

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO

DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

**Simulação do Escoamento Gás-Sólido
em um Duto Cilíndrico Vertical em
Leito Fluidizado Rápido Aplicando a Técnica CFD**

Autor: Jaci Carlo Schramm Câmara Bastos

Orientador: Prof. Dr. Milton Mori

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

Campinas – São Paulo

Outubro de 2005

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

B297s

Bastos, Jaci Carlo Schramm Câmara
Simulação do escoamento gás-sólido em um duto
cilíndrico vertical em leito fluidizado rápido aplicando a
técnica CFD / Jaci Carlo Schramm Câmara Bastos.--
Campinas, SP: [s.n.], 2005.

Orientador: Milton Mori
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Dinâmica dos fluidos. 2. Escoamento multifásico. 3.
Reatores fluidizados. 4. Simulação (Computadores). 5.
Métodos dos volumes finitos. I. Mori, Milton. II.
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. III. Título.

Título em Inglês: Simulation of the gas-solid flow in a vertical cylindrical
duct in fast-fluidized bed applying the CFD technique

Palavras-chave em Inglês: Computational fluid dynamics, Multiphase flow,
Fluidized reactors, Computer simulation, Finite
volume method.

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Waldir Pedro Martignoni e Henry França Meier

Data da defesa: 13/10/2005

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida pelo Eng. Jaci Carlo Schramm Câmara Bastos e aprovada pela comissão julgadora em 13 de outubro de 2005.

Prof. Dr. Milton Mori
Orientador

A handwritten signature in blue ink, written over a horizontal line. The signature is cursive and appears to read 'Milton Mori'.

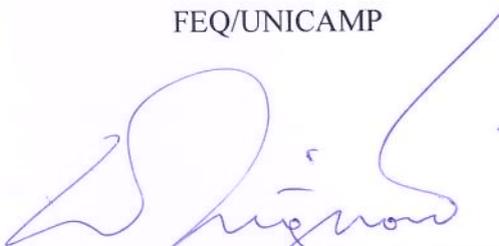
087709008

Dissertação de Mestrado defendida por Jaci Carlo Schramm Câmara Bastos e aprovada em
13 de outubro de 2005 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Milton Mori

FEQ/UNICAMP



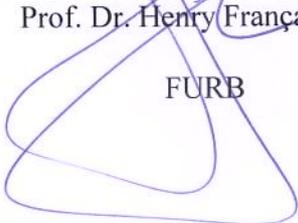
Prof. Dr. Waldir Pedro Martignoni

PETROBRAS



Prof. Dr. Henry França Meier

FURB



Dedicatória

Dedico esta pesquisa à Helena Niehues Schramm (in memorian), minha fonte eterna de iluminação e querida Avó, José Carlos Câmara Bastos, o homem por trás da máquina e Pai, e a Leonardo Peixoto Câmara Bastos, o homem à frente da máquina e Filho.

Agradecimentos

Agradeço a minha Mãe Nádia Schramm Câmara Bastos e aos meus Irmãos Jeferson Schramm Câmara Bastos e Nadine Schramm Câmara Bastos, simplesmente pelo fato de suas existências e insistências quanto a mim, aos Professores Henry França Meier, António André Chivanga de Barros e Atilano Antônio Vegini e Amigos do LFC¹ e LDPS² e ao Professor Milton Mori e Amigos do LMSPQ³ pela confiança e incentivo.

Epígrafe

“ Welcome my son, welcome to the machine...”

– Pink Floyd

¹ Laboratório de Fluidodinâmica Computacional - FURB

² Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação - FURB

³ Laboratório de Modelagem e Simulação de Processos Químicos - UNICAMP

Sumário

Resumo	vii
Abstract	viii
Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xii
Nomenclatura	xiii
Capítulo 1. Introdução	1
1.1. Fluidodinâmica Computacional	2
1.2. Apresentação	4
Capítulo 2. Fundamentação Teórica	5
2.1. Fluidização	5
2.2. Comportamento Pseudo Fluido	8
2.3. Classificação dos Sólidos por Geldart	10
2.4. Simulação	12
2.4.1. Aparato Experimental	16
2.5. Revisão	18
2.6. Metodologia CFD	23
2.6.1. Geração da Geometria e Malha Numérica	23
2.6.2. Pré – Processamento	24
2.6.3. <i>Solver</i>	24
2.6.4. Pós – Processamento	25
Capítulo 3. Modelagem Matemática e Numérica	26
3.1. Modelos Matemáticos	27
3.1.1. Equações de Transporte	27
3.1.2. Turbulência	31

3.1.3. Equações de Fechamento	34
3.2. Métodos Numéricos	37
3.2.1. Método dos Volumes Finitos	38
3.2.2. Esquema de Interpolação	40
3.2.3. Acoplamento Pressão-Velocidade	43
3.3. Geometria e Malha Numérica	44
3.4. Condições de Contorno	46
Capítulo 4. Resultados e Discussões	47
4.1. Teste de Malha Numérica	47
4.2. Fluxo de Sólidos quanto à Correlação de Arraste Gás-Sólido	50
4.2.1. Dinâmica do Escoamento	53
4.2.2. Fluxo de Sólidos quanto à Viscosidade da Fase Sólida Particulada	56
4.2.3. Frações Volumétricas e Velocidade da Fase Sólida Particulada	59
4.2.3.1. Perfis de Frações Volumétricas da Fase Sólida Particulada	59
4.2.3.2. Perfis de Velocidade da Fase Sólida Particulada	63
4.2.4. Caso 5 e Verificação das Oscilações Temporais Médias	68
Capítulo 5. Conclusões e Sugestões	76
Referências Bibliográficas	78

Resumo

A presente pesquisa apresenta a modelagem matemática e a simulação de uma operação de fluidização rápida em um longo duto cilíndrico vertical, operação importante em vários processos industriais, sendo que sua principal aplicação está vinculada ao craqueamento catalítico do petróleo para a conversão em gasolina. Tem como objetivos a obtenção de uma compreensão contínua e o conhecimento do desenvolvimento do escoamento gás-sólido, bem como a soma de experiências às pesquisas em escala industrial motivados pela possível predição do desempenho deste tipo de escoamento. O modelo tridimensional, turbulento e bifásico usado para a predição do escoamento gás-sólido, consiste num conjunto de equações de conservação da massa e momento para cada uma das fases, formuladas seguindo a aproximação Euleriana-Euleriana. As variáveis fluidodinâmicas foram estimadas pela solução do modelo, com o emprego de correlações empíricas da literatura e disponibilizadas pelo código computacional de CFD, para garantir o fechamento do modelo e sua solução numérica. Desde de que a predição da dinâmica do escoamento complexo, em dutos com alto fluxo ascendente de sólidos não é possível por meio somente de equações fundamentais, a maioria dos modelos requerem entradas empíricas, as quais somente são adquiridas com a experimentação. Estes dados foram obtidos dos estudos de PÄRSSINEN e ZHU (2001). A geometria e a malha numérica estrutural do duto vertical foram geradas pelo *software* (CAD) ICEM, subdividido em DDN (geometria) e Hexa (malha). A adaptação do modelo matemático para a geração do modelo numérico foi alcançada com o uso do simulador comercial CFX 5.7. Os resultados obtidos foram avaliados com respeito à teoria apresentada ao longo da dissertação, sendo finalmente feita uma comparação entre as predições numéricas com o modelo e dados experimentais da literatura.

Palavras Chave: Dinâmica dos fluidos. Escoamento multifásico. Reatores fluidizados. Simulação (computadores). Método dos volumes finitos.

Abstract

The present research presents the mathematical modeling and the simulation of an operation of fast fluidization in a long vertical cylindrical duct line, which is an important operation in many industrial processes, where its main application is tied with the catalytic cracking of oil for gasoline synthesis. It has as objective the attainment of a continuous understanding and knowledge of the development of the gas-solid flow, as well as adding of experiences to research of industrial scale equipments motivated by the possibility of prediction of the performance of this type of flow. The three-dimensional, turbulent and two-phase model used for the prediction of the gas-solid flow, consists of a set of conservation equations of mass and momentum for each phase, which was formulated following the Eulerian-Eulerian approach. The fluid dynamics variables was estimated by the solution of the model with the use of correlations found in the literature and available in the computational CFD code, in order to guarantee the closure of the model and its numerical solution. Since the prediction of the dynamics of the complex flow in ducts with high ascending solid flow is not possible by solely using the basic equations, the majority of the models require the setting empirical, parameters which are acquired only with experimentation. These data were obtained from the studies of PÄRSSINEN and ZHU (2001). The geometry and the structural numerical mesh of the vertical duct was generated by the software (CAD) ICEM, subdivided in DDN (geometry) and Hexa (meshing). The adaptation of the mathematical model for the numerical model generation was reached with the use of the commercial simulator CFX 5.7. The results were evaluated with respect to the theory presented along this dissertation, where comparisons between the numerical predictions with the model and experimental data from the literature were performed.

Key Words: Fluid dynamics. Multiphase flow. Fluidized reactors. Computer simulation. Finite volume method.

Lista de Figuras

- Figura 1. Regimes de fluidização.
- Figura 2. Comportamentos do leito bifásico.
- Figura 3. Classificação de Geldart para as partículas.
- Figura 4. Relação entre forças interparticulares e de corpo.
- Figura 5. Detalhamento das entradas e saídas do equipamento.
- Figura 6. Aparato experimental.
- Figura 7. Fluxograma do processo de simulação CFD.
- Figura 8. Analogia dos campos real e abstrato.
- Figura 9. Célula numérica retirada do sistema.
- Figura 10. Balanço de massa no volume elementar.
- Figura 11. Detalhes da malha numérica.
- Figura 12. Perfil axial de velocidade obtido com diferentes malhas.
- Figura 13. Perfil radial de velocidade obtido com diferentes malhas seção transversal 0,3m.
- Figura 14. Perfil radial de velocidade obtido com diferentes malhas seção transversal 5,0m.
- Figura 15. Perfil radial de velocidade obtido com diferentes malhas seção transversal 9,5m.
- Figura 16. Avaliação das correlações de arraste – seções inferiores do duto.
- Figura 17. Avaliação das correlações de arraste – seções superiores do duto.
- Figura 18. Avaliação radial temporal – seções inferiores do duto.
- Figura 19. Avaliação radial temporal – seções superiores do duto.
- Figura 20. Avaliação axial temporal para o caso 2.
- Figura 21. Avaliação axial temporal para o caso 4.

- Figura 22. Comparação radial do fluxo entre os casos 2 e 4 – seções inferiores.
- Figura 23. Comparação radial do fluxo entre os casos 2 e 4 – seções superiores.
- Figura 24. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 1,53m.
- Figura 25. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 2,73m.
- Figura 26. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 3,96m.
- Figura 27. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 5,13m.
- Figura 28. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 6,34m.
- Figura 29. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 8,74m.
- Figura 30. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 9,42m.
- Figura 31. Perfil axial da fração volumétrica da fase sólida particulada.
- Figura 32. Perfil axial da fração volumétrica da fase sólida particulada – plano em cores.
- Figura 33. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 1,53m.
- Figura 34. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 2,73m.
- Figura 35. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 3,96m.
- Figura 36. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 5,13m.

- Figura 37. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 6,34m.
- Figura 38. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 8,74m.
- Figura 39. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – seção transversal na posição axial 9,42m.
- Figura 40. Perfil axial de velocidade da fase sólida particulada.
- Figura 41. Perfil axial de velocidade da fase sólida particulada – plano em cores.
- Figura 42. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 1,53m.
- Figura 43. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 2,73m.
- Figura 44. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 3,96m.
- Figura 45. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada - caso 5 seção transversal na posição axial 5,13m.
- Figura 46. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 6,34m.
- Figura 47. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 8,74m.
- Figura 48. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 9,42m.
- Figura 49. Perfil axial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5.
- Figura 50. Perfil axial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 – plano em cores.
- Figura 51. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 – seção transversal na posição axial 1,53m.

- Figura 52. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 – seção transversal na posição axial 2,73m.
- Figura 53. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 – seção transversal na posição axial 3,96m.
- Figura 54. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 – seção transversal na posição axial 5,13m.
- Figura 55. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 – seção transversal na posição axial 6,34m.
- Figura 56. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 – seção transversal na posição axial 8,74m.
- Figura 57. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 – seção transversal na posição axial 9,42m.
- Figura 58. Perfil axial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5.
- Figura 59. Perfil axial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 – plano em cores.

Lista de Tabelas

- Tabela 1. Grandezas geométricas.
- Tabela 2. Propriedades físicas.
- Tabela 3. Problemas freqüentes numa planta de processamento de sólidos.
- Tabela 4. Condições típicas de operação.
- Tabela 5. Parâmetros de operação.
- Tabela 6. Modelos matemáticos.
- Tabela 7. Valores das variáveis ϕ , Γ^ϕ e S^ϕ .
- Tabela 8. Condições de contorno.

Nomenclatura

Letras Latinas

<i>A</i>	área superficial, (m^2)
<i>B</i>	soma das forças de corpo
<i>C</i>	constante da correlação da viscosidade turbulenta
<i>Cd</i>	coeficiente de arraste gás – sólido, ($kg.m^3.s^{-1}$)
<i>d</i>	diâmetro, (m)
<i>f</i>	fração volumétrica
<i>g</i>	aceleração gravitacional, ($m.s^{-2}$)
<i>G</i>	módulo de elasticidade partícula-partícula, ($N.m^{-2}$)
<i>k</i>	energia cinética turbulenta, ($m^2.s^{-2}$)
<i>K</i>	constante da correlação de arraste de Massarani e Coelho
<i>l</i>	ponto localizado no centro das faces vizinhas
<i>p</i>	pressão, (Pa)
<i>P</i>	produção de turbulência
<i>Pe</i>	número de Peclet
<i>Re</i>	número de Reynolds
<i>S</i>	termo fonte das equações de transporte, [$(\phi) m^{-3}.s^{-1}$]
<i>t</i>	tempo, (s)
<i>v</i>	velocidade, ($m.s^{-1}$)
<i>x,y,z</i>	direções no eixo cartesiano

Letras Gregas

α	difusividade térmica
β	coeficiente de transferência interfásico
κ	fator de atenuação de tensão
ε	taxa de dissipação de <i>k</i> , ($m^2.s^{-3}$)
ϕ	variável genérica
μ	viscosidade, ($kg.m^{-1}.s^{-1}$)

ρ	massa específica, (kg.m ⁻³)
σ	número de Prandtl turbulento, constante do modelo turbulento k - ε
ξ	direção em um sistema de coordenadas ortogonais
∂	derivada parcial
θ	esfericidade
δ	equação diferencial discretizada

Superescritos

ϕ	variável conservativa
ρ	massa
m	momento

Subscritos

A	área superficial
g	fase gasosa
s	fase sólida
p	partícula
x,y,z	direções no eixo cartesiano
k	energia cinética turbulenta
t	turbulento
ef	efetiva
w,e,s,n,f,b	centros das faces oeste e leste do elemento
P	centro do elemento
μ	viscosidade
ξ	direção em um sistema de coordenadas ortogonais
ε	taxa de dissipação de k
α	fase

Símbolos e Operadores

$\nabla ()$	operador gradiente
$\nabla \bullet ()$	operador divergente
$()^T$	transposição da matriz
Δ	diferença de uma variável

Siglas

CDS	<i>Central Differencing Scheme</i>
CFB	<i>Circulating Fluidized Bed</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DSU	<i>Dense Suspension Uniform</i>
FCC	<i>Fluid Catalytic Cracking</i>
FCCU	<i>Fluid Catalytic Cracking Units</i>
FFB	<i>Fast Fluidized Bed</i>
HFCFB	<i>High Flux Circulating Fluidized Bed</i>
HDCFB	<i>High Density Circulating Fluidized Bed</i>
LFCFB	<i>Low Flux Circulating Fluidized Bed</i>
LDCFB	<i>Low Density Circulating Fluidized Bed</i>
RANS	<i>Reynolds Average Navier-Stokes</i>
RMS	<i>Root Mean Square</i>
UDS	<i>Upwind Differencing Scheme</i>

Capítulo 1.

Introdução

O transporte de sólidos é uma importante operação em um número significativo de processos industriais, como o craqueamento catalítico e a combustão do carvão nas refinarias de petróleo, e a produção de combustíveis sintéticos do carvão em sistemas de conversão energética. A aplicação ainda se estende à secagem e ao transporte pneumático de grãos e outros materiais sólidos.

A fluidização, tipo especializado de transporte de sólidos, é uma operação na qual por meio de uma suspensão gasosa ou líquida, partículas comportam-se como num estado pseudo fluido, ou seja, adquirem um comportamento dinâmico análogo ao dos fluidos, por estarem mergulhadas numa grande porção deste, sendo que estes métodos de contato possuem características diferenciadas. Seu histórico é um tanto conturbado, roubou a cena industrial de maneira bastante significativa em 1942, com o craqueamento catalítico e perdurou desde então incorporada em muitas outras áreas.

Êxitos e fracassos colaboraram com a pesquisa científica de modo que houvesse em tempos atuais muito sobre o assunto relatado na literatura, porém infelizmente existem ainda confusões e contradições acerca de diversos aspectos. Incontáveis correlações são recomendadas, no entanto poucas de maneira a unificar a teoria. A maioria dos experimentos são realizados em escala laboratorial, o que, mesmo com boa ciência dos comportamentos diferenciados entre leitos de tamanhos distintos, interfere na extrapolação para a escala comercial (industrial), levando fatalmente ao insucesso dos projetos.

Davidson, por volta de 1960, explicou acerca do movimento do gás em torno de uma bolha ascendente, o que veio transformar-se no conceito seminal que guiou as pesquisas e avançou na compreensão dos leitos fluidizados, ARASTOPOUR (1982). Era o primeiro de uma classe de modelos fluidodinâmicos, e desde sua introdução muitas extensões e variações foram propostas. Equações para o escoamento multifásico, em geral, foram desenvolvidas e analisadas por vários investigadores.

Na presente pesquisa o alvo principal é a modelagem matemática e simulação da operação de fluidização a um alto fluxo de sólidos em escala industrial, o qual extravasa significativamente o transporte das partículas requerendo o reabastecimento de sólidos no leito, realizada em um longo duto cilíndrico vertical de 10m de altura e 76mm de diâmetro interno. O modelo matemático tem como características principais a tridimensionalidade, a turbulência e a mistura bifásica; consiste num conjunto de equações de conservação da massa e momento para cada uma das fases, formuladas seguindo a aproximação Euleriana-Euleriana. O modelo é consolidado pelo emprego de correlações da literatura e disponibilizadas pelo código computacional CFX 5.7, da ANSYS.

Pretende-se obter uma compreensão contínua e o conhecimento do desenvolvimento do escoamento gás-sólido, assim como somar experiências às pesquisas, motivados pela possível predição do desempenho deste em um longo duto cilíndrico vertical.

Os regimes de escoamento de sólidos, correlações disponíveis para os parâmetros do projeto, dados experimentais e fenômenos associados com o escoamento em um sistema de transporte pneumático de sólidos são discutidos nos capítulos seguintes.

1.1 Fluidodinâmica Computacional

A simulação numérica em mecânica dos fluidos e transferência de calor comporta-se hoje como uma ferramenta para a análise de problemas físicos em nível investigativo científico, e como ferramenta poderosa para a solução de importantes problemas de engenharia, trabalhando de maneira a resolver as equações do escoamento fluido (de maneira especial) sobre uma região de interesse, com condições especificadas nos limites dessa região.

Os avanços dos métodos numéricos, juntamente com o avanço das ciências da computação, estão permitindo que problemas de escoamentos de fluidos com transferência de calor e massa, turbulentos e multifásicos possam ser resolvidos com maior facilidade, integrando as ferramentas de mecânica dos fluidos computacional aos procedimentos de projeto e análise de escoamentos nas mais diversas áreas, como aerodinâmica, automotiva, ambiental, petrolífera, química entre outras (MALISKA, 2004).

Numerosos programas foram desenvolvidos para resolver problemas específicos, ou classes específicas do problema. Em meados dos anos de 1970 a matemática complexa requerida para generalizar os algoritmos começou a ser compreendida, e em uma proposta geral, os *solvers* de CFD foram desenvolvidos. Estes começaram a aparecer no início dos anos de 1980 e solicitaram o que eram então computadores muito poderosos, bem como um conhecimento profundo de fluidodinâmica e quantidades de tempo excessivas para as simulações. Conseqüentemente a CFD era uma ferramenta usada quase que exclusivamente na pesquisa.

Os avanços recentes na computação de alto desempenho, junto com gráficos poderosos e a manipulação 3-D interativa dos modelos, significam que o processo de criar um modelo de CFD e de analisar os resultados é muito menos laboriosa, reduzindo o tempo e conseqüentemente o custo. Os *solvers* avançados contêm algoritmos que permitem a solução robusta do campo do escoamento em um tempo razoável. Devido a estes fatores, a fluidodinâmica computacional é agora uma ferramenta de projeto industrial estabelecida, ajudando a reduzir escalas de tempo do projeto e melhorar processos de engenharia. A CFD fornece uma alternativa eficaz e exata para modelo em escalas de teste, com variações na simulação a qual está sendo executada rapidamente.

Embora métodos computacionais ofereçam muitas vantagens – como redução brusca do tempo e dos custos de novos projetos, capacidade de análise de sistemas onde experimentos são muito difíceis e obtenção de resultados com detalhamento quase ilimitado – o emprego de técnicas experimentais é de suma importância. Isto porque, mesmo que um caso simulado resulte em dados coerentes do ponto de vista numérico, pode-se facilmente obter um resultado inconsistente com a realidade; ou então, mesmo que fisicamente correto do ponto de vista qualitativo, pode apresentar distorção quantitativa com os resultados reais, e divergências como estas só podem ser percebidas quando compara-se os resultados numéricos com experimentos reais (ROSA, 2002).

1.2 Apresentação

Esta pesquisa tem por objetivos a modelagem matemática e a simulação numérica da operação de fluidização rápida a um alto fluxo de sólidos num longo duto cilíndrico vertical, bem como uma compreensão contínua e o conhecimento do desenvolvimento do escoamento gás-sólido, isto sob a motivação da predição de seu desempenho.

Diferentes adequações foram impostas ao modelo matemático, no que diz respeito as equações de fechamento para o arraste gás-sólido, visando encontrar a que melhor represente o processo real.

A seguir apresenta-se uma breve síntese dos capítulos desta pesquisa.

No **Capítulo 2** – apresentam-se os fundamentos teóricos do processo de fluidização, a revisão da literatura sobre os principais aspectos associados e a metodologia empregada pela técnica CFD.

Capítulo 3 – são apresentadas as equações fundamentais de conservação da massa e do momento para cada uma das fases envolvidas, bem como as equações constitutivas de natureza empírica e semi-empírica necessárias para o fechamento do modelo. A previsão do efeito da turbulência sobre o escoamento e o método dos volumes finitos, com respectivos esquemas de interpolação e acoplamento pressão-velocidade também são mostrados. Geração da malha numérica e as condições de contorno para a simulação são apresentados e discutidos ao final deste capítulo.

Capítulo 4 – discussões e resultados são exibidos para a corroboração do modelo matemático bifásico adotado como aproximação da fluidodinâmica do escoamento gás – sólido. Mostram-se dados referentes aos perfis de velocidade e fração volumétrica das partículas no interior do equipamento, axialmente e radialmente.

Capítulo 5 – conclusões e sugestões.

Capítulo 2.

Fundamentação Teórica

Neste capítulo é apresentada a revisão da literatura que trata da fluidização e das principais características desta operação industrial. Faz-se ainda uma avaliação da tecnologia empregada na simulação numérica do fenômeno de fluidização, bem como das motivações que levaram ao seu desenvolvimento.

2.1. Fluidização

O termo fluidização vêm sendo usado na literatura em referência a sistemas densos e diluídos, bem como em sistemas circulantes envolvendo transporte pneumático ou leitos móveis. A fluidização das partículas e a faixa de condições operacionais que sustentam a operação, variam enormemente em sistemas gás-sólido e numerosos fatores as afetam. Primeiramente o tamanho e a distribuição de tamanho dos sólidos. Em geral, partículas finas tendem a despedaçar-se e a formar aglomerados se as mesmas estiverem úmidas ou pegajosas; neste caso, o leito é agitado afim de manter satisfatórias as condições fluidizantes.

Em caminho contrário, leitos com grande uniformidade no tamanho das partículas muitas vezes são de pobre fluidização, com solavancos, repuxos, e intermitências, que podem causar sérios problemas estruturais em leitos amplos. A qualidade da fluidização nestes leitos pode deste modo ser melhorada por adição de uma pequena quantidade de finos para atuarem como lubrificantes, feito isto igualmente para fluidizar partículas grandes em uma faixa muito estreita de taxas de escoamento gasoso.

O segundo fator é a relação das densidades fluido-sólido. Normalmente, sistemas fluidizados gás-sólido exibem heterogeneidades. No entanto, pode haver desvios de norma com baixa densidade de sólidos em gás denso ou alta densidade de partículas em baixa densidade líquida. Outros fatores podem afetar a qualidade da fluidização, tais como

geometria do equipamento, arranjo de entrada do gás, tipos de sólidos utilizados, e escoamento livre de sólidos ou passível de aglomeração.

Para o melhor entendimento dos regimes de fluidização existentes, os quais estão diretamente ligados a taxa de escoamento gasoso, e visualização daquele que é empregado na pesquisa, segue, passo a passo, a caracterização dos leitos fluidizados.

Considerando um fluido escoando em um leito de partículas finas, como mostrado na Figura 1, a uma baixa taxa de escoamento, o mesmo simplesmente percola-se aos espaços vazios das partículas estacionárias, caracterizando o regime em leito fixo, Figura 1(a). Havendo um incremento na taxa de escoamento, ou seja, na velocidade do gás, partículas movimentam-se à parte, com pequena vibração e somente em algumas regiões restritas, o que faz com que a altura do leito levemente aumente. Em uma velocidade um pouco maior que aquela que origina a expansão do leito, um ponto é alcançado onde todas as partículas são claramente suspensas pelo escoamento ascendente de gás. Neste ponto a força friccional entre a partícula e o fluido contrabalança o peso efetivo das mesmas, a componente vertical da força compressiva entre os sólidos adjacentes desaparece e a queda de pressão através de uma determinada seção do leito é igual, por toda a parte, ao peso do fluido e das partículas nesta. O leito é considerado como em estado fluidizado e é chamado de leito à mínima fluidização ou leito em regime particulado, Figura 1(b).

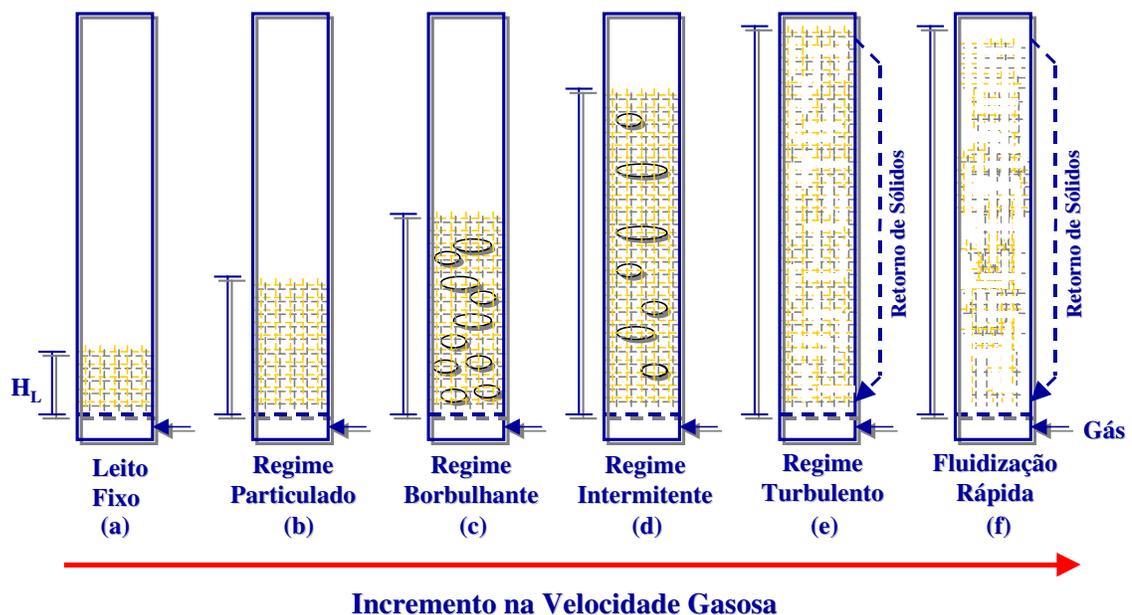


Figura 1. Regimes de fluidização.

Nos sistemas gás-sólido, elevando-se a velocidade do gás além da velocidade de mínima fluidização são observadas muitas instabilidades, como borbulhamento e canalização do gás. À taxas mais altas, a agitação é bem mais violenta e o movimento dos sólidos é mais vigoroso. No entanto, o leito não se expande muito em comparação ao de mínima fluidização, porém o mesmo passa a ser conhecido como leito agregativo, leito fluidizado heterogêneo ou leito borbulhante, Figura 1(c).

Ambos os leitos fluidizados, gasoso ou líquido, são considerados como sendo densos, contanto que seja facilmente identificado um limite superior ou uma superfície para o leito (KUNII e LEVENSPIEL, 1990).

Em sistemas gás-sólido, bolhas de gás coalescem e aumentam de volume enquanto se elevam no leito, e em um leito alto e de diâmetro pequeno elas podem eventualmente aparecer maiores, expandindo-se ao longo do equipamento. No caso de partículas finas, elas escoam suavemente para baixo pela parede do equipamento em torno dos vazios de gás ascendente. Estes tipos de leito são conhecidos como intermitentes, Figura 1(d).

Quando partículas finas são fluidizadas a uma suficiente alta taxa de escoamento de gás, a velocidade terminal dos sólidos é excedida (velocidade constante atingida pela partícula quando lançada no fluido inicialmente em repouso), a superfície superior do leito desaparece e há instabilidade de bolhas. É observado um movimento de aglomerados sólidos e vazios de gás de vários tamanhos e formas. Assim caracteriza-se o leito fluidizado turbulento, Figura 1(e). Com o favorecimento do incremento na velocidade do gás, sólidos são transportados para fora do leito juntamente com o mesmo. Neste estado tem-se um leito fluidizado disperso ou diluído, com transporte pneumático de sólidos, Figura 1(f).

Em ambos os leitos, turbulento e disperso, uma ampla quantidade de partículas estão aglutinadas, o que evita a operação em estado permanente. Para se operar em estado estacionário neste modo de contato de fases, as partículas aglutinadas devem ser separadas por ciclones e retornarem ao leito. Em leitos fluidizados turbulentos, ciclones internos podem conduzir a uma moderada taxa de aglutinação e este sistema é algumas vezes chamado de leito fluido. Por outro lado, a taxa de aglutinação é mais avançada em leitos fluidizados dispersos, no qual é usualmente necessária a utilização de grandes ciclones coletores no lado de fora do equipamento. Este tipo de sistema é conhecido como leito fluidizado rápido.

Em leitos fluidos e de rápida fluidização, a recirculação suave e permanente de sólidos por meio de uma pequena seção tubular ou de outros dispositivos é crucial para a boa operação. Estes leitos são chamados de leitos fluidizados circulantes. Sistemas circulantes são empregados principalmente em reações entre catalisadores sólidos e gás. O catalisador escoo suavemente e continuamente entre um circuito reator e regenerador – como nas unidades de FCC (FCCU). Devido ao grande calor específico dos sólidos, seu escoamento é rápido entre o reator e o regenerador podendo transportar uma vasta quantidade de calor de um para outro, e deste modo eficientemente controlar a temperatura do sistema.

2.2. Comportamento Pseudo Fluido

Um leito fluidizado gasoso denso pode ser aproximado como sendo um líquido fervente ou, como visto em vários trabalhos, como um material sujeito a comportamento análogo ao dos fluidos. Um objeto leve, ou seja, menos denso que o fluido, é facilmente empurrado no interior de um leito e, solto, irá aparecer subitamente na superfície superior deste flutuando, Figura 2(a). Quando o recipiente está inclinado, a superfície superior do leito permanece horizontal, Figura 2(b), e quando dois leitos são conectados estes níveis se igualam, Figura 2(c). Igualmente, a diferença na pressão entre quaisquer pontos no leito é rigorosamente igual, em níveis iguais. O leito bifásico (gás-sólido) da mesma maneira tem propriedades de escoamento de um fluido. Este comportamento admite vários esquemas de contato entre as fases, incluindo estágios de contato contracorrente, concorrente e circulação de sólidos entre dois leitos.

O comportamento pseudo fluido de sólidos com sua rapidez, fácil transporte e seu contato íntimo com o gás é freqüentemente a mais importante propriedade recomendada de fluidização nas operações industriais (KUNII e LEVENSPIEL, 1990).

Esta aproximação de estado também é muito importante para o modelo matemático, visto que com esta a possibilidade da aplicação das equações de Navier-Stokes para o movimento dos fluidos à fase particulada torna-se real. A princípio, o problema gás-sólido denso poderia ser resolvido empregando-se as equações do movimento de Newton para cada partícula suspensa, e as equações de Navier-Stokes para a fase gasosa. No

entanto, devido ao grande número de partículas, a quantidade de equações resultante seria muito ampla para permitir uma solução direta, ao menos nos computadores disponíveis atualmente (ROSA, 2002); assim a fase particulada também é tratada como um meio contínuo, sujeito às equações de conservação análogas as do meio fluido.

Dentro desta hipótese aplicada ao modelo, uma implicação à fase sólida particulada é imposta: a propriedade física viscosidade dinâmica, μ_s . Sabe-se que sólidos não apresentam tal propriedade, ou seja, são invíscidos, porém demonstram uma certa resistência ao escoamento quando da proximidade das partículas, a qual é função da porosidade do leito, caracterizando uma propriedade bastante compatível à viscosidade dos fluidos. Aconselha-se devido à influência causada no leito denso pela resistência sólida ao escoamento das demais partículas o emprego de um valor não nulo para tal propriedade física, a qual é de difícil caracterização. No entanto, esta viscosidade dinâmica deve ser atribuída à fase sólida particulada (fase contínua) com um valor insignificamente pequeno. Isto é permissível porque a física é dominada por efeitos interfásicos do arraste e da turbulência.

A determinação precisa da viscosidade efetiva da fase sólida particulada é fundamental na obtenção da distribuição radial de partículas e, conseqüentemente, de todas as variáveis fluidodinâmicas (ALVES, 1998).

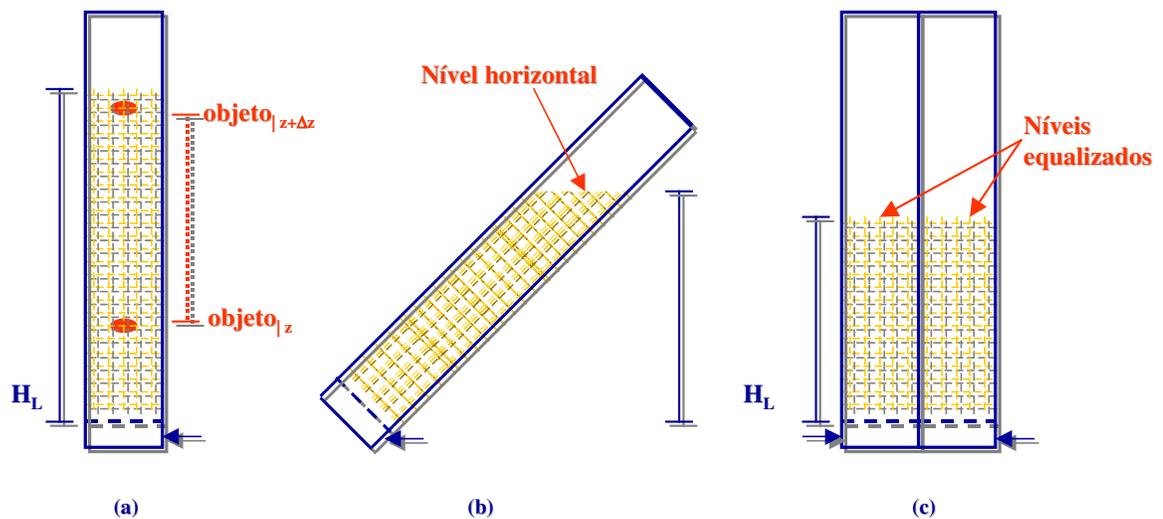


Figura 2. Comportamentos do leito bifásico.

2.3. Classificação dos Sólidos por Geldart

A classificação das partículas segundo Geldart, divide o comportamento em leitos fluidizados densos em quatro grupos distintos, baseada no procedimento padrão de fluidização e no tamanho dos sólidos, e aplicada à condição ambiente (KNOWLTON, 2005). A Figura 3 mostra o gráfico onde é relacionada a diferença de massa específica entre gás e sólido com o diâmetro das partículas.

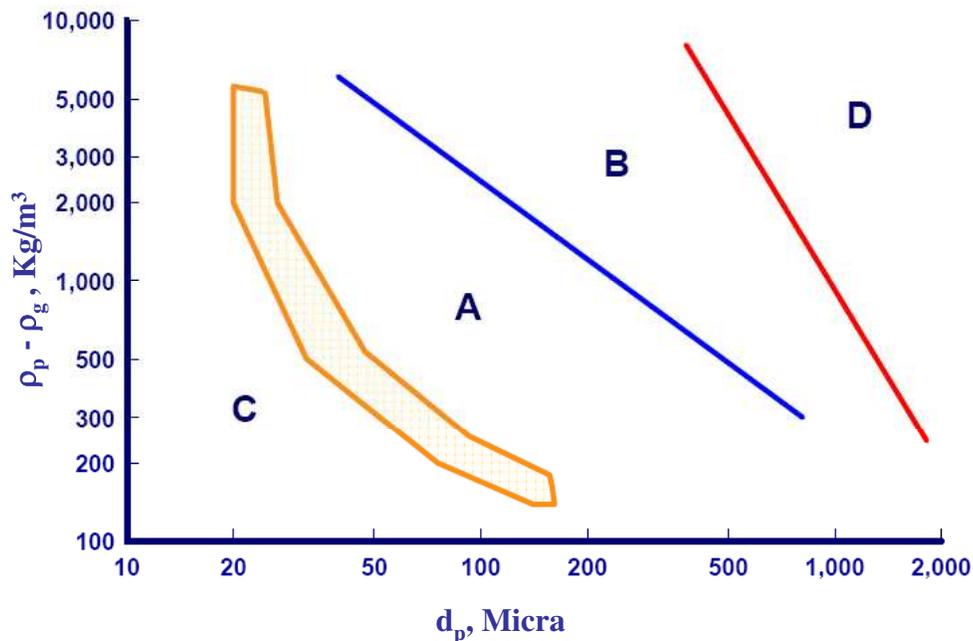


Figura 3. Classificação de Geldart para as partículas.

As características marcantes das partículas pertencentes aos quatro grupos distintos A, B, C e D são apresentadas abaixo separadamente e de acordo com a ordem da Figura 3, de maneira a facilitar a visualização e o entendimento.

Grupo C:

- Partículas coesivas e de difícil fluidização;
- Canalização de gás e refluxos ocorrem a velocidades baixas;
- Dificuldade no escoamento de sólidos devido estes materiais formarem pontes estáveis;
- Pós finos e cinzas são típicos do grupo.

Grupo A:

- Partículas entre 30 e 100 micra;
- Boa fluidização com bolhas pequenas (catalisadores FCC);
- Não defluidizam imediatamente quando o gás fluidizante é excluído (cortado),
- Não forma bolhas no leito imediatamente após excedida a velocidade mínima de fluidização.

Grupo B:

- Partículas entre 100 e 1000 micra;
- Defluidização quase que instantânea, após corte do gás;
- Formam bolhas no leito imediatamente após excedida a velocidade mínima de fluidização;
- Produzem bolhas maiores do que o grupo A.

Grupo D:

- Partículas maiores que 1000 micra;
- Em geral, a amplitude do tamanho das partículas:
 - são bem maiores do que as da velocidade mínima de fluidização;
 - são maiores do que as bolhas no material.

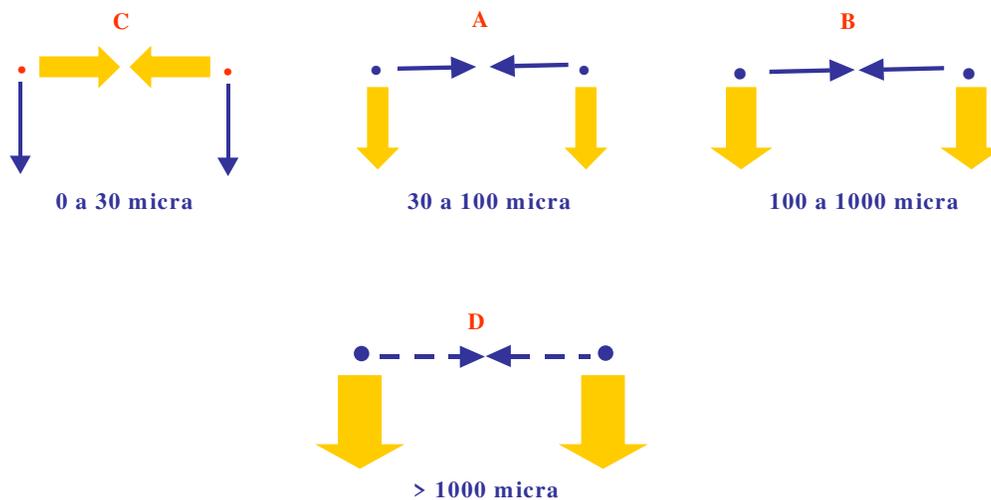


Figura 4. Relação entre forças interparticulares e de corpo.

Na Figura 4, se apresenta de maneira esquemática a diferença entre as forças interparticulares e as forças de corpo, funções do diâmetro e peso da partícula, impostas a duas partículas próximas. Nota-se que quanto menor for o tamanho das partículas maior será a coesão entre elas, ou seja, seqüencialmente haverá maior propensão coesiva do grupo C, devido a superioridade das forças de van der Waals (interparticular), e gradativamente as forças de corpo se sobressaem respectivamente para o grupo A, grupo B e grupo D. Este é um fator bastante importante para o desempenho da operação de fluidização, pois influencia diretamente outros, como a velocidade de entrada do gás, o fluxo de partículas e a formação de heterogeneidades.

2.4. Simulação

Métodos empregados por engenheiros químicos para a concepção, desenho e operação de processos químicos tem recebido mudanças significativas nos últimos anos. Princípios físicos, básicos e complexos, vêm sendo empregados e novas técnicas estão se tornando praticáveis. A aplicação de muitas destas técnicas é chamada de simulação ou análise de processos, a qual nos referenciamos à aplicação de métodos científicos para o reconhecimento, definição de problemas e o desenvolvimento de procedimentos para sua solução; mais detalhadamente, temos:

- Especificação matemática do problema para a dada situação física;
- Análise detalhada para a obtenção das adequações matemáticas;
- Síntese e apresentação de resultados para assegurar a compreensão completa.

Ou seja, um estudo de um sistema ou este em partes por manipulação de representações matemáticas ou modelos físicos. O processo denota uma atual série de operações ou tratamentos de materiais como contrastado com o modelo, juntamente representando uma descrição matemática do processo real (HIMMELBLAU e BISCHOFF, 1968).

O modelo simulado consiste basicamente de um escoamento turbulento, onde duas fases entram em contato, uma gasosa formada por ar à 25° C com umidade controlada de 70%, e outra particulada composta por catalisadores. Devido a força imprimida pela fase fluida, a qual vence o peso efetivo das partículas, as mesmas ganham aceleração e movem-se na direção do fluxo, caracterizando o regime de fluidização rápida num curto espaço de tempo ao longo do equipamento.

No duto cilíndrico vertical as alimentações das fases são realizadas pela base, formando ângulos em relação ao mesmo de 0°, fase gasosa, e 45°, fase particulada, a saída é única na parte superior, num ângulo de 90°, como apresentado na Figura 5.

O comportamento dinâmico de um leito fluidizado bifásico (gás-sólido) é definido por uma complexa interação entre suas fases individuais. Observam-se tendências diferentes tanto na direção axial quanto na radial, como alterações dos perfis das propriedades. Este comportamento se deve à instabilidade inercial da fase gasosa, entretanto quando a concentração de partículas é alta, acima de 20%, elas interagem entre si por colisões e tanto os efeitos inerciais quanto os viscosos são completamente dominados por contribuições da fase sólida particulada. O gás, por sua vez, responde a estas flutuações como um participante passivo na turbulência, enquanto o gradiente de pressão gasoso é o agente propelente do escoamento, e em uma última análise na fonte de energia para as flutuações turbulentas, o papel do gás na geração destas é de forma indireta. Com o estabelecimento da turbulência, há um espalhamento das partículas próximas ao eixo que corresponde ao aumento na concentração de partículas junto às paredes, para manter o balanço de forças no sentido axial.

A distribuição axial dos sólidos pode ser geralmente descrita como havendo uma região densa na base se estendendo pelo volume do duto vertical e outra diluída no seu topo. Na região densa o comportamento dinâmico varia enormemente com as condições de operação, principalmente pelas propriedades da mistura. Já a região diluída contém apenas partículas oriundas da região densa, porém em alguns casos, o topo pode conter concentrações densas de particulados, dependendo da sua configuração geométrica, sendo os limites entre estas duas regiões, bem mais visível para sistemas com partículas grandes e/ou densas do que para as pequenas e/ou leves.

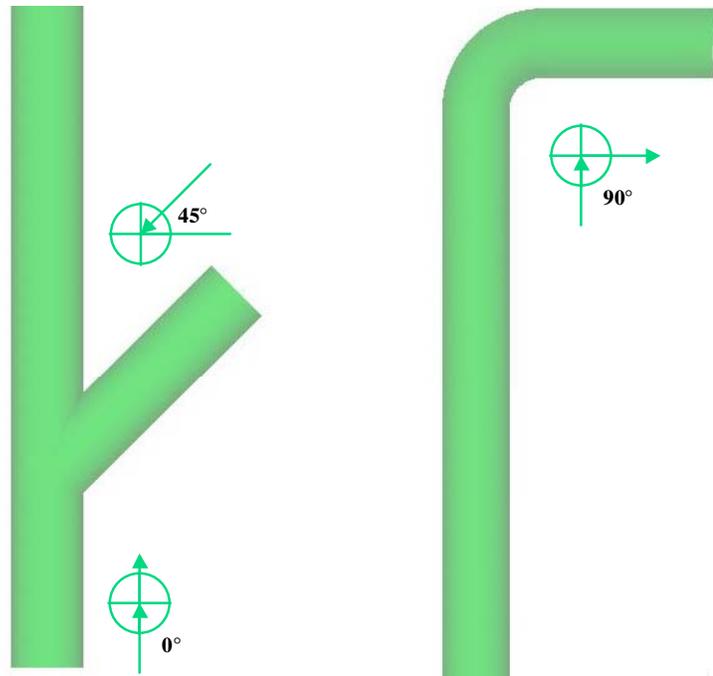


Figura 5. Detalhamento das entradas e saída do equipamento.

Num fluxo constante de $300\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ de sólidos, PÄRSSINEN e ZHU (2001) observaram que para o aumento da velocidade do gás as regiões densa e diluída começam em níveis axiais mais baixos, sugerindo um desenvolvimento mais rápido do escoamento. No entanto, quando o fluxo de sólidos aumenta não há mudança significativa nos testes padrões do desenvolvimento sob velocidade do gás constante. O teste mostra claramente que a aceleração da partícula (consequentemente o desenvolvimento do fluxo) parte do centro e estende-se então à parede. Isto dita o desenvolvimento dos perfis radiais de velocidade da partícula (PÄRSSINEN e ZHU, 2001).

Como relatados por ZHOU *et al.* (1994), a concentração de partículas aumenta com a taxa crescente de circulação de sólidos, com mudanças maiores próximo às paredes, formando-se agregados de partículas concentradas (*clusters*); a velocidade de deslizamento entre gás-sólido é maior, devido a diminuição da velocidade do gás perto das paredes com a taxa crescente de circulação de sólidos. A velocidade ascendente da partícula diminui, quando o valor descendente desta aumenta ligeiramente com a taxa crescente de circulação de sólidos (ZHOU e GRACE, 1995).

O escoamento radial é definido por *core-annulus* (centro-anular), ou seja, há uma região central diluída de sólidos, em que as partículas existem de forma dispersa, com altas velocidades tanto de fluido quanto de sólido. Uma forte segregação de catalisadores em direção às paredes pode ser encontrada, o mesmo tipo de comportamento radial de sólidos em uma região diluída do núcleo, cercados por *annulus* relativamente denso, são encontrados no equipamento (ISSANGYA *et al.*, 2000).

A região central, por sua vez, é envolta por outra mais densa, os sólidos nesta região aceleram ao ponto de conduzir a uma formação de um perfil radial pseudo linear da velocidade, sendo que junto à parede do equipamento existe escoamento lento de sólidos em fluxo descendente (WEI *et al.*, 1997 e CHENG *et al.*, 1998), notadamente para concentrações acima de $f_s \gg 6\%$ (WANG *et al.*, 1998). Na região anular do escoamento, o perfil assume um comportamento parabólico, o mecanismo de mistura entre as fases é dominado pelas dispersões axial e radial que ocorrem, basicamente, devido a agregação de particulados (WEI *et al.*, 1995). Esse fenômeno de agregação e conseqüente recirculação de catalisador acaba comprometendo o desempenho da operação, oferecendo uma distribuição não uniforme de concentração de sólidos, aumentando a distribuição do tempo de residência de particulados e conseqüentemente, elevando o seu tempo de residência médio no equipamento.

As principais dificuldades em modelar o escoamento multifásico empregando a técnica CFD são:

- Geometria necessita um grande número de células em uma das direções devido a altura do equipamento;
- A região densa apresenta intensa turbulência e as não homogeneidades resultam em fortes gradientes de concentração e velocidade, atrapalhando a convergência da solução numérica;
- Necessidade de equações constitutivas mais gerais.

2.4.1. Aparato Experimental

O diagrama esquemático do aparato experimental usado na pesquisa de PÄRSSINEN e ZHU (2001) e utilizado como estudo de caso experimental deste trabalho é mostrado na Figura 6. O sistema de circulação de sólidos consiste em dois longos dutos cilíndricos verticais, com escoamento ascendente, e um com escoamento descendente, de diâmetros internos de 76mm, 203mm e 320mm respectivamente, no entanto para a pesquisa corrente as medições foram tomadas somente no duto de fluxo ascendente de 76mm de diâmetro interno.

Os sólidos são catalisadores de FCC – zeólitas, que percorrem uma curta seção inclinada de tubo, para adentrar na base do duto de pesquisa, numa altura de 0,17 – 0,25m e serem acelerados pela massa gasosa.

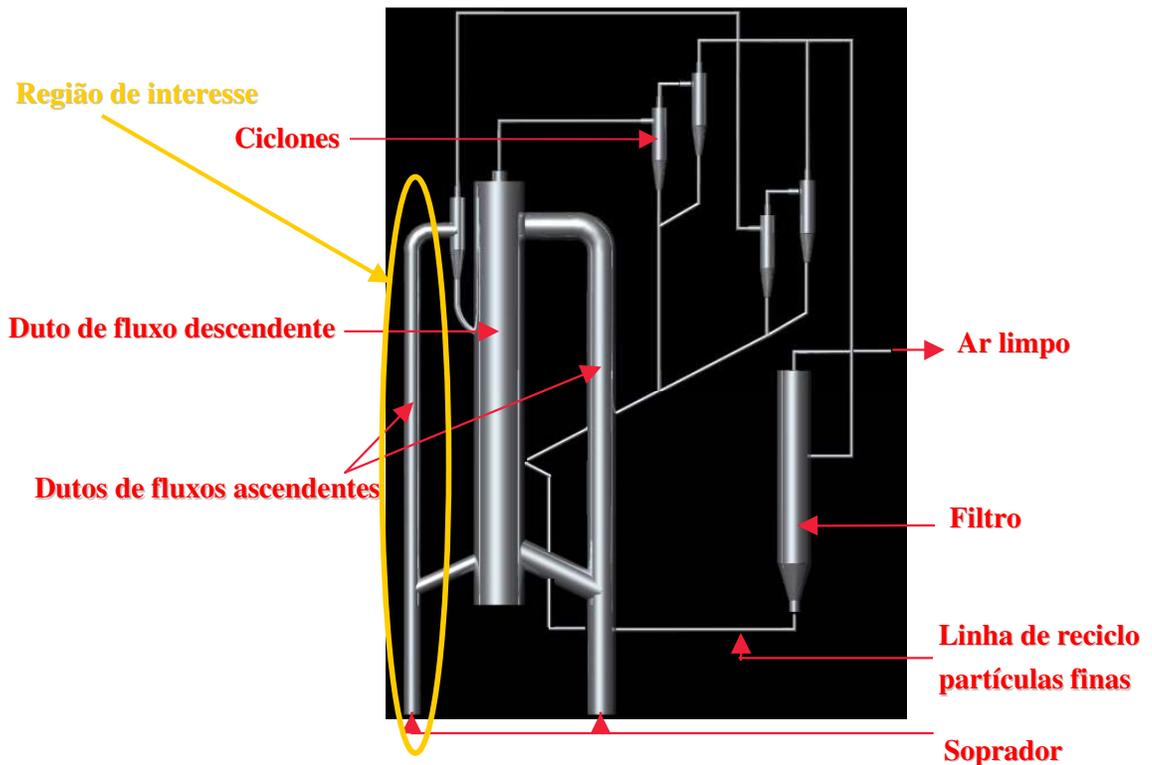


Figura 6. Aparato experimental.

Após a mistura inicial e aceleração, as partículas rumam ao topo da coluna, onde passam por uma saída em 90°, juntamente com o gás, e são separadas por um primeiro ciclone, um segundo e terceiro ciclones garantem a quase total remoção destas que ao final são transportadas para o filtro. Na base deste último, de grande capacidade, partículas finas que são coletadas retornam por meio do tubo de descida ao processo.

As medições de PÄRSSINEN e ZHU (2001) foram tomadas em sete níveis axiais do equipamento ($z = 1,53; 2,73; 3,96; 5,13; 6,34; 8,74$ e $9,42\text{m}$) e onze posições radiais ($r/R = 0,00; 0,16; 0,38; 0,5; 0,59; 0,67; 0,74; 0,81; 0,87; 0,92$ e $0,98$), em cada nível e posição contando com sondas constituídas de fibras ópticas para tal.

A Tabela 1 define as grandezas geométricas do equipamento, proposto por PÄRSSINEN e ZHU (2001) e as propriedades físicas estão relacionadas na Tabela 2.

Tabela 1. Grandezas geométricas, (PÄRSSINEN e ZHU, 2001).

Altura	10m
Diâmetro interno	76mm
Altura da entrada lateral (ponto alto)	0,25m
Altura da entrada lateral (ponto baixo)	0,17m

Tabela 2. Propriedades físicas, (PÄRSSINEN e ZHU, 2001).

Fluxo de catalisador	$300\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
Viscosidade dinâmica da fase sólida particulada	viscosa: $0,5\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ invíscida
Massa específica da partícula	$1500\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
Diâmetro da partícula	$67\mu\text{m}$
Viscosidade dinâmica do gás	$1,85 \times 10^{-5}\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
Massa específica do gás	$1,17\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$

2.5. Revisão

Processos comerciais que envolvem o contato gás-sólido são extremamente difíceis de operar, os que incorporam leitos fluidizados e ou reciclo de sólidos e sistemas de transporte estão entre os mais complexos, e sabe-se ainda que a grande maioria dos problemas de desempenho em plantas de processamento de sólidos são causados por dificuldades no escoamento e não por processos químicos. A Tabela 3 apresenta dados referentes aos tipos de problemas mais freqüentes (KNOWLTON, 2005), demonstrando concordância com a afirmação anterior.

A implementação da operação de fluidização em processos industriais já passa dos sessenta anos de experiência, tendo sofrido um desenvolvimento quase que contínuo. Em sua aplicação mais considerável, o craqueamento catalítico, esta implementação garantiu que este resultasse no maior processo de conversão no refino do petróleo, tornando-se indispensável às refinarias.

Tabela 3. Problemas freqüentes numa planta de processamento de sólidos.

% Problemas na Planta⁴	Nº de ocorrências
“Problemas Não Químicos”	
Falhas na Transferência de Sólidos	52
Falha de Equipamento Mecânico	48
Conexão de Entrada de Sólidos	45
Manipulação de Finos e Cinzas	23
“Problemas Químicos”	
Corrosão/Erosão	29
Outras Falhas no Processo Químico	6

O interesse é realçado quando toma-se ciência de que em torno de 30% de todo o petróleo refinado no mundo é processado em dutos com fluxo ascendente, isto significa o

⁴ O problema de desempenho foi definido como sendo qualquer um que cause uma parada da planta por 1 semana ou mais.

equivalente a 10 milhões de barris / dia em mais de 350 unidades. Somente a PETROBRAS (Petróleo Brasileiro S.A.) tem em suas dez refinarias uma capacidade de craqueamento catalítico de 420.000 barris / dia (MARTIGNONI, 1998).

Na literatura inúmeros livros e artigos relatam extensivamente acerca do transporte gás-sólido, apresentando medições experimentais, desenvolvimento de correlações empíricas e semi-empíricas e modelos matemáticos baseados nos princípios de conservação para o escoamento multifásico; porém existe uma grande lacuna quanto aos escoamentos desenvolvidos em leito fluidizado em escala industrial, operantes em regime de alto fluxo de sólidos, principalmente no que se diz respeito a dados experimentais, peça chave para a validação e verificação de modelos matemáticos.

O conceito da operação em alta densidade – *High Density Circulating Fluidized Bed* – HDCFB – foi proposto por BI e ZHU (1995), para distinguir o alto fluxo – *High Flux Circulating Fluidized Bed* – HFCFB – e as condições de operação em alta densidade encontradas na maioria dos leitos fluidizados industriais, dos baixos fluxos – *Low Flux Circulating Fluidized Bed* – LFCFB – e operações em baixa densidade – *Low Density Circulating Fluidized Bed* – LDCFB – estudados na maioria dos casos laboratoriais. Empregaram um fluxo de sólidos igual a $200\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ e uma fração volumétrica dos mesmos entre 3 e 5% na seção desenvolvida do duto vertical, para demarcar a operação HDCFB da LDCFB, após uma série de estudos detalhados no equipamento.

GRACE *et al.* (1999) definiram a operação HDCFB como a operação com fluxo de sólidos superior a $200\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ e fração volumétrica superior a 10% em toda extensão do duto. Para caracterizar o comportamento do escoamento, GRACE *et al.* (1999) propuseram uma suspensão densa em regime ascendente – *Dense Suspension Uniform* – DSU – definindo-a como um escoamento ascendente líquido de sólidos através do reator por completo, e a concentração total de sólidos numa ordem de 15 a 25% por todo o volume, com pouca variação axial.

Observou-se na operação em regime de alto fluxo que não há combinação com o regime DSU, mesmo que as duas condições operantes, fluxo de sólidos e velocidade da fase gasosa, sejam iguais. Por outro lado, a estrutura do fluxo de concentração na seção densa desenvolvida observada na pesquisa corresponde bem com o regime DSU; como exemplo, o fluxo líquido de sólidos é claramente ascendente em todas as posições radiais, como no

regime DSU, mas diferente do leito fluidizado rápido – *Fast Fluidized Bed* – FFB – onde há escoamento descendente. Os perfis radiais das concentrações de sólidos e os fatores de deslizamento são também bastante similares, embora não inteiramente idênticos àqueles do DSU.

Pesquisas experimentais vêm sendo realizadas desde a década de 1940, quando da introdução dos leitos fluidizados em seus processos, pelas grandes indústrias. Elas diferem-se basicamente entre si nas dimensões dos equipamentos (altura e diâmetro) – escalas laboratorial e industrial – nas suas condições operacionais e nas propriedades físicas das fases, as quais ao longo dos anos variaram bastante devido aos melhoramentos dos processos. Segundo DASGUPTA *et al.* (1994), as condições típicas de operação industrial em um leito fluidizado rápido são mostradas na Tabela 4.

Tabela 4. Condições típicas de operação.

Densidade das partículas	1100 – 1500kg.m ⁻³
Diâmetro médio das partículas	50 – 100µm
Diâmetro do tubo	0,2 – 2,0m
Velocidade mínima de arraste	5 – 20cm.s ⁻¹
Velocidade mínima superficial do gás	7 – 18m.s ⁻¹
Fluxo líquido de sólidos	400 – 1400kg.m ⁻² .s ⁻¹
Densidade aparente da suspensão	160 – 650kg.m ⁻³ (base) 50 – 80kg.m ⁻³ (topo)

As equações para o escoamento multifásico foram objeto de análise de vários investigadores, dentre estes GIDASPOW (1976), ARASTOPOUR (1979), THEOLOGOS e MARKATOS (1993), ALI e ROHANI (1997), porém a aproximação matemática deste tipo de escoamento é creditada originalmente à SOO (1967) e JACKSON (1963).

RIETEMA e AKKER (1983) apresentaram os detalhes da derivação das equações de momento para sistemas bifásicos dispersos, MICHAELIDES (1984) desenvolveu um modelo baseado nos métodos fenomenológicos para o procedimento da variação da densidade em linhas pneumáticas de transporte, e CROWE (1982) revisou os modelos

numéricos para o escoamento diluído entre gás e partículas. O efeito da turbulência no movimento das partículas em suspensão gás-sólida foi analisado por YOSHIDA e MASUDA (1980), CROWE (2000) e ZHANG E REESE (2003).

ARASTOPOUR e GIDASPOW (1979) foram os primeiros a aplicar as equações fluidodinâmicas multifásicas para um sistema diluído gás-sólido e compararam os valores preditos com dados experimentais disponíveis. IRONS e CHANG (1983) compararam valores preditos usando equações para o escoamento bifásico em uma linha de transporte pneumático com dados experimentais para estimar a força friccional entre as partículas. No entanto, o desenvolvimento da aproximação fluidodinâmica para sistemas gás-sólido ainda é lento, e isto pode ser atribuído à complexidade do escoamento da mistura, especialmente em leitos densos.

O escoamento multifásico não-homogêneo refere-se ao caso onde são separados os campos de velocidade e outros campos relevantes existentes para cada fluido, o campo da pressão, no entanto, é compartilhado por todos. Os fluidos interagem via termos de transferência interfásicos. Devido a rara ocorrência na prática de um leito homogeneizado, ou seja, leito uniforme – ondas concentram-se e movem-se para cima através do leito e tomam a forma de regiões compactadas de baixa concentração de partículas, alternando zonas de alta e baixa concentração de partículas, assim como regiões de alta concentração de partículas (*clusters*). Estes efeitos afetam significativamente a dinâmica do leito, sendo objeto de recentes pesquisas.

LI e KUIPERS (2003) observaram a ocorrência dessas estruturas heterogêneas num escoamento gás-sólido e concluíram que as mesmas afetam seriamente o contato entre fases e o processo de transporte no leito gasoso denso fluidizado. A dissipação colisional intensifica dramaticamente a formação de estruturas heterogêneas depois da quebra do equilíbrio do sistema. As estruturas dependem de alguma forma do balanço de forças locais atuantes sobre as partículas, por esta razão a quantificação precisa do arraste de gás atuante nas partículas em uma dada região é a chave para se entender as interações gás-sólido num escoamento particulado denso. Esta região tem efeito impactante sobre a transferência de calor e massa entre as fases.

Correntemente, os dois métodos mais difundidos para a modelagem matemática da fase particulada em simulações numéricas de escoamentos gás-sólido são a simulação da

partícula discreta e a aproximação de dois fluidos. Em ambas as aproximações a fase gás é descrita por uma média local da equação de Navier-Stokes e as duas fases são usualmente acopladas por uma força de arraste. Em geral, o desempenho dos modelos correntes dependem criticamente da exatidão na formulação da força de arraste.

A Tabela 5 e a Tabela 6 apresentam, respectivamente, pesquisas realizadas em torno dos parâmetros de operação e modelos matemáticos adotados na operação de fluidização rápida, referenciando os pesquisadores e as características dos mesmos.

Tabela 5. Parâmetros de operação.

Parâmetro	Referências	Valores para FFB
Densidade da partícula (kg.m^{-3})	GRACE <i>et al.</i> (1995) GAO <i>et al.</i> (1999) ALI e ROHANI (1997)	1100 – 1500 1545 – 1715 970
Diâmetro da partícula (μm)	GRACE <i>et al.</i> (1995) FAN <i>et al.</i> (2002)	60 – 70 30 – 90
Velocidade superficial do gás (m.s^{-1})	GRACE <i>et al.</i> (1995) GAO <i>et al.</i> (1999) THEOLOGOS <i>et al.</i> (1993)	8 – 18 3,5 – 4,5 50
Fluxo líquido de sólidos ($\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$)	GRACE <i>et al.</i> (1995) GAO <i>et al.</i> (1999) FAN <i>et al.</i> (2002)	400 – 1400 10 – 98 45 – 213
Altura do reator (m)	GAO <i>et al.</i> (1999) THEOLOGOS <i>et al.</i> (1993) ALI e ROHANI (1997)	11 – 11,5 50 33
Diâmetro do reator (m)	GAO <i>et al.</i> (1999) THEOLOGOS <i>et al.</i> (1993)	0,14 – 0,31 1,24

Tabela 6. Modelos matemáticos.

Modelo	Referências	FFB
Aproximação	SAMUELSBERG <i>et al.</i> (1996) GAO <i>et al.</i> (1999)	2 fluidos
Turbulência	THEOLOGOS <i>et al.</i> (1993) SAMUELSBERG <i>et al.</i> (1996)	k- ϵ
Arraste	NIVEN (2002) ZHANG e REESE (2003) GIDASPOW e NERI (2000) ZHANG e REESE (2003) MASSARANI e COELHO (2002) ROPELATO (2004)	Wen e Yu Gidaspow Massarani e Coelho

2.6. Metodologia CFD

A fluidodinâmica computacional pode ser empregada na determinação do desempenho de um componente no estágio do projeto ou na análise de problemas com um componente existente e conduzi-las a seu projeto melhorado. A primeira etapa é a identificação da região de interesse, definindo assim a geometria desta.

A etapa seguinte consiste na geração da malha numérica e sua importação para o pré-processador do simulador comercial, outros elementos serão definidos neste, incluindo as condições de contorno e as propriedades fluidas. A solução do escoamento funciona para produzir um arquivo de resultados que contenham a variação da velocidade, concentração, pressão e de todas as outras variáveis desejadas por toda a região de interesse.

Os resultados fornecem uma compreensão completa do comportamento do fluido por toda esta região, o que conduz às modificações de projeto que podem ser testadas mudando a geometria do modelo fluidodinâmico e observando os efeitos. O processo de execução de uma única simulação é dividida em quatro componentes, de acordo com a Figura 7.

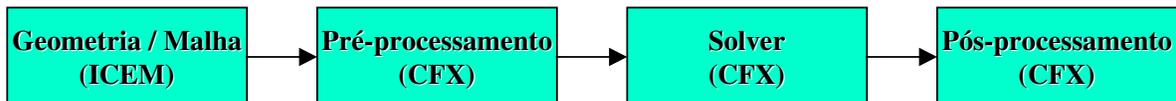


Figura 7. Fluxograma do processo de simulação de CFD.

2.6.1. Geração da Geometria e Malha Numérica

Este processo iterativo é o primeiro estágio do pré-processamento. Seu alvo é produzir uma malha para a entrada no pré-processador. Antes que uma malha possa ser produzida, um sólido geométrico fechado é requerido. A geometria e a malha foram criadas em *softwares* especializados, DDN e Hexa respectivamente, no entanto, uma variedade de outras ferramentas de criação de geometrias / malhas existe para tal função.

As etapas básicas envolvem:

- Definição da geometria da região do interesse;
- Criação de regiões de escoamento fluido, regiões contínuas e os nomes das superfícies de contorno;
- Ajuste das propriedades para a malha. Este estágio do pré-processamento está se tornando cada vez mais automatizado. No CFX-5.7, a geometria pode ser importada da maioria dos pacotes principais de CAD usando o formato nativo, e a malha de volumes de controle é gerada automaticamente.

2.6.2. Pré-Processamento

Este processo interativo é o segundo estágio do pré processamento, o propriamente dito, e é usado para criar a entrada para o *solver*. Os arquivos da malha são carregados no pré-processador, CFX-Pre, e as seguintes propriedades são definidas:

- Os modelos matemáticos a serem incluídos na simulação;
- As propriedades dos fluidos;
- E as condições de contorno.

2.6.3. Solver

O *solver* é o componente que resolve o problema de CFD, produzindo os resultados requeridos, em um processo não-interativo por batelada. Resolve o problema de CFD como segue:

- As equações diferenciais parciais são integradas por todos os volumes de controle da região do interesse. Isto é equivalente a aplicar uma lei básica de conservação (por exemplo para a massa ou o momento) a cada volume de controle;

- Estas equações integrais são convertidas a um sistema de equações algébricas gerando um jogo de aproximações para os termos nas equações integrais;
- As equações algébricas são resolvidas iterativamente. Uma aproximação iterativa é requerida por causa da natureza não-linear das equações e quando a solução se aproxima de um valor constante ela é dita convergente. Para cada iteração, um erro, ou o residual, são relatados como uma medida da conservação total das propriedades do escoamento. Para a proximidade da solução final depende-se de um número de fatores, incluindo o tamanho e a forma dos volumes de controle e do tamanho dos residuais finais. Os processos físicos complexos, tais como a combustão e a turbulência, são modelados frequentemente usando relacionamentos empíricos, e as aproximações inerentes nestes modelos contribuem também às diferenças entre a solução de CFD e o escoamento real. O processo de solução não requer nenhuma interação do usuário e conseqüentemente é realizado geralmente como um processo de grupo. O solver produz um arquivo de resultados que são transferidos então ao pós-processador.

2.6.4. Pós-Processamento

O pós-processador é o componente usado para analisar interativamente, visualizar e apresentar os resultados. O pós-processamento inclui desde a obtenção de valores nos pontos às seqüências animadas complexas. Os exemplos de algumas características importantes dos pós-processadores são: visualização do volume da geometria e dos volumes de controle, o vetor traça um gráfico a fim de mostrar o sentido e o valor do fluxo, visualização da variação das variáveis escalares (variáveis que têm somente o valor, não sentido, tal como a temperatura, a pressão e a velocidade) com o domínio, cálculos numéricos quantitativos, cartas que apresentam lotes gráficos das variáveis, animação e saída impressa.

Capítulo 3.

Modelagem Matemática e Numérica

Este capítulo trata das adequações matemáticas impostas ao modelo matemático para a simulação numérica do leito fluidizado bifásico em duto vertical. Nas equações de fechamento, no que se refere as correlações de arraste gás-sólido, foram implantadas três diferentes destas, afim de comprovar de melhor forma o comportamento das partículas no interior do equipamento.

A modelagem matemática consiste na descrição de um processo no campo real sob a forma matemática no campo abstrato, conforme representado na Figura 8, em outras palavras, é uma representação de uma situação física na forma de um conjunto de equações, ou seja, uma idealização da realidade. Já a modelagem numérica consiste de um método capaz e eficiente para solucionar este conjunto de equações, que formam o modelo matemático.

Especificamente a modelagem matemática do problema com base na realidade física (campo real); tratamento e solução do modelo matemático (campo abstrato); e a interpretação dos resultados com inferência e atuação sobre o processo refere-se à simulação ou análise de processos. A Figura 8 apresenta, esquematicamente, a analogia dos campos aplicada ao conceito de análise de processos.

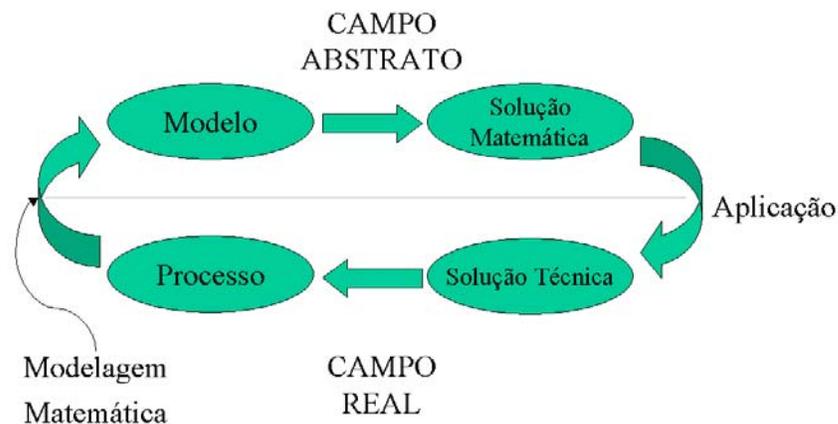


Figura 8. Analogia dos campos real e abstrato.

3.1. Modelos Matemáticos

As equações para ambas as fases gasosa e sólida particulada, as quais estão englobadas na descrição do modelo matemático, são envolvidas numa aproximação fenomenológica (modelo de dois fluidos) e assumidas no dado sistema⁵ como representações contínuas – ignora-se a descontinuidade da matéria e a sua constituição por átomos, moléculas e partículas mais elementares, em outras palavras, interações moleculares são desprezadas – e interpenetrantes, e equações diferenciais no balanço são formuladas para a massa e para o momento. Analisa-se, para a fase sólida particulada os seguintes modelos de dispersão: newtoniano com coeficiente de transporte constante e invíscido. O modelo de turbulência $k-\varepsilon$ foi utilizado para determinar os coeficientes de transporte da fase gasosa.

3.1.1. Equações de Transporte

As equações transientes de conservação da massa e do momento para cada uma das fases, gasosa e sólida, são dadas pelas seguintes expressões:

- Equação de conservação da massa, para a fase gasosa

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_g) + \frac{\partial}{\partial x}(f_g \rho_g v_{g,x}) + \frac{\partial}{\partial y}(f_g \rho_g v_{g,y}) + \frac{\partial}{\partial z}(f_g \rho_g v_{g,z}) = S_g^\rho \quad (1)$$

- Equação de conservação da massa, para a fase sólida

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_s \rho_s) + \frac{\partial}{\partial x}(f_s \rho_s v_{s,x}) + \frac{\partial}{\partial y}(f_s \rho_s v_{s,y}) + \frac{\partial}{\partial z}(f_s \rho_s v_{s,z}) = S_s^\rho \quad (2)$$

onde f_g é a fração volumétrica da fase gasosa e f_s a da fase particulada; ρ é a massa

⁵ Conjunto de elementos do processo que podem ser mantidos como um todo por possuírem em comum, fluxo de matéria e/ou informação.

específica ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$); \mathbf{v} é o vetor velocidade ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$), o qual pode ser decomposto em v_x , v_y e v_z , e S_i^ρ representa o termo fonte de massa para cada fase.

No caso em questão os termos fontes são nulos, devido ser considerado a não transferência de massa entre as fases.

$$S_g^\rho = S_s^\rho = 0$$

- Equação do momento, para a fase gasosa (direção x)

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_g v_{g,x}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f_g \rho_g v_{g,x} v_{g,\xi} - f_g \mu_g \left(\frac{\partial v_x}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial x} \right) \right) = S_{g,x}^m \quad (3)$$

com,

$$S_{g,x}^m = \beta_{gs}^m (v_{s,x} - v_{g,x}) + f_g \rho_g g_x - \frac{\partial p_g}{\partial x} \quad (4)$$

- Equação do momento, para a fase gasosa (direção y)

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_g v_{g,y}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f_g \rho_g v_{g,y} v_{g,\xi} - f_g \mu_g \left(\frac{\partial v_y}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial y} \right) \right) = S_{g,y}^m \quad (5)$$

com,

$$S_{g,y}^m = \beta_{gs}^m (v_{s,y} - v_{g,y}) + f_g \rho_g g_y - \frac{\partial p_g}{\partial y} \quad (6)$$

- Equação de momento, para a fase gasosa (direção z)

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_g v_{g,z}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f_g \rho_g v_{g,z} v_{g,\xi} - f_g \mu_g \left(\frac{\partial v_z}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial z} \right) \right) = S_{g,z}^m \quad (7)$$

com,

$$S_{g,z}^m = \beta_{gs}^m (v_{s,z} - v_{g,z}) + f_g \rho_g g_z - \frac{\partial p_g}{\partial z} \quad (8)$$

onde μ_g é a viscosidade da fase gasosa e S_g^m representa a transformação de momento na fase gasosa.

O termo de arraste entre as fases é representado pelo produto do coeficiente e da diferença de velocidade entre as fases $\beta_{gs}^m(v_g - v_s)$, e modelos para este serão apresentados no Capítulo 3 (Item 3.1.3).

Equações semelhantes podem ser escritas para a fase particulada, salvo a expressão no termo fonte para a ação das forças de pressão que para esta é ajustado de acordo com o módulo de elasticidade:

- Equação do momento, para a fase sólida (direção x)

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_s \rho_s v_{s,x}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f_s \rho_s v_{s,x} v_{s,\xi} - f_s \mu_s \left(\frac{\partial v_x}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial x} \right) \right) = S_{s,x}^m \quad (9)$$

com,

$$S_{s,x}^m = \beta_{gs}^m (v_{g,x} - v_{s,x}) + f_s \rho_s g_x - G \frac{\partial f_s}{\partial x} \quad (10)$$

onde o termo $G \frac{\partial f_s}{\partial x}$ da equação do termo fonte é um simples modelo para o ajuste de pressão de sólidos (caso de leitos fluidizados), G representa o módulo de elasticidade e a forma conveniente de expressá-lo é dada pela Equação (11) (GIDASPOW, 1994):

$$G = G_0 \exp[-\kappa(f_s - f_{s,máx})] \quad (11)$$

com um valor típico de $\kappa = 600$, $G_0 = 1,0$ Pa, $f_{s,máx} = 0,62$.

Para fases dispersas pode-se especificar um parâmetro máximo de empacotamento. Esta é a fração volumétrica da fase em seu estado de empacotamento máximo. É usada mais geralmente para fases sólidas dispersas densas, por exemplo, como encontrado em leitos fluidizados.

O parâmetro máximo de empacotamento é 1 para um fluido disperso padrão. Para uma fase sólida dispersa, pode variar entre 0,5 – 0,74, sendo o último valor o máximo empacotamento possível para esferas sólidas. Para a maioria das aplicações, o valor padrão 0,62 basta. O parâmetro máximo de empacotamento é usado em correlações para determinadas leis de arraste, e nos modelos para forças de colisões das partículas.

As demais equações do momento para a fase sólida nas direções y e z seguem abaixo:

- Equação do momento, para a fase sólida (direção y)

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_s \rho_s v_{s,y}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f_s \rho_s v_{s,y} v_{s,\xi} - f_s \mu_s \left(\frac{\partial v_y}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial y} \right) \right) = S_{s,y}^m \quad (12)$$

com,

$$S_{s,y}^m = \beta_{gs}^m (v_{g,y} - v_{s,y}) + f_s \rho_s g_y - G \frac{\partial f_s}{\partial y} \quad (13)$$

- Equação do momento, para a fase sólida (direção z)

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_s \rho_s v_{s,z}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f_s \rho_s v_{s,z} v_{s,\xi} - f_s \mu_s \left(\frac{\partial v_z}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial z} \right) \right) = S_{s,z}^m \quad (14)$$

com,

$$S_{s,z}^m = \beta_{gs}^m (v_{g,z} - v_{s,z}) + f_s \rho_s g_z - G \frac{\partial f_s}{\partial z} \quad (15)$$

onde S_s^m é o termo fonte de momento na fase sólida particulada.

3.1.2. Turbulência

Turbulência é a chave elementar no escoamento de misturas partícula-fluido, definida pelo aparecimento de instabilidades num escoamento originalmente estável, as quais se multiplicam por um processo não-linear e regeneram-se finalmente em um regime turbulento. Ela é responsável pela melhor mistura das espécies químicas, pela melhor transferência de calor e é caracterizada pelo tensores de Reynolds na fase contínua. A presença de partículas ou uma segunda fase na turbulência da fase contínua é conhecida como “modulação de turbulência”.

Vários estudos experimentais e numéricos foram realizados acerca da modulação de turbulência. Várias pesquisas de turbulência na fase de transporte tanto para partículas como para bolhas têm sido identificado; fenômenos tais como: distorção nas linhas de corrente de gás na presença de partículas; a trajetória estabelecida pelas mesmas; a modificação da velocidade (gradiente) no transporte da fase; as trocas associadas na geração da turbulência; e o descarregamento em massa do movimento turbulento provocado pela força de arraste nas partículas (CROWE, 2000).

A prática comum para a obtenção das equações de conservação válidas para escoamentos turbulentos têm sido a aplicação de uma média de Reynolds sobre as equações de transporte básicas de Navier-Stokes (ROSA, 2002), com os modelos RANS de turbulência, como o modelo $k-\varepsilon$ e o modelo $k-\omega$.

Como a operação de fluidização no duto vertical permanece sob condições turbulentas de fluxo, torna-se necessário o emprego de modelos adequados para descrever os efeitos das flutuações turbulentas.

O modelo turbulento de duas equações, $k-\varepsilon$ padrão, na qual a velocidade e a escala do comprimento são resolvidas usando equações separadas de transporte, é extensamente empregado para a determinação da turbulência na fase gasosa, porque oferece um bom acordo entre o esforço numérico e a exatidão computacional.

O modelo $k-\varepsilon$ é o que emprega a hipótese do gradiente de difusão, para relacionar as tensões de Reynolds aos gradientes médios de velocidade e à viscosidade turbulenta. A viscosidade turbulenta é modelada como o produto de uma velocidade turbulenta e de uma escala turbulenta de comprimento. Neste tipo de adequação, a escala da velocidade

turbulenta é computada da energia cinética turbulenta, que é fornecida da solução de sua equação de transporte.

A escala turbulenta de comprimento é estimada de duas propriedades do campo de turbulência, geralmente a energia cinética turbulenta e sua taxa da dissipação. A energia cinética turbulenta k é definida como a variação das flutuações na velocidade. A dissipação turbulenta do turbilhão ε é definida como a taxa em que as flutuações da velocidade se dissipam e tem dimensões de k por unidade de tempo ($L^2.t^{-3}$), por exemplo $m^2.s^{-3}$.

O modelo $k-\varepsilon$ ainda introduz duas variáveis novas no sistema de equações. A equação da continuidade da fase gasosa reescrita, fica de acordo com a Equação (16):

$$\frac{\partial(f_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_g \rho_g \mathbf{v}_g) = 0 \quad (16)$$

A Equação (16) difere da equação original de conservação mássica (Equação (1)) no que diz respeito à velocidade, pois nesta emprega-se a velocidade média, a qual ainda é adicionado um desvio, enquanto que na Equação (1) é utilizada a velocidade instantânea. Esta é a motivação dos modelos baseados na média de Reynolds, trabalhar com variáveis médias e equações de fechamento para os desvios.

E a equação do momento da fase gasosa, Equação (17) torna-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_g \rho_g \mathbf{v}_g) + \nabla \cdot (f_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) - \nabla \cdot (f_g \mu_{g,ef} \nabla \mathbf{v}_g) = \nabla p' + \nabla \cdot (f_g \mu_{g,ef} \nabla \mathbf{v}_g)^T + B \quad (17)$$

onde B é a soma de forças do corpo, o $\mu_{g,ef}$ é a viscosidade efetiva turbulenta da fase gasosa, e p' é a pressão modificada dada por:

$$p'_g = p_g + \frac{2}{3} \rho_g k \quad (18)$$

Baseado no conceito da viscosidade do turbilhão, o qual assume a hipótese de Boussinesq, onde os tensores de Reynolds apresentam uma relação com as propriedades médias-temporais similares ao tensor tensão em um escoamento Newtoniano laminar, e

negligencia todas as correlações de segunda ordem entre as partículas flutuantes que aparecem durante a aplicação da decomposição de Reynolds (DECKER, 2003), de modo que a viscosidade efetiva seja a soma das viscosidades dinâmica e turbulenta, tem-se:

$$\mu_{g,ef} = \mu_g + \mu_{g,t} \quad (19)$$

onde $\mu_{g,t}$ é a viscosidade turbulenta.

O modelo supõe que a viscosidade turbulenta está ligada à energia e à dissipação cinética turbulenta através da relação:

$$\mu_{g,t} = C_\mu \rho_g \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (20)$$

onde C_μ é uma constante do modelo turbulento com o valor de 0,09.

Os valores de k e de ε , vêm diretamente das equações diferenciais de transporte para a energia cinética e taxa da dissipação turbulenta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_g k) + \nabla \cdot (f_g \rho_g \overset{p}{v}_g k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_g + \frac{\mu_{g,t}}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - f_g \rho_g \varepsilon \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_g \varepsilon) + \nabla \cdot (f_g \rho_g \overset{p}{v}_g \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_g + \frac{\mu_{g,t}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} f_g \rho_g \varepsilon) \quad (22)$$

onde $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k e σ_ε são constantes do modelo turbulento k - ε , com valores respectivos de 1,44, 1,92, 1,0 e 1,3.

P_k é a produção turbulenta devido às forças viscosas e as de empuxo, que é expressa como:

$$P_k = \mu_{g,t} \nabla u_g \cdot (\nabla \overset{p}{v}_g + \nabla \overset{p}{v}_g^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \overset{p}{v}_g (3\mu_{g,t} \nabla \cdot \overset{p}{v}_g + f_g \rho_g k) + P_{kb} \quad (23)$$

Para fluxo incompressível, $\nabla \cdot v$ é pequeno e o segundo termo no lado direito de Equação (23) não contribui significativamente à produção. Para fluxo compressível, $\nabla \cdot v$ é grande somente nas regiões com divergência de elevada velocidade, como nos choques. O parâmetro de produção compressível pode ser usado para ajustar o valor do fator na frente de μ_t , o valor padrão é 3, como mostrado. O termo P_{kb} da produção do empuxo, no caso em questão é nulo, devido a não consideração de geração de turbulência pelo mesmo.

3.1.3. Equações de Fechamento

- Continuidade entre as fases

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha} = f_g + f_s = 1 \quad (24)$$

- Arraste gás/sólido

As correlações para o coeficiente de transferência de momento entre as fases que foram empregadas na pesquisa para os modelos de Wen e Yu, Gidaspow e Ettehadieh, e Massarani e Coelho, diferem-se apenas em uma delas, na que diz respeito ao escoamento diluído, a qual é função do coeficiente de arraste – Cd .

Os coeficientes de fricção ou arraste entre o fluido e as partículas são obtidos de correlações padrões com a aceleração negligenciada. Sem aceleração, fricção na parede ou gravidade, o balanço de momento unidimensional para a fase gasosa fica:

$$f_g \frac{\partial p_g}{\partial x} - \beta_{gs}^m (v_g - v_s) = 0 \quad (25)$$

Esta equação é uma afirmação da lei de Darcy onde a recíproca de β_{gs}^m é a permeabilidade dividida pela viscosidade do fluido.

O coeficiente de transferência de momento β_{gs}^m é agora obtido por comparação à Equação (25) pela equação de Ergun (KUNII e LEVENSPIEL, 1969):

$$\frac{\Delta p}{\Delta x} = 150 \frac{f_s^2 \mu_g U}{f_g^3 (\theta_s d_p^2)} + 1,75 \frac{U^2 f_s \rho_g}{f_g^3 (\theta_s d_p)} \quad (26)$$

onde U é a velocidade superficial; $U = f_g(v_g - v_s)$.

A comparação entre as Equações (25) e (26) mostra que para regimes densos, $f_g < 0,8$, o coeficiente de transferência de momento entre a fase gasosa e as partículas (esféricas) fica de acordo com a equação:

$$\beta_{g,s}^m = 150 \frac{f_s^2 \mu_g}{f_g d_p^2} + 1,75 \frac{|\rho_s - \rho_g| f_s \rho_g}{d_p} \quad (27)$$

onde d_p é o diâmetro das partículas de catalisador, no caso em especial desta pesquisa o mesmo é invariável de valor constante igual a unidade, visto a consideração das partículas serem perfeitamente esféricas.

Note que β_{gs}^m dividido pela viscosidade é a recíproca permeabilidade. Esta é proporcional ao quadrado do diâmetro da partícula para escoamentos lentos.

Wen e Yu (1966) estenderam o trabalho de Richardson e Zaki (1954) ao derivar uma expressão para a predição da queda de pressão em leitos particulados. Para porosidades maiores que 0,8, se $\partial p / \partial x$ é representada pela expressão de Wen e Yu para a queda de pressão, o coeficiente de transferência de momento nesta faixa de porosidade é dado como na equação:

$$\beta_{g,s}^m = \frac{3}{4} Cd \frac{|\rho_s - \rho_g| f_s \rho_g}{d_p} f(f_g) \quad (28)$$

O coeficiente de arraste (Cd) é uma função do número de Reynolds.

Para $Re_p < 1000$:

$$Cd = f_g^{-1,65} \max \left[\frac{24}{Re_p f_g} (1 + 0,15(Re_p f_g)^{0,687}) \right] \quad (29)$$

E para Re_p maior ou igual a 1000, tem um escoamento puramente turbulento onde:

$$Cd = 0,44 \quad (30)$$

O número de Reynolds é definido por:

$$Re_p = \frac{|\rho_s - \rho_g| \rho_g d_p}{\mu_g} \quad (31)$$

Na equação (28), $f(f_g)$, indica o efeito da presença de outras partículas no fluido e atua como uma correção da lei usual de Stokes para a queda livre de uma simples partícula. Na proposta de Wen e Yu o efeito populacional das partículas é desconsiderado, enquanto que Gidaspow e Ettehadieh (1983) (GIDASPOW, 1994), propuseram:

$$f(f_g) = f_g^{-2,65} \quad (32)$$

Massarani e Coelho (MASSARANI, 2002), propuseram uma modificação na correlação do coeficiente de arraste (Cd), esta abrange todos os valores de Reynolds para a partícula, evitando possíveis descontinuidades no cálculo provocadas pela mudança do regime de escoamento devido ao aumento da velocidade axial. Foram introduzidas duas novas constantes, funções da esfericidade da partícula, como apresentado na Equação (33).

$$Cd = \left[\left(\frac{24}{K_1 Re_p} \right)^{0,85} + K_2^{0,85} \right]^{1,18} \quad (33)$$

onde K_1 e K_2 são constantes do modelo, expressas pelas seguintes correlações:

$$\begin{aligned} K_1 &= 0,843 \log_{10} \left(\frac{\theta_s}{0,065} \right) \\ K_2 &= 5,31 - 4,88\theta_s \end{aligned} \quad (34)$$

onde θ_s é a esfericidade da partícula, no caso em particular $\theta_s = 1$.

3.2. Métodos Numéricos

O objetivo de um método numérico é solucionar uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões que envolvem a função incógnita (variável), isto é, transformar uma equação diferencial, definida em um domínio, em um sistema de equações algébricas; substituir as derivadas em termos que contêm a variável significa integrar a equação diferencial, e as diversas maneiras de fazê-lo são o que caracterizam o tipo de método numérico.

Uma equação genérica para as equações de transporte pode ser expressa por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho v^p \phi - \Gamma^\phi \nabla \phi) = S^\phi \quad (35)$$

onde Γ^ϕ é a difusividade de ϕ , a variável genérica transportada.

ϕ deve ser conservada em cada um dos volumes de controle da geometria discretizada. Assim a equação genérica para um volume de controle é expressa por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho v_i^p \phi - \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) = S^\phi \quad (36)$$

onde ∂x_i são as dimensões do volume de controle e ∂t é o passo no tempo da iteração.

A Tabela 7 apresenta os valores das variáveis ϕ , Γ^ϕ e S^ϕ para as equações de conservação da massa global e momento (nas direções x , y e z).

Tabela 7. Valores das variáveis ϕ , Γ^ϕ e S^ϕ .

Equação de conservação	ϕ	Γ^ϕ	S^ϕ
Massa global	1	0	0
Quantidade de movimento em x	u	μ	$Bx + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} \right) +$ $\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) - \frac{\partial p}{\partial x}$
Quantidade de movimento em y	v	μ	$By + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} \right) +$ $\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial y}$
Quantidade de movimento em z	w	μ	$Bz + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} \right) +$ $\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \frac{\partial p}{\partial z}$

3.2.1. Método dos Volumes Finitos

Este trabalho emprega o Método dos Volumes Finitos, o qual encontra-se farta menção na literatura, destacando-se PATANKAR (1980) e MALISKA (2004), disponibilizado pelo código comercial CFX 5.7 para a aproximação da conservação das propriedades de estudo, para um volume elementar ou célula numérica discretizada no domínio do espaço e do tempo, Figura 9. O balanço de massa realizado no volume elementar é apresentado na Figura 10, onde segue-se o mesmo tratamento do sistema aberto na Figura 9, ou seja, a célula está suscetível a entrada, saída, acúmulo, transformação, fronteiras e as vizinhanças que o cercam.

Com o intuito da obtenção das equações aproximadas, todo método que satisfaça a conservação da propriedade requerida em nível volumétrico elementar é considerado um método de volumes finitos (MALISKA, 2004).

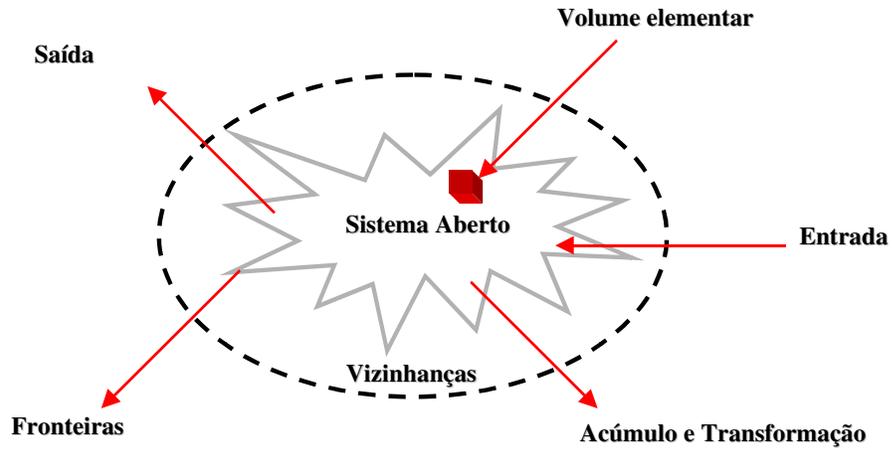


Figura 9. Célula numérica retirada do sistema.

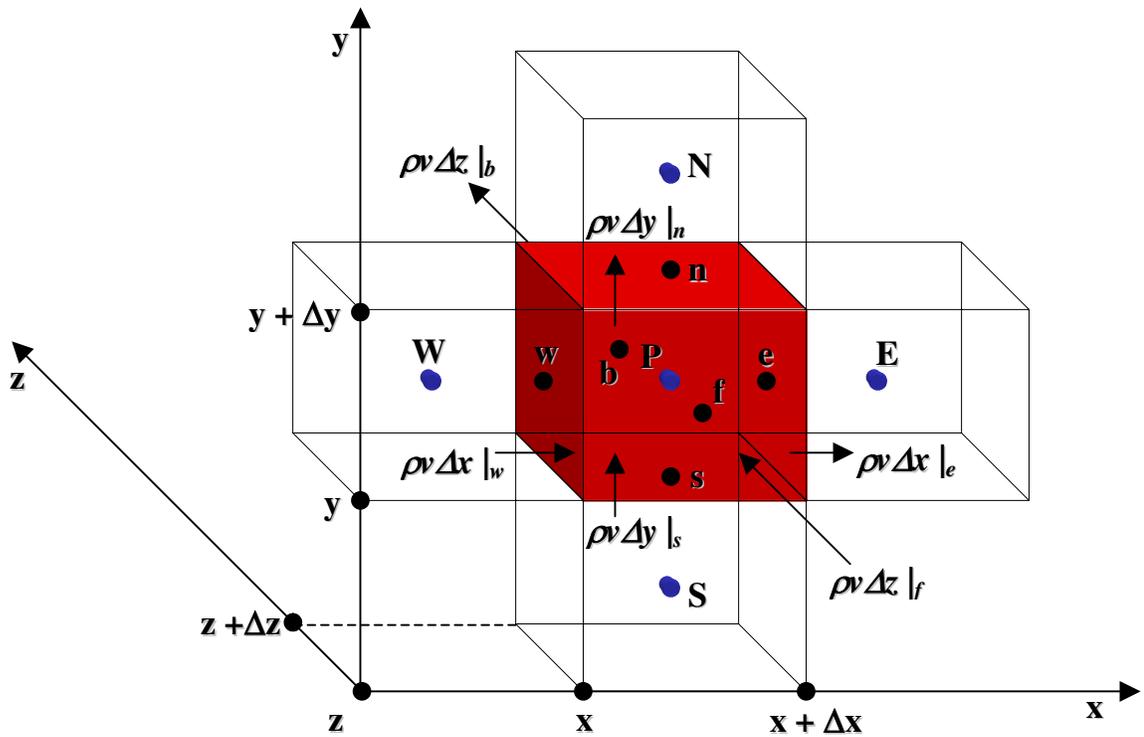


Figura 10. Balanço de massa para um volume elementar.

Este método garante que para qualquer tamanho de malha, todos os princípios de conservação sejam respeitados, mesmo sem refino; portanto o conjunto de equações diferenciais que expressam estas propriedades no caso em questão foi convertido em equações discretas, que podem ser resolvidas sobre a malha de volumes de controle que preenchem o domínio do equipamento (ROSA, 2002).

A partir das equações de conservação, na sua forma integral e aplicando o teorema de Gauss, tem-se:

$$\int_V \nabla \phi dV = \int_A \phi^n dA \quad \text{Teorema de Gauss} \quad (37)$$

$$\int_A \rho \phi v^n dA = \int_A \Gamma \phi^n dA + \int_V A^\phi dV \quad (38)$$

Um número finito de células numéricas divide o domínio do sistema. A equação de conservação aplica-se a cada volume, bem como para o domínio. A equação de conservação global é obtida por meio de uma soma das células, uma vez que as integrais sobre as superfícies internas se cancelam.

$$\int_A \rho \phi v^n dA = \sum_I \int_{A_I} \rho \phi v^n dA \quad (39)$$

$$\int_A \Gamma \phi^n dA = \sum_I \int_{A_I} \Gamma \phi^n dA \quad (40)$$

3.2.2. Esquema de Interpolação

Nas fronteiras do volume de controle devem ser avaliados os fluxos convectivos e difusivos das propriedades, estes cálculos devem ser realizados em função dos valores da função nos pontos nodais; em outras palavras, a função de interpolação tem o papel de conectar os locais de armazenamento da função ϕ .

$$\rho v \phi|_e - \rho v \phi|_w = \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}|_e - \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}|_w \quad (41)$$

Utilizando o esquema de interpolação por diferenças centrais (CDS), obtêm-se:

$$\rho v \frac{(\phi_E - \phi_P)}{2} - \rho v \frac{(\phi_P - \phi_W)}{2} = \Gamma^\phi \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x} - \Gamma^\phi \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x} \quad (42)$$

Rearranjando:

$$\Psi_p \phi_P = \Psi_e \phi_E + \Psi_w \phi_W \quad (43)$$

onde os coeficientes Ψ_p , Ψ_e e Ψ_w :

$$\begin{cases} \Psi_p = \frac{2\Gamma^\phi}{\Delta x^2} \\ \Psi_e = -\frac{\rho v}{2\Delta x} + \frac{\Gamma^\phi}{\Delta x^2} \\ \Psi_w = \frac{\rho v}{2\Delta x} + \frac{\Gamma^\phi}{\Delta x^2} \end{cases}$$

Considerando a velocidade positiva, a seguinte relação deve ser satisfeita para que o coeficiente Ψ_e , seja positivo:

$$\frac{\rho v \Delta x}{1 \frac{\Gamma^\phi}{2}} \leq 2$$

Nº de Reynolds da célula

Quando a velocidade aumenta, a malha deve ser reduzida proporcionalmente para manter o coeficiente Ψ_e positivo. Manter os coeficientes positivos é uma característica desejada por qualquer método numérico, pois coeficientes negativos comprometem a média. Portanto o uso do esquema CDS na aproximação de termos convectivos/difusivos, pode produzir coeficientes negativos, pois é impraticável (em problemas reais) refinar a malha até forçar a sua positividade, ou seja, manter $\underbrace{Pe}_{N^\circ \text{ de Peclet}} \leq 2$.

As dificuldades encontradas em coeficientes negativos são:

- Natureza no método iterativo usado para a solução do sistema linear (tendência a divergir, caso não seja ponto a ponto);
- Ordem de aproximação da função de interpolação (aproximação de alta ordem, como o CDS, causam nos termos convectivos, instabilidade, quando estes forem dominantes – ocasionando oscilações numéricas).

A maneira mais simples de se evitar coeficientes negativos é utilizar outra função de interpolação para o termo convectivo, como por exemplo uma aproximação de um lado só dos volumes de controle, como o esquema *upwind*.

Considerando a Figura 10, a função de interpolação *upwind* tem as seguintes expressões:

$$\phi_w = \phi_W , \quad \phi_e = \phi_P \quad p/v > 0$$

$$\phi_w = \phi_P , \quad \phi_e = \phi_E \quad p/v < 0$$

O esquema de interpolação de primeira ordem *upwind* tem sua relação direta com o valor na fronteira, que é igual ao valor da função no volume seguinte, mudando com o sentido da velocidade (MALISKA, 2004).

O esquema *higher upwind* difere-se por ser de segunda ordem, dando maior precisão ao método devido a presença de mais um termo a oeste da célula numérica ϕ_{ww} .

$$\phi_w = \phi_w + \frac{1}{2}(\phi_w - \phi_{ww}) \quad (44)$$

$$\phi_e = \frac{3}{2}\phi_P - \frac{1}{2}\phi_w \quad (45)$$

3.2.3. Acoplamento Pressão – Velocidade

O código comercial CFX-5.7 utiliza uma única célula numérica, sem escalonamento dos planos, ou seja, desestruturada, para arranjar a malha afim de superar o desacoplamento da pressão da velocidade. A representação unidimensional da conservação da massa pode ser escrita como:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^3 A}{4m} \left(\frac{\partial^4 p}{\partial x^4}\right)_i = 0 \quad (46)$$

onde: $m = \rho v_j \Delta n_j$ (47)

A equação da continuidade é uma aproximação por diferenças centrais de segunda ordem para a derivada primeira na velocidade, modificada por uma derivada quarta na pressão que age para redistribuir a influência da mesma. Isto supera o problema do verificador nas oscilações da borda que são encontradas quando as variáveis são arranjadas. O método é similar aquele usado por Rhie e Chow, com um número de extensões que melhoram o robustez da discretização quando a pressão varia rapidamente, ou são afetadas por forças do corpo.

Enquanto a malha é refinada, o valor do segundo termo na equação acima vai a zero na taxa de Δx^3 relativo à derivada da velocidade, de modo que a forma diferencial desejada da continuidade seja recuperada rapidamente.

O esquema de interpolação de Rhie e Chow para encontrar a solução dos campos da pressão e da velocidade nas mesmas posições nodais na malha. O termo de Rhie e Chow, ou equivalente, é de quarta ordem de suavização da pressão, e tem por muitos anos fornecido uma maneira confiante para permitir soluções fisicamente sensíveis em malhas co-localizadas (contra malhas desestruturadas). Para a grande maioria dos escoamentos, este tratamento amarra os campos de pressão para render soluções suaves, enquanto somente afeta minimamente o transporte das velocidades da massa (CFX-5.7 MANUAL).

3.3. Geometria e Malha Numérica

Processos de escoamento e desempenho de reatores multifásicos de indústrias químicas são muitas vezes dependentes do desenho geométrico, sendo necessário no momento de assegurar e prever um ótimo procedimento, uma simulação capaz de unir o modelo matemático com a geometria do reator. Parâmetros como o número de pontos e a sua distribuição influenciam diretamente na ortogonalidade dos elementos da geometria. Tais detalhes podem diferenciar consideravelmente o tempo computacional e a convergência da simulação. Isto porque, quanto mais detalhada a malha, maior o número de volumes de controle envolvidos, e mais cálculos são necessários a cada iteração (ROSA, 2002).

Para obter uma malha numérica considerada ideal, para os estudos numéricos desta pesquisa sete diferentes foram construídas com o objetivo de observação da dependência nos cálculos com o refino da malha.

O procedimento adotado após o porte do desenho estrutural do duto vertical, foi a elaboração desta geometria e das malhas numéricas com o auxílio dos programas DDN, especializado na construção da geometria, e HEXA, especializado na confecção da malha numérica, estágios componentes do *software* ICFM (vinculado ao CFX 5.7), as quais ao serem importadas para o pré processador são unidas ao modelo matemático passando para o *solver*, onde foram testadas afim de encontrar-se a melhor configuração, ou seja, aquela que assegure a não dependência do escoamento para com a malha. Estes resultados encontram-se no Capítulo 4 (Item 4.1).

De acordo com a estrutura do equipamento em estudo, no qual a relação altura / diâmetro é muito maior que a unidade, cuidados acerca do refino da malha foram tomados na parede, na zona de contato das fases e na curva de saída do reator, a fim de obter melhor ortogonalidade dos elementos. A Figura 11 apresenta a seção transversal e as entradas das fases na base do reator, e a saída no topo da malha numérica adotada para a simulação, a qual possui 584880 volumes de controle.

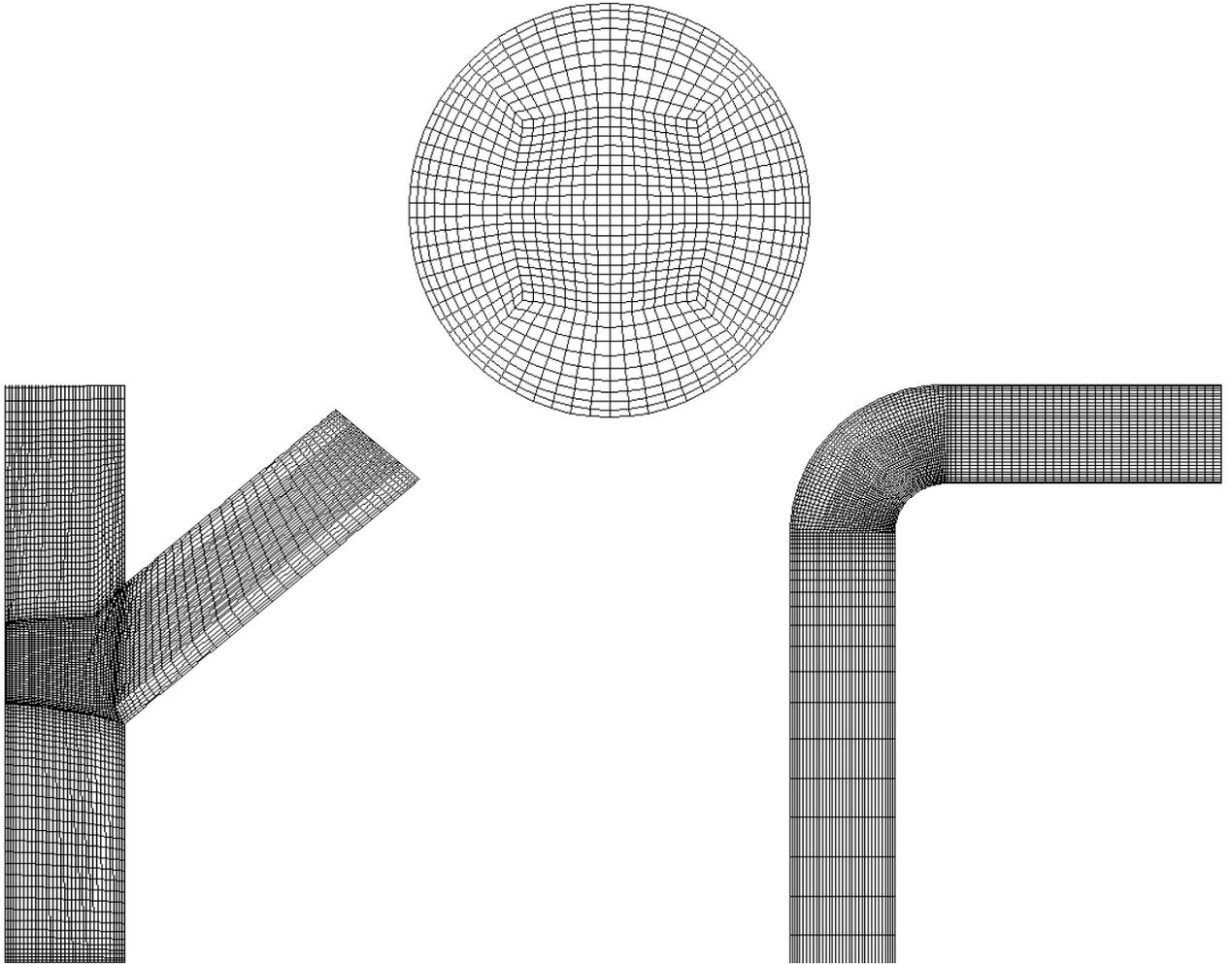


Figura 11. Detalhes da malha numérica nas entradas e na saída.

Outras características da malha numérica empregadas na pesquisa são: a distribuição dos volumes de controle, aproximadamente 30 volumes de controle na direção radial (38mm) e 470 volumes de controle na direção axial (10m); a faixa da razão volumétrica entre os volumes de controle, mínima de 1,0 e máxima 6,64; a faixa da razão de comprimento entre os volumes de controle, mínima de 1,0 e máxima de 30,0; e o comprimento dos volumes de controle junto às paredes, aproximadamente 1mm.

3.4. Condições de Contorno

As condições de contorno do problema em questão são definidas nas entradas, entrada de ar (base) ‘componente puro’ e entrada de catalisadores (base) ‘mistura’, na saída ‘mistura’ (topo) e na parede do equipamento, apresentadas na Tabela 8.

Tabela 8. Condições de contorno.

Entradas	fluxo de sólidos (G_s) = $300\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ velocidade do gás (v_g) = $8\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
Saída	pressão atmosférica
Parede	fase gasosa = não deslizamento fase particulada = deslizamento livre
Critério de convergência	tipo residual = Root Mean Square – RMS alvo residual = 1×10^{-4}

Capítulo 4.

Resultados e Discussões

Este capítulo refere-se as discussões e resultados numéricos obtidos nas simulações realizadas para uma operação de fluidização rápida num duto cilíndrico vertical. Cinco casos são apresentados, três deles diferenciando-se quanto o emprego da correlação de arraste gás-sólido nas equações de fechamento do modelo matemático e dois quanto a viscosidade dinâmica da fase sólida. O sistema de equações foi calculado em regime transiente, discretizado de acordo com a malha numérica mostrada na Figura 11.

Foram inicialmente realizados os testes das malhas numéricas, para então de posse daquela que apresentar melhor comportamento quanto ao escoamento padrão iniciar as simulações para o processo real. Analisou-se os perfis de velocidade e fração volumétrica das partículas radialmente e axialmente no interior do duto, considerando as mesmas condições propostas por PÄRSSINEN e ZHU (2001), visando a corroboração de dados.

4.1. Teste das Malhas Numéricas

Na avaliação da dependência do escoamento com a malha numérica, sabe-se que um número adequado de volumes de controle é de extrema importância para a determinação de alguns comportamentos, não evidenciados em malhas menos refinadas. Foram então testadas sete malhas: Malha 1 – aproximadamente 234000 volumes de controle; Malha 2 – aproximadamente 337000 volumes de controle; Malha 3 – aproximadamente 417000 volumes de controle; Malha 4 – aproximadamente 470000 volumes de controle; Malha 5 – aproximadamente 585000 volumes de controle; Malha 6 – aproximadamente 635000 volumes de controle e Malha 7 – aproximadamente 828000 volumes de controle, respectivamente.

O modelo matemático empregado para a simulação das malhas numéricas é monofásico, de acordo com a prática comumente adotada, ou seja, o escoamento no interior do equipamento é puramente gasoso, sujeito as equações de conservação da massa (Equação (1)) e momento (Equações (3), (5) e (7)) para tal fase, apresentadas no Capítulo 3

(Item 3.1.1). Na Equação da conservação da massa a variável fração volumétrica (f_g) desaparece, visto ser monofásico o modelo, o que também acontece nas Equações da conservação de momento, ainda nestas últimas Equações, o termo de geração de momento ($S_{g,i}^m$), Equações (4), (6) e (8) negligenciam o efeito do arraste.

Os resultados das simulações com as distintas malhas numéricas são apresentados axialmente (plano de corte em $r = 0m$, com $z = 10m$) e radialmente em diferentes níveis de altura, 0,3m, 5,0m e 9,5m, de acordo com as Figuras 12, 13, 14 e 15 respectivamente.

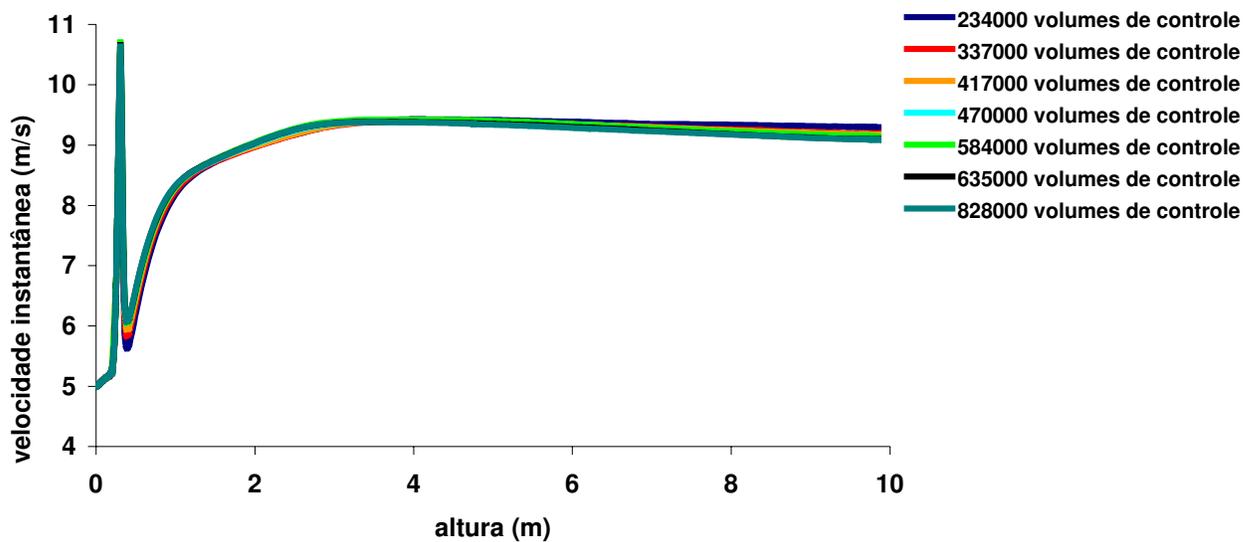


Figura 12. Perfil axial de velocidade obtido com diferentes malhas.

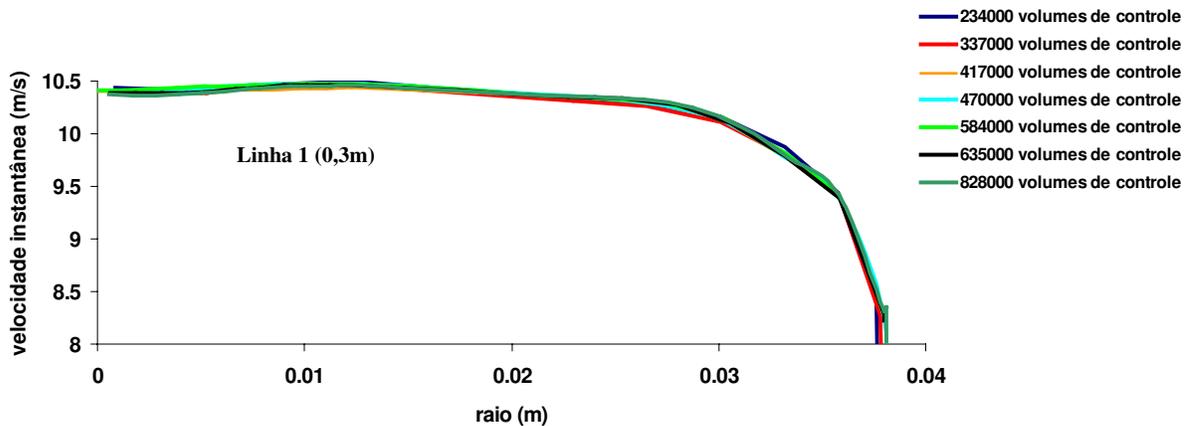


Figura 13. Perfil radial de velocidade obtido com diferentes malhas seção transversal 0,3m.

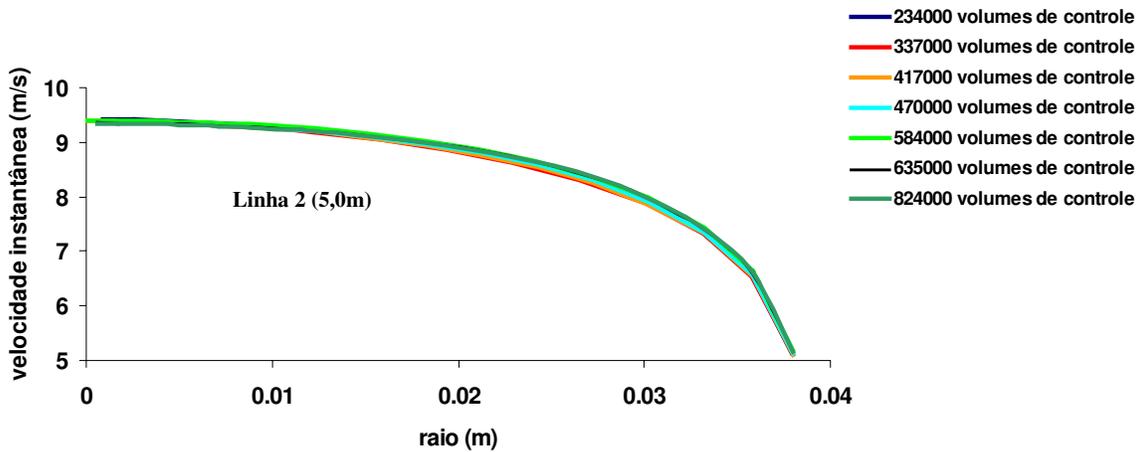


Figura 14. Perfil radial de velocidade obtido com diferentes malhas seção transversal 5,0m.

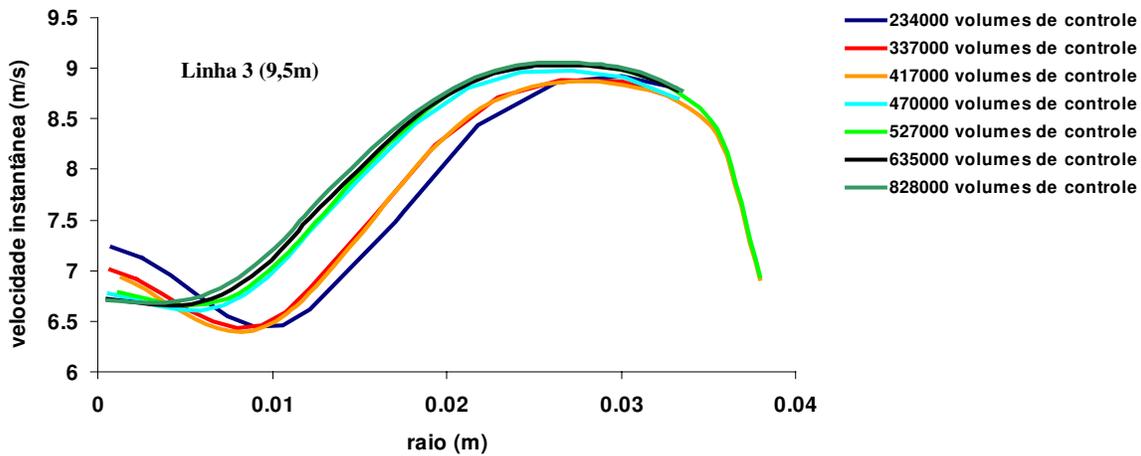


Figura 15. Perfil radial de velocidade obtido com diferentes malhas seção transversal 9,5m.

A partir destes resultados, as seguintes observações podem ser feitas:

- dependência axial ($r = 0m$ e $z = 10m$):** Não se percebe influência significativa quanto ao refino da malha na direção axial do escoamento. No entanto uma leve variação é constatada na malha mais grosseira na região de contato das cargas (base do duto), um ponto crítico do equipamento juntamente com a saída, apresentada na Figura 12.

- **dependência radial (0,3m):** Nesta seção transversal, praticamente na região de contato das cargas, o comportamento radial do escoamento é análogo ao descrito para a dependência axial, Figura 13.
- **dependência radial (5,0m):** Seção transversal no centro do duto vertical, nota-se ainda uma insignificante influência do refino, todas as malhas conduzem a um mesmo perfil qualitativo e muito próximo quantitativo, Figura 14.
- **dependência radial (9,5m):** A dependência quanto ao refino é mais visível na região de saída, onde se percebe apesar da diferença sutil, a qual não modifica os resultados qualitativamente, influencia na tendência da curva, apresentada na Figura 15.

Com estes resultados, optou-se pelo emprego da malha numérica composta por 584880 volumes de controle, a qual mostrou-se dentro dos padrões estabelecidos, ou seja, não existe mais a dependência significativa do escoamento quanto o refino da malha, assim como na malha de 470000 volumes de controle (pouco mais grosseira) e nas malhas mais refinadas. No entanto a escolha pela tal deu-se tanto pela tentativa de prevenir qualquer problema eventual de influência do refino quanto pelo custo-benefício.

4.2. Fluxo de Sólidos quanto à Correlação de Arraste Gás-Sólido

Primeiramente foi analisado o escoamento das partículas na direção radial, em forma de fluxos mássicos instantâneos (funções da velocidade e concentração de partículas) ao longo do duto cilíndrico vertical em sete níveis distintos, descritos no Item 2.4.1, num tempo real de 5s e sob um passo de tempo de 2×10^{-3} s, impondo um valor constante para a propriedade física da fase sólida, viscosidade dinâmica, igual a $0,5 \text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$, para tentar modelar a influência da concentração de partículas sobre o escoamento. Utilizou-se três diferentes equações de fechamento para o arraste gás-sólido, propostas por Wen e Yu (1966), Gidaspow e Ettehadieh (1983), e Massarani e Coelho (2002). O objetivo é encontrar a correlação que melhor descreva o comportamento das partículas na operação de fluidização rápida. Os três casos referentes à avaliação das correlações de arraste são caracterizados abaixo:

Caso 1. Modelo matemático:	{	massa - Equações 1 e 2 momento - Equações 3 a 15 turbulência - Equações 19 a 23 continuidade entre as fases - Equação 24 arraste - Equação 29 (Wen e Yu) viscosidade da fase sólida - $0,5\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
Caso 2. Modelo matemático:	{	massa - Equações 1 e 2 momento - Equações 3 a 15 turbulência - Equações 19 a 23 continuidade entre as fases - Equação 24 arraste - Equação 30 (Gidaspow e Ettehadieh) viscosidade da fase sólida - $0,5\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
Caso 3. Modelo matemático:	{	massa - Equações 1 e 2 momento - Equações 3 a 15 turbulência - Equações 19 a 23 continuidade entre as fases - Equação 24 arraste - Equação 33 (Massarani e Coelho) viscosidade da fase sólida - $0,5\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$

As Figuras 16 e 17 apresentam os resultados obtidos para cada um dos três casos nas sete seções transversais e no determinado tempo. Optou-se pelo tempo de 5s para esta avaliação devido ao curto tempo de residência das partículas no interior do equipamento, ou seja, com uma altura do duto de 10m e uma velocidade de entrada da fase gasosa de $8\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ em 5s têm-se 4 ciclos completos, o que oferece uma certa garantia quanto à descrição do comportamento das partículas na operação de fluidização pelas correlações de arraste.

Para uma melhor visualização separou-se os resultados, a Figura 16 mostra os resultados para as altura até 5,13m, enquanto a Figura 17 mostra as demais.

Nota-se nas Figuras 16(a) e 16(b), linhas 1 e 2 respectivamente a 1,53m e 2,73m de altura, uma discrepância entre os resultados obtidos em cada caso com o resultado

experimental. Em ambas as Figuras observa-se a constância do fluxo de partículas do centro ao semi-centro⁶ (zona central diluída de sólidos) em todos os três casos.

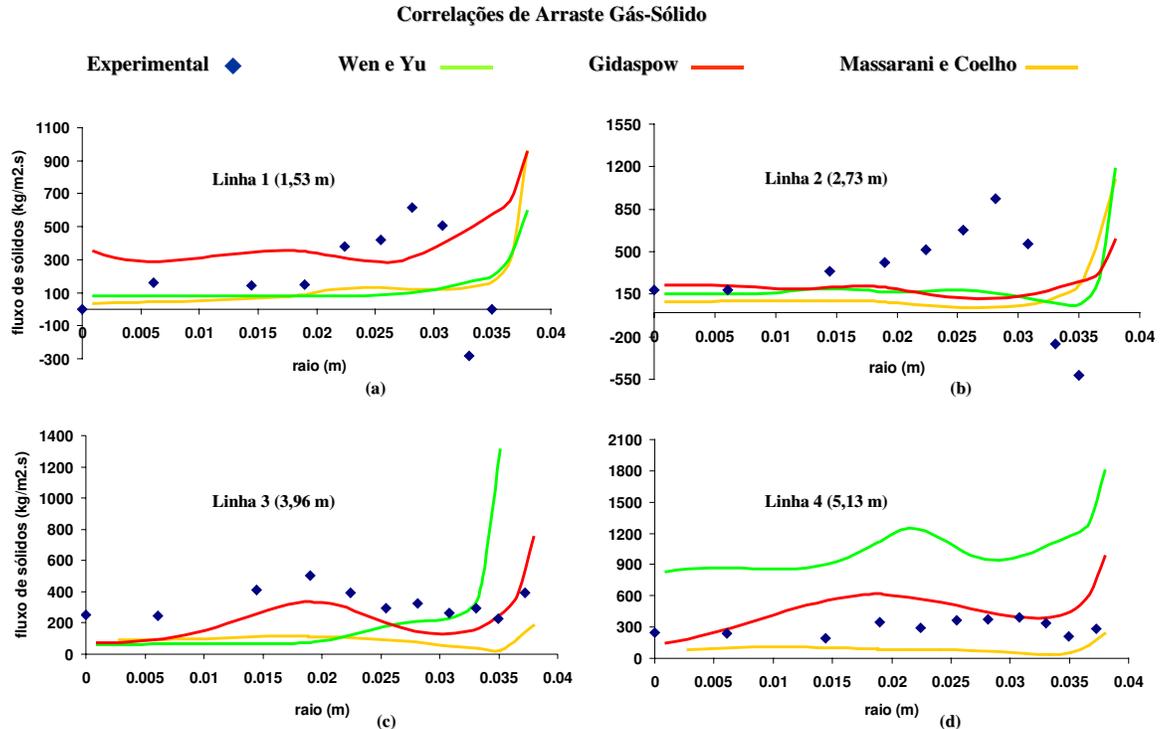


Figura 16. Avaliação das correlações de arraste – seções inferiores do duto.

Na Figura 16(c) o caso 2 apresenta boa concordância qualitativa, com os resultados experimentais, o que não acontece com os outros dois casos. A Figura 16(d) na continuação comprova o melhor desempenho da correlação de Gidaspow e Ettehadieh, bem evidenciado ainda nas Figuras 17(a) e 17(b), respectivamente 6,34m e 8,74m de altura.

O comportamento descrito pelas partículas no equipamento com o emprego da correlação de arraste de Gidaspow e Ettehadieh é bastante satisfatório qualitativamente em comparação aos resultados experimentais e frente as outras duas correlações utilizadas. Porém junto à saída (à 9,42m, Figura 17(c)), há um desvio constatado também neste caso.

De posse destes resultados, verifica-se que os casos 1 e 3 mostraram-se ineficientes quanto a predição do escoamento gás-sólido até o tempo prescrito e além disso, percebe-se uma maior aproximação do caso 2 aos dados experimentais na maioria dos

⁶ Distância média na seção transversal entre o centro e a parede do duto vertical, 0,02 m.

níveis analisados. Justifica-se assim a eliminação dos modelos de Wen e Yu e de Massarani e Coelho, e a escolha do modelo de Gidaspow e Ettehadieh para a continuação da pesquisa.

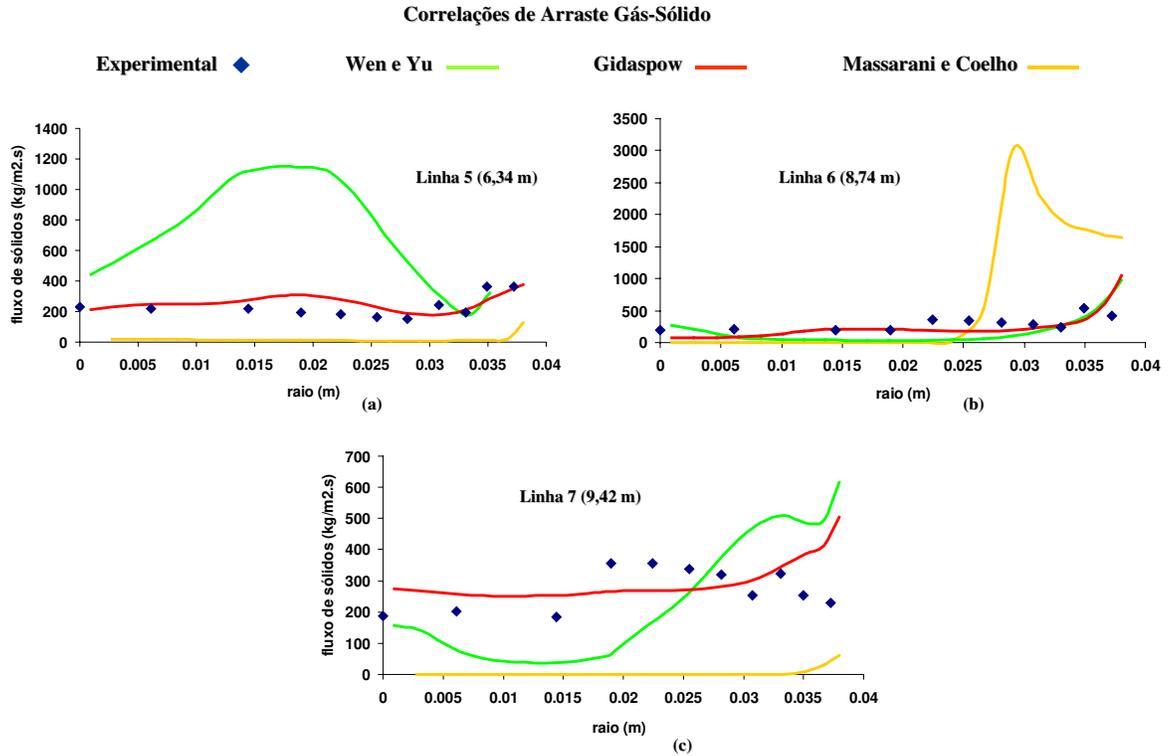


Figura 17. Avaliação das correlações de arraste – seções superiores do duto.

4.2.1. Dinâmica do Escoamento

A avaliação temporal axial e radial do comportamento dos sólidos no interior do equipamento foi realizada para o caso 2, em acordo com o Item 4.2, num tempo real entre 5s e 10s. O passo de tempo foi alterado, afim de promover uma maior rapidez nos cálculos para $5 \times 10^{-3} s$, mantendo o valor de $0,5 kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$ para a viscosidade dinâmica da fase sólida, o que indica que as partículas têm efeito viscoso maior do que a fase fluida, ou seja, este é considerado como sendo um fluido mais denso e responsável pelos efeitos viscosos no escoamento, ver Capítulo 2, Itens 2.1, 2.2, 2.3.

As Figuras 18 e 19 apresentam os perfis radiais do fluxo de sólidos instantâneo do caso 2 nos diferentes tempos. Como já feito no item anterior, para uma melhor visualização

dividem-se os resultados em Figuras separadas. Ao longo do tempo, em todos os sete níveis, observa-se a existência de forte oscilação quanto aos fluxos particulados, um pouco menos evidente nas Figuras 18(a) e 18(b) onde o comportamento do fluxo de sólidos do centro do duto ao semi-centro é análogo, e ainda na Figura 18(b) continuam muito próximos até a região da parede.

Nos demais níveis, Figuras 18(c), 18(d) e 19 percebe-se uma concordância maior com os dados experimentais para os tempos de 5s, 6s e 7s, suas curvas sofrem a mesma tendência que a experimental, porém com valores de fluxo de sólidos menor, salvo no tempo de 5s, o qual é maior em algumas seções.

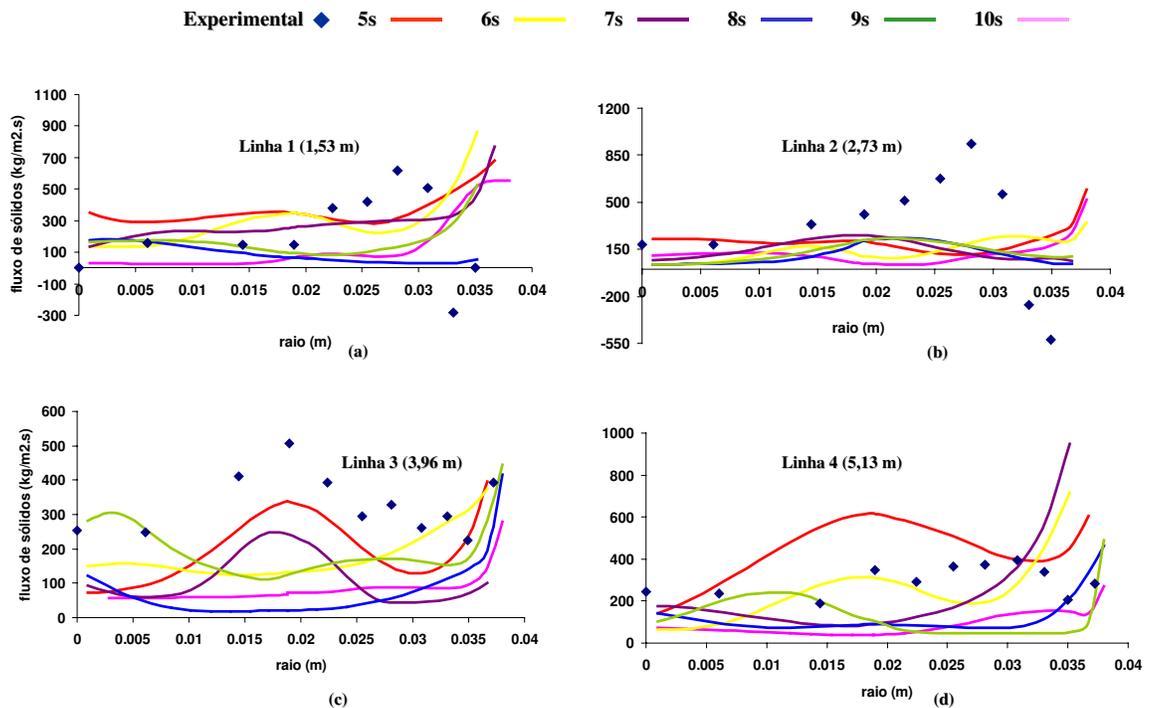


Figura 18. Avaliação radial temporal – seções inferiores do duto.

Quando dá análise dos 7s adiante, observa-se da linha 3 até a linha 7, uma forte oscilação para o segundo seguinte, no caso 8s, e quando se avança até os 10s o comportamento ainda se mantêm análogo para 8s, 9s e 10s.

A avaliação axial, mostrada na Figura 20, foi feita após a posse dos dados radiais. Para cada um dos níveis uma média destes dados caracteriza o valor do fluxo de partículas na direção ascendente.

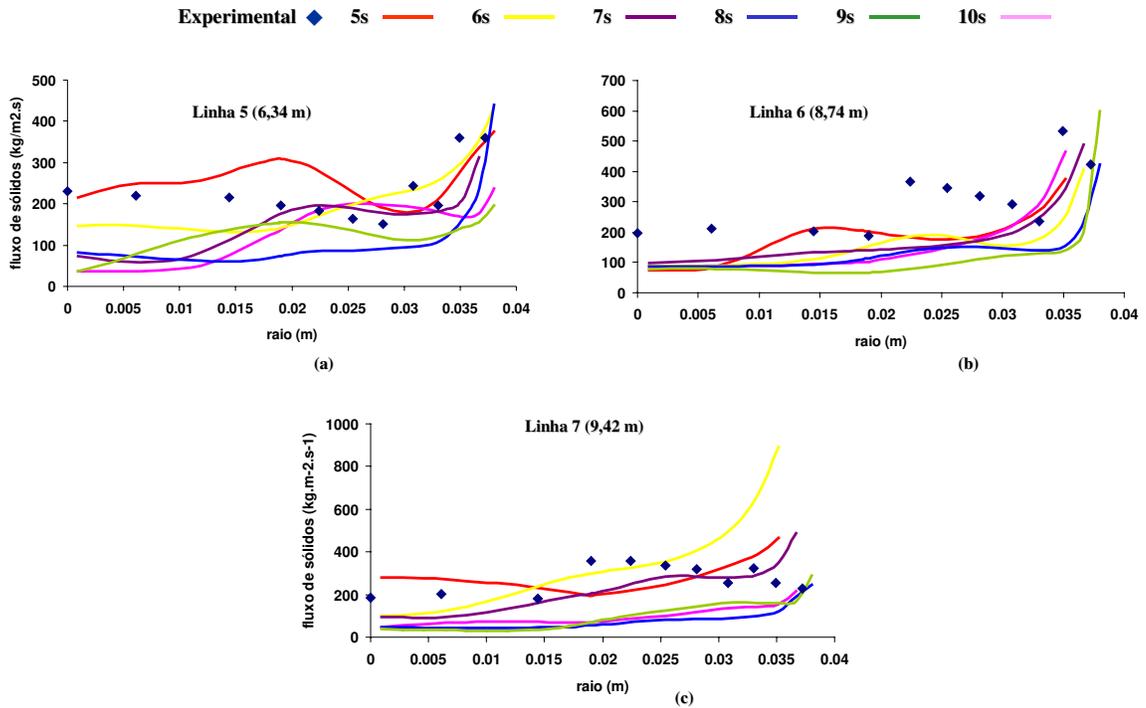


Figura 19. Avaliação radial temporal – metade superior do duto.

Nota-se que para os tempos de 5s, 6s e 7s os resultados coincidem com a faixa dos experimentais, porém com amplitudes maiores, ou seja, o espaçamento entre os pontos conseguintes é mais distanciado. No entanto é de suma importância às tais oscilações temporais, visto que se pode concluir que não há ainda uma constância do fluxo particulado ou uma leve variação nos ciclos completos pelo duto vertical. Percebe-se que esta pequena variação somente é adquirida próxima aos 10s, como se pode ver na Figura 20 comparando os dados para os tempos de 8s, 9s e 10s frente aos dados para os tempos 5s, 6s e 7s, onde as oscilações são maiores em todas as seções transversais. As amplitudes são suavizadas de maneira a diminuir a faixa de fluxo de sólidos. Entretanto, os valores obtidos para os fluxos encontrados nestes últimos tempos de simulação ainda não corroboram com os dados experimentais, tornando assim inválida a previsão do modelo matemático.

Diante disto procurou-se modificar o valor da viscosidade dinâmica da fase sólida, que apresenta influência direta no escoamento gás-sólido, este passou de $0,5\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ para uma situação invíscida. O valor é praticamente nulo, ou seja, considera-se a fase particulada invíscida, como explicitado no trabalho de ROPELATO (2004). O objetivo é conseguir alcançar os valores dos fluxos sólidos experimentais também para o tempo de 10s.

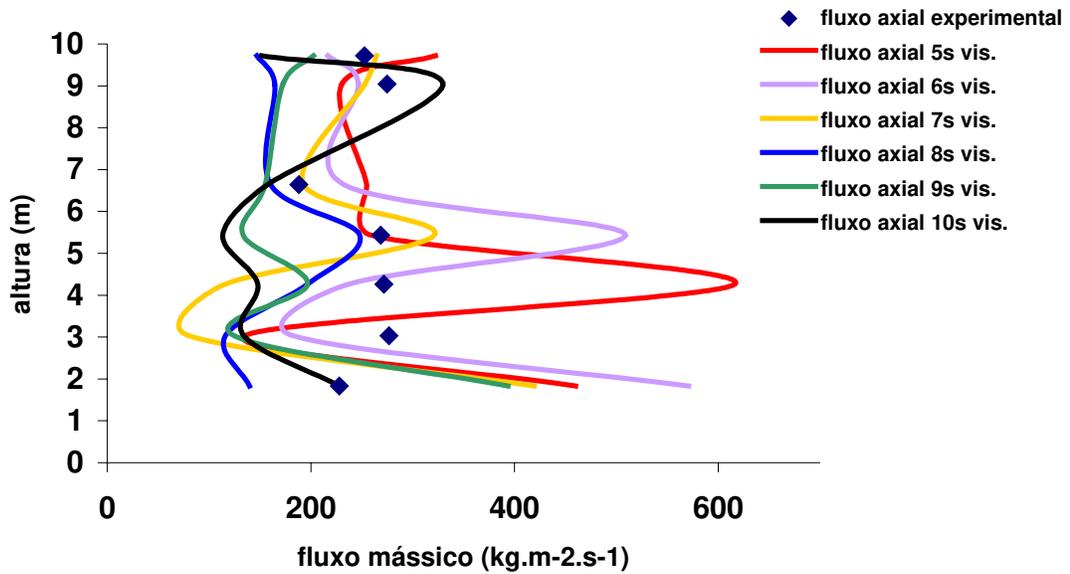


Figura 20. Avaliação axial temporal para o caso 2.

4.2.2. Fluxo de Sólidos quanto à Viscosidade da Fase Sólida

A análise dos resultados obtidos nas simulações para o caso 4, evidencia a grande influência da viscosidade dinâmica para a fase sólida na operação de fluidização rápida. Este caso diferencia-se do caso 2 apenas pelo valor prescrito para a viscosidade da fase sólida.

Caso 4. Modelo matemático: {

- massa - Equações 1 e 2
- momento - Equações 3 a 15
- turbulência - Equações 19 a 23
- continuidade entre as fases - Equação 24
- arraste - Equação 30 (Gidaspow e Ettehadieh)
- viscosidade da fase sólida - invíscida

Observa-se um comportamento axial do fluxo de sólidos instantâneo no interior do duto cilíndrico vertical análogo ao demonstrado pelo caso 2, o qual emprega à fase particulada o valor de $0,5\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ para a viscosidade dinâmica. No entanto o objetivo de amenizar as oscilações temporais e a amplitude do fluxo de partículas foi alcançado com

sucesso. Um melhoramento frente aos dados experimentais também é percebido, como apresentado pela Figura 21.

Quanto ao comportamento radial do fluxo de sólidos instantâneo, Figuras 22 e 23, nota-se após a terceira seção transversal, ou seja, em 3,96m de altura do equipamento, uma melhoria bastante significativa frente aos dados do caso 2 e aos experimentais. Evidenciando assim a grande influência da viscosidade dinâmica da fase sólida no escoamento.

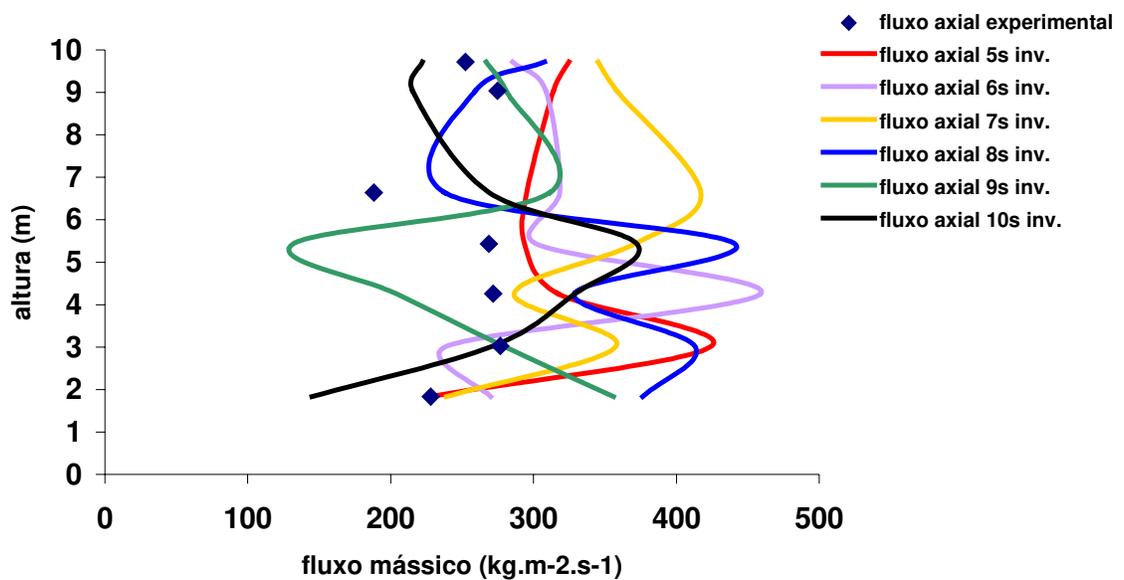


Figura 21. Avaliação axial temporal para o caso 4.

A diferença radial no fluxo de sólidos instantâneos entre os casos 2 e 4, é mais evidente na zona central diluída, onde a transferência de momento entre partícula-partícula é menor. Isto também acontece do semi-centro à parede, porém com uma maior aproximação entre os casos, visto ser esta uma região densa, o que facilita enormemente a transferência de momento entre os sólidos.

Os resultados obtidos com a simulação do caso 4, mostraram-se bem próximos aos dados experimentais de PÄRSSINEN e ZHU (2001), salvo nas duas primeiras seções transversais (região densa inferior), porém, devido à natureza da operação vigente, oscilações temporais ocorrem freqüentemente, tornando-se necessário o procedimento de média ponderada dos fluxos sólidos instantâneos.

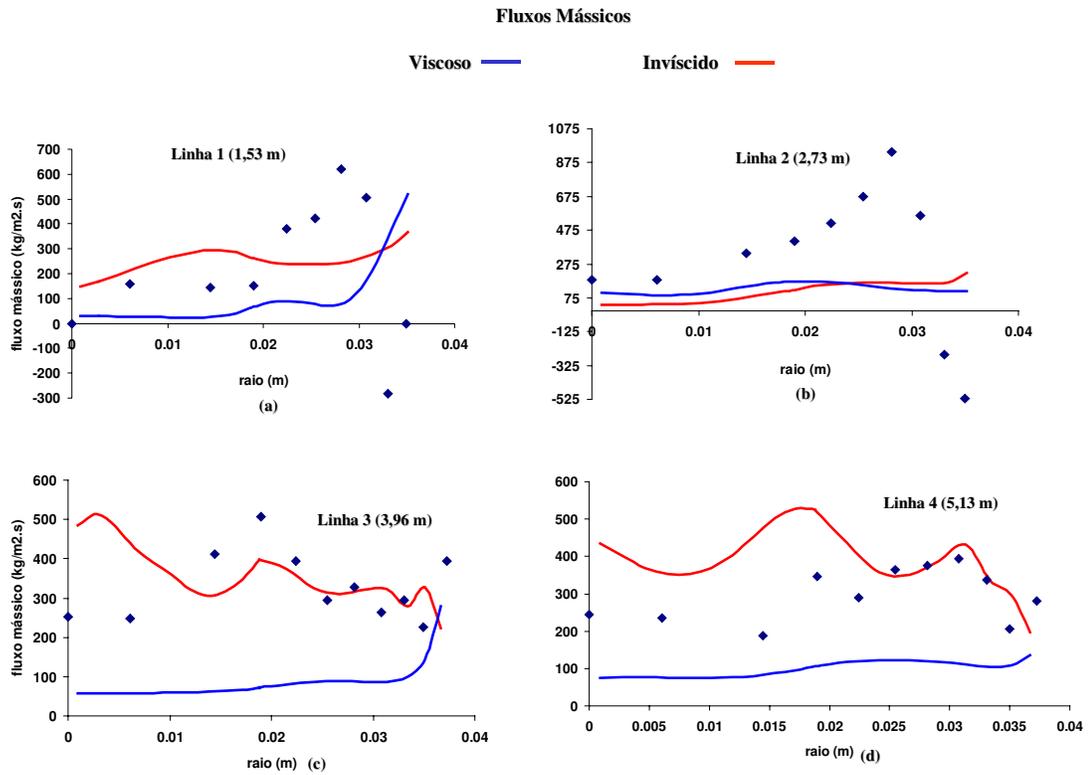


Figura 22. Comparação radial do fluxo entre os casos 2 e 4 – seções inferiores.

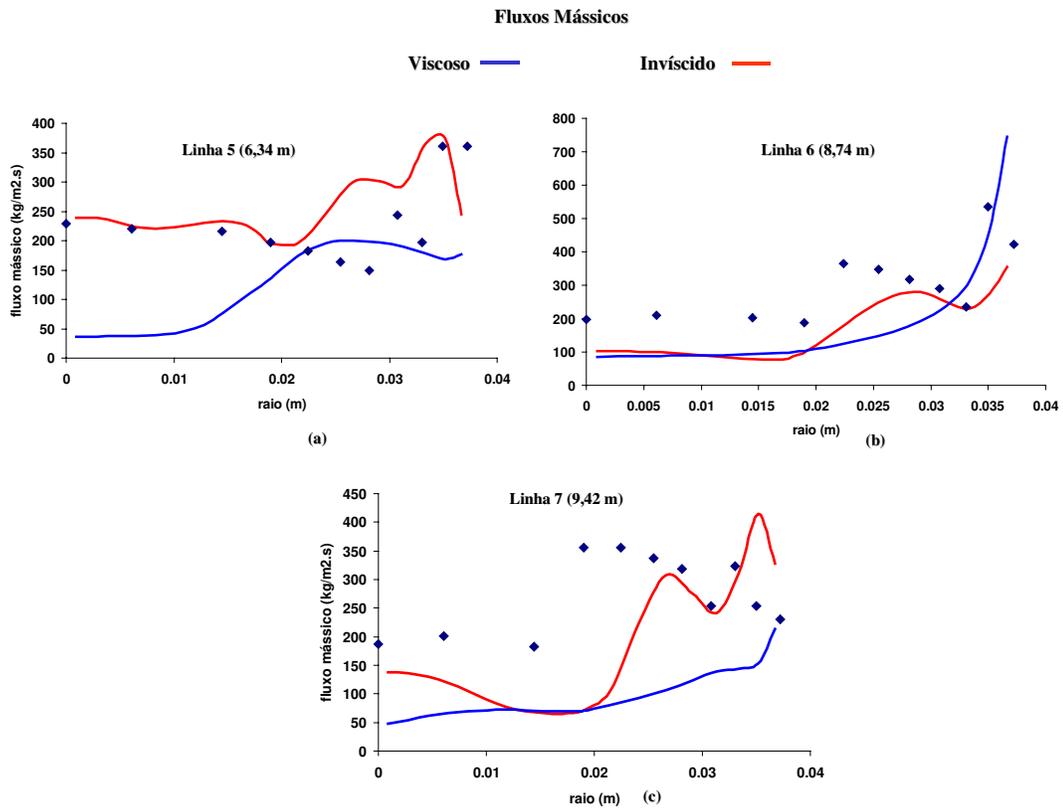


Figura 23. Comparação radial do fluxo entre os casos 2 e 4 – seções superiores.

4.2.3. Frações Volumétricas e Velocidade da Fase Sólida Particulada

Os perfis de concentração e velocidade das partículas no interior do duto vertical são retirados do caso 4, ou seja, avaliando-se o fluxo de sólidos em suas principais componentes, concentração e velocidade, num tempo real de 10s, e submetidas ao procedimento de média transiente a cada iteração. Estes procedimentos renderam a pesquisa uma alta concordância com os dados experimentais de concentração e velocidade dos sólidos de PÄRSSINEN e ZHU (2001), a qual é apresentada a seguir nos Itens 4.2.3.1 e 4.2.3.2, respectivamente.

4.2.3.1. Perfil de Frações Volumétricas da Fase Sólida Particulada

De posse dos resultados médios obtidos com a simulação do caso 4 para a concentração de partículas durante a operação de fluidização rápida, observou-se nas seções transversais três zonas distintas, zona central diluída (0m – 0,02m), zona intermediária (0,02m – 0,032m) e zona da parede (0,032m – 0,04m), ao longo de todo o equipamento, e três regiões axiais também diferentes, região densa inferior (0m – 4m), região desenvolvida (4m – 8m) e região diluída do topo (8m – 10m), como também foram encontradas por PÄRSSINEN e ZHU (2001) em seus estudos.

As Figuras 24 a 30 apresentam o comportamento radial das partículas no interior do duto, cada uma delas ilustra de duas maneiras os dados obtidos, ao lado esquerdo o gráfico linha (dados experimentais versus resultados numéricos) e ao lado direito o plano em cores, gerado nas mesmas escalas dos resultados obtidos. A linha amarela, posicionada ao centro, existente nos planos em cores mostra a posição de onde foram retirados os resultados.

Nota-se que em todas as seções transversais a concentração de sólidos permanece quase que constante na zona central diluída, aumentando significativamente em direção a zona da parede, alcançando freqüentemente valores elevados em torno de 40% – 50%. Em geral, a concentração de sólidos é mais elevada na região densa inferior (abaixo dos 4m) do que na região superior em todas as posições radiais.

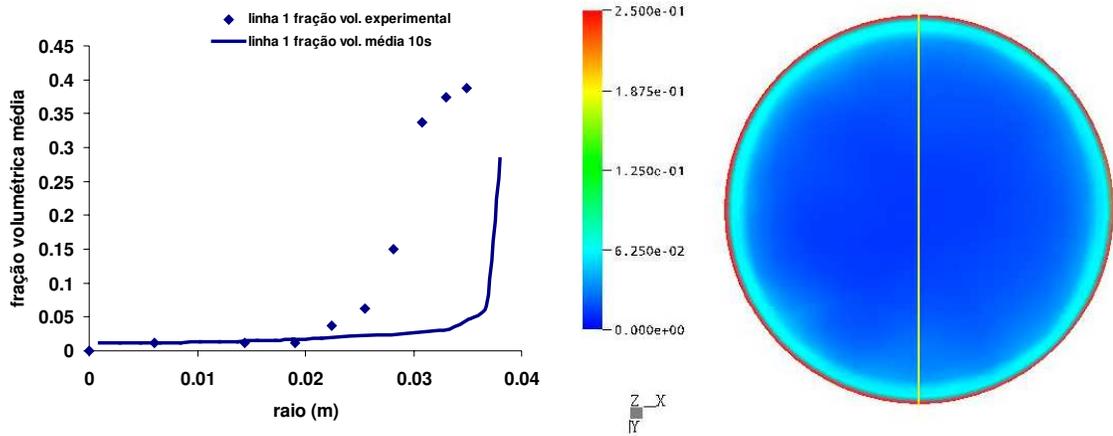


Figura 24. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 1,53m.

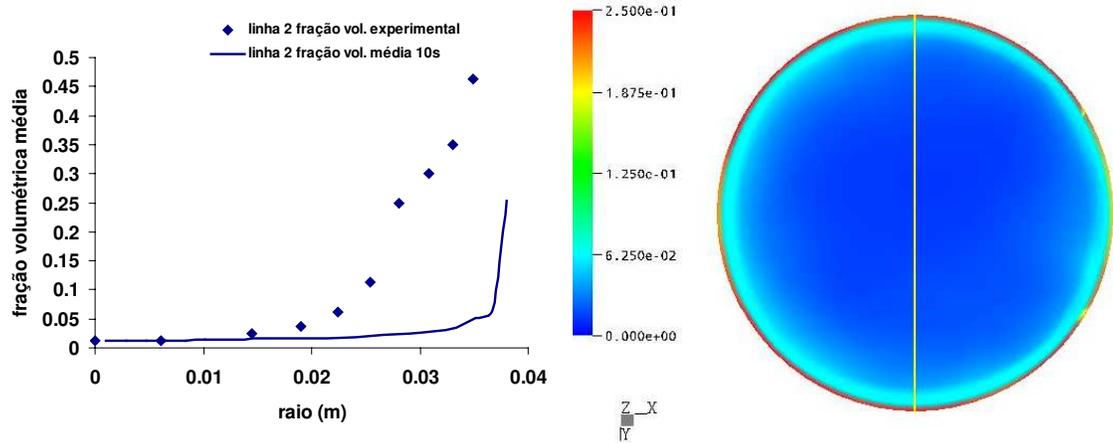


Figura 25. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 2,73m.

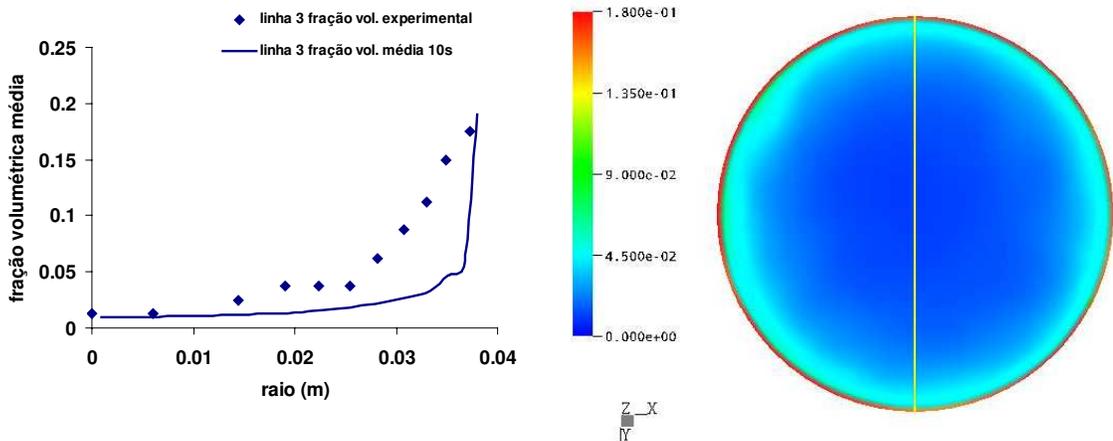


Figura 26. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 3,96m.

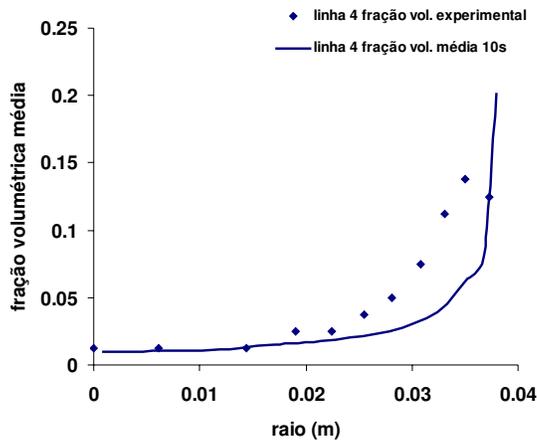


Figura 27. Perfil radial da fração volu seção transversal na pos

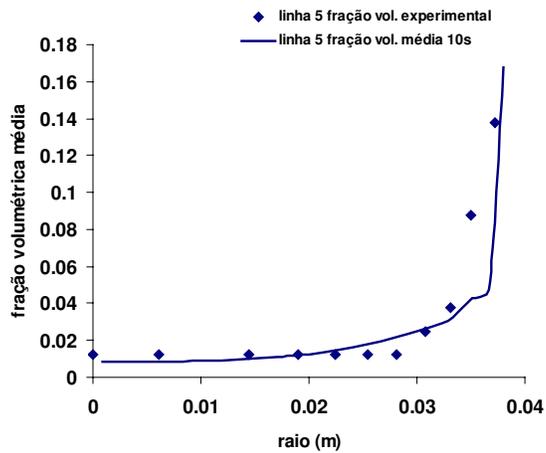


Figura 28. Perfil radial da fração volu seção transversal na pos

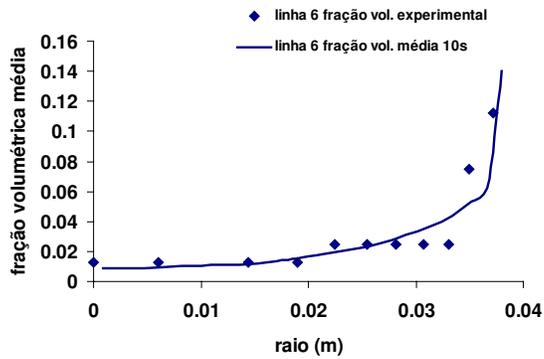


Figura 29. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 8,74m.

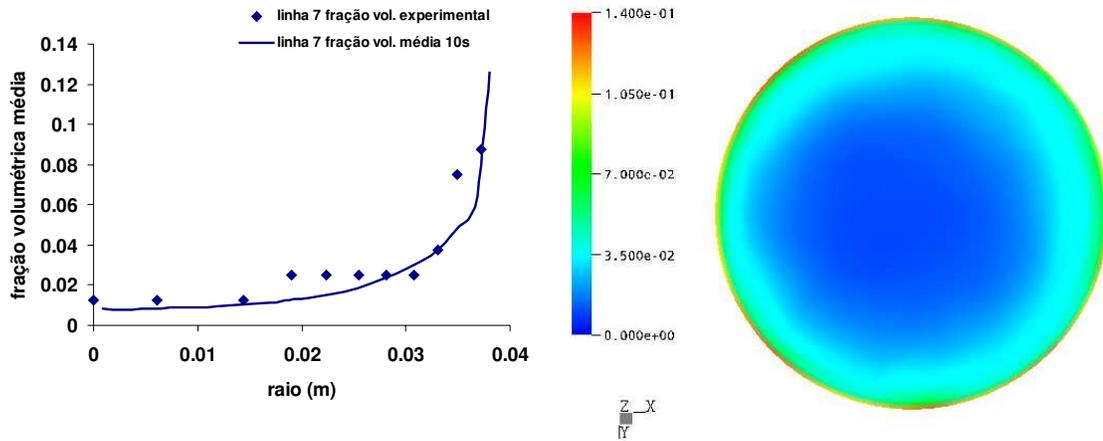


Figura 30. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 9,42m.

O comportamento axial da fração volumétrica da fase sólida particulada é apresentado nas Figuras 31 e 32, onde se percebe que não existe mudança significativa nas três zonas radiais e a falta de corroboração entre os dados experimentais e os resultados numéricos na região densa inferior, vista também radialmente. Nas demais regiões a aproximação dos resultados é muito boa, a concentração de sólidos é mais baixa na zona central diluída do que na zona da parede em todas as posições axiais, no entanto ao longo do eixo do duto vertical a concentração de partículas diminui na zona da parede, alcançando valores menores que 15% na região desenvolvida, em acordo com os dados experimentais.

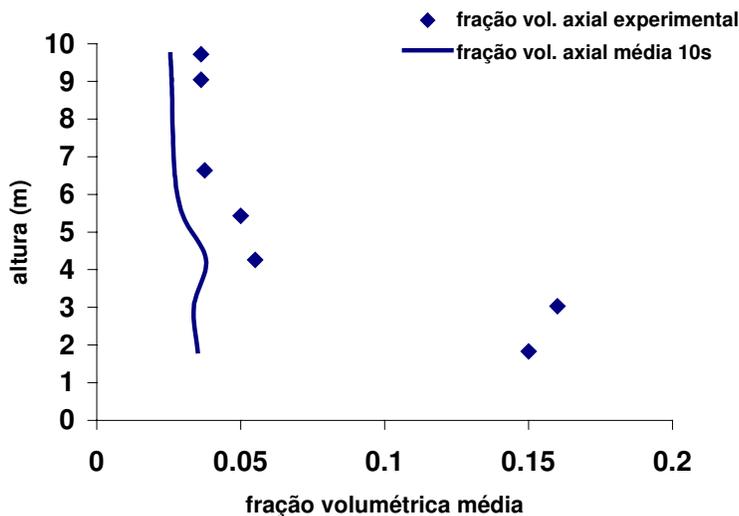


Figura 31. Perfil axial da fração volumétrica da fase sólida particulada.

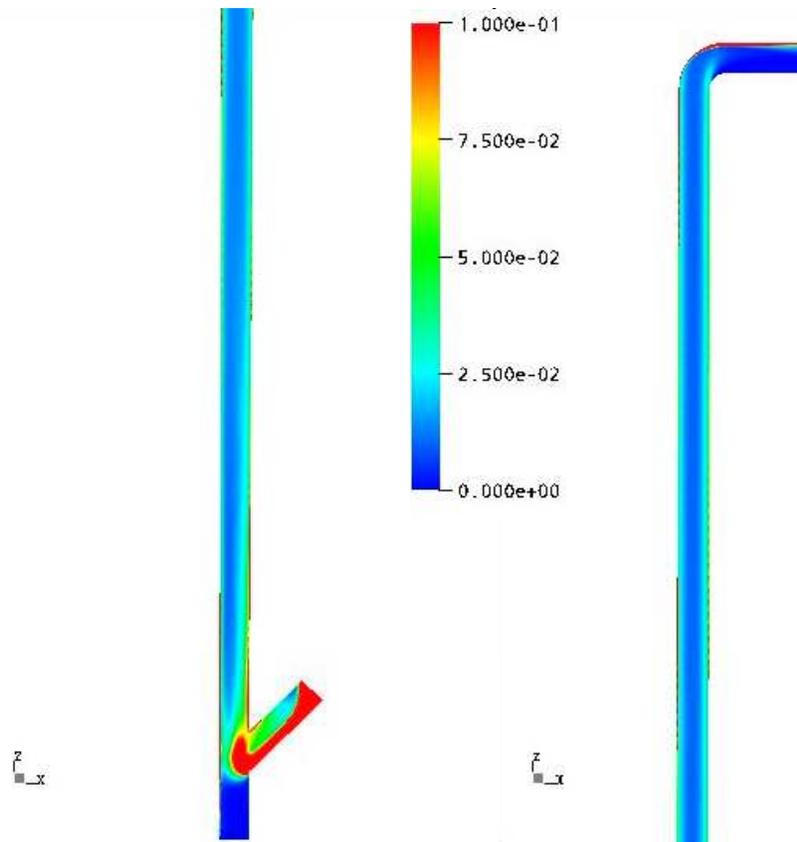


Figura 32. Perfil axial da fração volumétrica da fase sólida particulada – plano em cores.

4.2.3.2. Perfil de Velocidade da Fase Sólida Particulada

De posse dos resultados médios obtidos com a simulação do caso 4 para a velocidade da fase sólida particulada durante a operação de fluidização rápida, observou-se nas seções transversais três zonas distintas, zona central rápida (0m – 0,016m), zona intermediária (0,016m – 0,035m) e zona da parede (0,035m – 0,04m), ao longo de todo o equipamento, e três regiões axiais também diferentes, região densa inferior (0m – 4m), região desenvolvida (4m – 8m) e região do topo (8m – 10m), como também foram encontradas por PÄRSSINEN e ZHU (2001) em seus estudos.

As Figuras 33 à 39 apresentam o comportamento radial da velocidade da fase sólida particulada e, como no Item anterior, cada uma delas ilustra de duas maneiras os dados obtidos, ao lado esquerdo o gráfico de linha (dados experimentais versus resultados numéricos) e ao lado direito o plano em cores. A linha amarela, posicionada ao centro,

existente nos planos em cores é a mesma utilizada pelo código comercial para os cálculos numéricos da seção.

Nota-se na região desenvolvida, que na zona central (0m – 0,016m) a aceleração é maior do que nas outras duas zonas radiais, conduzindo a um perfil quase que linear da velocidade em todas as seções transversais. Esta região desenvolvida inicia-se pela altura de 4m, onde o perfil de velocidade axial começa a diferenciar-se para um perfil parabólico.

Na zona da parede (0,035m – 0,04m) a velocidade da partícula permanece baixa até aproximadamente 6 m de altura e aumenta lentamente até a região de topo do duto. Sob o alto fluxo de sólidos de $300\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$, pode-se ver as partículas fluírem em sua grande maioria ascendentemente na região da parede (*upflow*).

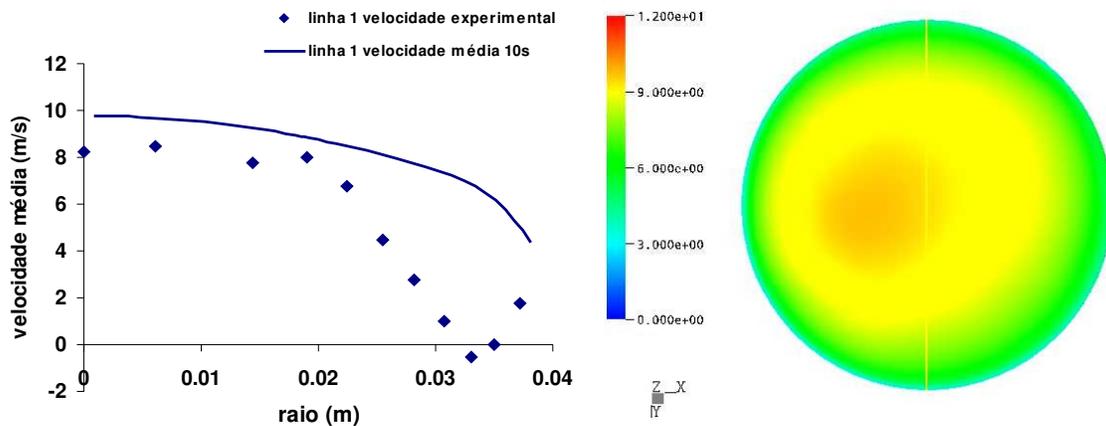


Figura 33. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 1,53m.

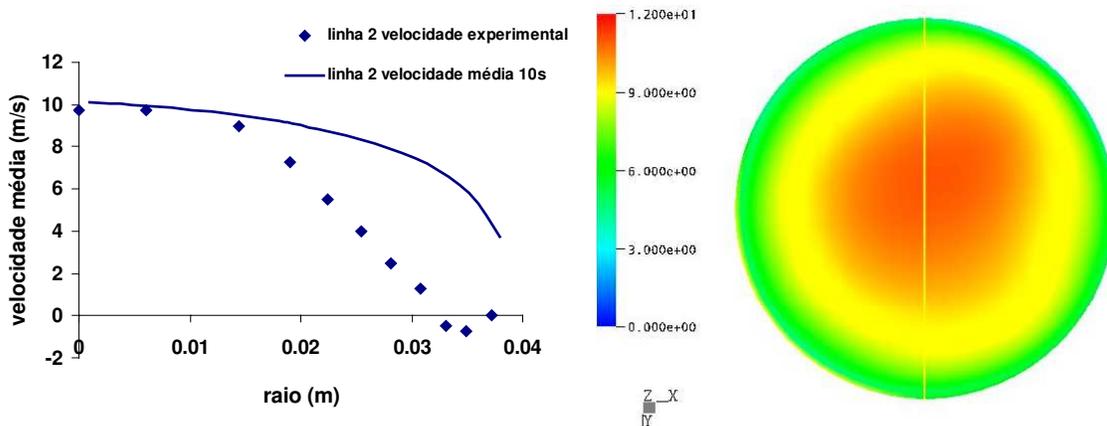


Figura 34. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 2,73m.

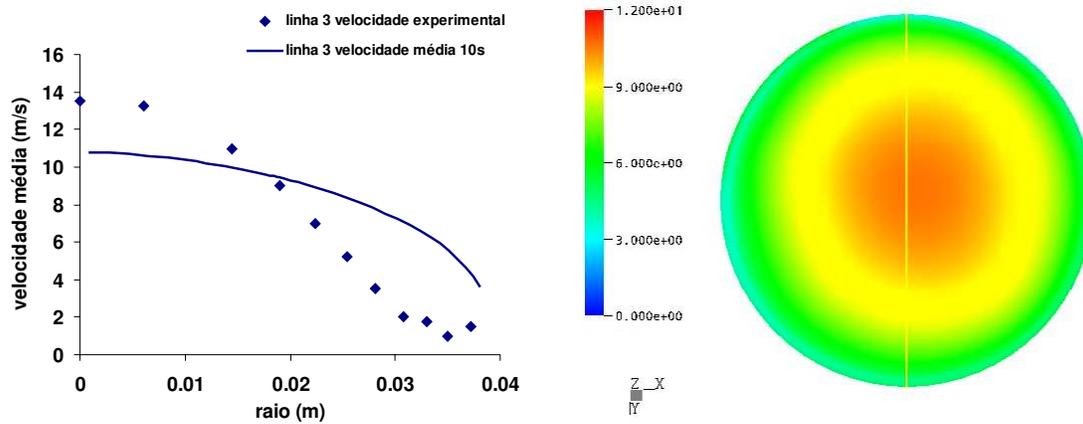


Figura 35. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 3,96m.

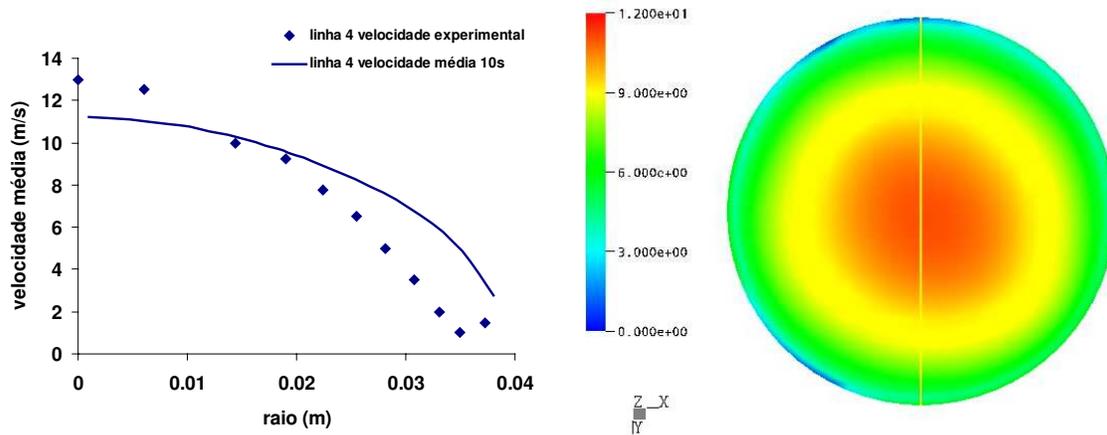


Figura 36. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 5,13m.

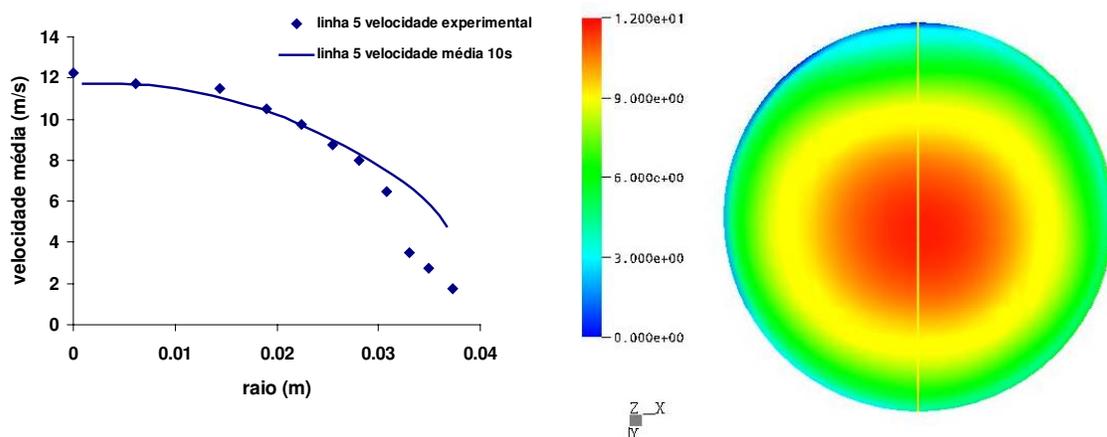


Figura 37. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 6,34m.

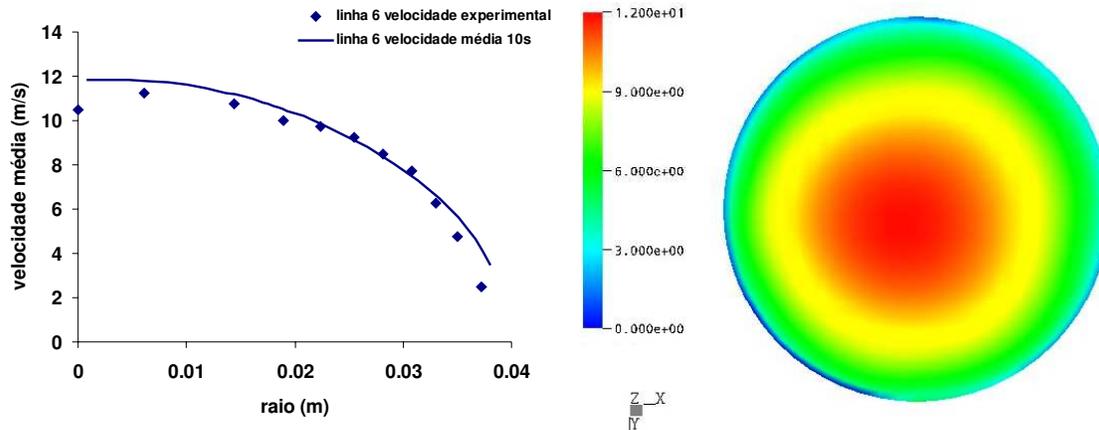


Figura 38. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 8,74m.

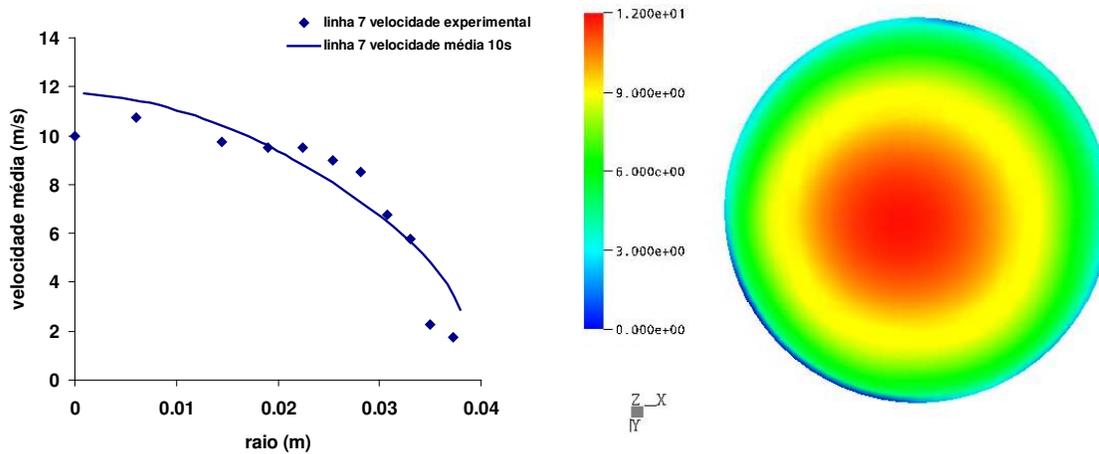


Figura 39. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada seção transversal na posição axial 9,42m.

O comportamento axial da velocidade da fase sólida particulada é apresentado nas Figura 40 e 41, onde se percebe, assim como para os dados das frações volumétricas, a falta de corroboração entre os dados experimentais e os resultados numéricos na região densa inferior, vista também radialmente. Nas demais regiões a aproximação dos resultados é bastante satisfatória, a velocidade da fase sólida particulada é, de fato, mais alta na zona central diluída do que na zona da parede em todas as posições axiais, no entanto ao longo do eixo do duto vertical normalmente e vagarosamente a velocidade da fase aumenta na zona da parede, alcançando valores maiores que $10\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ na região desenvolvida, em acordo com os dados experimentais.

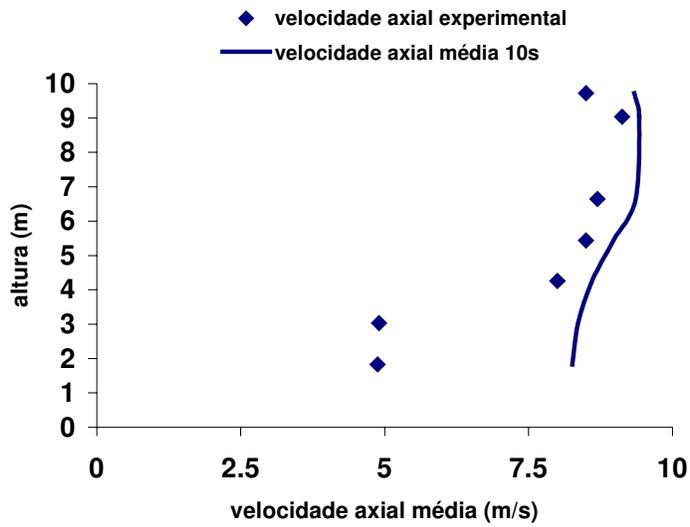


Figura 40. Perfil axial de velocidade da fase sólida particulada.

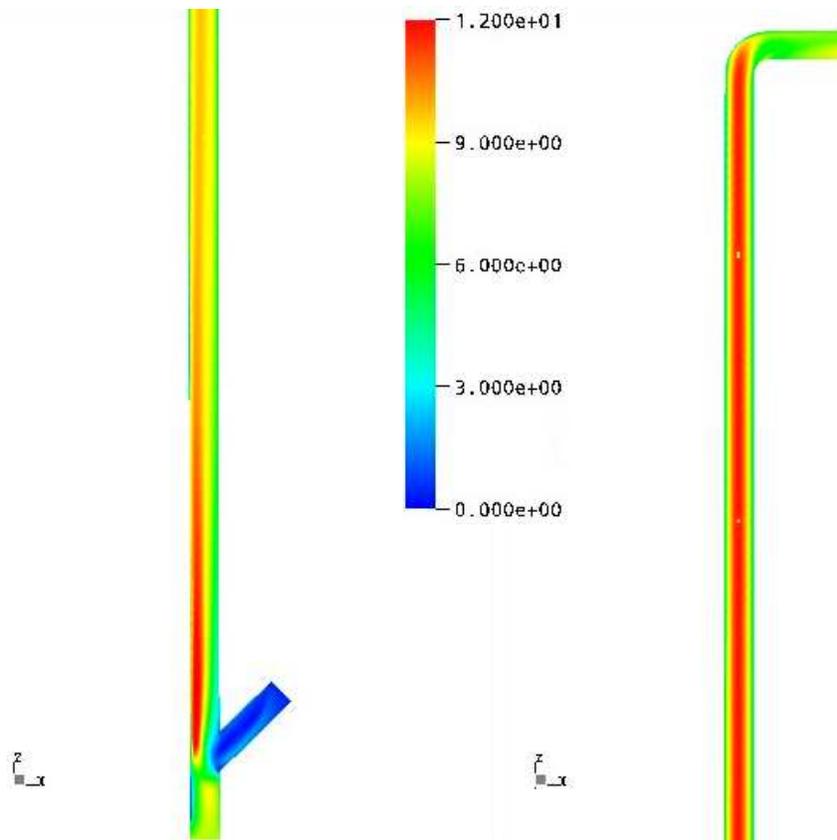


Figura 41. Perfil axial de velocidade da fase sólida particulada – plano em cores.

4.2.4. Caso 5 e Verificação das Oscilações Temporais Médias

Visto a concordância insatisfatória dos resultados obtidos com a simulação do caso 4, para a concentração e velocidade média da fase sólida particulada, com os dados experimentais somente na região densa inferior, foi simulado um novo caso, denominado caso 5, na tentativa de sanar tal problema, além de objetivar a garantia da não oscilação temporal destas propriedades.

Este novo caso diferencia-se do caso 4 apenas pela modificação, no décimo segundo de simulação real, da viscosidade dinâmica da fase sólida, a qual passa a ter um valor prescrito igual à viscosidade da fase gasosa, ou seja, $1,85 \times 10^{-5} \text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$, o que indica que as partículas têm o mesmo efeito viscoso da fase fluida, estando presentes nela ou não, diferentemente de quando a sua viscosidade é maior ou menor.

O caso 5, foi simulado de 10s até 14s de tempo real, e após o mesmo procedimento de média realizado para o caso 4, nos Itens anteriores aplicou-se a este. As Figuras 42 à 48 apresentam os resultados alcançados da fração volumétrica radial da fase sólida particulada, enquanto que as Figuras 49 e 50 mostram os resultados da fração volumétrica média axial.

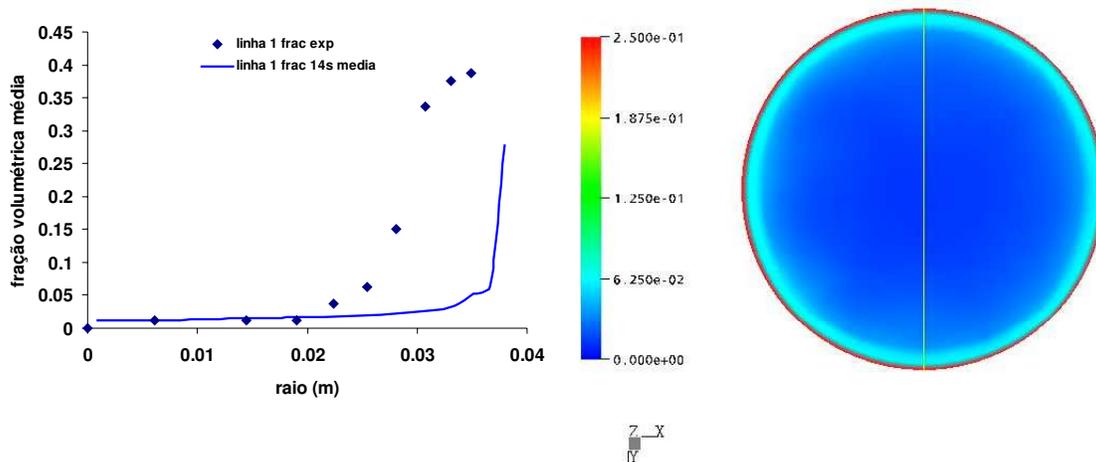


Figura 42. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 1,53m.

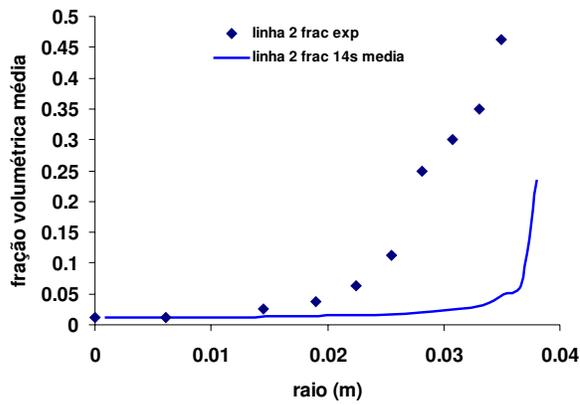


Figura 43. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 2,73m.

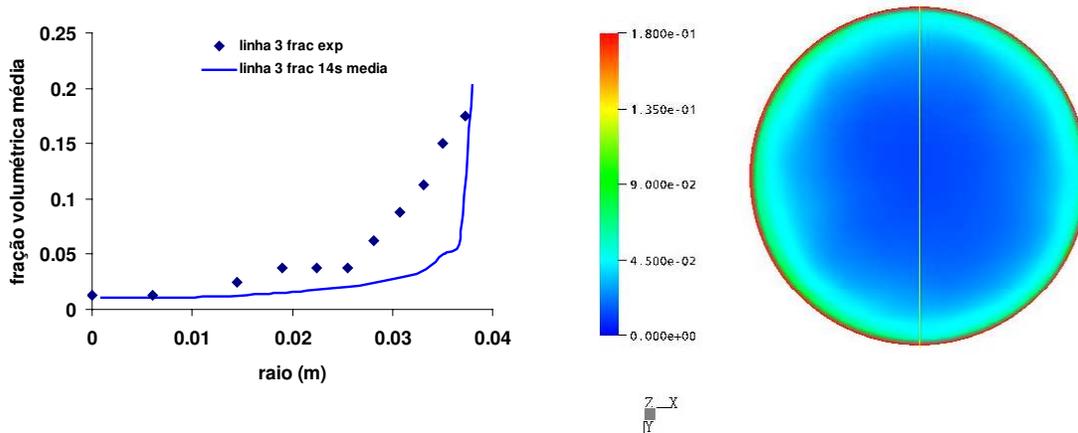


Figura 44. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 3,96m.

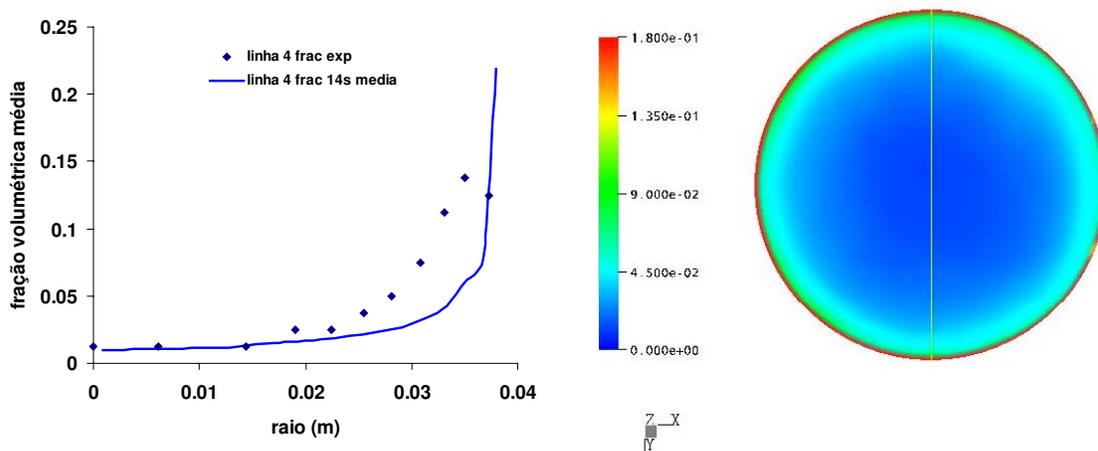


Figura 45. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 5,13m.

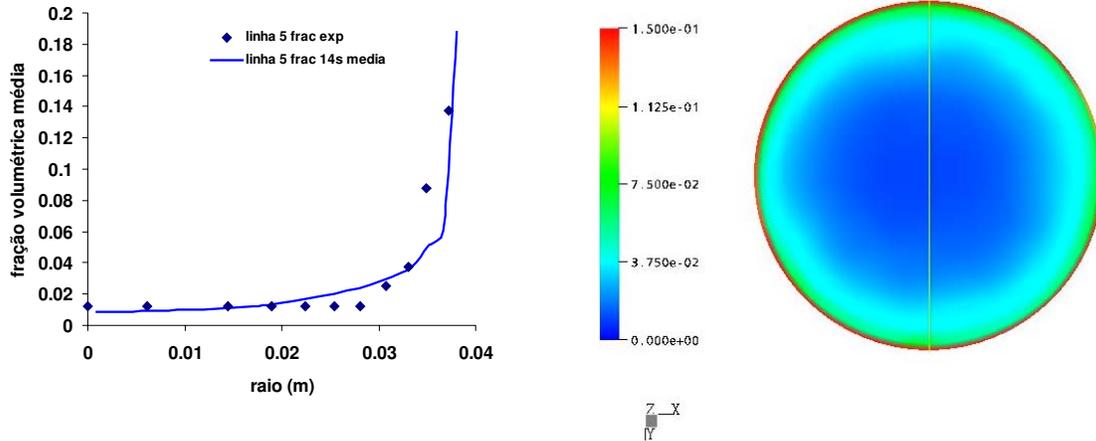


Figura 46. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 6,34m.

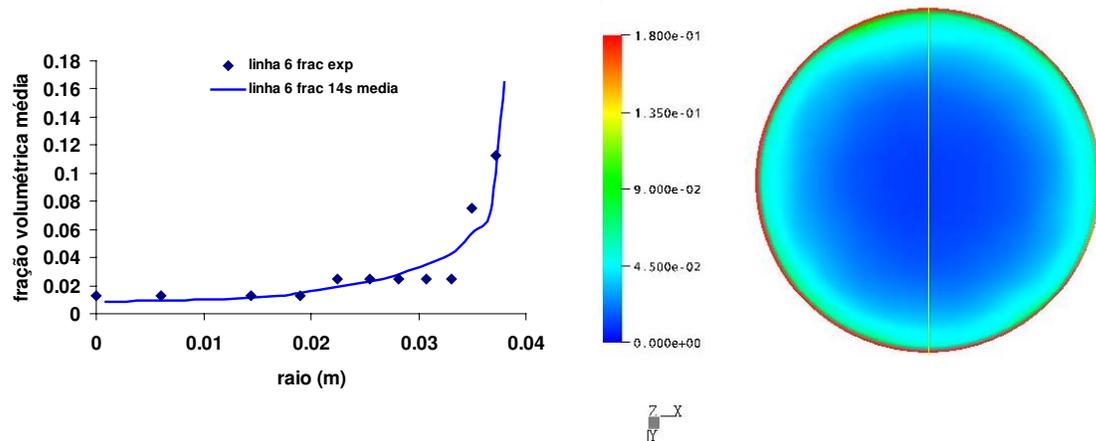


Figura 47. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 8,74m.

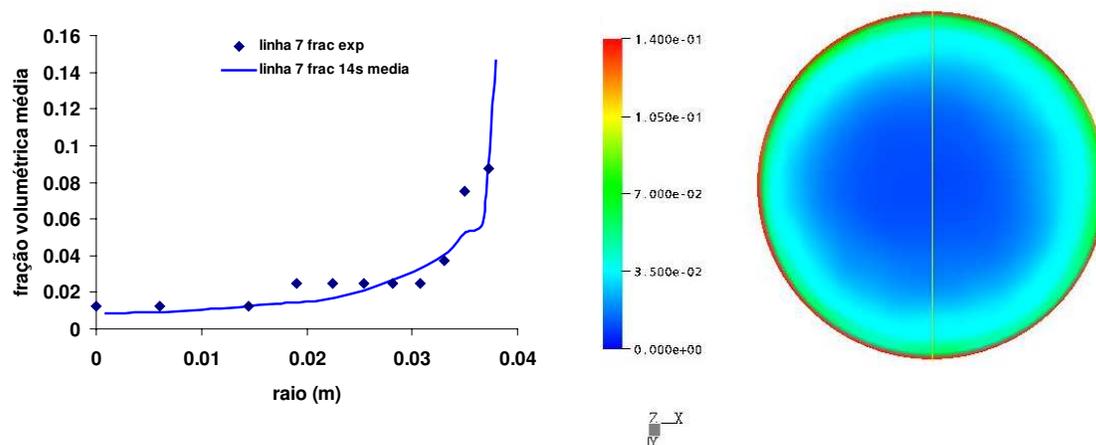


Figura 48. Perfil radial da fração volumétrica da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 9,42m.

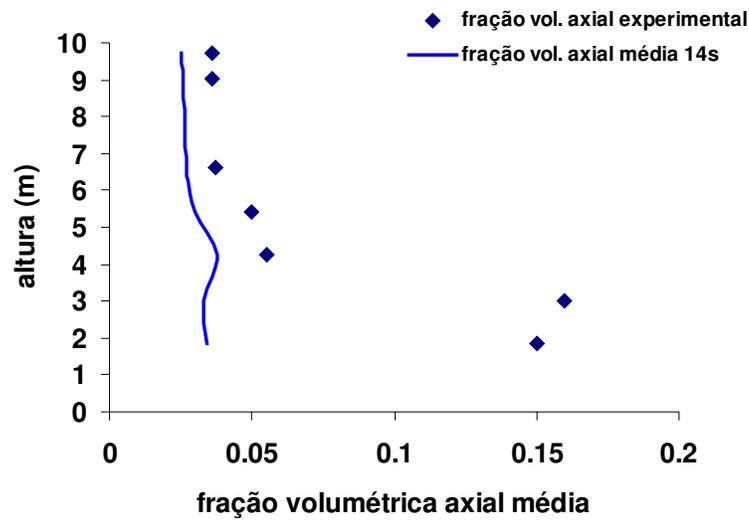


Figura 49. Perfil axial da fração volumétrica da fase particulada – caso 5.

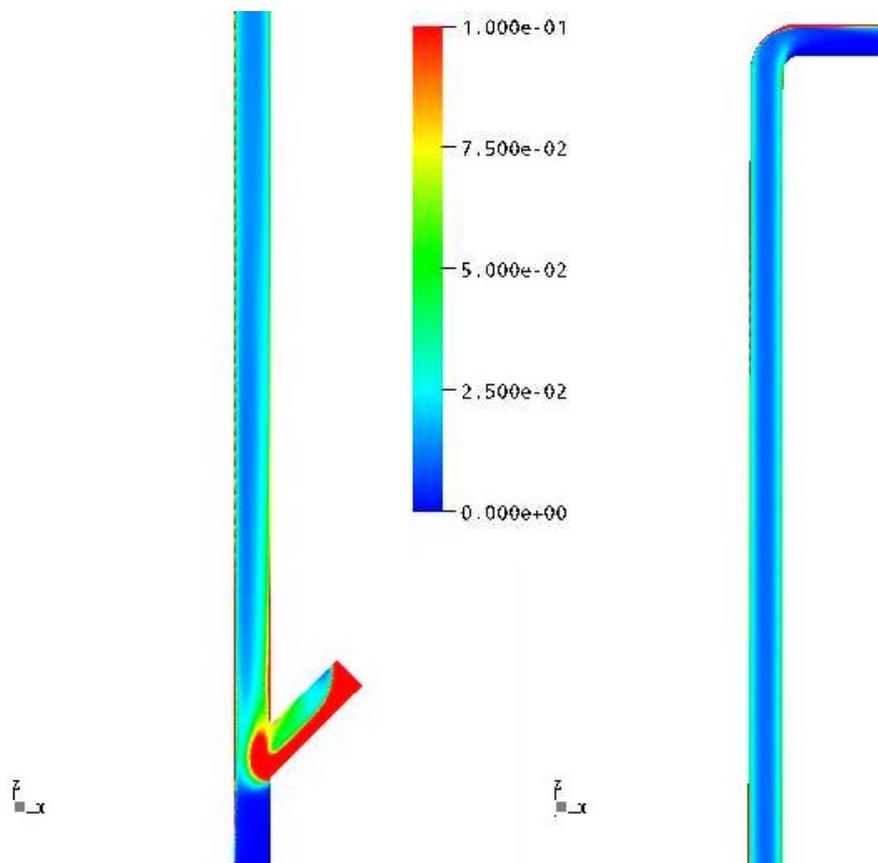


Figura 50. Perfil axial da fração volumétrica da fase sólida particulada caso 5 – plano em cores.

Na avaliação dos resultados da fração volumétrica média radial e axial da fase particulada para o caso 5, verifica-se que nenhuma alteração significativa quanto a aproximação dos resultados numéricos com os dados experimentais ocorre ao longo do equipamento, nos quatro segundos a frente de simulação. Justifica-se assim o tempo de simulação empregado, visto que não há variações da propriedade num tempo além, porém o problema na região densa inferior não desapareceu, levando a acreditar na necessidade de maior refinamento da malha numérica nesta região em pesquisa futura.

As Figuras 51 à 57 apresentam os resultados obtidos para a velocidade média radial da fase sólida particulada, em comparação com os dados experimentais, enquanto que as Figuras 58 e 59 mostram os resultados para a velocidade média axial da fase sólida particulada.

Na avaliação destes resultados da velocidade média da fase sólida particulada para o caso 5, observa-se (como para a fração volumétrica média da fase sólida particulada) que nenhuma alteração significativa é verificada quanto à aproximação dos resultados numéricos deste caso com o caso 4 e com os dados experimentais, estes continuam em muito boa concordância. Os mesmos problemas verificados anteriormente na região densa inferior permanecem. A partir da região desenvolvida nota-se uma leve mudança nos resultados da velocidade, o que leva a concluir na possibilidade da simulação de um novo caso, o qual desde o início terá como valor prescrito da viscosidade dinâmica da fase sólida o mesmo da fase gasosa.

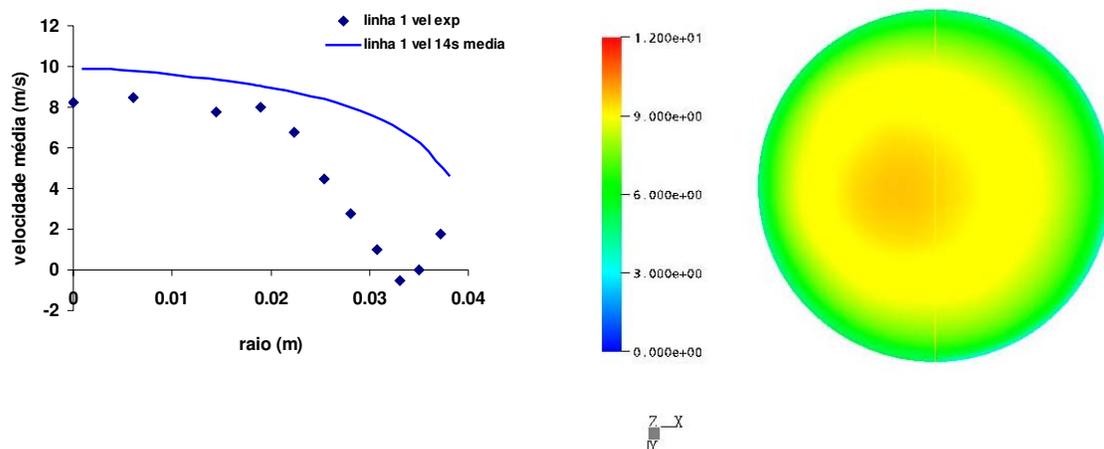


Figura 51. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 1,53m.

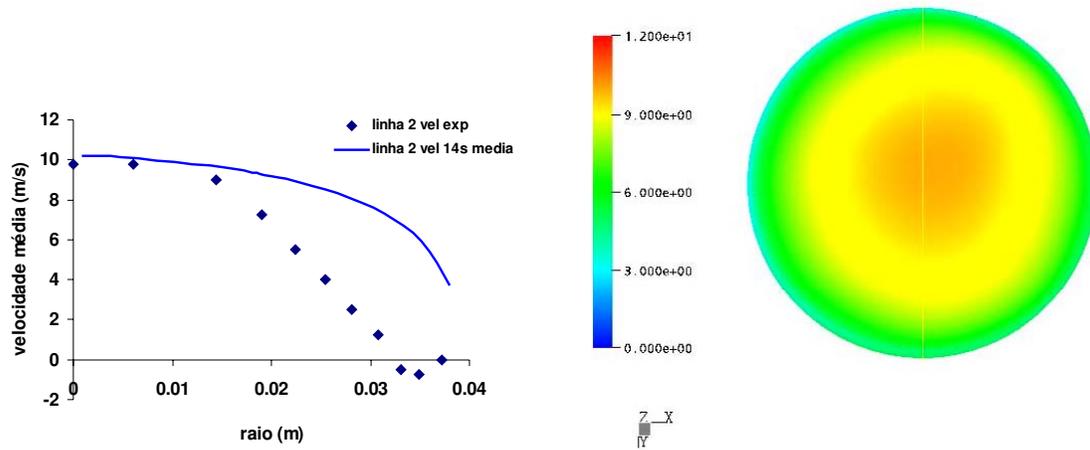


Figura 52. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 2,73m.

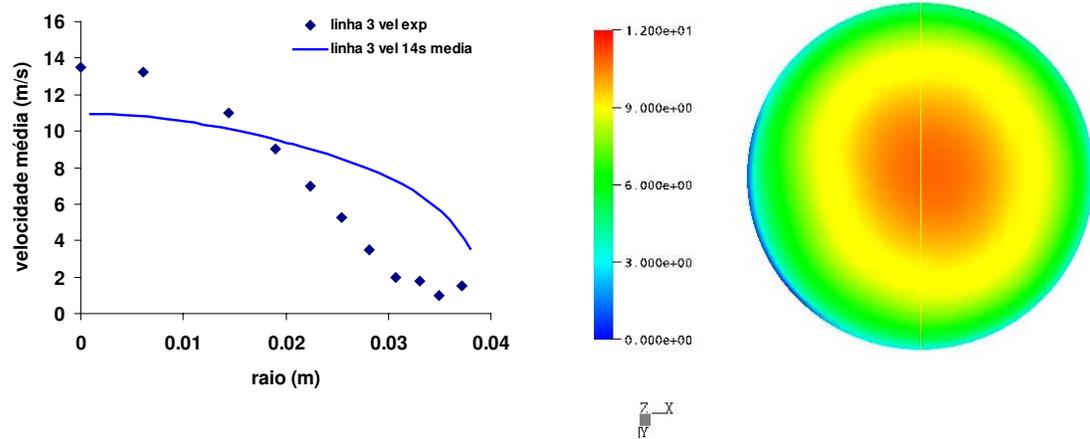


Figura 53. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 3,96m.

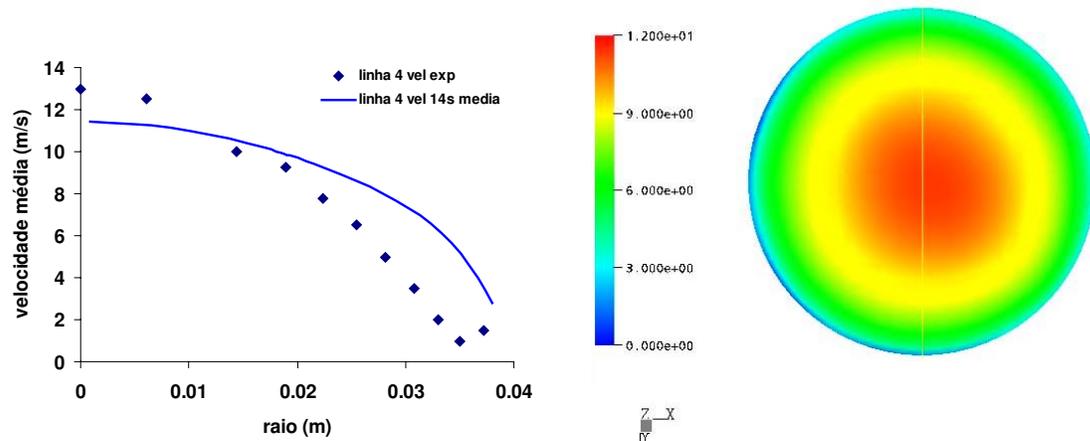


Figura 54. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 5,13m.

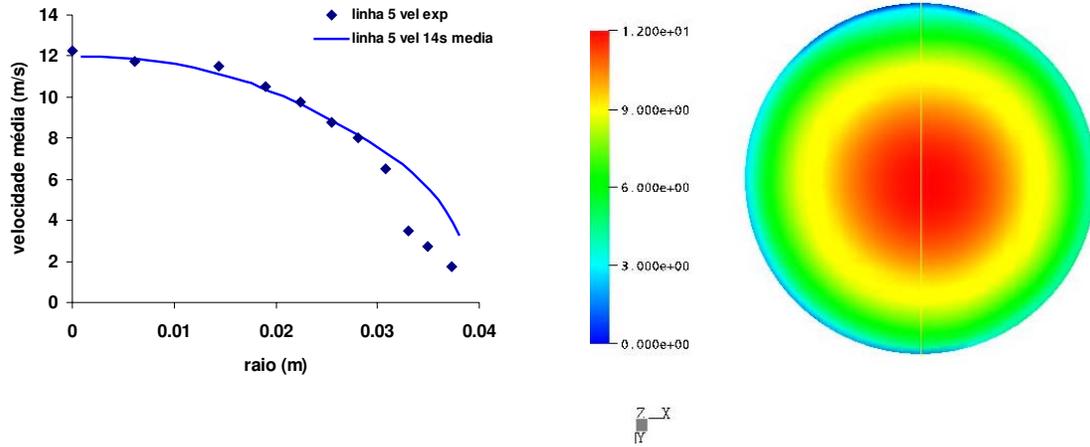


Figura 55. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 6,34m.

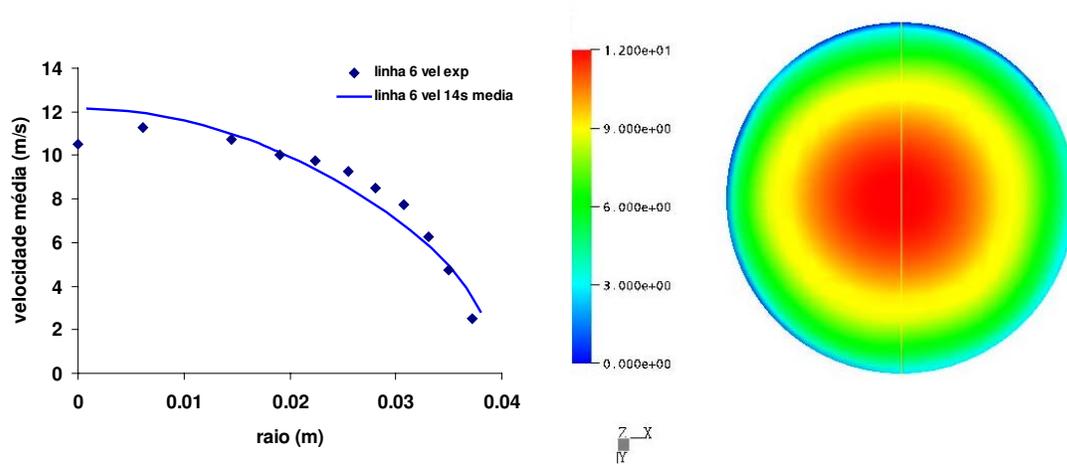


Figura 56. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 8,74m.

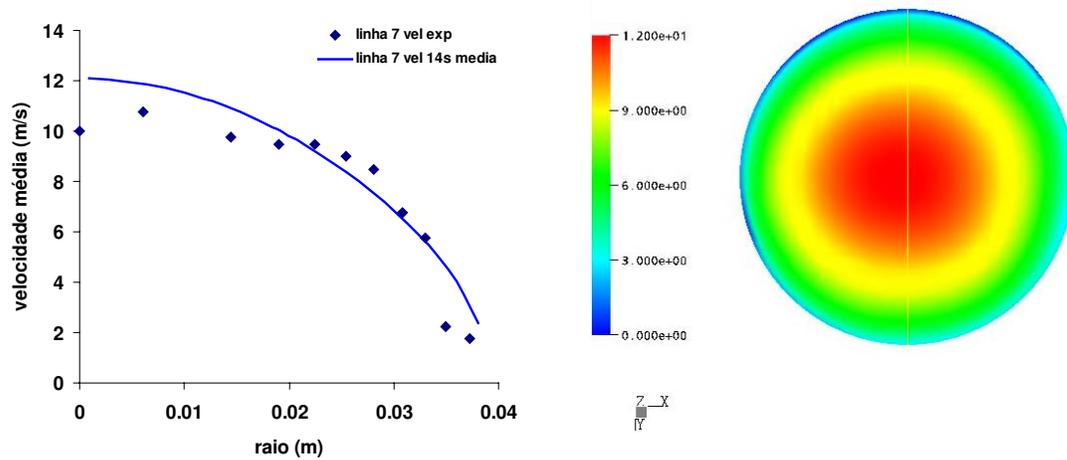


Figura 57. Perfil radial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 seção transversal na posição axial 9,42m.

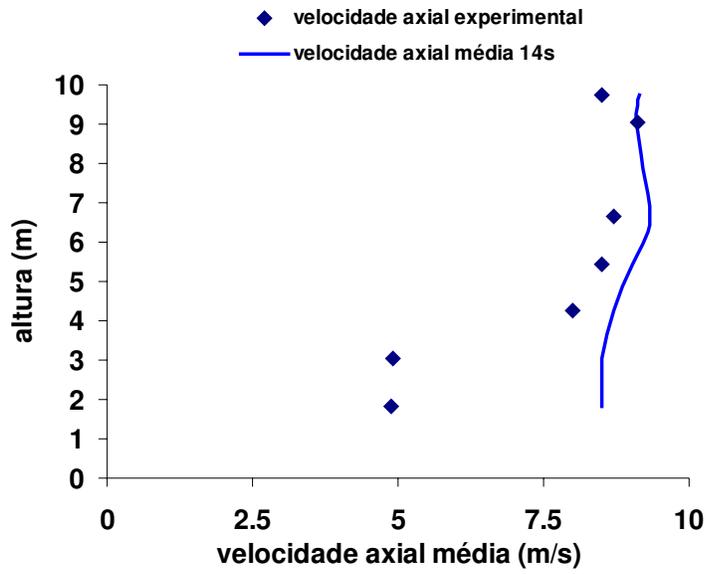


Figura 58. Perfil axial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5.

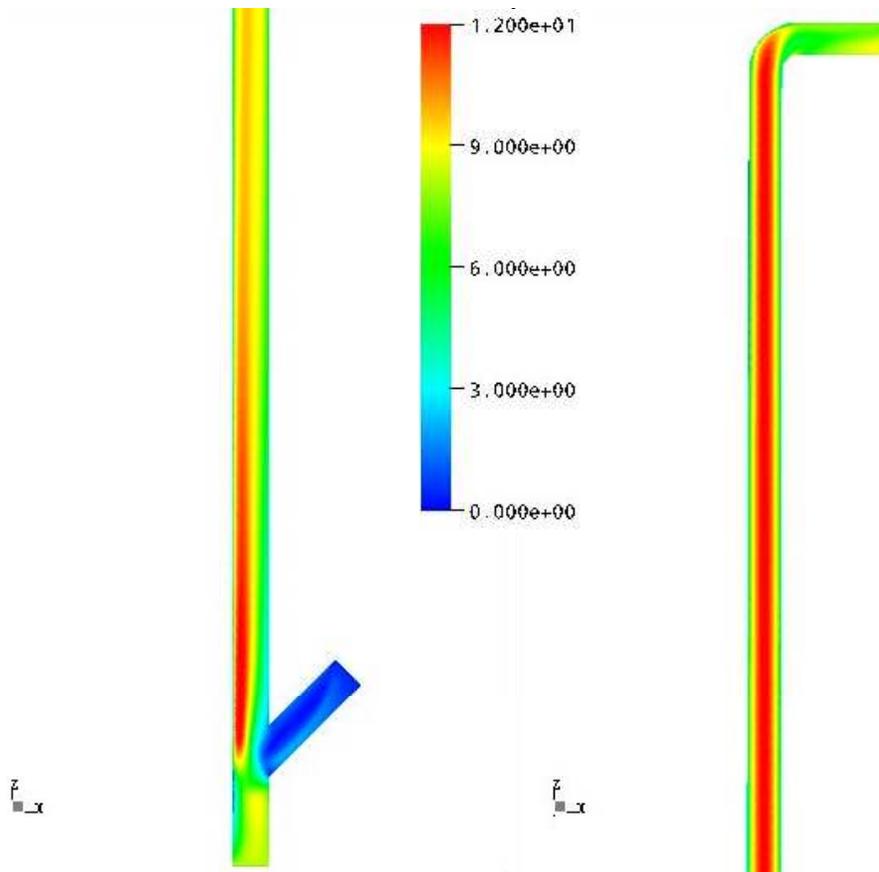


Figura 59. Perfil axial de velocidade da fase sólida particulada – caso 5 – plano em cores.

Capítulo 5.

Conclusões e Sugestões

Os resultados obtidos nas simulações, com relação às influências das variáveis do sistema, correlações de arraste e viscosidade dinâmica da fase sólida, sobre o desenvolvimento do escoamento gás-sólido, apresentaram-se em acordo com as teorias expostas ao longo da pesquisa. Justificaram-se assim, os modelos matemáticos e a malha numérica utilizados.

Os resultados obtidos referentes as correlações de arraste gás-sólido empregadas nas simulações, mostraram que os casos 1 e 3, modelo de Wen e Yu e modelo de Massarani e Coelho respectivamente, são ineficientes quanto a predição do escoamento gás-sólido até o tempo prescrito. Justificando assim a eliminação destes modelos, e a escolha do modelo de Gidaspow e Ettehadieh para a continuação da pesquisa, o qual rendeu bons resultados.

A partir da análise das Figuras 24 a 32, perfis de fração volumétrica da fase sólida particulada, e 33 a 41, perfis de velocidade da fase sólida particulada, vê-se que, para o caso 4, onde são empregados a correlação de arraste de Gidaspow e Ettehadieh e o comportamento invíscido da fase sólida, tem-se uma boa concordância entre os resultados obtidos, o que vem a confirmar a representatividade dos resultados.

Do mesmo modo, a partir da análise das Figuras 42 a 50, perfis de fração volumétrica da fase sólida particulada, e 51 a 59, perfis de velocidade da fase sólida particulada, nota-se também para o caso 5, onde são empregados a correlação de arraste de Gidaspow e Ettehadieh e o comportamento invíscido da fase sólida até os dez primeiros segundos de simulação, e viscoso com viscosidade da fase sólida particulada de $1,85 \times 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ até o fim da simulação (14s), uma grande concordância entre os resultados obtidos.

A ferramenta computacional empregada na pesquisa, própria para a simulação, mostrou-se bastante eficaz e proveitosa para o escoamento gás-sólido em um duto cilíndrico vertical. O código comercial agrega dentro de si uma grande quantidade de algoritmos prontos, o que reduz substancialmente os esforços do operador, e/ou é capaz de acoplar equações novas às já existentes.

A malha numérica tridimensional em coordenadas cartesianas, com 584880 volumes de controle, empregada nas simulações apresentou-se satisfatória, no entanto a possibilidade de um maior refinamento desta, na região densa inferior do equipamento não está descartada.

Cabe por fim, lembrar a necessidade da realização de uma pesquisa futura, objetivando uma melhor aproximação dos resultados na região densa inferior do equipamento, tendo como principal passo o maior refinamento da malha numérica nesta região. Além disso, deve-se formular também uma correlação para o cálculo da viscosidade dinâmica da fase sólida, afim de torná-la uma função da fração volumétrica dos sólidos ou a simulação de um novo caso, o qual tem como valor prescrito da viscosidade dinâmica da fase sólida o mesmo da fase gasosa, visto que para este tipo de escoamento regiões diferenciadas de concentração apresentam-se em todas as seções ao longo do duto.

Referências Bibliográficas

- ALI, H., ROHANI, S., Dynamic Modeling and Simulation of a Riser-Type Fluid Catalytic Cracking Unit., *Chemical Engineering Technology*, n. 20, p. 118-130, 1997.
- ALVES, J. J. N., *Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante*, Tese de Doutorado, UNICAMP, Campinas – SP, 1998.
- ANSYS CFX-5.7, Reference Guide, 2003.
- ARASTOOPOUR, H., WANG, C., SANFORD, A. W., Particle-Particle Interaction Force in a Dilute Gas-Solid System, *Chemical Engineering Science*, v. 37, n. 9, p. 1379-1386, 1982.
- ARASTOOPOUR, H., CUTCHIN III, J. H., Measurement and Analysis of Particle-Particle Interaction in a Cocurrent Flow of Particles in a Dilute Gas-Solid System, *Chemical Engineering Science*, v. 40, n. 7, p. 1135-1143, 1985.
- BI, H., ZHU, J., Distinctions Between Low Density and High Density Circulating Fluidized Beds. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 73, p. 644-649, 1995.
- CHENG, Y., WEI, F., YANG, G., JIN, Y., Inlet and Outlet Effects on Flow Patterns in Gas-Solid Risers, *Powder Technology*, v. 98, p. 151-156, 1998.
- CROWE, C. T., On Models for Turbulence Modulation in Fluid-Particle Flows, *International Journal of Multiphase Flow*, n. 26, p. 719-727, 2000.

- CROWE, C. T., Review-Numerical Models for Dilute Gas-Particle Flows, *Journal of Fluids Engineering*, vol. 104, p. 297-303, 1982.
- DASGUPTA, S., JACKSON, R., SUNDARESAN, S., Turbulent Gas-Particle Flow in Vertical Risers, *AIChE Journal*, v. 40, n. 2, p. 215-228, 1994.
- DECKER, R. K., *Modelagem e Simulação Tridimensional Transiente do Escoamento Gás-Sólido*, Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas – SP, 2003.
- FAN, Y., Ye, S., CHAO, Z., LU, C., SUN, G., SHI, M., Gas-Solid Two-Phase Flow in FCC Riser, *AIChE Journal*, vol. 48, n. 9, p.1869-1887, 2002.
- GAO, J., XU, C., LIN, S., YANG, G., Advanced Model for Turbulent Gas-Solid Flow and Reaction in FCC Riser Reactors, *AIChE Journal*, v. 45, n. 5, p.1095-1112, 1999.
- GIDASPOW, D., *Multiphase Flow and Fluidization – Continuum and Kinetic Theory Descriptions*, Academic Press, Inc., San Diego, California, 1994.
- GRACE, J. R., ISSANGYA, A., BAI, D., ZHU, J., Situating the High-Density Circulating Fluidized Bed, *AIChE Journal*, v. 45, p.2108-2116, 1999.
- HIMMELBLAU, D. M., BISCHOFF, K. B., *Process Analysis and Simulation – Deterministic Systems*, John Wiley & Sons, Inc. New York, 1968.
- HUILIN, L., GIDASPOW, D., Hydrodynamics of Binary Fluidization in Riser: CFD simulation using two granular temperatures, *Chemical Engineering Science*, n. 58, p. 3777-3792, 2003.

- HUILIN, L., GIDASPOW, D., Hydrodynamic Simulation of Gas-Solid Flow in a Riser using Kinetic Theory of Granular Flow, *Chemical Engineering Science*, n. 95, p. 1-13, 2003.
- IRONS, G. A., CHANG, J. S., Dispersed Powder Flow Through Vertical Pipes, *Powder Technology*, v. 34, p. 233-242, 1983.
- ISSANGYA, A., GRACE, J. R., BAI, D., ZHU, J. Further Measurements of Flow Dynamics in a High-Density Circulating Fluidized Bed Riser, *Powder Technology*, n. 111, p. 104-113, 2000.
- KNOWLTON, T. M., Experiment Modeling of Gas-Solid Flow System, *artigo apresentado no CFDOIL-2005*, Rio de Janeiro, 2005.
- LEVENSPIEL, O., KUNII, D., Fluidization Engineering, *Butterworth-Heinemann*, 2º ed., 1990.
- LI, J., KUIPERS, J., Gas-Particle Interactions in a Dense Gas-Fluidized Beds, *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 711-718, 2003.
- MALISKA, C. R., Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, *Livros Técnicos e Científicos Editora*, 2º ed., 2004.
- MARTIGNONI, Waldir Pedro. *Modeling and Simulation of FCC Riser Reactors: An Heterogeneous Approach*. Ontario: Faculty of Graduate Studies, The University of Western Ontario, 339p. PhD Thesis, 1998.
- MASSARANI, G., Fluidodinâmica em Sistemas Particulados, E-Papers Serviços Editoriais, 2002.
- MICHAELIDES, E. E., A Model for the Flow of Solid Particles in Gases. *International Journal Multiphase Flow*, vol. 10, n. 1, p. 61-77, 1984.

- NIVEN, R. K., Physical Insight into the Ergun and Wen Yu Equations for Fluid Flow in Packed and Fluidized Beds, *Chemical Engineering Science*, v. 57, p. 527-534, 2002.
- NERI, A., GIDASPOW, D., Riser Hydrodynamics: Simulation Using Kinetic Theory. *AIChE Journal*, v. 46, n. 1, 2000.
- OZBELGE, T. A., An Algorithm for Hydrodynamics of Turbulent Upward Dilute Gas-Solids Suspension. *International Journal Multiphase Flow*, vol. 9, n. 4, p. 437-446, 1983.
- PÄRSSINEN, J. H., ZHU, J. X., Particle Velocity and Flow Development in a Long and High-Flux Circulating Fluidized Bed Riser, *Chemical Engineering Science*, n. 56, p. 5295-5303, 2001.
- PÄRSSINEN, J. H., ZHU, J. X., Axial and Radial Solids Distribution in a Long and High-Flux CFB Riser, *AIChE Journal*, v. 47, n. 10, p. 2197-2205, 2001.
- PATANKAR, S. V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, *McGraw-Hill*, New York, USA, 1980.
- RIETEMA, K., H. E. A., van der AKKER, On the Momentum Equations in Dispersed Two-Phase System. *International Journal Multiphase Flow*, vol. 9, n. 1, p. 21-36, 1983.
- ROPELATO, K., CREMASCO, M.A., MEIER, H. F., *Modelagem 3D e Simulação Dinâmica do Escoamento gás Sólido em Reator Downer*. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas-SP, 2004.
- ROSA, L. M., MORI, M., *Simulação de Reações Químicas e Consumo de Calor em Reatores Riser*. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas – SP, 2002.

- SAMUELSBERG, A., HJERTAGER, B. H. Computational Modeling of Gas/Particle Flow in a Riser. *AIChE Journal*, v. 42, n. 6, p. 1536-1546, 1996.
- SOO, S. L., *Fluid Dynamics of Multiphase Systems*, Waltham MA: Blaisdell Publishing Co., 1967.
- SUN, B., GIDASPOW, D., Computation of Circulating Fluidized-Bed Riser Flow for the Fluidization VIII Benchmark Test. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 38, n. 3, p. 787-792, 1999.
- THEOLOGOS, K. N., MARKATOS, N. C., Advanced Modeling of Fluid Catalytic Cracking Riser-Type Reactors. *AIChE Journal*, vol. 39, n. 6, p. 1007-1016, 1993.
- THEOLOGOS, K. N., NIKOU, I. D., LYGEROS, A. I., MARKATOS, N. C. Simulation and Design of Fluid Catalytic-Cracking Riser-Type Reactors. *AIChE Journal*, vol. 43, n. 2, 1997.
- WEI, F., ZHU, J., Effect of Flow Direction on Axial Solid Dispersion in Gas-Solid Cocurrent Upflow and Downflow Systems, *Chemical Engineering Science*, v. 64, p. 345-352, 1996.
- YOSHIDA, H., MASUDA, H., Model Simulation of Particle Motion in Turbulent Gas-Solid Pipe Flow. *Powder Technology*, v. 26, p. 217-220, 1980.
- ZHANG, Y., REESE, J.M., Gas Turbulence Modulation in a Two-Fluid Model for Gas-Solid Flows. *AIChE Journal*, vol. 49, n. 12, 2003.
- ZHANG, Y., REESE, J.M., The Drag Force in Two-Fluid Models of Gas-Solid Flows. *Chemical Engineering Science*, n. 58, p 1641-1644, 2003.
- ZHOU, GRACE, Particle Velocity Profiles in a Circulating Fluidized Beds Riser of Square Cross-Section, *Chemical Engineering Science*, n. 2, p. 237-244, 1995.