECKING OF USER ROUTINE
      IF (IUCALL.EQ.0) RETURN

C SET IPHS = 1 FOR SINGLE PHASE FLOW.
IPHASE = 2

```

C-- SET POINTERS

C

IU = 1

C IV = 2

C IW = 3

C IT = 4

IS = 5

C

C PEGANDO O NUMERO DE U

c CALL GETVAR('USRBCS', 'U', ITEU)

C PEGANDO O NUMERO DE VFRAC

c CALL GETVAR('USRBCS', 'VFRAC', IVFRAC)

c

c CALL IPREC('WALL1', 'PATCH', 'CENTRES', IPT, ILEN, JLEN, KLEN,

c + CWORK, IWORK)

c DO 102 K=1, KLEN

c DO 101 J=1, JLEN

c DO 100 I=1, ILEN

c IP(I, J, K) = IPT((K-1)*ILEN*JLEN+ (J-1)*ILEN+I)

CALL GETSCA('TGRAN', ITG, CWORK)

FVMax = 0.5D0

FHIW = 0.5D0

CRestW = 1.0D0

Pi = 3.14159265359D0

c

c TESTE DE JAILSON

c teste de jailson

c CALL IPALL('WALL1', 'WALL', 'PATCH', 'CENTRES', IPT, NPT, CWORK, IWORK)

c

C CALL IPREC('WALL1', 'PATCH', 'CENTRES', IPT, ILEN, JLEN, KLEN,

C + CWORK, IWORK)

CALL IPREC('BLOCK-NUMBER-1', 'BLOCK', 'CENTRES', IPT, ILEN, JLEN, KLEN,

```

+ CWORK,IWORK)
AESMAX=0.99*FVmax
DO 15 K = 1, KLEN
  DO 14 J = 1, JLEN
    DO 13 I = 1, ILEN
c restrição para temperatura granular ser positiva

IWALL = IP(I,JLEN,K)
IANTE = IP(I,JLEN-1,K)

c fim da restricao
c      do 13 J=1,NPT
c IWALL=IPT(J)
c
c IWALL = IP(I,JLEN,K)
c IANTE = IP(I,JLEN-1,K)
c
cc VFRAC(IWALL,2)=(VFRAC(IANTE,2)*SCAL(IANTE,2,ITG)+
cc   +100.0d+0*VFRAC(IWALL,2))
cc   //(SCAL(IWALL,2,ITG)+100.0d+0)
VFRAC(IWALL,2)=(VFRAC(IANTE,2)*SCAL(IANTE,2,ITG)*AESMAX+
  +1.0d+0*VFRAC(IWALL,2))
  //(SCAL(IWALL,2,ITG)*(AESMAX-VFRAC(IANTE,2))+
  +SCAL(IANTE,2,ITG)*VFRAC(IANTE,2)+1.0d+0)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc VFRAC(IWALL,2)=0.1d+0
cc VFRAC(IWALL,2)=VFRAC(IANTE,2)
  IF (VFRAC(IWALL,2) .LT. 1.0d-20) then
VFRAC(IWALL,2)=1.0d-20
  endif
  IF (VFRAC(IWALL,2) .GE. FVmax) then
VFRAC(IWALL,2)=0.99D+0*FVmax
  endif
VFRAC(IWALL,1)=1.0d+0-VFRAC(IWALL,2)
13   continue
14   continue

```

```

15  continue
c fim teste de jailson
c armazenando c.c. para a particula
      CALL GETVAR('USRBCS','VFRAC ',IFRAC)
CALL IPALL('WALL1','WALL','PATCH','CENTRES',IPT,NPT,CWORK,IWORK)
c
      do 16 J=1,NPT
IWALL=IPT(J)
c
C RESTRIÇÃO PARA TGRAN SER POSITIVA
      SCAL(IWALL,2,ITG)=DMAX1(SCAL(IWALL,2,ITG),1.0d-10)
C FIM RESTRIÇÃO

VARBCS(IFRAC,2,IWALL)=VFRAC(IWALL,2)
VARBCS(IFRAC,1,IWALL)=1.0d+0-VFRAC(IWALL,2)
16  continue
c
C FIM DO TESTE DE JAILSON
c
CALL IPALL('WALL1','WALL','PATCH','CENTRES',IPT,NPT,CWORK,IWORK)
c
DO 100 I = 1,NPT
INODE = IPT(I)
CCC VFRAC(inode,2)=0.1d+0
CCC VFRAC(inode,1)=0.9d+0
c restrição para temperatura granular ser positiva
      SCAL(INODE,2,ITG)=DMAX1(SCAL(INODE,2,ITG),1.0d-10)
c fim da restricao
Aux1 = DSQRT(3.0d0)*PI*VFRAC(INODE,2)**2.0*DEN(INODE,2)*
      *SCAL(INODE,2,ITG)**(1.0D0/2.0D0)*(1.0d0-CRestW**2.0D0)/
      +(4.0D0*FVMax*(1.0D0-(VFRAC(INODE,2)/FVMax)**(1.0d0/3.0d0)))

c
      gamaW=Aux1*SCAL(INODE,2,ITG)
c

```

```

Aux2 = FHIW*DSQRT(3.0d0)*PI*VFRAC(INODE,2)*DEN(INODE,2)*
      *SCAL(INODE,2,ITG)**(1.0D0/2.0D0)/
      +(6.0D0*FVMax*(1.0D0-(VFRAC(INODE,2)/FVMax)**(1.0D0/3.0D0)))

```

```

c

```

```

TauRZ=Aux2*U(INODE,2)

```

```

C SETANDO VELOCIDADE AXIAL DO SOLIDO NA PAREDE

```

```

A(IU,IPHASE,INODE) = Aux2+1000000.0d+0

```

```

      B(IU,IPHASE,INODE) = 1.0d+0

```

```

C(IU,IPHASE,INODE) = 0.0+1000000.0d+0*U(INODE,2)

```

```

C A(IU,IPHASE,INODE) = 0.0d+0 + 1.0

```

```

C      B(IU,IPHASE,INODE) = 1.0

```

```

C C(IU,IPHASE,INODE) = -Aux2*U(INODE,2)+1.0*U(INODE,2)

```

```

c AUX3 = 1.0D0/AUX2

```

```

c A(IU,IPHASE,INODE) = 1.0+1000000

```

```

c      B(IU,IPHASE,INODE) = AUX3

```

```

c C(IU,IPHASE,INODE) = 0.0+1000000*U(INODE,2)

```

```

c SETANDO TGRAN NA PAREDE

```

```

A(IS,IPHASE,INODE) = aux1+10000.0d+0

```

```

      B(IS,IPHASE,INODE) = 1.0d+0

```

```

C(IS,IPHASE,INODE) = TauRZ*U(INODE,2)

```

```

      **10000.0d+0*SCAL(INODE,2,ITG)

```

```

C A(IS,IPHASE,INODE) = 0+1.0

```

```

C      B(IS,IPHASE,INODE) = 1.0

```

```

C C(IS,IPHASE,INODE) = +TauRZ*U(INODE,2)

```

```

C      **AUX1*SCAL(INODE,2,ITG)+1.0d+0*SCAL(INODE,2,ITG)

```

```

100 CONTINUE

```

```

c101 CONTINUE

```

```

c102 CONTINUE

```

```

C

```

```

RETURN

```


C

END

C.4 USRSRC - Subrotina para o Cálculo da Termo de Geração

```

SUBROUTINE USRSRC(IEQN, ICALL, CNAME, CALIAS, AM, SP, SU, CONV, U, V, W, P,
+                VFRAC, DEN, VIS, TE, ED, RS, T, H, RF, SCAL, XP, YP, ZP, VOL,
+                AREA, VPOR, ARPOR, WFACT, IPT, IBLK, IPVERT, IPNODN,
+                IPFACN, IPNODF, IPNODB, IPFACB, WORK, IWORK, CWORK)

```

C SUBROUTINE ARGUMENTS

C

```

C   IEQN  - EQUATION NUMBER
C   ICALL - SUBROUTINE CALL
C   CNAME - EQUATION NAME
C   CALIAS - ALIAS OF EQUATION NAME
C   AM    - OFF DIAGONAL MATRIX COEFFICIENTS

C   SU    - SU IN LINEARISATION OF SOURCE TERM
C   SP    - SP IN LINEARISATION OF SOURCE TERM
C   CONV  - CONVECTION COEFFICIENTS
C   U     - U COMPONENT OF VELOCITY
C   V     - V COMPONENT OF VELOCITY
C   W     - W COMPONENT OF VELOCITY
C   P     - PRESSURE
C   VFRAC - VOLUME FRACTION
C   DEN   - DENSITY OF FLUID
C   VIS   - VISCOSITY OF FLUID
C   TE    - TURBULENT KINETIC ENERGY
C   ED    - EPSILON
C   RS    - REYNOLD STRESSES
C   T     - TEMPERATURE
C   H     - ENTHALPY
C   RF    - REYNOLD FLUXES

```

C SCAL - SCALARS (THE FIRST 'NCONC' OF THESE ARE MASS FRACTIONS)
C XP - X COORDINATES OF CELL CENTRES
C YP - Y COORDINATES OF CELL CENTRES
C ZP - Z COORDINATES OF CELL CENTRES
C VOL - VOLUME OF CELLS
C AREA - AREA OF CELLS
C VPOR - POROUS VOLUME
C ARPOR - POROUS AREA
C WFACT - WEIGHT FACTORS
C
C IPT - 1D POINTER ARRAY
C IBLK - BLOCK SIZE INFORMATION
C IPVERT - POINTER FROM CELL CENTERS TO 8 NEIGHBOURING VERTICES
C IPNODM - POINTER FROM CELL CENTERS TO 6 NEIGHBOURING CELLS
C IPFACN - POINTER FROM CELL CENTERS TO 6 NEIGHBOURING FACES
C IPNODF - POINTER FROM CELL FACES TO 2 NEIGHBOURING CELL CENTERS
C IPNODB - POINTER FROM BOUNDARY CENTERS TO CELL CENTERS
C IPFACE - POINTER FROM BOUNDARY CENTERS TO BOUNDARY FACES
C
C WORK - REAL WORKSPACE ARRAY
C IWORK - INTEGER WORKSPACE ARRAY
C CWORK - CHARACTER WORKSPACE ARRAY
C
C SUBROUTINE ARGUMENTS PRECEDED WITH A '*' ARE ARGUMENTS THAT MUST
C BE SET BY THE USER IN THIS ROUTINE.
C
C NOTE THAT WHEN USING MASS SOURCES, THE FLOWS THROUGH MASS FLOW
C BOUNDARIES ARE UNCHANGED. THE USER SHOULD THEREFORE INCLUDE AT
C LEAST ONE PRESSURE BOUNDARY FOR SUCH A CALCULATION.
C
C NOTE THAT OTHER DATA MAY BE OBTAINED FROM CFX-4 USING THE
C ROUTINE GETADD, FOR FURTHER DETAILS SEE THE VERSION 4
C USER MANUAL.
C
C*****

C

```

DOUBLE PRECISION AM, SP, SU, CONV, U, V, W, P, VFRAC, DEN, VIS, TE, ED, RS
DOUBLE PRECISION T, H, RF, SCAL, XP, YP, ZP, VOL, AREA, VPOR, ARPOR, WFACT
DOUBLE PRECISION WORK, SMALL, SORMAX, TIME, DT, DTINVF, TPARM
LOGICAL LDEN, LVIS, LTURB, LTEMP, LBUOY, LSCAL, LCOMP, LRECT, LCYN, LAXIS,
+      LPOROS, LTRANS

```

C

```

CHARACTER*(*) CWORK
CHARACTER CNAME*6, CALIAS*24

```

```

DOUBLE PRECISION g0, FVMax, VSDil, DPart, Pi, CRest, TGranAux, Aux
+Cor, ksi, Ps, GAMA1, GAMA2, TAUDIVV, DIVV, DVXDX, DVXDY, DVXDZ, DVYDX, DVYDY,
+DVYDZ, DVZDX, DVZDY, DVZDZ, TXX , TYY, TZZ , TXY, TYZ, TZX, TYX, TZY, TZZ

```

```

INTEGER NoI, IFase, INTGra, IWALL, IANTE, ITG, ITGEQ

```

```

COMMON /ALL/NBLOCK, NCELL, NBDRY, NNODE, NFACE, NVERT, NDIM,
+      /ALLWRK/NRWS, NIWS, NCWS, IWRFRE, IWIFRE, IWCFRE, /ADDIMS/NPHASE,
+      NSCAL, NVAR, NPRP, NDVAR, NDPROP, NDXNN, NDGEOM, NDCOE, NILIST,
+      NRLIST, NTOPOL, /CHKUSR/IVERS, IUCALL, IUSED, /DEVICE/NREAD,
+      NWRITE, NRDISK, NWDISK, /IDUM/ILEN, JLEN, /LOGIC/LDEN, LVIS,
+      LTURB, LTEMP, LBUOY, LSCAL, LCOMP, LRECT, LCYN, LAXIS, LPOROS,
+      LTRANS, /MLTGRD/MLEVEL, NLEVEL, ILEVEL, /SGLDBL/IFLGPR, ICHKPR,
+      /SPARM/SMALL, SORMAX, NITER, INDPRI, MAXIT, NODREF, NODMON,
+      /TRANSI/NSTEP, KSTEP, MF, INCORE, /TRANSR/TIME, DT, DTINVF, TPARM

```

```

DIMENSION AM(NCELL, 6, NPHASE), SP(NCELL, NPHASE), SU(NCELL, NPHASE),
+      CONV(NFACE, NPHASE)

```

C

```

DIMENSION U(NNODE, NPHASE), V(NNODE, NPHASE), W(NNODE, NPHASE),
+      P(NNODE, NPHASE), VFRAC(NNODE, NPHASE), DEN(NNODE, NPHASE),
+      VIS(NNODE, NPHASE), TE(NNODE, NPHASE), ED(NNODE, NPHASE),
+      RS(NNODE, NPHASE, 6), T(NNODE, NPHASE), H(NNODE, NPHASE),
+      RF(NNODE, NPHASE, 4), SCAL(NNODE, NPHASE, NSCAL)

```

```

c, IP(NNODE, NNODE, NNODE)

```

C

```

DIMENSION XP(NNODE),YP(NNODE),ZP(NNODE),VOL(NCELL),AREA(NFACE,3),
+         VPOR(NCELL),ARPOR(NFACE,3),WFACT(NFACE),IPT(*),
+         IBLK(5,NBLOCK),IPVERT(NCELL,8),IPNODN(NCELL,6),
+         IPFACN(NCELL,6),IPNODF(NFACE,4),IPNODB(NBDRY,4),
+         IPFACB(NBDRY),IWORK(*),WORK(*),CWORK(*)

```

C---- STATEMENT FUNCTION FOR ADDRESSING

C

```

IP(I,J,K) = IPT((K-1)*ILEN*JLEN+ (J-1)*ILEN+I)

```

C

C----VERSION NUMBER OF USER ROUTINE AND PRECISION FLAG

C

```

IVERS = 4

```

```

ICHPR = 2

```

C

C+++++ USER AREA 4 ++++++

C---- TO USE THIS USER ROUTINE FIRST SET IUSED=1

C

```

IUSED = 1

```

C

C+++++ END OF USER AREA 4 ++++++

C

```

IF (IUSED.EQ.0) RETURN

```

C

C---- FRONTEND CHECKING OF USER ROUTINE

```

IF (IUCALL.EQ.0) RETURN

```

```

FVMax = 0.5d0

```

```

DPart = 200.0E-6

```

```

C IFase diz qual a fase (1 - gas; 2 - solido)

```

```

IFase = 2

```

```

Pi = 3.14159265359D0

```

```

CRest = 1.0D0

```

```

C Fim da seção de inicialização

```

```

      CALL GETSCA('TGRAN ',ITG, CWORK)
c teste de jailson
c CALL IPALL('WALL1','WALL','PATCH','CENTRES',IPT,NPT,CWORK,IWORK)
c
cc DO 13 J = 1,NPT
cc INODE = IPT(J)
cc VFRAC(inode,2)=0.1d+0
cc VFRAC(inode,1)=0.9d+0
cc 13  continue
cc
cc
cc
C teste de jailson
c CALL IPALL('WALL1','WALL','PATCH','CENTRES',IPT,NPT,CWORK,IWORK)
c
CALL IPREC('BLOCK-NUMBER-1','BLOCK','CENTRES',IPT,ILEN,JLEN,KLEN,
+ CWORK,IWORK)
      AESMAX=0.99*FVmax
      DO 15 K = 1, KLEN
        DO 14 J = 1, JLEN
          DO 13 I = 1, ILEN
c
c      do 131 J=1,NPT
c IWALL=IPT(J)
IWALL = IP(I,JLEN,K)
IANTE = IP(I,JLEN-1,K)
c restrição para temperatura granular ser positiva
C      SCAL(IANTE,2,ITG)=DMAX1(SCAL(IANTE,2,ITG),1.0d-10)
c fim da restricao
cc VFRAC(IWALL,2)=(VFRAC(IANTE,2)*SCAL(IANTE,2,ITG)+
cc +100.0d+0*VFRAC(IWALL,2))
cc //(SCAL(IWALL,2,ITG)+100.0d+0)
c
VFRAC(IWALL,2)=(VFRAC(IANTE,2)*SCAL(IANTE,2,ITG)*AESMAX+
+1.0d+0*VFRAC(IWALL,2))

```

```

      //(SCAL(IWALL,2,ITG)*(AESMAX-VFRAC(IANTE,2))+
      +SCAL(IANTE,2,ITG)*VFRAC(IANTE,2)+1.0d+0)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc      VFRAC(IWALL,2)=0.1d+0
c VFRAC(IWALL,2)=VFRAC(IANTE,2)
  IF (VFRAC(IWALL,2) .LT. 1.0d-20) then
VFRAC(IWALL,2)=1.0d-20
  endif
  IF (VFRAC(IWALL,2) .GE. FVmax) then
VFRAC(IWALL,2)=0.99D+0*FVmax
  endif
VFRAC(IWALL,1)=1.0d+0-VFRAC(IWALL,2)
 13  continue
 14  continue
 15  continue
c
c AESMAX=.99D+0*ESMAX
c ES(I,M)=(ES(I,M-1)*TG(I,M-1)*AESMAX+(10.D+0+APO(I,M))*ES(I,M))/
c  /(TG(I,M)*(AESMAX-ES(I,M-1))+TG(I,M-1)*ES(I,M-1)+APO(I,M)+10.D+0)
c
c AESMAX=.99D+0*ESMAX
c VFRAC(INODE,2)=(VFRAC(I,M-1)*TG(I,M-1)*AESMAX+(10.D+0+APO(I,M))*ES(I,M))/
c  /(TG(I,M)*(AESMAX-ES(I,M-1))+TG(I,M-1)*ES(I,M-1)+APO(I,M)+10.D+0)
c
c fim teste de jailson

C

c fim teste de jailson
IPHASE = 2

CALL GETVAR('USR SRC','SCAL ',ISCPS)
  CALL GETSCA('USR DCC PS',IPS,cwork)
  ITPS = IPS+ISCPS-1

```

```
CALL IPALL('*','*', 'BLOCK', 'CENTRES', IPT, NPT, CWORK, IWORK)
```

```
DO 222 I = 1, NCELL
```

```
  c   INODE=IPT(I)
```

```
     INODE=I
```

```
  C
```

```
  c restrição para temperatura granular ser positiva
```

```
     SCAL(INODE,2,ITG)=DMAX1(SCAL(INODE,2,ITG),1.0d-10)
```

```
  c fim da restricao
```

```
  C FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO RADIAL g0 - TESE DE JAILSON PAGINA 44
```

```
  g0 = 3.0D0/5.0D0*(1.0D0-(VFRAC(INODE,IFase)/FVMax)**(1.0D0
    +/3.0D0))**(-1.0D0)
```

```
  C PRESSÃO DE SOLIDO
```

```
  PS = DEN(INODE,2)*VFRAC(INODE,2)*(1.0D0+2.0D0*(1.0D0+
    +CRest)*VFRAC(INODE,2)*g0)*SCAL(INODE,2,ITG)
```

```
  C ARMAZENANDO PS NO ESCALAR USRDCC PS
```

```
  SCAL(INODE,2,IPS) = PS
```

```
  C
```

```
    222 CONTINUE
```

```
  C
```

```
  C SOMA AO TERMO FONTE
```

```
  c
```

```
  IF(ICALL.EQ.2)THEN
```

```
  CALL GETVAR('USRSRC','U      ',IUU)
```

```
  CALL GETVAR('USRSRC','V      ',IVV)
```

```
  CALL GETVAR('USRSRC','W      ',IWW)
```

```
  CALL SETWRK('USRSRC','WORK  ', 'GRADPS', 3*NCELL, JGRADPS)
```

```
  CALL GRADS('USRSRC','SCAL  ',ITPS,IPHASE,SCAL(1,IPHASE,IPS),
```

```
    + WORK(JGRADPS),XP,YP,ZP,VOL,AREA,IBLK,IPVERT,IPNODN,IPFACN,
```

```
    + IPNODF,IPNODB,IPFACB,WORK,IWORK,CWORK)
```

```
  C
```

```
  DO 223 I = 1, NCELL
```

```
inode=I
SCAL(INODE,2,ITG)=DMAX1(SCAL(INODE,2,ITG),1.0d-10)
c INODE = IPT(I)
DPSDX=(WORK(JGRADPS+INODE-1))
DPSDY=(WORK(JGRADPS+NCELL+INODE-1))
DPSDZ=(WORK(JGRADPS+2*NCELL+INODE-1))

IF (IEQN.EQ.IUU)THEN
SU(INODE,2) = SU(INODE,2) - DPSDX*VOL(INODE)
END IF

IF(IEQN.EQ.IVV)THEN
SU(INODE,2) = SU(INODE,2) - DPSDY*VOL(INODE)
END IF

IF(IEQN.EQ.IWW)THEN
SU(INODE,2) = SU(INODE,2) - DPSDZ*VOL(INODE)
END IF
C
223 CONTINUE
C
      CALL DELWRK('USRSRC','WORK ','GRADPS')
END IF

C1500  continue
C
C---- SOBREESCREVE O TERMO FONTE
      IF (ICALL.EQ.2) THEN

CALL GETVAR('USRSRC','SCAL ',ISCTG)
      CALL GETSCA('TGRAN ',ITG, CWORK)
      ITGEQ = ITG+ISCTG-1

C      CALL GETVAR('USRSRC','TGRAN ',ITG)
```



```

      IF(IEQN.EQ.ITGEQ) THEN
C      IF(IEQN.EQ.IUAR) KK=1
C      IF(KK.EQ.1) THEN

CALL SETWRK('USRSRC','WORK ','UGRAD ',3*NCELL,JUGRAD)
      CALL SETWRK('USRSRC','WORK ','VGRAD ',3*NCELL,JVGRAD)
      CALL SETWRK('USRSRC','WORK ','WGRAD ',3*NCELL,JWGRAD)
C
      CALL IPALL('*','*', 'BLOCK', 'CENTRES', IPT,NPT,CWORK,IWORK)
C
      IPHASE = 2
C CALL GRADS(USR
      CALL GRADV('USRSRC',IPHASE,U(1,IPHASE),V(1,IPHASE),W(1,IPHASE)
+ ,WORK(JUGRAD),WORK(JVGRAD),WORK(JWGRAD),XP,YP,ZP,VOL,AREA,
+ IBLK,IPVERT,IPNODN,IPFACN,IPNODF,IPNODB,IPFACB,WORK,IWORK,CWORK)

C NPT =NNODE
C      DO 103 K = 1, KLEN
C      DO 102 J = 1, JLEN
C      DO 101 I = 1, ILEN
      DO 101 I = 1, NCELL
C USE STATEMENT FUNCTION IP TO GET ADDRESSES

C      IP(I,J,K) = IPT((K-1)*ILEN*JLEN+ (J-1)*ILEN+I)
C      INODE = IPT((K-1)*ILEN*JLEN+ (J-1)*ILEN+I)
C      INODE = IPT(I)
      inode=I

DVXDX=(WORK(JUGRAD+INODE-1))

DVXDY=(WORK(JUGRAD+NCELL+INODE-1))
DVXDZ=(WORK(JUGRAD+2*NCELL+INODE-1))
DVYDX=(WORK(JVGRAD+INODE-1))
DVYDY=(WORK(JVGRAD+NCELL+INODE-1))
DVYDZ=(WORK(JVGRAD+2*NCELL+INODE-1))

```

```

DVZDX=(WORK(JWGRAD+INODE-1))
DVZDY=(WORK(JWGRAD+NCELL+INODE-1))
DVZDZ=(WORK(JWGRAD+2*NCELL+INODE-1))

```

```

DivV = DVXDX+DVYDY+DVZDZ
TXX = VIS(INODE,2)*(2.0D0*DVXDX-2.0D0/3.0D0*DivV)
TYY = VIS(INODE,2)*(2.0D0*DVYDY-2.0D0/3.0D0*DivV)
TZZ = VIS(INODE,2)*(2.0D0*DVZDZ-2.0D0/3.0D0*DivV)
TXY = VIS(INODE,2)*(DVXDY+DVYDX)
TYZ = VIS(INODE,2)*(DVYDZ+DVZDY)
TZX = VIS(INODE,2)*(DVZDX+DVXDZ)
TYX = TXY
TZY = TYZ
TXZ = TZX

```

C FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO RADIAL g0 - TESE DE JAILSON PAGINA 44

```

g0 = 3.0D0/5.0D0*(1.0D0-(VFRAC(INODE,IPHASE)/FVMax)**(1.0D0
+/3.0D0))**(-1.0D0)

```

```

PS = SCAL(INODE,2,IPS)

```

C ZERANDO TEMPERATURA GRANULAR PARA FASE GAS CONFORME PG 345 DO SOLVER MANUAL
SCAL(INODE,1,ITG)=0.0D+0

c restrição para temperatura granular ser positiva

```

SCAL(INODE,2,ITG)=DMAX1(SCAL(INODE,2,ITG),1.0d-10)

```

c fim da restricao

```

c Ps = DEN(INODE,2)*VFRAC(INODE,2)*(1.0D0+2.0D0*(1.0D0+
c +CRest)*VFRAC(INODE,2)*g0)*SCAL(INODE,2,ITG)

```

```

Ksi = 4.0d0/3.0d0*DEN(INODE,2)*g0*(VFRAC(INODE,2)**2.0D0)*
+(1.0D0+CRest)*DPART*DSQRT(SCAL(INODE,2,ITG)/Pi)

```

```

Aux = (-Ps+Ksi*DivV)*DivV

```

c

```

TauDivV = TXX*DVXDX+TYY*DVYDY+TZZ*DVZDZ+TXY*(DVXDY+DVYDX)+

```

+TYZ*(DVYDZ+DVZDY)+TZX*(DVZDX+DVXDZ)+Aux

Gama1 = 3.0d0*(1.0d0-CRest**2.0D0)*VFRAC(INODE,2)**2.0D0*
 +DEN(INODE,2)*g0*(4.0d0/DPart*DSQRT(SCAL(INODE,2,ITG)/Pi)-DivV)*
 +SCAL(INODE,2,ITG)

C Gama1 = 0.0

c Calculo do coeficiente de interface

IA = 1

CDD = 0.44

IB = 2

IAB = 1

C DO 111 J = 1,NPT

C INODE=IPT(J)

IN = INODE

C VISA= VIS(INODE,1)

visa = 4.0000D-05

SLIP = DSQRT((U(IN,1)-U(IN,2))**2.+(V(IN,1)-V(IN,2))**2.0D0
 + (W(IN,1)-W(IN,2))**2.0D0)

RES1 = (SLIP)*DEN(INODE,IA)*VFRAC(INODE,1)*DPart/VISA

CD = 24.0D0 / (RES1)*(1.0D0+.15D0*(RES1**.687D0))

CF =.75*CD / DPart

c IF(VFRAC(IN,2).LT.0.20D0) THEN

c CAB(INODE,IAB) = CF*

c + VFRAC(INODE,2)*DEN(INODE,IA)*SLIP*(VFRAC(

c + INODE,IA)**(-1.65D0))

c ELSE

c CAB(IN,IAB) = (150.0*(VFRAC(IN,IB)**2.)*VISA

c + /((VFRAC(IN,IA)**2.)*(DPart**2.))+1.75*DEN(IN,IA)*

c + SLIP*VFRAC(IN,2)/(DPart*VFRAC(INODE,1)))

c CAB(INODE,IAB)=CAB(IN,IAB)*VFRAC(INODE,1)

c ENDIF

C

```
BETA = (17.3D0/RES1+0.336D0)*DEN(INODE,1)*SLIP*(1-VFRAC(INODE,1))
      +*VFRAC(INODE,1)**(-2.8D0)/DPart
```

C CORRELAÇÃO DE FLUTUAÇÃO ENTRE GAS-PARTICULA

```
c Cor = (TE(INODE,1)+3.D0/2.D0*SCAL(INODE,2,ITG))
```

```
c Gama2 = BETA*(Cor-3.0d0*SCAL(INODE,2,ITG))*0.0
```

```
c Gama2SU = BETA*Cor
```

```
c Gama2SP = -BETA*3.0d0
```

```
c OBS: O TERMO FONTE DEVE SER SOMADO< POIS A TRANSFORMAÇÃO DE COORDENADAS GERA UM TERMO
```

```
c SP(INODE,2)= SP(INODE,2)
```

```
SU(INODE,2)=(TauDivV-Gama1)*2.0d0/3.0d0*VOL(INODE)/VFRAC(INODE,2)
```

```
cteste inclusão Vr/r
```

```
c vrr=VIS(INODE,2)*(V(INODE,IPHASE)/YP(INODE))**2.d+0
```

```
c SU(INODE,2)=SU(INODE,2)+vrr*VOL(INODE)
```

```
C1000 continue
```

```
101 CONTINUE
```

```
c 102 continue
```

```
c 103 continue
```

```
CALL DELWRK('USRSRC','WORK ','UGRAD ')
```

```
ENDIF
```

```
END IF
```

```
c1000 continue
```

```
RETURN
```

C

```
END
```

C.5 USRPRT - Subrotina para Impressão dos Resultados

```

SUBROUTINE USRPRT(ICALL,IWHEN,IFLAGP,MPLANE,IPLANE,CBLOCK,DUMMY,
+                IPRV,IPRG,U,V,W,P,VFRAC,DEN,VIS,TE,ED,RS,T,H,RF,
+                AMF,COMB,USRSCL,VFMUS,XP,YP,ZP,VOL,AREA,VPOR,
+                ARPOR,WFACT,CONV,IPT,IBLK,IPVERT,IPNODN,IPFACN,
+                IPNODF,IPNODEB,IPFACB,WORK,IWORK,CWORK)

```

C

C SUBROUTINE ARGUMENTS

C

C ICALL - FLAG INDICATING PURPOSE OF SUBROUTINE CALL

C IFLAGP - FLAG INDICATING WHEN DATA IS TO BE PRINTED

C IPRV - FLAG INDICATING WHAT VARIABLES TO PRINT

C U - U COMPONENT OF VELOCITY

C V - V COMPONENT OF VELOCITY

C W - W COMPONENT OF VELOCITY

C P - PRESSURE

C VFRAC - VOLUME FRACTION

C DEN - DENSITY OF FLUID

C VIS - VISCOSITY OF FLUID

C TE - TURBULENT KINETIC ENERGY

C ED - EPSILON

C RS - REYNOLD STRESSES

C T - TEMPERATURE

C H - ENTHALPY

C RF - REYNOLD FLUXES

C AMF - MASS FRACTIONS

C COMB - COMBUSTION SCALARS

C USRSCL - USER SCALARS

C VFMUS - MUSIG VOLUME FRACTIONS

C XP - X COORDINATES OF CELL CENTRES

C YP - Y COORDINATES OF CELL CENTRES

C ZP - Z COORDINATES OF CELL CENTRES

C VOL - VOLUME OF CELLS

```

C   AREA   - AREA OF CELLS
C   VPOR   - POROUS VOLUME
C   ARPOR  - POROUS AREA
C   WFACT  - WEIGHT FACTORS
C   CONV   - CONVECTION COEFFICIENTS
C
C   IPT    - 1D POINTER ARRAY
C   IBLK   - BLOCK SIZE INFORMATION
C   IPVERT - POINTER FROM CELL CENTERS TO 8 NEIGHBOURING VERTICES
C   IPNODN - POINTER FROM CELL CENTERS TO 6 NEIGHBOURING CELLS
C   IPFACN - POINTER FROM CELL CENTERS TO 6 NEIGHBOURING FACES
C   IPNODF - POINTER FROM CELL FACES TO 2 NEIGHBOURING CELL CENTERS
C   IPNOB  - POINTER FROM BOUNDARY CENTERS TO CELL CENTERS
C   IPFACB - POINTER FROM BOUNDARY CENTERS TO BOUNDARY FACESS
C
C   WORK   - REAL WORKSPACE ARRAY
C   IWORK  - INTEGER WORKSPACE ARRAY
C   CWORK  - CHARACTER WORKSPACE ARRAY
C
C   SUBROUTINE ARGUMENTS PRECEDED WITH A '*' ARE ARGUMENTS THAT MUST
C   BE SET BY THE USER IN THIS ROUTINE.
C
C   NOTE THAT OTHER DATA MAY BE OBTAINED FROM CFX-4 USING THE
C   ROUTINE GETADD, FOR FURTHER DETAILS SEE THE VERSION 4
C   USER MANUAL.
C
C*****
C
C   DOUBLE PRECISION DUMMY,U,V,W,P,VFRAC,DEN,VIS,TE,ED,RS,T,H,RF
C   DOUBLE PRECISION AMF,COMB,USRSCL,VFMUS,XP,YP,ZP,VOL,AREA
C   DOUBLE PRECISION VPOR,ARPOR,WFACT,CONV,WORK,SMALL, SORMAX
C   DOUBLE PRECISION TIME,DT,DTINVF,TPARM
C   LOGICAL LDEN,LVIS,LTURB,LTEMP,LBUOY,LSCAL,LCOMP,LRECT,LCYN,LAXIS,
C   +       LPOROS,LTRANS
C

```

CHARACTER*(*) CWORK,CBLOCK

C

C+++++ USER AREA 1 +++++

C---- AREA FOR USERS EXPLICITLY DECLARED VARIABLES

C

C+++++ END OF USER AREA 1 +++++

C

```
COMMON /ALL/NBLOCK,NCELL,NBDRY,NNODE,NFACE,NVERT,NDIM,
+      /ALLWRK/NRWS,NIWS,NCWS,IWRFRE,IWIFRE,IWCFRE,/ADDIMS/NPHASE,
+      NSCAL,NVAR,NPROP,NDVAR,NDPROP,NDXNN,NDGEOM,NDCOE,NILIST,
+      NRLIST,NTOPOL,/ADDMPH/NAB,NCOMPT,NCOMB,NSCUSR,
+      /CHKUSR/IVERS,IUCALL,IUSED,/CONC/NCONC,/DEVICE/NREAD,
+      NWRITE,NRDISK,NWDISK,/IDUM/ILEN,JLEN,/IOFMT/IFRMT,
+      /IOPR2/MXPOPT,MXPRT1,MXPRT2,MXPRT3,MXPRT4,MXPRT,
+      /LOGIC/LDEN,LVIS,LTURB,LTEMP,LBUOY,LSCAL,LCOMP,LRECT,LCYN,
+      LAXIS,LPOROS,LTRANS,/MLTGRD/MLEVEL,NLEVEL,ILEVEL,
+      /RESID/IRESID,NRESID,/SGLDBL/IFLGPR,ICLKPR,/SPARM/SMALL,
+      SORMAX,NITER,INDPRI,MAXIT,NODREF,NODMON,/TRANSI/NSTEP,
+      KSTEP,MF,INCORE,/TRANSR/TIME,DT,DTINV,TPARM
```

C

```
COMMON /IMUS/NMUS,IPHC,NPHMUS,NPHD,NADD
```

C

C

```
DIMENSION IPRV(NBLOCK,NVAR,NPHASE),IPRG(MXPRT4,NBLOCK),
+      IPLANE(0:MXPRT3-1)
DIMENSION U(NNODE,NPHASE),V(NNODE,NPHASE),W(NNODE,NPHASE),
+      P(NNODE,NPHASE),VFRAC(NNODE,NPHASE),DEN(NNODE,NPHASE),
+      VIS(NNODE,NPHASE),TE(NNODE,NPHASE),ED(NNODE,NPHASE),
+      RS(NNODE,NPHASE,6),T(NNODE,NPHASE),H(NNODE,NPHASE),
+      RF(NNODE,NPHASE,4),AMF(NNODE,NPHASE,NCONC),
+      COMB(NNODE,NPHASE,NCOMB),USRSCL(NNODE,NPHASE,NSCUSR),
+      VFMUS(NNODE,NPHASE,NMUS)
DIMENSION XP(NNODE),YP(NNODE),ZP(NNODE),VOL(NCELL),AREA(NFACE,3),
+      VPOR(NCELL),ARPOR(NFACE,3),WFACT(NFACE),
+      CONV(NFACE,NPHASE),IPT(*),IBLK(5,NBLOCK),
```

```

+          IPVERT(NCELL,8),IPNODN(NCELL,6),IPFACN(NCELL,6),
+          IPNODF(NFACE,4),IPNOBDB(NBDRY,4),IPFACE(NBDRY),IWORK(*),
+          WORK(*),CWORK(*),CBLOCK(NBLOCK),DUMMY(*)
C----- STATEMENT FUNCTION FOR ADDRESSING
      IP(I,J,K) = IPT((K-1)*ILEN*JLEN+ (J-1)*ILEN+I)
C
C-----VERSION NUMBER OF USER ROUTINE AND PRECISION FLAG
C
      IVERS = 3
      ICHKPR = 2
C
C+++++ USER AREA 4 ++++++
C----- TO USE THIS USER ROUTINE FIRST SET IUSED=1
C
      IUSED = 1
C
C+++++ END OF USER AREA 4 ++++++
C
      IF (IUSED.EQ.0) RETURN
C
C----- FRONTEND CHECKING OF USER ROUTINE
      IF (IUCALL.EQ.0) RETURN
C
      IF (ICALL.EQ.1) THEN
      ELSE IF (ICALL.EQ.2) THEN

IF(IWHEN .EQ. 4)THEN

      CALL IPREC('BLOCK-NUMBER-1', 'BLOCK', 'CENTERS', IPT, ILEN, JLEN, KLEN,
      *CWORK, IWORK)

      CALL GETSCA('TGRAN', ITG, CWORK)
CALL GETSCA('USRDCC PS', IPS, CWORK)

OPEN(10, FILE='VelRadial1.DAT', STATUS='NEW')
```



```
OPEN(11,FILE='VelRadial2.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(12,FILE='VelAxial1.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(13,FILE='VelAxial2.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(14,FILE='Conc1.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(15,FILE='Conc2.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(16,FILE='TGRAN.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(17,FILE='PS.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(18,FILE='PRESSAO1.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(19,FILE='K.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(20,FILE='EPSILON.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(21,FILE='VIC1.DAT',STATUS='NEW')
OPEN(22,FILE='VIC2.DAT',STATUS='NEW')

C DO 103 K= 1,KLEN
K=1
c DO 102 J=1,JLEN
C DO 101 I=1,ILEN

C INODE=IP(I,J,K)
C VELOCIDADE RADIAL DO GAS
WRITE(10,5)((V(IP(I,J,K),1),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C VELOCIDADE RADIAL DAS PARTICULAS
WRITE(11,5)((V(IP(I,J,K),2),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C VELOCIDADE AXIAL DO GAS
WRITE(12,5)((U(IP(I,J,K),1),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C VELOCIDADE AXIAL DAS PARTICULAS
WRITE(13,5)((U(IP(I,J,K),2),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C CONCENTRAÇÃO DO GAS
WRITE(14,5)((VFRAC(IP(I,J,K),1),I=1,ILEN),J=1,JLEN)
```

C CONCENTRAÇÃO DAS PARTICULAS

WRITE(15,5)((VFRAC(IP(I,J,K),2),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C TEMPERATURA GRANULAR

WRITE(16,5)((USRSCL(IP(I,J,K),2,ITG),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C PRESSAO DE SOLIDO

WRITE(17,5)((USRSCL(IP(I,J,K),2,IPS),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C PRESSÃO DE GAS

WRITE(18,5)((P(IP(I,J,K),1),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C ENERGIA CINETICA TURBULENTA

WRITE(19,5)((TE(IP(I,J,K),1),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C TAXA DA ENERGIA CINETICA TURBULENTA

WRITE(20,5)((ED(IP(I,J,K),1),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C VISCOSIDADE DO GAS

WRITE(21,5)((VIS(IP(I,J,K),1),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

C VISCOSIDADE DOS SOLIDOS

WRITE(22,5)((VIS(IP(I,J,K),2),I=1,ILEN),J=1,JLEN)

5 FORMAT(40F20.15)

C101 CONTINUE

c102 CONTINUE

C103 CONTINUE

CLOSE(10)

CLOSE(11)

CLOSE(12)

CLOSE(13)
CLOSE(14)
CLOSE(15)
CLOSE(16)
CLOSE(17)
CLOSE(18)
CLOSE(19)
CLOSE(20)
CLOSE(21)
CLOSE(22)

END IF

END IF

C

RETURN

C

END