

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS**

**Modelagem Fenomenológica e Simulação
Bidimensional da Fluidodinâmica de
Reatores de Leito Fluidizado Circulante**

Autor: **José Jailson Nicácio Alves**
Orientador: **Prof. Dr. Milton Mori**

01/98

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS**

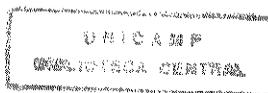
Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante

**Autor: José Jailson Nicácio Alves
Orientador: Prof. Dr. Milton Mori**

Curso: Engenharia Química
Área de Concentração: Modelagem e Simulação de Processos Químicos

Tese de Doutorado apresentada à comissão de Pós Graduação da Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Campinas, 1998
S.P. - Brasil



UNIDADE	BC
N.º CIRCULAR:	
UNIVERSIDADE	Unicamp
AL	87m
V.	
T.º	33915
PREL.	395/98
	X
VALOR	R\$ 11,00
DATA	20/05/98
N.º CPO	

CM-00113101-B

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

AL87m Alves, José Jailson Nicácio
Modelagem fenomenológica e simulação bidimensional da fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado circulante / José Jailson Nicácio Alves.--Campinas, SP: [s.n.], 1998.

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

1. escoamento multifásico. 2. Turbulência. 3. Modelos matemáticos. 4. Métodos de simulação. I. Mori, Milton. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Esta versão corresponde a redação final da Tese de doutorado em Engenharia Química defendida pelo Eng. José Jailson Nicácio Alves e aprovada pela comissão julgadora em 09 de janeiro de 1998.



Prof. Dr. Milton Mori
Orientador

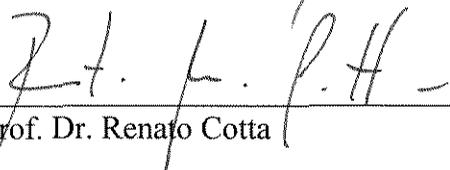
Tese de doutorado defendida e aprovada em 09 de janeiro de 1998 pela banca examinadora constituída pelos professores doutores:



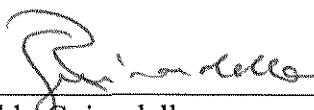
Prof. Dr. Milton Mori
Orientador



Prof. Dr. Michel Francois Fossy



Prof. Dr. Renato Cotta



Prof. Dr. Reginaldo Guirardello



Prof.^a Dr.^a Maria Regina Wolf Maciel

Dedicatória:

Dedico esta realização a meu filho, Victor Manuel, e a toda minha família que foi a base para o início de tudo.

Agradecimentos

Para a realização deste trabalho foi fundamental a colaboração de diversas pessoas, às quais manifesto meus agradecimentos:

Aos meus pais pelo apoio em todos os momentos da minha vida.

A minha esposa, Analúcia, pela dedicação, compreensão e paciência.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Milton Mori, pela proposta, orientação, apoio e incentivo em todos os momentos e pelo compartilhamento da experiência profissional.

Aos professores e colegas de curso, que ajudaram de forma direta e indireta na realização deste trabalho, especialmente a Henry França Meier, pelas discussões, sugestões e esclarecimentos.

Ao Engenheiro Waldir Martingnoni, pela valiosa contribuição com as discussões e pelo material fornecido.

A Universidade Federal da Paraíba e ao programa PICD/CAPES pelo suporte financeiro.

Por fim, agradeço a amizade de todos acima citados e a daqueles com os quais tenho convivido.

Resumo

ALVES, José Jailson Nicácio, *Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante*, Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1998. 236 p. Tese.

Reatores de Leito Fluidizado Circulante são bastante utilizados na indústria química e petroquímica, principalmente em processos de craqueamento catalítico e de combustão. A simulação numérica é ferramenta indispensável para o desenvolvimento e otimização destes reatores. Neste trabalho, um modelo fluidodinâmico baseado no modelo de dois fluidos, no qual o gás e as partículas são tratados como fases contínuas e totalmente interpenetrantes, foi utilizado na simulação da fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado circulante. Analisa-se a sensibilidade do modelo fluidodinâmico com relação a parâmetros da teoria cinética do escoamento de materiais granulares. Analisa-se também o efeito do termo de transferência de energia cinética turbulenta entre as fases gasosa e particulada na fluidodinâmica. Utiliza-se o modelo de turbulência $k-\epsilon$ para estimativa dos coeficientes de transporte da fase gasosa. Para a fase particulada, o modelo invíscido, o modelo newtoniano com viscosidade obtida experimentalmente (da literatura) e o modelo cinético do escoamento de materiais granulares (KTGF) foram utilizados e os resultados analisados. No modelo cinético do escoamento de materiais granulares os coeficientes de transporte dependem da temperatura granular, para a qual tem-se uma equação de conservação. A temperatura granular depende de parâmetros da teoria cinética do escoamento de materiais granulares e da sua condição de entrada. Os resultados comprovam que as partículas tendem a concentrarem-se nas regiões de menor temperatura granular e também mostram uma sensibilidade do modelo a estes parâmetros, mais fortemente aos coeficientes de restituição partícula-partícula e partícula-parede. Mostraram ainda que o termo de transferência de energia cinética do movimento flutuante é importante em sistemas com recirculações internas. O método dos volumes finitos com arranjo co-localizado foi utilizado na discretização do modelo. A solução foi obtida iterativamente resolvendo-se linha por linha com TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm). Com relação ao método numérico, mostra-se que a interpolação do momentum e não da velocidade propriamente dita, para o cálculo das velocidades da fase particulada, nas faces do volume de controle, elimina as oscilações numéricas observadas para o caso de interpolação das velocidades no cálculo dos fluxos nas faces.

Palavras Chave: Escoamento multifásico. Turbulência. Modelos matemáticos. Métodos de simulação.

Abstract

ALVES, José Jailson Nicácio, *Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante*, Campinas,: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1998. 236 p. Thesis.

Circulating Fluidized Bed (CFB) reactors are used in a variety of industrial applications especially related to combustion and catalytic cracking. The fluid dynamic prediction of CFB is fundamental in its development and optimisation. In this work, a computer code for the simulation of the fluid dynamics of Circulating Fluidized Bed Reactors was developed. The Finite Volume Method was used to make the discretization of the mathematical model. The fluid dynamic model is based on the two fluid model, in which both the gas and particle phases are considered to be continuous and fully interpenetrating. With relation to mathematical model of CFB reactors, the sensitivity of the model to parameters of the Kinetic Theory of Granular Flows was analyzed. The effect of the turbulence transfer between the gas and particle phases was also analyzed. The k- ϵ turbulence model, modified to consider the presence of the particle phase, was used to calculate the effective viscosity of the gas phase. Since there is no consensus about the effective stresses in the particle phases, the inviscid model, the Newtonian fluid model with experimentally obtained viscosity constant and the model of the emerging kinetic theory of granular flows (KTGF) have been used to simulate the fluid dynamics of the CFB reactors and the results were analysed. In the kinetic theory of granular flows the particle phase transport coefficients are dependent on the granular temperature, which intern has a transport equation. The granular temperature depends on parameters of the kinetic theory and also of the inlet conditions. The results confirm that the particles tends to concentrate in the regions of lower granular temperature, also showing a high sensitivity of the model to the parameters of the kinetic theory of granular flows, especially to the particle-particle and particle-wall coefficients of restitution. Further analyses showed that the interface turbulence transfer is very important for systems with high particle concentration and internal recirculations. With relation to the numerical method, in order to calculate the particle velocities at the faces of the control volumes, the results show that numerical oscillations are present when the calculation is carried out using linear interpolation of the particle phase velocities, in the collocated grid. The results also show that the numerical oscillation is eliminated by calculating the particle phase velocities at the faces of the control volumes by interpolating the particle phase momentum. The results were obtained by using a computer code developed by the authors. The finite volume method with the collocated grid, the hybrid interpolation scheme, the false time step strategy and the SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) algorithm were used to obtain the numerical solution.

Key Words: Escoamento multifásico. Turbulência. Modelos matemáticos. Métodos de simulação.

3.9.1 - Continuidade da fase gás	39
3.9.2 - Quantidade de movimento da fase gás	39
3.9.3. - Tensões na fase gás	39
3.9.4 - Modelo de turbulencia k- ε	40
3.9.4.1 - Energia cinética turbulenta (k)	40
3.9.4.2 - Taxa de dissipação (ε) para a fase gás	41
3.10 - Fase particulada - Equações médias	41
3.10.1 - Continuidade da fase particulada	42
3.10.2 - Quantidade de movimento da fase particulada	42
3.10.3. - Tensões na fase particulada	42
3.10.4 - Energia pseudo-térmica - fase particulada	43
3.11- Correlação para $\overline{\mathbf{v}'_s \mathbf{v}'_g}$	45
3.12 - Coeficiente de transferência de Q. M. entre fases	46
3.13 - Condições de contorno	46
3.14 -Resumo Modelo Matemático para o caso bidimensional em coordenadas cilíndricas	50
3.15 - Adimensionalização do Modelo	51
3.15.1 - Forma adimensional das equações de conservação da fase gás	54
3.15.2 - Forma adimensional das equações de conservação da fase particulada	55
3.16 - Modelo adimensional generalizado	57
4 - MÉTODO NUMÉRICO	58
4.1 - Discretização usando o método dos volumes finitos	62
4.2 - Linearização da equação e geração do sistema linear	65
4.3 - Acoplamento pressão - velocidade	71
4.3.1- O algoritmo SIMPLE para o arranjo Co-localizado	72
4.3.2 - O SIMPLE - “Consistent”	83
4.4 - Velocidades nas faces para a fase particulada	86
4.5 - O algoritmo SIMPLE	89
4.6 - Relaxações	89
4.7 - Solução do sistema	91
4.8 - Critérios de Convergência	92

4.9 - Linearização das condições de Contorno	92
5 - CONCEPÇÃO E TESTES DO PROGRAMA	95
5.1 - Subrotinas	95
5.2- Caso Teste: Escoamento monofásico no interior de um tubo	100
5.2.1 - Regime laminar	100
5.2.1.1 - Efeito dos fatores de relaxação na taxa de convergência	103
5.2.1.2 - Taxa de convergência	103
5.2.1.3 - Independência com a malha	109
5.3 - Regime Turbulento	113
5.4 - Conclusões preliminares	120
6 - RESULTADOS E DISCUSSÕES	121
6.1 - Caso 1: Transporte pneumático - Sistema Diluído	125
6.1.1 - Comparação dos algoritmos SIMPLE x SIMPLEC	126
6.1.2 - “Upwind” x Híbrido x “Power-law”	127
6.1.3 - Dependência com a malha	129
6.1.5 - Comparação com dados experimentais	132
6.1.6- Resultados de Simulação - Padrão do Escoamento	133
6.2 - Caso 2: “Riser” com partículas típicas de Unidades de Craqueamento Catalítico	147
6.2.1 -Saida axial: Análise de Sensibilidade Paramétrica para o modelo cinético do escoamento de materiais granulares	148
6.2.2 - Análise qualitativa da dispresão numerica: Efeito do esquema de interpolação	154
6.2.3 - Modelos de tensões para a fase particulada: Inviscido x Newtoniano x Cinético	156
6.2.4 - Dependência com a malha: caso 2 com saída axial	159
6.2.5 - Resultados de Simulação - Padrão do escoamento para o caso 2 com saída axial	162
6.2.6 - Saida lateral: Dependência com a malha	179
6.2.7 - Análise do termo de interface de energia cinética turbulenta	181
6.2.8 - Resultados de Simulação - Padrão do escoamento para o caso 2 com saída lateral	183
6.3 - Caso 3 - Partículas Típicas de Combustores de Leito Fluidizado Circulante	200
6.3.1 -Saida axial: Análise de Sensibilidade Paramétrica para o modelo cinético do escoamento de materiais granulares	201

6.3.2 - Análise qualitativa de oscilação numerica: Efeito da interpolação da velocidade do sólido nas faces.	203
6.3.3 - Modelos de tensões para a fase particulada: Inviscido x Newtoniano x Cinético	205
6.3.4 - Saída Lateral: Dependência com a malha	208
6.3.5 - Resultados de Simulação - Padrão do escoamento para o caso 3 com saída lateral	209
6.4 - Conclusões Preliminares	226
7 - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	227
7.1 - Contribuições	228
7.2 - Sugestões para continuação do trabalho	229
REFERÊNCIAS	230

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Condições típicas dos Reatores CFB's	10
Tabela 3.1 - Coeficientes de difusão e termos fonte para as equações de conservação.	52
Tabela 4.1 - Função $A(Pe)$	71
Tabela 5.1 - Características do sistema	102
Tabela 5.2 - Coeficientes de transporte e termos fonte para as equações de conservação	102
Tabela 5.3 - Condições de contorno para o monofásico laminar	102
Tabela 5.4 - Características do sistema	114
Tabela 5.5 - Coeficientes de transporte e termos fonte para as equações de conservação	114
Tabela 5.6 - Condições de contorno para o monofásico turbulento	115
Tabela 6.1 - Casos estudados	121
Tabela 6.2 - Características do sistema do caso 1	125
Tabela 6.3 - Condições de contorno	126
Tabela 6.4 - Tempos de execução para os diferentes esquemas e algoritmos.	129
Tabela 6.5 - Características do sistema do caso 2	147
Tabela 6.6 - Condições de contorno para o caso 2	148
Tabela 6.7: combinação de parâmetros	150
Tabela 6.8 - Parâmetros numéricos: caso 2	157
Tabela 6.9 - Características do sistema do caso 3	200
Tabela 6.8 - Parâmetros numéricos: caso 3	206

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 - Esquema típico de um Reator de Leito Fluidizado Circulante.	4
Figura 1.2 - Definição do modelo matemático e método numérico para simulação dos reatores de leito fluidizado circulante	5
Figura 2.1 - Perfis típicos de velocidade e concentração em reatores CFB gás-sólido	9
Figura 3.1 - Volume de Controle para sistemas Multifásicos.	19
Figura 3.2 - Fluxos intersticiais instantâneos do gás e partículas para sistemas dispersos em um volume de controle.	20
Figura 3.3 - Fluxos intersticiais locais e médios volumétricos na região de entrada da Figura 3.2.	21
Figura 3.4 - Decomposição da velocidade local instantânea.	29
Figura 4.1 - Malha Numérica Bidimensional	59
Figura 4.2 - Volume de controle bidimensional cilíndrico	60
Figura 4.3 - Possibilidades de arranjos no método dos volumes finitos	61
Figura 4.4 - Dimensões do Volume de Controle	68
Figura 4.5 - Volume de controle para a pseudo equação da face "e"	76
Figura 4.6 - Pontos envolvidos no cálculo das velocidades nas faces	82
Figura 5.1 - Algoritmo do	96
Figura 5.2 - Efeito dos fatores de relaxação na taxa de convergência	103
Figura 5.3 - Convergência para a malha 5 x 5	104
Figura 5.4 - Convergência para a malha 10 x 5	105
Figura 5.5 - Convergência para a malha 10 x 10	105
Figura 5.6 - Convergência para a malha 15 x 10	106
Figura 5.7 - Convergência para a malha 15 x 15	106
Figura 5.8 - Convergência para a malha 20 x 15	107
Figura 5.9 - Convergência para a malha 20 x 20	107
Figura 5.10 - Efeito da variação não uniforme na taxa de convergência	109
Figura 5.11 - Independência com a malha	111
Figura 5.12 - Perfis de Velocidade axial	112
Figura 5.13 - Perfis de velocidade radial	112
Figura 5.14 - Perfis de pressão	113

Figura 5.15 - Dependência com a malha	116
Figura 5.16 - Energia cinética turbulenta na região totalmente desenvolvida em função da malha	117
Figura 5.17 - Taxa de Dissipação de Energia cinética turbulenta na região totalmente desenvolvida em função da malha	118
Figura 5.18 - Desenvolvimento da velocidade axial para o escoamento monofásico através de um tubo. $Re=10.000$	119
Figura 6.1 - Saídas idealizadas para o caso cilíndrico simétrico.	122
Figura 6.2 - Entradas idealizadas para os casos cilíndricos simétricos	123
Figura 6.3 - Eficiência relativa dos algoritmos SIMPLE e SIMPLEC.	127
Figura 6.4 - Velocidade axial do gás na saída: Efeito do esquema de interpolação	128
Figura 6.5- Velocidade axial da partícula na saída: Efeito do esquema de interpolação.	129
Figura 6.6 - Queda de pressão total	130
Figura 6.7 - Efeito da malha sobre velocidade axial do gás.	131
Figura 6.8 -Efeito da malha sobre a fração volumétrica de sólidos na saída do tubo.	132
Figura 6.9 - Comparação dos numéricos com experimentais, para o componente axial da velocidade.	133
Figura 6.10 - História da convergência para o caso 1	134
Figura 6.11 - Concentração de partículas	136
Figura 6.12 - Pressão do gás	137
Figura 6.13 - Velocidade axial do gás	138
Figura 6.14 - Velocidade radial do gás	139
Figura 6.15 - Energia cinética turbulenta	140
Figura 6.16 - Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta	141
Figura 6.17 - Viscosidade efetiva da fase gasosa	142
Figura 6.18 - Linhas de corrente do gás	143
Figura 6.19 - Velocidade axial do sólido	144
Figura 6.20 - velocidade radial do sólido.	145
Figura 6.21 - Linhas de corrente do sólido	146
Figura 6.22 - Concentração de partículas	152
Figura 6.23 - Temperatura granular	152
Figura 6.24 -Velocidade das partículas	153

Figura 6.25- Velocidade do gás	153
Figura 6.26 - Fração volumétrica de partículas. Efeito do esquema de interpolação	155
Figura 6.27 - Dispersão numérica. V_{gz} em $z=7,5$ m (maior pico de velocidade)	155
Figura 6.28 - Dispersão numérica. $V_{s,z}$ em $z=7,5$ m (maior pico de velocidade)	156
Figura 6.29 - Concentração de partículas para os 3 modelos de tensões	158
Figura 6.30 - Velocidade axial do sólido para os 3 modelos de tensões	158
Figura 6.31 - Velocidade axial do gás para os 3 modelos de tensão	159
Figura 6.32- Tempo de execução e número de iterações em função da malha	160
Figura 6.33 - Dependência da solução com a malha: queda de pressão e velocidade axial na saída ($r=0$)	161
Figura 6.34 - História da convergência para o caso 2.	162
Figura 6.35 - Concentração de partículas	164
Figura 6.36 - Pressão do gás	165
Figura 6.37 - velocidade axial do gás	166
Figura 6.38 - velocidade radial do gás	167
Figura 6.39 - Energia cinética turbulenta do gás	168
Figura 6.40 - Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta	169
Figura 6.41 - viscosidade efetiva da fase gasosa	170
Figura 6.42 - Linhas de corrente do gás	171
Figura 6.43 - Velocidade axial do sólido	173
Figura 6.44 - Velocidade radial do sólido.	174
Figura 6.45 - Temperatura granular	175
Figura 6.46 - Pressão do sólido	176
Figura 6.47 - Viscosidade efetiva do fase particulada	177
Figura 6.48 - linhas de corrente da fase particulada	178
Figura 6.49 - Dependência com a malha. Queda de pressão e velocidade na saída	180
Figura 6.50 - Tempo de execução e numero de iterações	180
Figura 6.51 - Efeito do termo de interface na distribuição de partículas em uma dada posição axial.	182
Figura 6.52 - Velocidade axial da fase particulada	182
Figura 6.53 - Linhas de corrente (a) Sem interface e, b) com interface	183
Figura 6.54 - História da convergência para o caso 2, com saída lateral	184

Figura 6.55 - Concentração de partículas	186
Figura 6.56 - Pressão do gás	187
Figura 6.57 - Velocidade axial do gás	188
Figura 6.58 - velocidade radial do gás	189
Figura 6.59 - Energia cinética turbulenta	190
Figura 6.60 - Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta	191
Figura 6.61 - Viscosidade efetiva da fase gasosa	192
Figura 6.62 - Linhas de corrente do gás	193
Figura 6.63 - Velocidade axial do sólido	194
Figura 6.64 -Velocidade radial do sólido.	195
Figura 6.65 - Temperatura granular	196
Figura 6.66 - Pressão do sólido	197
Figura 6.67 - Viscosidade efetiva da fase particulada	198
Figura 6.68 - linhas de corrente da fase particulada	199
Figura 6.69 - Concentração de partículas	201
Figura 6.70 - Temperatura granular	202
Figura 6.71 -Velocidade axial da fase particulada	202
Figura 6.72 - Velocidade axial da fase gás	203
Figura 6.73 - Fração volumétrica de partículas em $z/H=0,9$. Efeito do tipo de interpolação para o cálculo da velocidade da fase particulada sobre qualidade da solução.	204
Figura 6.74 - Velocidade radial das partículas em $z/H=0,9$. Efeito do tipo de interpolação para o cálculo da velocidade da fase particulada nas faces sobre a qualidade da solução.	205
Figura 6.75 - Concentração de partículas para os 3 modelos de tensões	206
Figura 6.76 - Velocidade axial do sólido para os 3 modelos de tensões	207
Figura 6.77 - Velocidade axial do gás para os 3 modelos de tensão	207
Figura 6.78 - Dependência da solução com a malha: queda de pressão e velocidade axial na saída ($r=0$)	209
Figura 6.79 - História da convergência para o caso 3, com saída lateral.	210
Figura 6.80 - Concentração de partículas	212
Figura 6.81 - Pressão do gás	213
Figura 6.82 - Velocidade axial do gás	214
Figura 6.83 - (b) velocidade radial do gás	215

Figura 6.84 - Energia cinética turbulenta	216
Figura 6.85 - taxa de dissipação de energia cinética turbulenta	217
Figura 6.86 - Viscosidade efetiva da fase gasosa	218
Figura 6.87 - Linhas de corrente do gás	219
Figura 6.88 - Velocidade axial do sólido	220
Figura 6.89 - Velocidade radial do sólido	221
Figura 6.90 - Temperatura granular	222
Figura 6.91 - Pressão do sólido	223
Figura 6.92 - Viscosidade efetiva do fase particulada	224
Figura 6.93 - Linhas de corrente da fase particulada	225

SIMBOLOGIA

a_i - matriz dos coeficientes

A_f - área da face

b - termo independente no sistema linear

d_p - diâmetro da partícula

D - diâmetro do tubo

e - coeficiente de restituição partícula-partícula

e_w - coeficiente de restituição partícula-parede

F_k - fluxo de massa na face "k"

g_r, g_z - aceleração da gravidade

g_0 - função de distribuição radial

H - altura do tubo

k, k_g - energia cinética turbulenta do gás

L - comprimento do tubo

N - Fluxo total

Pe - Grupo adimensional, Equação (4.27) ($Pe = Re =$ Reynolds para o caso da solução das equações do movimento)

P_i - pressão da fase "i"

r - coordenada radial, $r^* = r/R$

R - raio do tubo

S_c - coeficiente angular da reta na linearização do termo fonte

S_c - coeficiente linear da reta na linearização do termo fonte

S_ϕ - termo fonte para a variável ϕ

t - tempo

T - temperatura granular

U^+ - Velocidade universal

v_{ij} - componente de velocidade da fase "i" na direção "j"

Y^+ - Distância universal na lei da distribuição logarítmica

z -coordenada axial, $z^+ = z/H$

Grego

α - fator de redução da pressão

β - coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre o gás e as partículas

ε - taxa de dissipação de energia cinética turbulenta

ε_i - fração volumétrica da fase i

ϕ - variável genérica

Φ - coeficiente de atrito partícula-parede

γ_1 - dissipação de energia cinética turbulenta das partículas devido as colisões partícula-partícula

γ_2 - termo de transferência de energia cinética turbulenta entre as fases

γ_i - tensor taxa de deformação da fase i ($i = g, s$)

η - coordenada espacial genérica (r ou z)

μ - viscosidade

ρ - densidade

σ_i - tensor tensão extra da fase i ($i = g, s$)

τ_i - tensor tensão da fase i ($i = g, s$)

\mathcal{V} - volume de controle

Subscritos

e - face “leste” do volume de controle com centro no ponto P

E - Ponto cardinal ao “leste” do ponto P

g - gás

i - fase genérica ($i=g, s$)

j - direção coordenada ($j=r, z$)

\max - indica valor máximo

n - face “norte” do volume de controle com centro no ponto P

N - ponto cardeal ao “norte” do ponto P

P - ponto nodal principal da malha

s - sólido

s - face “sul” do volume de controle com centro no ponto P

S - ponto cardeal ao “sul” do ponto P

w - face “oeste” do volume de controle com centro no ponto P

W - ponto cardeal ao “oeste” do ponto P

0 - entrada

∞ - condição de concentração máxima

Superscritos

l - laminar

t,T - turbulento

T - transposta

* - identifica valor da iteração anterior, Capítulo 4

* - identifica variável adimensional, Capítulo 3

0 - identifica valor no instante de tempo (falso) anterior

Matemáticos

∂ - derivada parcial

Σ - somatório

Δ - operador de diferenças finitas

$\|y_1, y_2\|$ - maior valor de y_1, y_2

1 - INTRODUÇÃO

Reatores gás-sólido são bastante utilizados na indústria química e petroquímica principalmente em processos de craqueamento catalítico, combustão e incineração de resíduos. Muitas vezes estes reatores são pontos críticos nestes processos, dos pontos de vista econômico e ambientais. O conhecimento da fluidodinâmica destes reatores é fundamental para o seu desenvolvimento e otimização. O objetivo deste trabalho é exatamente o desenvolvimento de um simulador compreendendo tanto a parte do modelo quanto a de programação, a princípio, para simulação da fluidodinâmica destes reatores, utilizando modelos fenomenológicos que, ao contrário dos empíricos, podem ser utilizados em diferentes reatores, com diferentes condições de escoamento. Por exemplo, na área de escoamentos monofásicos, estudou-se os regimes laminar e turbulento, e os resultados foram aplicados a diferentes processos, sejam em fase líquida ou gasosa. Defendemos, neste trabalho, também a tese de que este mesmo procedimento pode ser estendido e aplicado aos processos multifásicos, utilizando-se modelos genéricos para representarem diferentes processos. Ainda continuando o paralelo entre os processos monofásicos e os multifásicos, para os monofásicos, por exemplo, estudou-se as características dos escoamentos laminar e turbulento e os resultados foram aplicados a várias tecnologias, enquanto na área do escoamentos multifásicos, a tendência tem sido analisar a fluidodinâmica de sistemas particulares, de uma maneira tal que não existe ainda um método geral, para prever o comportamento destes sistemas. Na verdade, os sistemas multifásicos apresentam dificuldades adicionais em relação aos monofásicos. A principal delas é a existência de interfaces separando as fases. Nestas interfaces o meio e suas propriedades são descontínuas. O transporte entre as fases precisa ser conhecido e com isto o grau de dificuldade na formulação matemática do problema é maior.

O projeto, desenvolvimento e otimização dos processos químicos, em geral, e a capacidade em se prever a performance dos equipamentos de processos, dependem de modelos representativos, ferramentas para resolução dos modelos e da disponibilidade de informações experimentais para assegurar estatisticamente as previsões feitas.

Para prever as condições ótimas em reatores químicos, ferramentas de simulação numérica são indispensáveis, pois de um modo geral, os métodos analíticos são aplicáveis

apenas aos problemas mais simples de escoamento, enquanto os métodos experimentais são mais dispendiosos e trabalhosos do que a simulação numérica, embora, ratificamos, estes sejam necessários para verificar a validade e precisão dos resultados numéricos. Por isto a modelagem matemática e a simulação numérica são, atualmente, ferramentas indispensáveis para o desenvolvimento e otimização dos processos químicos, particularmente, dos Reatores de Leito Fluidizado Circulante (CFB).

O grande desenvolvimento dos computadores e dos métodos computacionais permitem atualmente, para escoamentos monofásicos, a solução de praticamente todos os problemas fluidodinâmicos complexos tanto matemática quanto geometricamente. Existem códigos -“softwares”- comerciais disponíveis com tal capacidade.

Porém, para escoamentos multifásicos, algumas dificuldades adicionais tanto dos modelos, quanto dos métodos numéricos são encontrados e ambos estão, atualmente, em fase de desenvolvimento de forma tal que não estão consolidados ainda, como ocorre para os escoamentos monofásicos. Para escoamentos multifásicos, dois pontos podem limitar o uso dos “softwares” comerciais: 1º) como não existe ainda na literatura, uma unanimidade sobre os modelos fenomenológicos representativos destes processos, os códigos comerciais podem necessitar de implementações muitas vezes trabalhosas e 2º) as técnicas numéricas, desenvolvidas para escoamentos monofásicos, podem apresentar problemas numéricos quando aplicadas na solução numérica de modelos matemáticos para sistemas multifásicos. Adaptações podem ser necessárias. Flexibilidade, rapidez, economia e confiabilidade dos resultados são características das simulações numéricas e por isto tendem a serem utilizadas cada vez mais na engenharia.

1.1- Objetivo geral

Originalmente, este trabalho tinha como objetivo o desenvolvimento de um modelo matemático fenomenológico e de um programa de computador para a simulação numérica da incineração de resíduos em reatores de leito fluidizado circulante. Porém, na fase de levantamento do estado da arte, observou-se que a fluidodinâmica com este nível de formulação ainda não está totalmente desenvolvida e que, atualmente, os esforços são no

sentido do desenvolvimento e avaliação de modelos fluidodinâmicos. Diante disto, o objetivo foi restringido ao desenvolvimento de um programa de computador para a simulação numérica da fluidodinâmica dos reatores de leito fluidizado circulante, como descrito em seguida.

O objetivo deste trabalho, de uma maneira geral, é o desenvolvimento, avaliação e utilização de um programa de computador para simulação bidimensional da fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado circulante (“riser”). A Figura (1.1) ilustra um CFB, de forma simplificada. No desenvolvimento do programa, os dois pontos principais no desenvolvimento de um simulador foram trabalhados: 1) o modelo matemático e 2) o método numérico adequado para a solução deste modelo. A Figura (1.2) mostra os caminhos definidos para o desenvolvimento do plano de tese. Para o desenvolvimento deste trabalho, os seguintes objetivos específicos, foram definidos:

1.2 - Objetivos específicos

Como dito anteriormente, os pontos principais pesquisados foram, o modelo matemático e o método numérico. Os seguintes pontos foram estudados para cada um destes.

1.2.1 - Modelo matemático

O modelo matemático utilizado foi o modelo de dois fluidos, no qual o gás e as partículas são tratados como contínuos e totalmente interpenetrantes. Analisa-se, para a fase particulada os seguintes modelos de dispersão: invíscido, newtoniano com coeficientes de transporte constante (valores experimentais disponíveis na literatura) e o modelo cinético do escoamento de materiais granulares no qual os coeficientes de transporte são obtidos a partir da teoria cinética do escoamento de materiais granulares. O modelo de turbulência k- ϵ , modificado para levar em conta a presença das partículas, foi utilizado para determinar os coeficientes de transporte da fase gasosa.

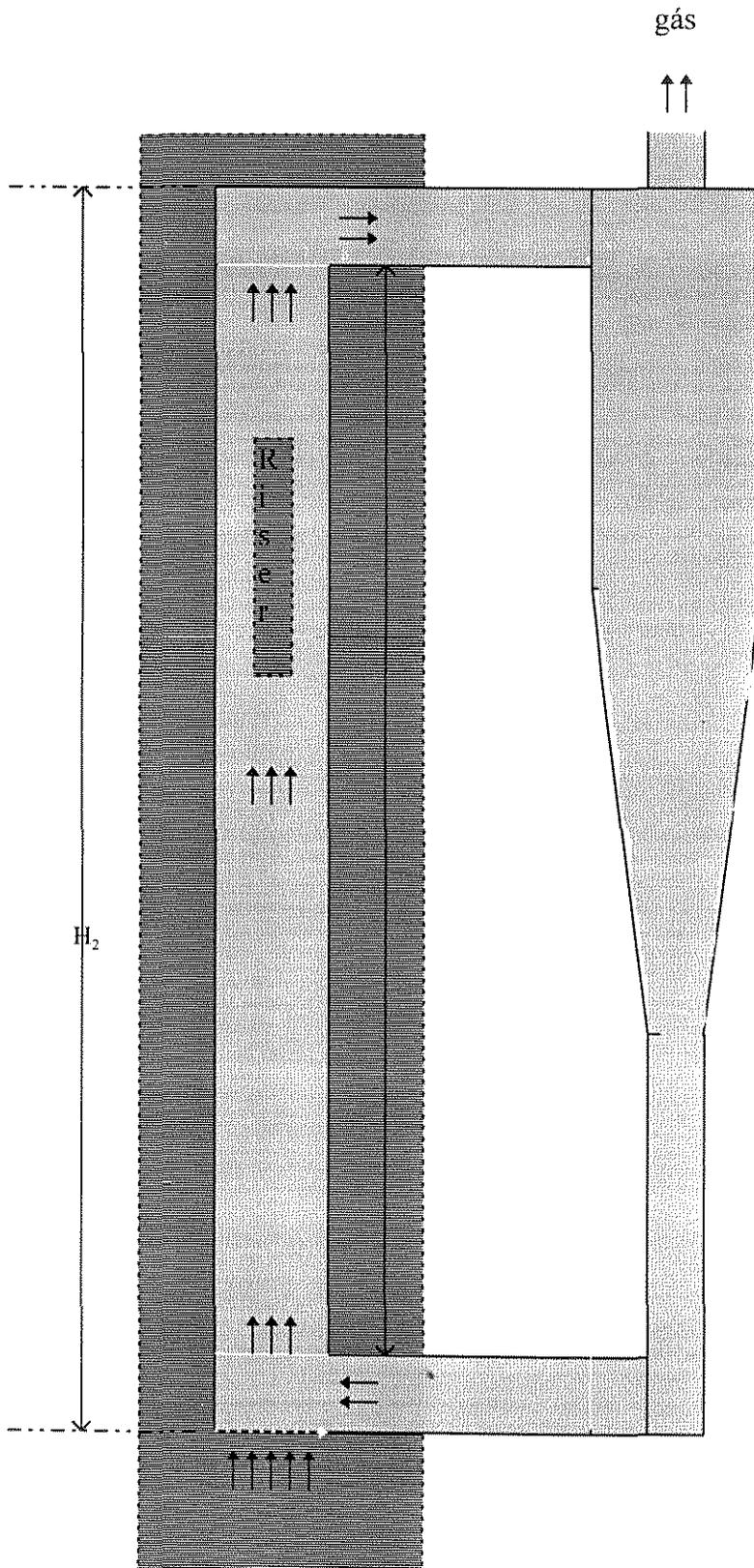


Figura 1.1 - Esquema típico de um Reator de Leito Fluidizado Circulante.

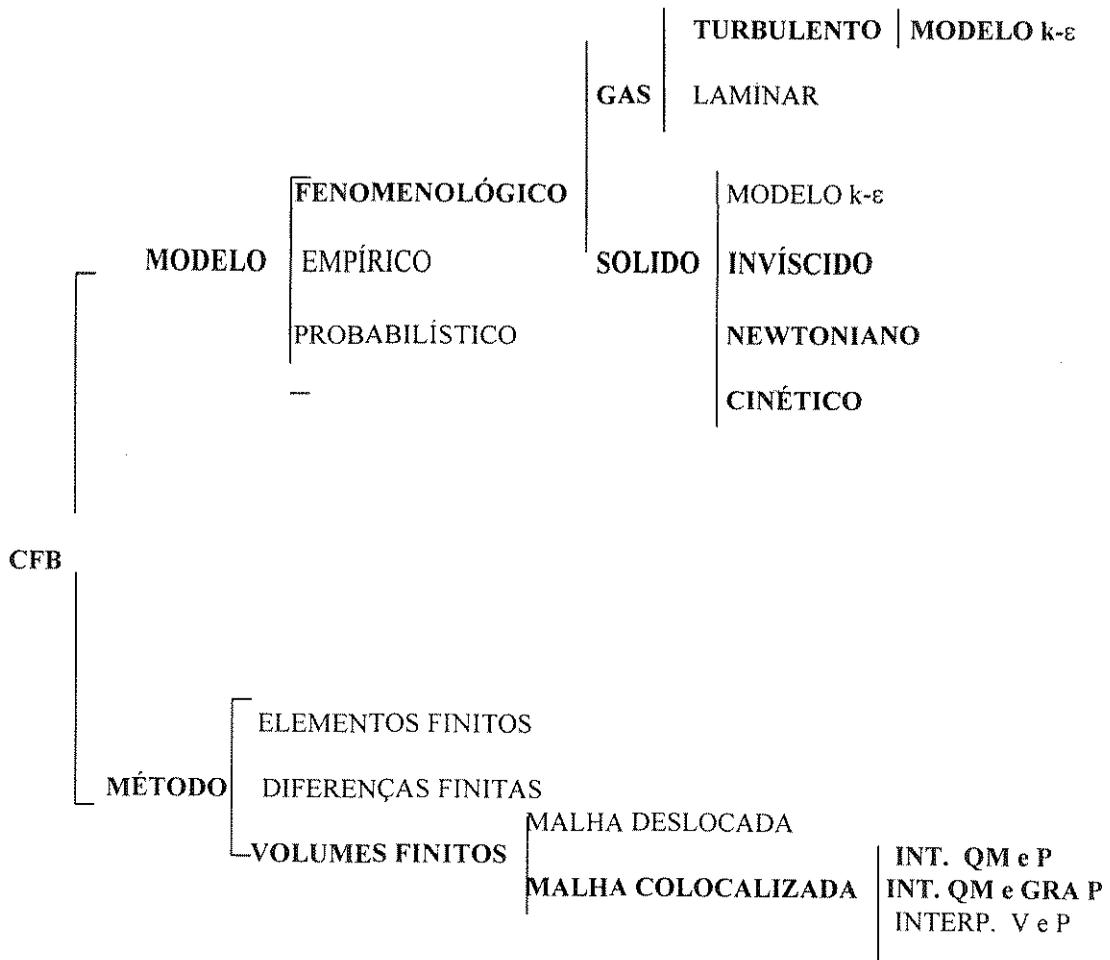


Figura 1.2 - Definição do modelo matemático e método numérico para simulação dos reatores de leito fluidizado circulante.

Para o modelo cinético do escoamento de materiais granulares, destacamos:

1º - Apresenta-se uma proposta para o cálculo da concentração de partículas na parede.

2º - Análise de sensibilidade do modelo aos parâmetros: coeficiente de restituição partícula-partícula, partícula-parede e temperatura granular de entrada.

3º - Analisa-se a importância do termo de transferência de energia cinética turbulenta entre as fases.

1.2.2- Método numérico

Utilizou-se o método dos volumes finitos, e os seguintes estudos foram conduzidos:

1º - Analisa-se a influência da malha, convergência e fatores de relaxação.

2º - Apresenta-se um método alternativo para o cálculo da velocidade da fase particulada nas faces do volume de controle e mostra-se que este elimina as oscilações observadas quando utiliza-se interpolações da velocidade propriamente (linearmente, por exemplo).

1.2.3 - Efeitos geométricos de saída

Devido à aproximação para bidimensional de um problema essencialmente tridimensional, várias idealizações são possíveis para a entrada e saída, as quais são mostradas, embora investiga-se apenas efeitos de saída.

1.2.4 - Comparação com dados experimentais

Simulação de casos testes, comparação e avaliação da eficácia dos modelos.

1.3- Plano de trabalho

Para o desenvolvimento da tese, as seguintes etapas foram estabelecidas:

- 1 - Revisão bibliográfica sobre leito fluidizado circulante e método dos volumes finitos.
- 2 - Desenvolvimento e concepção do programa, utilizando-se como caso teste, problemas simples com soluções analíticas e/ou empírico/experimentais. Os escoamentos laminar e turbulento monofásico foram utilizados como casos para testes de concepção do programa.
- 3 - Desenvolvimento do modelo matemático e Simulação do “riser” de CFB.
- 4 - Avaliação numérica dos casos teste e do problema do CFB.
- 5 - Interpretação dos resultados de simulação.
- 6 - Conclusões e recomendações

1.4 - Objetivos futuros

O objetivo originalmente estabelecido, ou seja a modelagem da incineração de resíduos, poderá, com o desenvolvimento do modelo fluidodinâmico, ser retomado. Isto deverá ser feito logo após a consolidação do modelo fluidodinâmico. Além do processo de incineração, outros processos como, por exemplo, recuperação eletroquímica de metais de soluções aquosas também poderão ser avaliados utilizando-se o mesmo programa, dentro da idéia de generalização do modelo para sistemas multifásicos. Neste último caso teríamos um sistema líquido-sólido.

2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, apresentam-se algumas características dos Reatores de Leito Fluidizado Circulante e discute-se rapidamente o estado da arte no estudo da fluidodinâmica destes reatores, objeto desta pesquisa. Ao final, faz-se uma rápida revisão sobre os métodos numéricos utilizados na simulação dos CFB's.

2.1 - Características dos Reatores de Leito Fluidizado Circulante

Quando um gás flui verticalmente para cima através de um leito de partículas sólidas, diferentes regimes fluidodinâmicos podem ser observados dependendo da velocidade do gás e das características físicas do sistema gás-partícula, que vão desde o escoamento através do leito fixo de partículas, até o transporte pneumático vertical. Muitos estudos foram desenvolvidos com o objetivo de caracterizar os regimes de escoamento (Kwauk and Li, 1996). Entre os regimes turbulento e de transporte pneumático, está o chamado “fluidização rápida”, regime de escoamento utilizado nos reatores de leito fluidizado circulante. Os reatores de leito fluidizado circulante caracterizam-se por apresentarem um escoamento anular com uma parte da mistura gás-sólido movendo-se verticalmente para cima no centro e outra descendo próximo a parede. Uma alta concentração de partículas próxima a parede é comumente observada (Figura 2.1). Basicamente, existem dois tipos de reatores de leito fluidizado circulante: os combustores (CFBC) e os utilizados em unidades de craqueamento catalítico (FCC). Berruti et al (1995) e Zhu and Bi (1995) apresentam uma vasta revisão sobre as características destes dois tipos de reatores de leito fluidizado circulante, as quais são resumidas na Tabela 2.1.

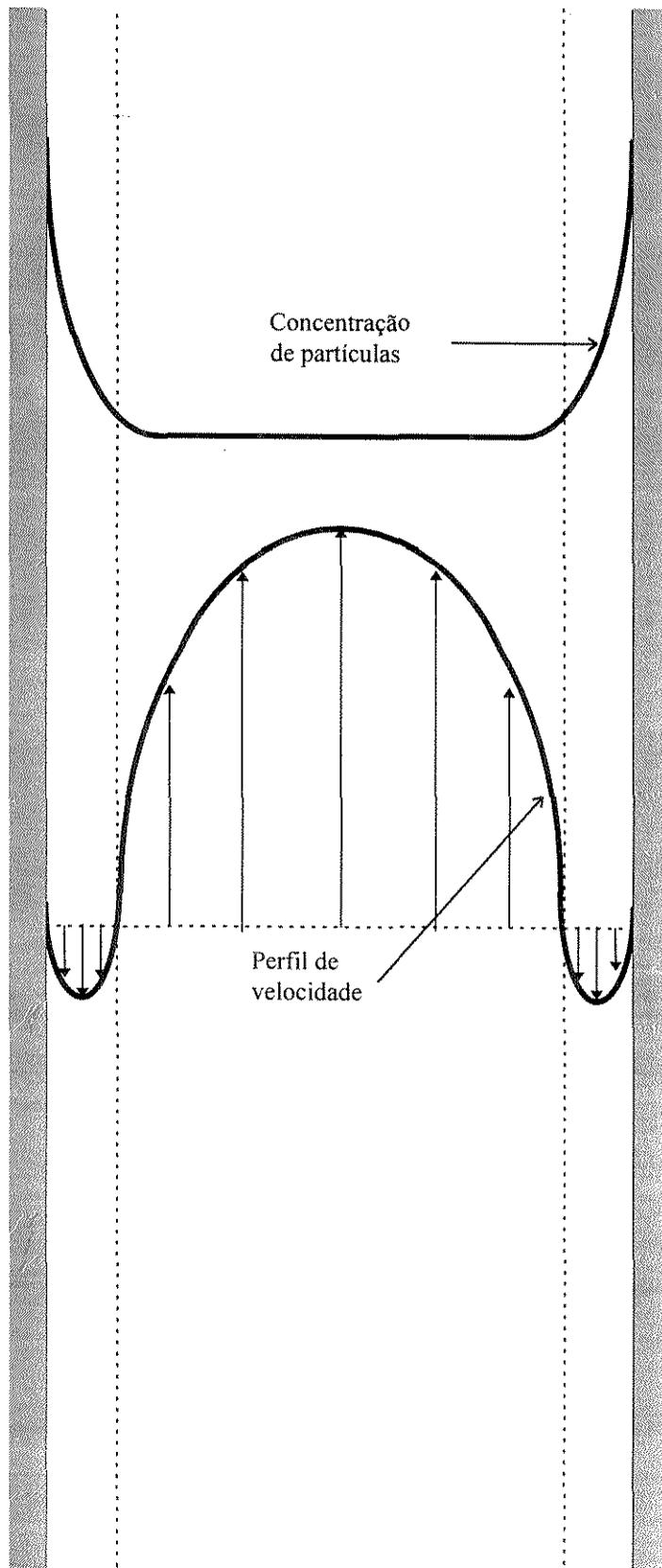


Figura 2.1 - Perfis típicos de velocidade e concentração em reatores CFB gás-sólido.

Tabela 2.1 - Condições típicas dos Reatores CFB's (Zhu and Bi, 1995)

Reator	Combustor		Riser FCC	
	Zhu and Bi (1995)	Berruti et al (1995)	Zhu and Bi (1995)	Berruti et al (1995)
ρ_p (kg/m ³)	1800 - 2600	-	1100 - 1700	-
$d_p \times 10^5$ (m)	10 - 30	25 - 50	4 - 8	5 - 15
Classificação de Geldart	B	B	A	A
$v_{g, superficial}$ (m/s)	5 - 9	2-6	6 - 28	4-10
G_s (kg/m ² .s)	10 -100	5-100	400 - 1200	>250
tempo de residência (s)	20 - 40	-	2 - 4	-
D_{tubo} (m)	4 - 8	8-10	0,7 - 1,5	1-2
Temperatura (°C)	-	> 800	-	250 - 650
Conc sólidos reg desen	< 1%	-	3-12 %	-

2.2 - Tipos de modelos utilizados em CFB

Na introdução, mostrou-se na Figura 1.2 os possíveis modelos utilizados na modelagem matemática dos reatores de leito fluidizado circulante. Um grande número de modelos foram propostos nos últimos anos para representarem a fluidodinâmica destes reatores, os quais pertencem, em geral, à classe dos empíricos ou fenomenológicos. Harris and Davidson (Berruti, 1995) classificam estes modelos em três tipos: tipo I: modelos que prevêem apenas variações axial na concentração de partículas; tipo II: modelo anular, que divide o escoamento em duas ou mais regiões; e tipo III: modelos fenomenológicos, ou seja, baseados nos princípios gerais de conservação da massa, quantidade de movimento e energia. As classes I e II são modelos semi-empíricos que possuem um grande número de parâmetros ajustáveis e são restritos a aquelas escalas para as quais foram ajustados ("scale-up" não é possível). Destes três tipos de modelos o

tipo III é o mais rigoroso e pode, teoricamente, ser aplicado a qualquer sistema de escoamento. É no modelo do tipo III que fundamenta-se este trabalho de tese.

2.3 - O Estado da Arte

Um breve levantamento dos níveis atuais de modelos e métodos numéricos utilizados na simulação numérica de CFB's é apresentado aqui. Inicialmente, faz-se um pequeno comentário sobre os modelos e em seguida, sobre os métodos numéricos.

2.3.1 - Modelo matemático

Um modelo matemático capaz de prever a fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante deve levar em conta todas as interações intra e inter fases. Estas interações, assinaladas por SINCLAIR and JACKSON (1989) depende dos componentes médio e flutuante das velocidades do gás e das partículas. BÓLIO et al (1995) apresentam um resumo destas interações, os quais incluem:

- 1 - Interações entre as velocidades médias do gás e das partículas através da força de arraste.
- 2 - Interações entre a velocidade média e flutuante do gás que geram as tensões de Reynolds.
- 3 - Interações entre a velocidade média e flutuante da partícula que geram tensões viscosas nesta fase.
- 4 - Interações entre as velocidades médias do gás e/ou partículas com as flutuações de velocidade da outra fase.
- 5 - Além destas, a interação partícula-parede é mais um tipo de interação que influencia fortemente a fluidodinâmica dos CFB's, como será mostrado neste trabalho.

6 - Interações entre as flutuações de velocidade das fases.

Dentro dos modelos do tipo III, dois caminhos têm sido usados na modelagem da turbulência no escoamento gás-sólido (SAMUELSBERG and HJERTAGER, 1996). O primeiro usa as equações de conservação da massa, momentum e energia para a fase contínua (gasosa) e uma extensão do modelo k - ϵ para escoamentos monofásicos e relaciona estes com a fase dispersa (particulada). Um exemplo deste tipo é o modelo k - ϵ - k_p (LIXING, 1993; LIOU et al, 1997). Nestes modelos, as interações partícula-partícula são desprezadas e não prevêm uma flutuação de velocidade da partícula maior do que a do gás, como observa-se experimentalmente em CFB's. Esta limitação torna estes modelos inadequados para modelar reatores CFB's.

O segundo caminho, que é o que tem sido usado com grande frequência atualmente é o modelo da teoria cinética do escoamento de materiais granulares. Este modelo é uma extensão da teoria cinética dos gases densos (CHAPMAN AND COWLING, 1970), por analogia, a escoamentos de materiais granulares.

JENKINS and SAVAGE (1983), LUN *et al* (1984) e LUN and SAVAGE (1987) foram os primeiros trabalhos a apresentarem e resolverem a equação de conservação para a “temperatura granular”, baseados na teoria cinética do escoamento de materiais granulares. Estes dois trabalhos desprezaram totalmente a presença do fluido intersticial.

SINCLAIR and JACKSON (1989) desenvolveram um modelo para o escoamento gás-sólido, para a região totalmente desenvolvida de um tubo vertical, baseados também na teoria cinética do escoamento de materiais granulares. Com este modelo, simularam o escoamento em um pequeno tubo de 3 cm de diâmetro. O modelo mostrou-se capaz de prever a distribuição não uniforme de partículas na direção radial e revelou ainda uma grande variedade de comportamento fluidodinâmico, na faixa do escoamento analisado. Entretanto, eles desprezaram a turbulência do gás e, conseqüentemente, não distinguem os regimes em que as colisões dominam as interações das partículas com os turbilhões do gás. Os resultados não foram comparados com dados experimentais.

SAMUELSBERG and HJERTAGER (1996) usaram o modelo cinético do escoamento de materiais granulares para simulação bidimensional de um CFB e compararam os resultados com dados experimentais. A turbulência da fase gasosa foi considerada.

Os modelos mais recentes (SAMUELSBERG and HJERTGER, 1995; DING and GIDASPOW, 1992; BOLIO et al, 1995) que prevêm o tipo de interação partícula-partícula e os efeitos de parede, baseiam-se na emergente teoria cinética dos escoamentos granulares, desenvolvida por analogia com a teoria cinética dos gases. Como será confirmado neste trabalho, este modelo prevê as tensões entre partículas e partícula-parede e comprova que este é o principal mecanismo que leva a formação de regiões com alta concentração de partículas próximo a parede do tubo, como tem sido encontrado experimentalmente por diversos autores (GIDASPOW, 1990; NIEUWLAND, 1996; SAMUELSBERG and HJERTAGER, 1996). Neste trabalho mostra-se que o modelo cinético do escoamento de materiais granulares é capaz de prever a fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado circulante satisfatoriamente. Entretanto, alguns pontos neste modelo continuam em aberto, como a especificação da temperatura granular na entrada e a obtenção dos coeficientes de restituição partícula-partícula e partícula parede. Neste trabalho, uma contribuição buscando a estimativa destes é apresentado. Além disto, utiliza-se uma relação já demonstrada (SINCLAIR and JACKSON, 1989) para a variação da concentração de partículas com a temperatura para a região totalmente desenvolvida para o cálculo da concentração de partículas na parede do tubo.

O escoamento gás-sólido satisfaz os princípios gerais de conservação da massa, quantidade de movimento e energia. Enquanto as equações de Navier-Stokes governam o movimento da fase gasosa, não existe ainda unanimidade na literatura sobre um modelo governante do movimento das partículas. Uma alternativa é tratar o conjunto de partículas também como uma fase contínua e de alguma forma obter as equações de conservação médias para esta fase. Então, dependendo da situação, os fluxos e fontes de quantidade de movimento e energia da fase particulada são modelados de modo a se ter um sistema determinado (No Equações = No Variáveis). Para sistemas multifásicos formados por diversas fases distribuídas randomicamente no espaço e no tempo, soluções locais instantâneas além de serem praticamente impossíveis de serem obtidas, não são de interesse prático. Na verdade, em sistemas multifásicos, as variações locais “microscópicas” são bastante complexas e, além disto, interessa-nos diretamente as variações médias “macroscópicas”. Um tratamento adequado é expressar o comportamento físico e dinâmico (universo espaço-tempo) em termos de propriedades médias como será mostrado no capítulo de desenvolvimento do Modelo Matemático.

2.3.2 - Método numérico

Na área de Fluidodinâmica computacional, o método dos volumes finitos tem-se mostrado mais adequado do que outros como diferenças finitas ou elementos finitos que tiveram grande divulgação na década de 70. Mas, mesmo com relação ao método dos volumes finitos, existiu alguma discussão em torno da possibilidade de obtenção de campos irrealis de pressão mesmo que satisfazendo a continuidade (PATANKAR, 1980). Entretanto, vários métodos foram propostos, os quais minimizavam este problema com o uso de malhas co-localizadas para escoamentos monofásicos. Várias alternativas surgiram destes esforços, entre as quais, DATE (1996), THIART (1990), ABDALLAH (1987), REGGIO and CAMARERO (1986), MAJUNDAR (1988), DATE (1993), PERIC et al (1988), PARAMESWARAN (1992), MILLER and SCHMIDT (1988). Problemas de oscilação numérica associados a sistemas multifásicos foram também apontados no trabalho de MEIER et al (1997).

2.4 - Observações Preliminares

Atualmente, o estado da arte no estudo de reatores gás-sólido baseado em modelos fenomenológicos encontra-se em fase de desenvolvimento de modelos matemáticos que representem a fluidodinâmica destes reatores e as técnicas numéricas utilizadas são extensões daquelas utilizadas para escoamentos multifásicos. Portanto, tanto do ponto de vista de modelo, quanto de método, a área encontra-se em fase de desenvolvimento.

Trabalhos anteriores desenvolveram modelos para a região totalmente desenvolvida do reator incluindo todas as interações intra e interfases e, outros apresentaram modelos bidimensionais também para a região de desenvolvimento do reator, mas alguns tipos de interações foram desprezadas.

Neste trabalho, utiliza-se um modelo bidimensional, contendo todos os tipos de interações, conhecidas atualmente e assinaladas anteriormente, para todo o reator, e analisa-se a importância de alguns termos desprezados em outros trabalhos disponíveis na literatura.

Apresenta-se também uma solução alternativa para minimizar o problema da oscilação numérica apontado na literatura por MEIER et al (1997). O problema foi detectado, mas a literatura não mostrou ainda a fonte da oscilação nem como minimizar o problema da oscilação o que é feito neste trabalho.

3 - MODELO MATEMÁTICO

Os escoamentos monofásicos são analisados na mecânica do contínuo em termos de equações de campo representadas pelas leis de conservação da massa, momentum e energia, complementadas por relações constitutivas, relações de “fechamento” (tornar o sistema determinado matematicamente) adequadas e condições de contorno e inicial (na análise da dinâmica dos processos). A análise de escoamentos multifásicos, em geral, do ponto de vista do contínuo é consideravelmente mais complexo do que no caso monofásico. A principal dificuldade é a existência de interfaces, as quais representam descontinuidades físicas, dificultando a formulação matemática do problema. Fisicamente, o escoamento multifásico é um meio constituído por diferentes sub-regiões monofásicas (Figura (3.1)). Matematicamente, o problema poderia ser formulado com esta característica, ou seja, poderia ser considerado como um campo dividido em sub-regiões monofásicas, só que de contornos móveis e normalmente de posições desconhecidas separando as fases constituintes do meio. Os balanços diferenciais valem, assim, para cada sub-região, mas não podem ser aplicadas ao conjunto destas, pois neste caso violariam as condições de continuidade do ponto de vista microscópico. Diante destas dificuldades, a formulação de um sistema de escoamento multifásico a nível microscópico é, atualmente, muito limitado.

Entretanto, existem duas grandes aplicações da formulação microscópica. Primeiro é que ela é a base para a formulação macroscópica, como será desenvolvida e utilizada neste trabalho. Segundo é que ela pode ser útil na análise de problemas simples e auxiliar na obtenção de relações importantes utilizadas na formulação macroscópica. Por exemplo, o coeficiente de transporte de momentum na interface gás-partícula pode ser obtido analiticamente para o regime de Stoke, analisando-se o escoamento de um fluido em torno de uma esfera (BIRD et al, 1967). O resultado serve de orientação para a obtenção de relações em outras condições de escoamento, mais comumente encontradas, como escoamento turbulento em torno das esferas em uma condição de alta concentração de partículas, onde os efeitos de população de partículas são incluídos através de ajustes semi-empíricos.

No caso do escoamento gás-sólido, particularmente, do ponto de vista microscópico, o movimento deveria ser descrito pelas equações de Newton para cada partícula individual (referencial lagrangeano) e as equações de Navier-Stokes para a fase gás (referencial euleriano). Entretanto, considerando o grande número de partículas, o que representaria um grande número de equações, e a dificuldade na determinação de todas as forças sobre estas, principalmente as interações partícula-partícula, é conveniente desenvolver-se uma formulação macroscópica para o problema, na qual o conjunto de partículas numa dada região do espaço é analisada como uma fase fluida ou um pseudo-fluido (fase particulada), para a qual assume-se a hipótese do contínuo (LIXING, 1993). Algumas restrições são impostas para que esta hipótese seja aplicável, como será visto no desenvolvimento do modelo matemático. O tratamento de um conjunto de partículas como uma fase contínua justifica-se principalmente para sistemas com alta concentração de partículas ($>1\%$) (NIEUWLAND et al, 1996), comumente encontrada em reatores de leito fluidizado circulante, embora para sistemas diluídos esta hipótese também pode ser aplicada, sendo que neste caso as interações partícula-partícula podem ser desprezadas e a fase particulada tratada como invíscido (esta situação, na verdade, corresponde a uma formulação euleriana na análise do movimento das partículas). Convém enfatizar mais uma vez que, na verdade, os sistemas gás-sólido (ou os multifásicos em geral), ocupam microscopicamente diferentes regiões do espaço num dado volume de controle e que na formulação macroscópica, onde eles são tratados como uma mistura multifluido na qual as fases (particulada e gasosa no nosso caso) são tratadas como contínuas na mesma região do espaço (macroscopicamente), consiste de uma ferramenta puramente matemática, que simplifica o problema, caracterizando cada uma das fases por suas variáveis e propriedades médias volumétricas como velocidade, concentração, temperatura, etc, em torno de um ponto.

Vamos, inicialmente, introduzir uma rápida descrição da notação referente a ordem das variáveis que aparecem nas equações. Exceto quando estivermos nos referindo a uma variável geral ϕ , que pode representar um escalar, um vetor ou um tensor, a seguinte notação será usada para identificar, principalmente o resultado de operações sobre as variáveis:

() - escalar: alfabeto Romano normal

[] - vetor: alfabeto romano negrito

{ } - tensor: alfabeto grego negrito

Como dito anteriormente, a formulação microscópica é a base da formulação macroscópica e será introduzido primeiro.

3.1 - Equações microscópicas locais instantâneas

As equações de conservação para uma grandeza de transporte da fase “i” associada a variável ϕ no volume infinitesimal $d\theta_i$ desta fase em um sistema contendo “n” fases (Figura (3.2)) podem ser escritas de forma generalizada, como (SOO, 1989):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \phi) + \nabla \cdot [\rho_i \mathbf{v}_i \phi] = \nabla \cdot \mathbf{J}_\phi + S_\phi, \quad (3.1)$$

onde ϕ representa a variável associada a grandeza de transporte. As variáveis representam as grandezas locais instantâneas, cujos fluxos ocorrem através de toda área que delimita a fase, incluindo-se a interface com outras fases. \mathbf{v}_i é o vetor velocidade da fase “i”, \mathbf{J}_ϕ o fluxo difusivo da grandeza ϕ na fase “i” e S_ϕ o termo fonte de ϕ .

Com $\phi=1$, $\mathbf{J}_\phi=0$ e $S_\phi=0$ tem-se a equação da continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i) + \nabla \cdot [\rho_i \mathbf{v}_i] = 0 \quad (3.2)$$

e com $\phi=\mathbf{v}_i$, $\mathbf{J}_\phi=\boldsymbol{\tau}_i$ e $S_\phi=\rho_i \mathbf{g}$, tem-se a equação do momentum:

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho_i \mathbf{v}_i] + \nabla \cdot \{\rho_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i\} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_i + \rho_i \mathbf{g}_i \quad (3.3)$$

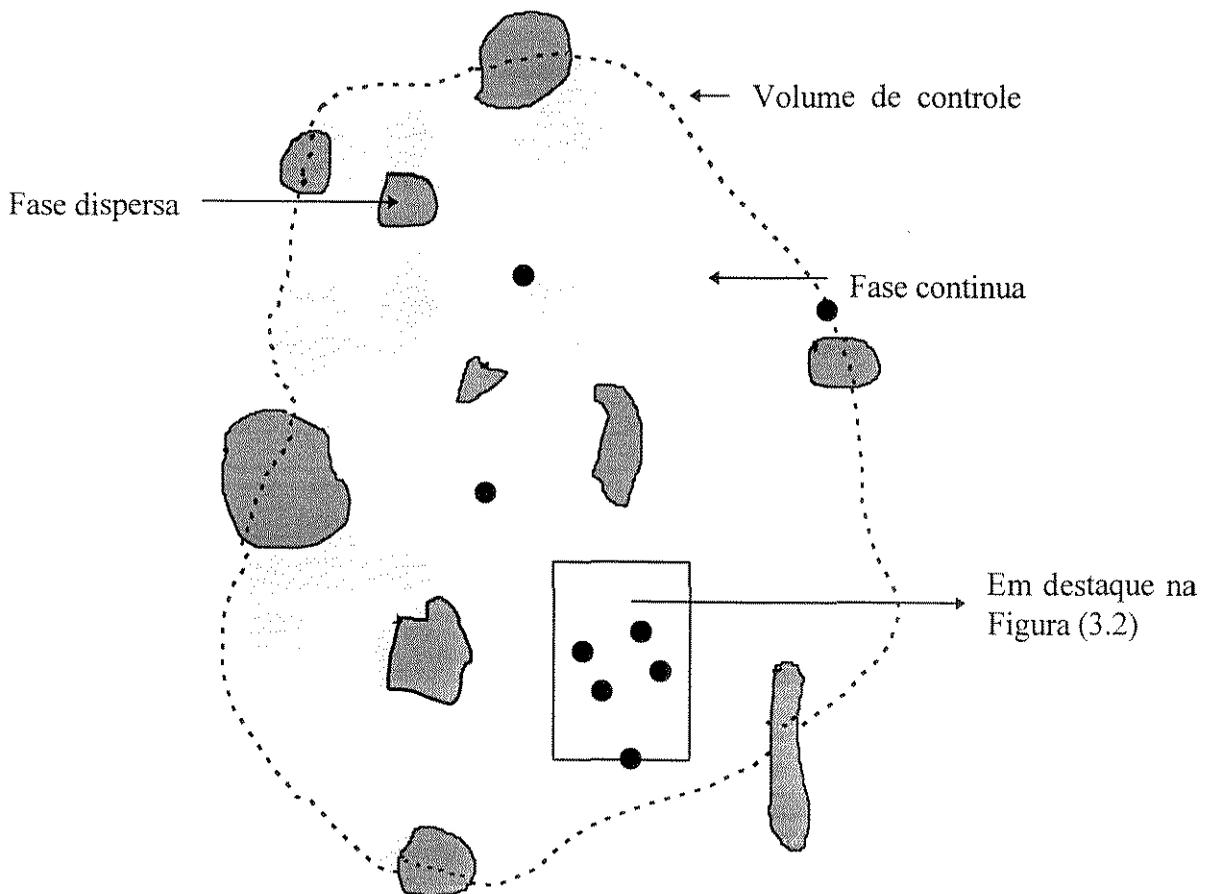


Figura 3.1 - Volume de Controle para sistemas Multifásicos.

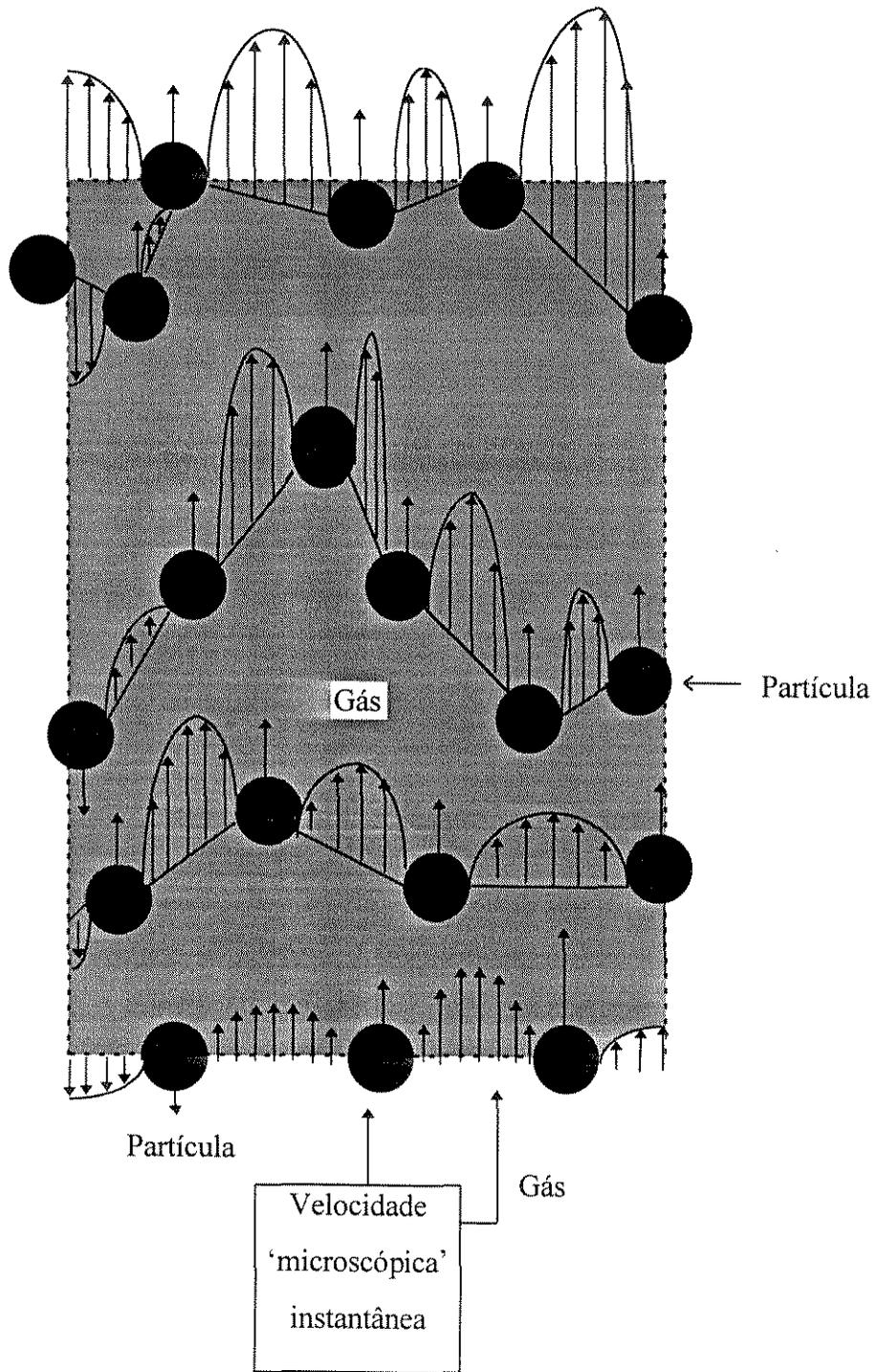
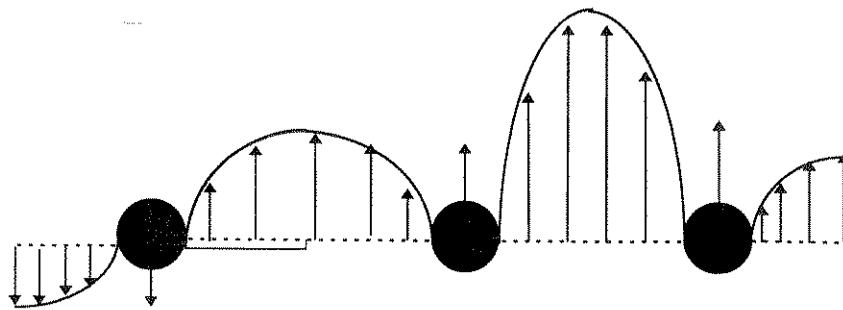
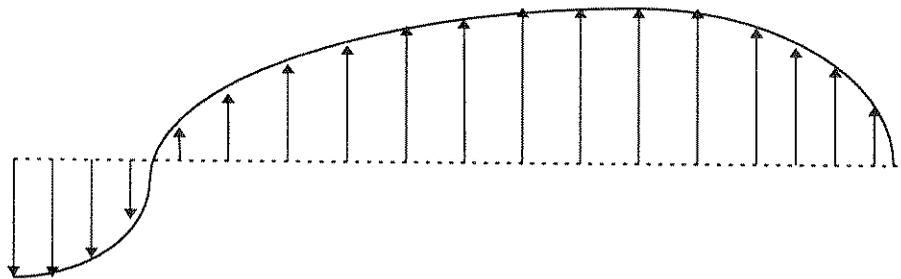


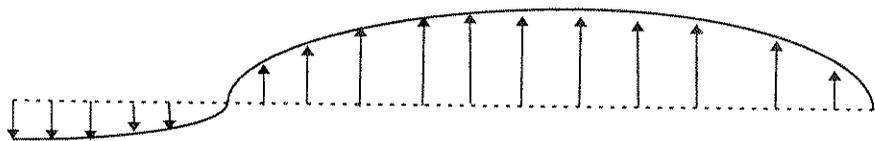
Figura 3.2 - Fluxos intersticiais instantâneos do gás e partículas para sistemas dispersos em um volume de controle.



(a) Velocidades intersticiais locais instantâneas



(b) Velocidade média volumétrica local do gás



(c) Velocidade média volumétrica das partículas

Figura 3.3 - Fluxos intersticiais locais e médios volumétricos na região de entrada da Figura 3.2.

Estes balanços diferenciais podem ser aplicados para cada fase, cada uma das quais com as relações constitutivas que as caracterizam. Porém na interface, balanços devem ser introduzidos e integram a solução destas equações como condições de contorno. Aliás, esta é a grande dificuldade em resolver este tipo de formulação, pois estas interfaces, que representam as condições de contorno na formulação microscópica, são móveis e de posições desconhecidas. Diante desta dificuldade, métodos de análise do problema definido como formulação “macroscópica”, no qual estes detalhes microscópicos são perdidos em favor de uma simplificação do problema, o qual passa a ser descrito em termo de valores médios volumétricos (Figura (3.3)) foram desenvolvidos. Existe uma vasta literatura sobre o tratamento de obtenção de valores médios “macroscópicos”, entre o quais, citamos LIXING (1993), SOO (1989), ISHII (1987), DREW (1983), GRAY (1975), WHITAKER (1973) e SLATERRY (1967). A compreensão do significado dos valores médios utilizados na formulação macroscópica é fundamento básico na modelagem matemática de problemas de escoamento multifásicos. Por isto, antes de apresentarmos a formulação macroscópica, vamos introduzir um breve resumo sobre os tipos de médias utilizadas no desenvolvimento desta formulação.

3.2 - Médias utilizadas na análise de escoamentos Multifásicos

Os procedimentos para obtenção de propriedades médias nos sistemas multifásicos, podem ser classificados em 3 tipos básicos: lagrangeana, euleriana e boltzmanniana.

A Média “lagrangeana” de uma função $\phi(\mathbf{X},t)$, $\mathbf{X}=\mathbf{X}(\mathbf{x},t)$, é definida como (ISHII, 1987):

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \phi(\mathbf{X},t) dt \quad (3.4)$$

A Média “euleriana” de uma função $\phi(\mathbf{x},t)$ é dada por (SLATERRY, 1969):

a) no espaço (\mathfrak{R}^1 , \mathfrak{R}^2 , \mathfrak{R}^3)

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{\mathfrak{R}} \int_{\mathfrak{R}} \phi(\mathbf{x},t) d\mathfrak{R} \quad (3.5)$$

b) no tempo

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \phi(\mathbf{x}, t) dt \quad (3.6)$$

A média “boltzmanniana” de uma função ϕ , no universo espaço tempo, é definida como (GIDASPOW, 1994):

$$\overline{\langle \phi \rangle} = \frac{\int_{\xi} \phi F(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}}{\int_{\xi} F(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}} \quad (3.7)$$

onde $F(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$ é uma função de distribuição de velocidades de entidades individuais, como por exemplo, as partículas, a menor entidade, constituinte da fase particulada (pseudo-fluido).

Neste trabalho faremos uso das médias euleriana e boltzmanniana. A média volumétrica será utilizada na obtenção das equações médias volumétricas instantâneas, a média temporal será utilizada na análise da turbulência relacionada as flutuações dos valores médios volumétricos, pois utiliza-se para o escoamento multifásico, elementos da análise de Reynolds para escoamentos monofásicos, modificados para levar em conta a presença da outra fase. A média Boltzmanniana será utilizada no fechamento das equações para a fase particulada, na determinação das tensões partícula-partícula, devido as flutuações destas.

Pode-se adiantar que um valor médio temporal de um médio volumétrico (euleriano) e um valor médio “boltzmaniano” têm exatamente o mesmo significado físico: representam médias de uma grandeza no universo espaço-tempo. Este significado será importante na compreensão da semelhança entre modelos obtidos por caminhos diferentes, mas com mesmo significado físico. É equivalente a usar uma média aritmética ou geométrica. Os dois resultados significam médias.

3.3 - Volume de Controle e Propriedades Médias Volumétricas

O método de obtenção das médias volumétricas em sistemas multifásicos, baseia-se na idéia de que a cada ponto do espaço está associado um volume $d\vartheta$, sobre o qual obtendo-se o

valor médio de uma propriedade ϕ , este corresponde ao valor médio do ponto central do volume $d\vartheta$.

Consideremos, então, um volume de controle $d\vartheta$, contido em um meio de volume V , conforme indicado na Figura (3.2), através do qual passam as fases da mistura. O valor médio volumétrico de uma grandeza ϕ pode ser definido de duas formas: em relação ao volume de controle $d\vartheta$ total, contendo todas as fases do sistema, e definido como (LIXING, 1993):

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{d\vartheta} \iiint_{d\vartheta} \phi \, d\vartheta \quad (3.8)$$

ou em relação ao volume $d\vartheta_i$, da fase “i”, denominada média volumétrica “intrínseca” de ϕ na fase “i”:

$${}^i\langle \phi \rangle = \frac{1}{d\vartheta_i} \iiint_{d\vartheta_i} \phi \, d\vartheta \quad (3.9)$$

estas duas médias estão relacionadas pela fração volumétrica da fase “i”, por:

$$\langle \phi \rangle = \left(\frac{d\vartheta_i}{d\vartheta} \right) \frac{1}{d\vartheta_i} \iiint_{d\vartheta_i} \phi \, d\vartheta = \varepsilon_i {}^i\langle \phi \rangle \quad (3.10)$$

onde ε_i é uma propriedade instantânea, e $d\vartheta$ é o volume de controle total contendo as “n” fases do sistema, sobre o qual os valores médios são obtidos, portanto,

$$d\vartheta = \sum_i d\vartheta_i, \quad (3.11)$$

e a fração volumétrica instantânea de cada fase “i”, ε_i , é:

$$\varepsilon_i = d\vartheta_i / d\vartheta \quad (3.12)$$

Na verdade, a fase “i” não está, necessariamente, uniformemente distribuída no interior do volume $d\vartheta$, de modo que pode existir uma distribuição das propriedades ϕ 's desta fase no

volume $d\mathcal{V}$. Logo, para que média volumétrica seja representativa, ela deve ser obtida sobre um volume de controle cujas dimensões características são maiores do que as dimensões características da fase. Por exemplo, para o escoamento gás-sólido em um tubo, o volume $d\mathcal{V}$ deve ser muito maior que o volume da partícula e muito menor que o volume do tubo, ou em termos de dimensões características,

$$d_p \ll d_{d\mathcal{V}} \ll D_{\text{tubo}} \quad (3.13)$$

As operações diferenciais sobre as médias volumétricas não são comutativas, e a relação entre as médias de operações diferenciais sobre ϕ microscópico local com as operações diferenciais sobre ϕ médio volumétrico no ponto central do volume $d\mathcal{V}$, são dadas pelos teoremas do valor médio local, por (LIXING, 1993):

$$\left\langle \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} - \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{dA_i} \phi \mathbf{w}_{A_i} \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.14)$$

$$\langle \nabla \phi \rangle = \nabla \langle \phi \rangle + \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{dA_i} \phi \mathbf{n} dA \quad (3.15)$$

$$\langle \nabla \cdot \phi \rangle = \nabla \cdot \langle \phi \rangle + \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{dA_i} \phi \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.16)$$

onde $\mathbf{w}_{A_i} \cdot \mathbf{n}$ é a velocidade de deslocamento da interface A_i devido a mudança de fase.

Para $\phi=1$, da Equação (3.14), obtêm-se:

$$\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} = \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{dA_i} \mathbf{w}_{A_i} \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.17)$$

e de (3.15), obtêm-se:

$$\nabla \varepsilon_i = -\frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{dA_i} \mathbf{n} dA \quad (3.18)$$

Com isto observa-se que no volume de controle $d\mathcal{V}$, nós temos um valor médio volumétrico de ϕ , um valor médio de seu gradiente (ou divergente), e um valor médio de sua derivada temporal distribuída sobre todo o volume $d\mathcal{V}$. Deve-se notar que, sendo o teorema do valor médio, teorema matemático, ele não está sujeito as restrições impostas pelas dimensões características.

3. 4 - Equações médias volumétricas

A aplicação do teorema do valor médio, Eq. (3.8), na equação de conservação para ϕ dado pela equação (3.1), resulta na equação de conservação para ϕ no volume de controle infinitesimal total, $d\mathcal{V}$, resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho_i \phi \rangle + \nabla \cdot \langle \rho_i \mathbf{v}_i \phi \rangle &= \nabla \cdot \langle \mathbf{J}_\phi \rangle + \langle S_{\phi i} \rangle \\ - \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_{ik}} \rho_i \phi [\mathbf{v}_i - \mathbf{w}_i] \cdot d\mathbf{A} + \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_{ik}} \mathbf{J}_\phi \cdot d\mathbf{A} \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde $[\mathbf{v}_i - \mathbf{w}_i]$ é velocidade da fase “i” relativa a velocidade da interface, representando a geração interna da fase “i” devido a mudança de fase, tal que:

$$\frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_{ik}} \rho_i [\mathbf{v}_i - \mathbf{w}_i] \cdot d\mathbf{A} = \frac{1}{d\mathcal{V}} \iiint_{d\mathcal{V}} R_i d\mathcal{V} = \langle R_i \rangle \quad (3.20)$$

representa a de geração de massa da fase “i” no volume $d\mathcal{V}$. Assim, os dois últimos termos da equação (3.19) representam a geração interna de ϕ , originado da outra fase, devido a mudança de fase e aos termos de interface, respectivamente, fenômenos que ocorrem na interface das áreas internas ao volume $d\mathcal{V}$. Sem mudança de fase, o primeiro destes dois termos desaparece. O segundo destes, para a continuidade é zero e para o *momentum* representa as forças agindo na interface, sendo as forças de arrasto e de tensões na superfície (“buoyant”) as mais

importantes. Da relação entre o valor médio no volume $d\mathcal{V}$ e o valor médio intrínseco $d\mathcal{V}_i$, dado pela equação (3.10), tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_i \varepsilon_i \langle \phi \rangle + \nabla \cdot \varepsilon_i \langle \rho_i \mathbf{v}_i \phi \rangle = \\ \nabla \cdot \varepsilon_i \langle \mathbf{J}_\phi \rangle + \varepsilon_i \langle S_{\phi i} \rangle - \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_k} \rho_i \phi [\mathbf{v}_i - \mathbf{w}_i] \cdot d\mathbf{A} + \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_k} \mathbf{J}_\phi \cdot d\mathbf{A} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Esta continua sendo uma equação por unidade de volume da mistura, mas agora em termos de valores médios intrínsecos (com base no volume de cada fase). A equação (3.21) é a equação de conservação média volumétrica da grandeza de transporte instantânea associada a variável ϕ . Observe que escrever o termo difusivo em termos de $\langle \mathbf{J}_\phi \rangle$, o valor intrínseco, não adianta muito neste momento, pois por exemplo, para as tensões viscosas no interior da fase, este termo depende dos gradientes da velocidade local, que são diferentes dos gradientes da velocidade média intrínseca. Mas, por formalismo no desenvolvimento matemático, vamos mante-lo nesta forma, e depois indicaremos como representa-lo em termo das velocidades médias volumétricas intrínsecas, que são as que efetivamente são obtidas. O termo de difusão \mathbf{J}_ϕ poderia não ser escrito em termos de valores intrínsecos, já que ele depende, por exemplo, no caso de transferência de momentum dos gradientes locais microscópicos os quais não são conhecidos. Apenas a velocidade média volumétrica e os gradientes desta são conhecidos.

Com $\phi=1$, $\mathbf{J}_\phi = 0$ e $S_\phi=0$, temos a equação da continuidade para a fase “i”:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \varepsilon_i) + \nabla \cdot [\rho_i \varepsilon_i \langle \mathbf{v}_i \rangle] = - \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_k} \rho_i [\mathbf{v}_i - \mathbf{w}_i] \cdot \mathbf{n} d\mathbf{A} \quad (3.22)$$

e com $\phi=\mathbf{v}_i$, $\mathbf{J}_\phi=\boldsymbol{\tau}_i$ e $S_\phi=\rho\mathbf{g}$, tem-se a equação de conservação do momentum linear:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\rho_i \varepsilon_i \langle \mathbf{v}_i \rangle] + \nabla \cdot \{ \rho_i \varepsilon_i \langle \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i \rangle \} = \nabla \cdot \{ \varepsilon_i \langle \boldsymbol{\tau}_i \rangle \} + [\varepsilon_i \rho_i \mathbf{g}] \\ + \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_k} \{ \boldsymbol{\tau}_i \} \cdot \mathbf{n} d\mathbf{A} - \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_k} \rho_i \{ \mathbf{v}_i [\mathbf{v}_i - \mathbf{w}_i] \} \cdot \mathbf{n} d\mathbf{A} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Nesta forma, as equações ainda apresentam as médias volumétricas de produtos de velocidades e das tensões viscosas no interior das fases que são funções dos gradientes de velocidade locais no interior da fase, e não em função de gradientes da velocidade média intrínseca da fase. Assim, estes termos precisam de alguma forma serem escritos em termos dos valores médios intrínsecos da fase, que são as variáveis efetivamente calculadas. Seguindo GRAY (1975), a velocidade local instantânea pode ser escrita como sendo a soma do valor médio intrínseco mais um desvio deste valor, ou seja (Figura (3.4)):

$$\mathbf{v}_i = \langle \mathbf{v}_i \rangle + \tilde{\mathbf{v}}_i \quad (3.24)$$

com a propriedade de que:

$$\langle \tilde{\mathbf{v}}_i \rangle = 0 \quad (3.25)$$

Assim, para o termo $\mathbf{v}_i \mathbf{v}_i$, temos:

$$\langle \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i \rangle = \langle \mathbf{v}_i \rangle \langle \mathbf{v}_i \rangle + \langle \tilde{\mathbf{v}}_i \tilde{\mathbf{v}}_i \rangle \quad (3.26)$$

onde $\langle \tilde{\mathbf{v}}_i \tilde{\mathbf{v}}_i \rangle$ representa um termo de dispersão de momentum. Segundo SOO (1989) este termo pode ser desprezado para sistemas dispersos.

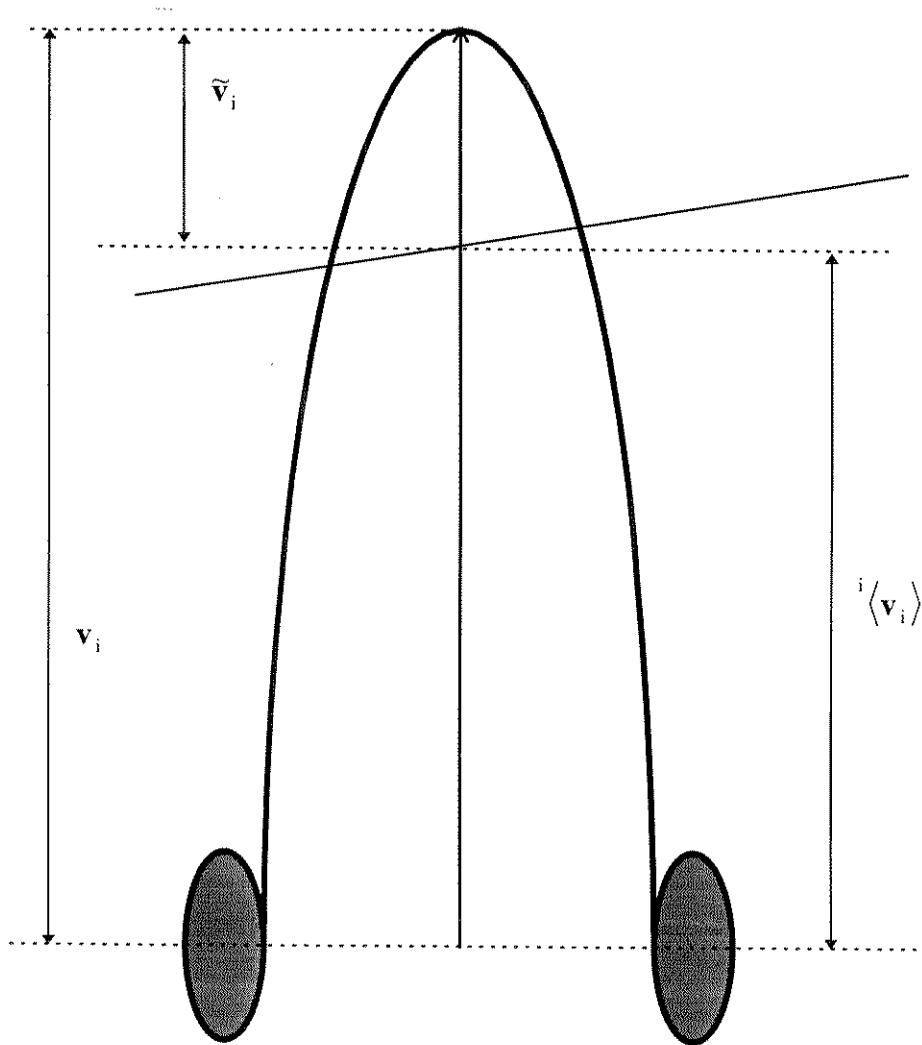


Figura 3.4 - Decomposição da velocidade local instantânea.

3.4.1 - Equações constitutivas

Vamos assumir o modelo de tensões de um fluido newtoniano para as fases (na verdade, para o escoamento gás-sólido, o gás tem este comportamento, mas o sólido não apresenta esta difusão interna), para o qual a relação tensão deformação é:

$$\boldsymbol{\tau}_i = (-\bar{P}_i + (\xi_i - \frac{2}{3}\mu_i) \nabla \cdot \mathbf{v}_i) \mathbf{I} + \mu_i \{ \nabla \mathbf{v}_i + \nabla \mathbf{v}_i^T \} \quad (3.27)$$

e assim, substituindo a pressão e velocidade pelas suas decomposições, temos:

$$\boldsymbol{\tau}_i = (-\langle \bar{P}_i \rangle + (\xi_i - \frac{2}{3}\mu_i) \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_i \rangle) \mathbf{I} + \mu_i \{ \nabla \langle \mathbf{v}_i \rangle + \nabla \langle \mathbf{v}_i \rangle^T \} + \tilde{\boldsymbol{\tau}}_i \quad (3.28)$$

onde

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}}_i = (-\tilde{P}_i + (\xi_i - \frac{2}{3}\mu_i) \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_i) \mathbf{I} + \mu_i \{ \nabla \tilde{\mathbf{v}}_i + \nabla \tilde{\mathbf{v}}_i^T \} \quad (3.29)$$

onde $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_i$ é o tensor desvio, devido aos desvios na taxa de deformação entre o local instantâneo e médio volumétrico intrínseco da fase. Aplicando-se o teorema do valor médio para o valor médio intrínseco de $\boldsymbol{\tau}_i$, tem-se:

$$\langle \boldsymbol{\tau}_i \rangle = (-\langle \bar{P}_i \rangle + (\xi_i - \frac{2}{3}\mu_i) \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_i \rangle) \mathbf{I} + \mu_i \{ \nabla \langle \mathbf{v}_i \rangle + \nabla \langle \mathbf{v}_i \rangle^T \} + \langle \tilde{\boldsymbol{\tau}}_i \rangle \quad (3.30)$$

onde

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\boldsymbol{\tau}}_i \rangle &= (\xi_i - \frac{2}{3}\mu_i) (\nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_i \rangle + \frac{1}{d\vartheta_i} \iint_{dA} \tilde{\mathbf{v}}_i \cdot \mathbf{n} dA) \mathbf{I} + \\ &\mu_i \{ \nabla \langle \tilde{\mathbf{v}}_i \rangle + \nabla \langle \tilde{\mathbf{v}}_i \rangle^T + \frac{1}{d\vartheta_i} \iint_{dA} (\tilde{\mathbf{v}}_i + \tilde{\mathbf{v}}_i^T) \mathbf{n} dA \} = 0 \end{aligned} \quad (3.31)$$

Logo, a equação (3.23) tem a seguinte forma (agora em termos do produto da velocidade média e não dá média do produto da velocidade):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\rho_i \varepsilon_i \langle \mathbf{v}_i \rangle] + \nabla \cdot \{ \rho_i \varepsilon_i \langle \mathbf{v}_i \rangle \langle \mathbf{v}_i \rangle \} &= \nabla \cdot \{ \varepsilon_i \langle \boldsymbol{\tau}_i \rangle \} + [\varepsilon_i \rho_i \mathbf{g}] \\ &+ \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_{ik}} \{ \boldsymbol{\tau}_i \} \cdot \mathbf{n} dA \\ &- \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_{ik}} \rho_i \{ \mathbf{v}_i [\mathbf{v}_i - \mathbf{w}_i] \} \cdot \mathbf{n} dA \end{aligned} \quad (3.32)$$

Se não há mudança de fase ($\mathbf{v}_i - \mathbf{w}_i = 0$), o termo do lado direita da Equação (3.22), assim como o último termo do lado direito da Equação (3.23) (ou da Equação 3.32) são nulos.

3.5- Balanços nas Interfaces

Os balanços de massa e momentum na interface das fases fornece o termo de transferência entre as fases, que aparece nas equações acima, e devem satisfazer a conservação global de massa e momentum. Assim, temos:

- Balanço de massa: O fluxo de massa na interface é igual a soma dos fluxos de geração interna das fases (mudanças de fases):

$$\sum_{i=1}^n - \frac{1}{d\mathcal{V}} \iint_{A_{ik}} \rho_i [\mathbf{v}_i - \mathbf{w}_i] \cdot \mathbf{n} dA = \sum_1^n \langle R_i \rangle = 0 \quad (3.33)$$

Para um processo sem mudança de fase, então:

$$\langle R_i \rangle = 0 \quad (3.34)$$

-Balanço de momentum: Sem mudança de fase, o balanço de momentum na interface restringe-se a transferência de momentum através da força de arrasto e das tensões na superfície (“buoyant”). Assim,

$$\sum_{k=1}^n \sum_i \frac{1}{d\Omega} \iint_{A_k} \{\boldsymbol{\tau}_i\} \cdot \mathbf{n} dA = \sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^n \beta_{ik} [\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i] + \mathbf{F}_i \quad (3.35)$$

Onde o primeiro termo é força de arraste entre as fases e \mathbf{F}_i representa outras forças de interface sobre a fase “i”.

Portanto, as equações de conservação (3.22) e 3.23), reduzem-se a:

-continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \varepsilon_i) + \nabla \cdot [\rho_i \varepsilon_i \langle \mathbf{v}_i \rangle] = 0 \quad (3.36)$$

-momentum

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\rho_i \varepsilon_i \langle \mathbf{v}_i \rangle] + \nabla \cdot \{ \rho_i \varepsilon_i \langle \mathbf{v}_i \rangle \langle \mathbf{v}_i \rangle \} &= \nabla \cdot \{ \varepsilon_i \langle \boldsymbol{\tau}_i \rangle \} + \{ \varepsilon_i \rho_i \mathbf{g} \} \\ &+ \sum_{k=1}^n \beta_{ik} [\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i] + \mathbf{F}_i \end{aligned} \quad (3.37)$$

Estas são, portanto, as equações de conservações médias volumétricas, para um sistema multifásico, sem mudança de fase. No nosso caso, particularmente, temos um sistema constituído por duas fases, uma gasosa contínua e a outra formada por partículas dispersas no gás.

Os processos em CFB's são, como já foi dito, essencialmente turbulentos, de modo que as flutuações turbulentas tem um papel importante nos processos de transporte. Neste trabalho, uma extensão da teoria clássica da turbulência para escoamento multifásico, conforme apresentado por vários autores (LIXING, 1993) é utilizado na análise da turbulência.

A idéia é modelar as correlações de alta ordem usando-se correlações de menor ordem ou propriedades do escoamento médio, para se ter um sistema de equações matematicamente determinado (fechado). Em seguida, apresenta-se um resumo da análise de Reynolds, detalhada em SOO (1989). Por conveniência, o símbolo “ $\langle \rangle$ ” e o superescrito “i” serão omitidos a partir deste ponto, mas estaremos sempre nos referindo as variáveis médias volumétricas. Vamos

restringir a análise a um sistema contendo apenas duas fases, a gás e a particulada, embora isto vale também para um sistema com “n” fases, mas por simplicidade, vamos ficar restrito ao nosso caso.

3.6 - Equações médias temporais das médias volumétricas - decomposição de Reynolds

Obtivemos primeiro as médias volumétricas, para depois obter-se as médias temporais. Isto deve-se a duas razões, conforme assinaladas por SOO (1989): (1) A obtenção das médias temporais primeiro, elimina a existência das fases dinâmicas instantâneas, cada uma das fases tendo a sua dinâmica e (2) quando existem diferentes fases dinâmicas, cada uma das quais com diferentes tempos de duração, as médias temporais geram frações de tempos de residência das fases, termos sem significado físico.

As equações médias temporais das médias volumétricas, são obtidas de modo análogo ao desenvolvimento para escoamentos monofásicos:

Cada variável média volumétrica instantânea é decomposta em um valor médio temporal da média volumétrica e um componente flutuante desta média volumétrica. Logo, as variáveis são decompostas, como:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.38a)$$

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{v}' \quad (3.38b)$$

$$\varepsilon = \bar{\varepsilon} + \varepsilon' \quad (3.38c)$$

onde $\bar{\phi}$ é definido conforme a equação (3.5), e as seguintes propriedades são satisfeitas:

$$\bar{\phi}' = 0 \quad (3.39a)$$

$$\overline{\phi_1 + \phi_2} = \overline{\phi_1} + \overline{\phi_2} \quad (3.39b)$$

$$\overline{C\phi} = C\overline{\phi} \quad (3.39c)$$

$$\overline{\phi_1 \phi_2} = \overline{\phi_1} \overline{\phi_2} \quad (3.39d)$$

$$\overline{\frac{\partial \phi}{\partial s}} = \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial s} \quad (3.39e)$$

Assim, para um sistema de densidade de cada fase “i” constante (ou desprezando-se a flutuação na densidade intrínseca da fase), substituindo as variáveis decompostas nas equações médias volumétricas instantâneas de conservação da massa e momentum e aplicando-se a média temporal, resulta:

- Equação da continuidade

$$\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_i \overline{\varepsilon_i \mathbf{v}_i} + \rho_i \overline{\varepsilon'_i \mathbf{v}'_i}] = 0 \quad (3.40)$$

- Equação do momentum

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\rho_i \overline{\varepsilon_i \mathbf{v}_i} + \rho_i \overline{\varepsilon'_i \mathbf{v}'_i}] + \nabla \cdot \{ \rho_i \overline{\varepsilon_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i} + 2\overline{\mathbf{v}_i \rho_i \varepsilon'_i \mathbf{v}'_i} \} = \nabla \cdot \{ \rho_i \overline{\varepsilon'_i \mathbf{v}'_i \mathbf{v}'_i} + \overline{\varepsilon'_i \boldsymbol{\tau}'_i} \} \\ - \nabla \cdot (\overline{\varepsilon_i \boldsymbol{\tau}_i}) + \nabla \cdot \overline{\varepsilon_i \{ \boldsymbol{\sigma}'_i + \rho_i \overline{\mathbf{v}'_i \mathbf{v}'_i} \}} + \rho_s \overline{\varepsilon_i \mathbf{g}} + \overline{\mathbf{F}_i} + \overline{\beta_{ik} [\overline{\mathbf{v}_k} - \overline{\mathbf{v}_i}]} + \overline{\beta'_{ik} [\overline{\mathbf{v}'_k} - \overline{\mathbf{v}'_i}]} \end{aligned} \quad (3.41)$$

As correlações turbulentas (associadas aos componentes flutuantes) que aparecem nas Equações (3.40) e (3.41) são de 5 tipos (ELGHOBASHI et al, 1983):

$\overline{\varepsilon'_i \mathbf{v}'_i}$ - correlações de flutuações de velocidade com fração volumétrica da fase.

$\overline{\varepsilon'_i \mathbf{v}'_i \mathbf{v}'_i}$ - correlações múltiplas de vários componentes de flutuações de velocidade com fração volumétrica da fase.

$\nabla \cdot \{\overline{\varepsilon_i' \tau_i'}\}$ - correlações de flutuações das tensões cisalhantes com a fração volumétrica da fase.

$\overline{\beta'_{ik} (\mathbf{v}'_k - \mathbf{v}'_i)}$ - correlações de flutuação do coeficiente de transferência de momentum entre fases com as flutuações de velocidades das fases.

$\overline{\mathbf{v}'_i \mathbf{v}'_i}$ - múltiplas correlações de flutuações de velocidade da fase.

Destes 5 tipos de correlações identificadas, os 4 primeiros devem-se a presença da outra. O sistema formado pelas equações (3.40) e (3.41) não constitui um sistema matematicamente fechado, devido aos termos adicionais relacionados aos componentes flutuantes de velocidade, concentração e tensões cisalhantes das fases que aparecem nestas equações, por isto, faz-se necessário a introdução de modelos para determinar estas correlações associadas às flutuações turbulentas. Como os métodos diferem para as fases gasosa e particulada, devido as diferentes características das mesmas, os modelos para estes termos serão vistos para cada fase específica e não de forma genérica como vem sendo desenvolvido até então. Mas, a idéia é a mesma para modelar os termos devido às flutuações turbulentas. Estas geram tensões turbulentas que por analogia com a teoria cinética dos gases são proporcionais a uma velocidade característica e a um comprimento característico. No caso da fase gás, a analogia não é completa por que os turbilhões responsáveis pelo transporte turbulento não mantém sua identidade, como as moléculas de um gás na teoria cinética dos gases. Mas esta velocidade e este comprimento característicos podem ser obtidos via modelos de turbulência. Neste trabalho o modelo de turbulência k- ε desenvolvido para escoamentos multifásicos, modificado para levar em conta a presença da outra fase, foi utilizado na estimativa dos termos associados as flutuações turbulentas. No caso da fase particulada, a analogia do movimento das partículas com as das moléculas de um gás na teoria cinética é total, de modo que o modelo de turbulência para esta fase é hoje conhecido como modelo da teoria cinética do escoamento de materiais granulares (GIDASPOW, 1994). Tanto o modelo k- ε para o gás (ELGHOBASHI et al, 1983), quanto o modelo cinético do escoamento de materiais granulares para a fase partícula (GIDASPOW, 1994) são objetos de estudos específicos sobre os quais existem uma vasta literatura. O desenvolvimento destes modelos é tarefa bastante longa, que foge aos objetivos deste trabalho, voltado para aplicação, de forma que apenas os resultados finais são mostrados e utilizados aqui.

3.7 - Fechamento do modelo - Modelo dos Tensores de Reynolds

Uma simplificação introduzida seria desprezar todos os termos associados às flutuações de concentração das fases. Squares and Eaton (DASGUPTA et al, 1994) concluíram que estes termos para sistemas dispersos com turbulência isotrópica podem ser desprezados.

Mas, a correlação de flutuação de concentração com velocidade ($v_i' \varepsilon_i'$) tem sido considerada por alguns autores (LIXING, 1993), como uma contribuição dispersiva ao transporte de massa, por uma lei análoga a da difusão de "Fick":

$$\rho_i \overline{v_i' \varepsilon_i'} = -D_{im}^T \nabla \rho_i \varepsilon_i \quad (3.42)$$

representando um fluxo dispersivo de massa da fase "i" através da mistura devido as flutuações de concentração e velocidade, e

As correlações de flutuação de velocidade $v_i' v_i'$, que geram tensões turbulentas, são modeladas por analogia com as tensões em fluido newtoniano, como:

$$\rho_i \overline{v_i' v_i'} = \sigma^T = \mu_i^T \{ \nabla \bar{v}_i + \nabla \bar{v}_i^T \} + ((\xi_i^T - \frac{2}{3} \mu_i^T) \nabla \cdot \bar{v}_i - \frac{2}{3} \rho_i k_i) I \quad (3.43)$$

representando um fluxo dispersivo de momentum devido as flutuações de velocidade da fase "i".

Portanto, as equações, com introdução destes tem a forma:

-Equação da continuidade:

$$\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_i \varepsilon_i v_i - D_{im}^T \nabla \rho_i \varepsilon_i] = 0 \quad (3.44)$$

-Quantidade de movimento:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\varepsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i - D_{im}^T \nabla \varepsilon_i \rho_i] + \nabla \cdot \{ \varepsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i - 2 \mathbf{v}_i D_{im}^T \nabla \varepsilon_i \rho_i \} = \\ - \nabla \varepsilon_i P_i + \nabla \cdot \varepsilon_i \{ \boldsymbol{\sigma}_i^l + \boldsymbol{\sigma}_i^T \} + \varepsilon_i \rho_s \mathbf{g} + \beta_{ik} [\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i] \end{aligned} \quad (3.45)$$

As equações poderiam ser resolvidas nesta forma, porém para mantermos a consistência com as equações de conservação obtidas a partir da teoria cinética dos materiais granulares, que será visto adiante, rearranjou-se estas equações na seguinte forma: Da equação (3.40), observamos que a velocidade nas faces é composta de duas partes, definidas como contribuição convectiva, o valor médio temporal do médio volumétrico, e uma parte difusiva, resultante das flutuações de velocidade e concentração, dado pela equação (3.42) ou seja, podemos escrever (LIXING, 1993):

$$\mathbf{v}_{iT} = \mathbf{v}_{iC} + \mathbf{v}_{iD} \quad (3.46)$$

3.8 - Modelo geral

Em termos da velocidade total \mathbf{v}_{iT} , as equações de conservação são (omitindo-se o sub-índice "T"):

-Equação da continuidade:

$$\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i] = 0 \quad (3.47)$$

-Quantidade de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\varepsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i] + \nabla \cdot \{ \varepsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i \} = \nabla \cdot \varepsilon_i \{ \boldsymbol{\tau}_i^l + \boldsymbol{\tau}_i^T \} + \varepsilon_i \rho_s \mathbf{g} + \mathbf{F}_i + \beta_{ik} [\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i] + [D_{im}^T \nabla \rho_i \varepsilon_i] \mathbf{v}_{iD} \quad (3.48)$$

A preferência pela substituição de \mathbf{v}_i por \mathbf{v}_{iT} é que nesta forma as equações de conservação da massa e momentum assumem a forma padrão. Outro motivo é que o último

termo da Equação (3.48) surge como uma fonte de momentum devido a gradientes de concentração da fase e a natureza deste gradiente é gerar movimento.

O termo τ^T , depende da viscosidade turbulenta, de acordo com a Equação 3.43, na qual a viscosidade turbulenta é função de propriedades do escoamento que caracterizam o movimento flutuante, como energia cinética do movimento flutuante e taxa de dissipação desta energia cinética e representa um fluxo adicional de momentum devido as flutuações de velocidade média volumétrica da fase.

O último termo do lado direito da Equação (3.48), que aparece como um termo adicional de momentum, devido a flutuação de concentração da fase e proporcional a contribuição dispersiva de massa, foi desprezado.

Para estimar o termo τ^T , os modelos de turbulência para as duas fases, gasosa e particulada, embora baseados na mesma idéia, seguem desenvolvimento diferentes e por isto cada fase será analisada agora independentemente e não numa forma geral como fez-se até este ponto.

Em resumo, o modelo matemático do processo é o modelo de dois fluidos (LIXING, 1993), o qual baseia-se nos princípios gerais de conservação da massa, quantidade de movimento e energia para cada fase e global. No modelo que determina as variáveis básicas (velocidade das fases, pressão e fração volumétrica), alguns parâmetros (μ_g , μ_s , β_{ij} , ξ) e propriedades do escoamento (k , ε e T), que possibilitam a determinação destes parâmetros, foram introduzidos para termos um modelo “fechado”. As equações de conservação médias volumétricas instantâneas para o gás e as partículas são apresentadas em seguida.

3.9- Fase gás - Equações médias temporais das médias volumétricas instantâneas.

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

3.9.1 - Continuidade da fase gás

$$\frac{\partial(\rho_g \varepsilon_g)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_g \varepsilon_g \mathbf{v}_g] = 0 \quad (3.49)$$

onde ρ é a densidade da fase, ε a fração volumétrica e \mathbf{v}_g o vetor velocidade média volumétrica do gás.

3.9.2 - Quantidade de movimento da fase gás

$$\frac{\partial[\rho_g \varepsilon_g \mathbf{v}_g]}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_g \varepsilon_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g] = \nabla \cdot \varepsilon_g \boldsymbol{\tau}_g + \beta_{gs} [\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g] + \varepsilon_g \rho_g \mathbf{g} + P \nabla \varepsilon_g - \frac{2}{3} \nabla \rho_g k_g \quad (3.50)$$

O termo $P \nabla \varepsilon_g$ representa um termo adicional da força de pressão (DREW, 1983) devido a variação de área efetiva da fase em função da presença da outra fase.

3.9.3. - Tensões na fase gás

$$\boldsymbol{\tau}_g = -P_g \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_g \quad (3.51)$$

onde,

$$\boldsymbol{\sigma}_g = 2\mu_g \boldsymbol{\gamma}_g$$

onde μ_g é viscosidade efetiva da fase gás e $\boldsymbol{\gamma}_g$ é o tensor taxa de deformação da fase gás,

$$\boldsymbol{\gamma}_g = \frac{1}{2} \{ \nabla \mathbf{v}_g + \nabla \mathbf{v}_g^T \} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}_g) \mathbf{I} \quad (3.52)$$

3.9.4 - Modelo de turbulência k-ε

A viscosidade da fase gasosa, pode ser estimada a partir de qualquer modelo de turbulência. Existem na literatura modelos de zero, de uma ou de duas equações (RODI, 1980). Os modelos mais completos são os modelos de duas equações. Entre estes, o modelo k-ε é o mais utilizado. A vantagem deste tipo de modelo é a possibilidade da inclusão do termo de transferência de energia cinética do movimento flutuante entre as fases, fato que não é possível com modelos de zero equações, como comprimento de mistura de Prandtl, por exemplo. Já os modelos de uma equação necessitam de relações algébricas para o comprimento de escala, o que não está disponível ainda na literatura para escoamentos multifásicos. Por estes motivos, a viscosidade efetiva da fase gás foi calculada a partir do modelo de turbulência k-ε, descrito pelas equações seguintes:

3.9.4.1 - Energia cinética turbulenta (k)

A equação da energia cinética turbulenta da fase gasosa é obtida subtraindo-se a equação média temporal do momentum linear da equação local instantânea, e esta diferença é multiplicada pela flutuação de velocidade do gás, resultando, após algumas simplificações (LIXING, 1993):

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g k)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_g \varepsilon_g \mathbf{v}_g k] = \nabla \cdot [\varepsilon_g \Gamma_k \nabla k] - (\boldsymbol{\tau}_g : \nabla \mathbf{v}_g - \rho_g \varepsilon^k) \varepsilon_g + \beta_{ki} (\overline{v'_g v'_g} - 2k) \quad (3.53)$$

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

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

3.9.4.2 - Taxa de dissipação (ε) para a fase gás

A equação da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta da fase gasosa é (LIXING, 1993):

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g \varepsilon^k)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_g \varepsilon_g \mathbf{v}_g \varepsilon^k] = \nabla \cdot [\varepsilon_g \Gamma_k \nabla \varepsilon^k] - (C_1 \tau_g : \nabla \mathbf{v}_g - C_2 \rho_g \varepsilon^k + \beta_{ik} (\overline{v'_s v'_g} - 2k)) \frac{k}{\varepsilon^k} \varepsilon_g \quad (3.54)$$

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

Os parâmetros do modelo k- ε são: $\Gamma_k = \mu_g / \sigma_k$, $\Gamma_\varepsilon = \mu_g / \sigma_\varepsilon$, $\sigma_k = 1.00$, $\sigma_\varepsilon = 1.30$, $C_1 = 1.44$, $C_2 = 1.92$, e a viscosidade turbulenta da fase gás foi calculada pelo modelo de turbulência k- ε . No modelo k- ε , a viscosidade turbulenta é calculada pela relação de Kolmogorov-Prandtl (BOLIO et al, 1995):

$$\mu_g^t = C_\mu \rho_g \frac{k^2}{\varepsilon^k} \quad (3.55)$$

e

$$\mu_g = \mu_g^l + \mu_g^t \quad (3.56)$$

3.10 - Fase particulada - Equações médias

Para a fase particulada, a difusão molecular de momentum não existe, pois esta é formada de partículas sólidas, sem gradientes internos de velocidade. Portanto, com $\tau_s^l = 0$. As propriedades desta fase são valores médios do conjunto de partículas, dado pela Equação 3.7. As equações finais são (GIDASPOW, 1994):

3.10.1 - Continuidade da fase particulada

$$\frac{\partial(\rho_s \varepsilon_s)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_s \varepsilon_s \mathbf{v}_s] = 0 \quad (3.57)$$

onde ρ é a densidade da fase, ε a fração volumétrica e \mathbf{v}_g o vetor velocidade média volumétrica do gás.

3.10.2 - Quantidade de movimento da fase particulada

$$\frac{\partial[\varepsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s]}{\partial t} + \nabla \cdot \{\varepsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s\} = \nabla \cdot \{\varepsilon_s \boldsymbol{\tau}_s^T\} + \beta_{gs}[\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s] + \varepsilon_s \rho_s \mathbf{g} + \varepsilon_s \nabla P_g \quad (3.58)$$

onde P é a pressão do gás, $\boldsymbol{\tau}_s^T$ é o tensor tensão, β o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases e \mathbf{g} é a aceleração da gravidade. O termo devido a pressão do gás é a força “buoyant” (força de “flutuação”) agindo sobre a partícula pelo gás.

Temos portanto, um sistema de equações diferenciais para cada fase, os quais interagem através do termo de interface.

3.10.3 - Tensões na fase particulada

$$\boldsymbol{\tau}_s = [-P_s + \xi_s \nabla \cdot \mathbf{v}_s] \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_s \quad (3.59)$$

onde,

$$\boldsymbol{\sigma}_s = 2\mu_s \boldsymbol{\gamma}_s$$

onde μ_s é viscosidade efetiva, P_s é a pressão efetiva e $\boldsymbol{\gamma}_s$ é o tensor taxa de deformação da fase particulada, sendo

$$\boldsymbol{\gamma}_s = \frac{1}{2} \{\nabla \mathbf{v}_s + \nabla \mathbf{v}_s^T\} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}_s) \mathbf{I} \quad (3.60)$$

3.10.4 - Energia pseudo-térmica - fase particulada

Associado ao movimento flutuante (randômico) das partículas está a temperatura granular T (por analogia com a temperatura termodinâmica na teoria cinética dos gases), definida como:

$$T = \frac{1}{3} \overline{\langle \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}' \rangle} \quad (3.61)$$

onde a barra e os colchetes indicam um valor médio no domínio velocidade (definido pela Equação 3.7), o que equívale a um valor médio temporal de um médio volumétrico no domínio espacial.

Os termos de dispersão de momentum na fase particulada dependem desta temperatura, para a qual tem-se uma equação de transporte (GIDASPOW, 1994).

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial \epsilon_s \rho_s T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \epsilon_s \mathbf{v}_s T) \right] = \nabla \cdot (\Gamma_T \nabla T) - \boldsymbol{\tau}_s : \nabla \mathbf{v}_s - \gamma_1 + \gamma_2 \quad (3.62)$$

onde T é a Temperatura granular, $T=1/3V_s'^2$, $v_s' = v_z' = v_r'$, sendo v_s' a flutuação de velocidades das partículas.

$$\gamma_1 = 3(1 - e^2) \epsilon_s^2 \rho_s g_0 \left[\frac{4}{d_p} \sqrt{\frac{T}{\pi}} - \nabla \cdot \mathbf{v}_s \right] \quad (3.63)$$

é a dissipação da energia pseudo-térmica, devido as colisões inelásticas entre as partículas, onde “ e ” é o coeficiente de restituição partícula-partícula, que assume o valor 1 para colisões elásticas e 0 (zero) para colisões plásticas,

$$\gamma_2 = \beta_{gs} \overline{(v'_g v'_s)} - 3T \quad (3.64)$$

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

$$P_s = \varepsilon_s \rho_s [1 + 2(1 + e)\varepsilon_s g_0] T \quad (3.65)$$

é a pressão efetiva da fase particulada,

$$g_0 = \frac{3}{5} \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,\max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (3.66)$$

é a função de distribuição radial,

$$\xi_s = \frac{4}{3} \varepsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{T}{\pi}}, \quad (3.67)$$

é a viscosidade de conjunto,

$$\mu_s = \frac{2\mu_{s,dil}}{(1 + e)g_0} \left[1 + \frac{4}{5}(1 + e)g_0\varepsilon_s \right]^2 + \frac{4}{5} \varepsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{T}{\pi}} \quad (3.68)$$

é a viscosidade efetiva da fase particulada, sendo

$$\mu_{s,dil} = \frac{4}{96} \rho_s d_p \sqrt{\pi T} \quad (3.69)$$

e

$$\Gamma_T = \frac{2\Gamma_{T,dil}}{(1 + e)g_0} \left[1 + \frac{6}{5}(1 + e)g_0\varepsilon_s \right]^2 + 2\varepsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{T}{\pi}} \quad (3.70)$$

é o coeficiente de difusão da energia pseudo-térmica devido a gradientes na temperatura granular (nas flutuações de velocidades das partículas), sendo

$$\Gamma_{T,dil} = \frac{75}{384} \rho_s d_p \sqrt{\pi T}. \quad (3.71)$$

3.11- Correlação para $\overline{v'_s v'_g}$

Um dos pontos ainda em aberto na modelagem de escoamentos gás sólido, é a correlação de interações entre os componentes flutuantes do gás e da partícula. Para estimar este termo, nós simplesmente impomos a condição de conservação do movimento flutuante global, que significa em aplicar um balanço de interface para esta variável, satisfazendo a condição de conservação deste movimento. Assim, temos:

$$\beta_{gs} (\overline{v'_g v'_s} - 2k) + \beta_{gs} (\overline{v'_g v'_s} - 3T) = 0 \quad (3.72)$$

da qual tem-se:

$$\overline{v'_g v'_s} = (k + \frac{3}{2}T) \quad (3.73)$$

e portanto, tem-se:

$$\beta_{gs} (\overline{v'_g v'_s} - 2k) = \beta_{gs} (\frac{3}{2}T - k) \quad (3.74)$$

e

$$\beta_{gs} (\overline{v'_g v'_s} - 3T) = \beta_{gs} (k - \frac{3}{2}T) \quad (3.75)$$

3.12 - Coeficiente de transferência de Q. M. entre fases

Finalmente, o último parâmetro do modelo é o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases gasosa e particulada, o qual é calculado por (GIDASPOW, 1990):

a) Baseado na equação de Ergun ($\epsilon_g < 0,8$):

$$\beta = 150 \frac{\epsilon_s^2 \mu_g^1 \rho_s}{(\epsilon_g d_p \varphi_s)^2 (\rho_s - \rho_g)} + 1.75 \frac{\rho_g \rho_s |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s| \epsilon_s}{(\epsilon_g d_p \varphi_s) (\rho_s - \rho_g)}, \quad \text{se } \beta < 0,8 \quad (3.76)$$

b) baseado no coeficiente de arrasto da esfera

$$\beta = \frac{3}{4} Cd \frac{\rho_g \rho_s |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s| \epsilon_s}{(d_p \varphi_s) (\rho_s - \rho_g)} \epsilon_s^{-2,65}, \quad \text{se } \beta \geq 0,8 \quad (3.77)$$

$$Cd = \begin{cases} \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,687}); & \text{se } Re \leq 1000 \\ 0,44; & \text{se } Re > 1000 \end{cases}, \quad \text{onde } Re = \frac{|\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s| d_p \rho_g \epsilon_s}{\mu_g^1} \quad (3.78)$$

3.13 - Condições de contorno

A especificação das condições de contorno para o escoamento gás-sólido aqui simulado apresentam um grau de complexidade um pouco maior do as condições para os escoamentos monofásicos, devido a presença da fase particulada. Neste trabalho, as seguintes condições de contorno foram utilizadas:

a) Condição na entrada: exceto a pressão, a qual é obtida por extrapolação, todas as outras variáveis têm valores conhecidos na entrada (condição de contorno de primeira espécie):

$$\phi_{ent} = \phi_{conhecido} \quad (3.79)$$

b) Centro do tubo: A condição de simetria é utilizada para todas as variáveis,

$$\frac{\partial \phi}{\partial r} = 0 \quad (3.80)$$

c) Saída do tubo: A condição de continuidade do fluxo foi aplicada para todas as variáveis (gradiente nulo em relação a direção da saída).

$$\frac{\partial \phi}{\partial \eta} = 0, \quad \eta = z, r \quad (3.81)$$

d) Condição na parede: para os componentes de velocidades da fase gás, a condição de não deslizamento é aplicada:

$$v_{gz} = v_{gr} = 0 \quad (3.82)$$

- a pressão é obtida por extrapolação, a energia cinética e a taxa de dissipação desta são obtidas através de funções de parede.

-para a fase particulada, a condição de parede impermeável,

$$v_{sr} = 0 \quad (3.83)$$

é usada para o componente radial. Para o componente axial para o modelo invíscido e para o newtoniano com viscosidade constante assume-se a condição de não deslizamento, e para o modelo cinético do escoamento de materiais granulares a velocidade axial na parede é obtida de um balanço para a taxa de transferência de tensão viscosa para a parede pelas partículas que colidem com esta (SINCLAIR and JACKSON, 1989),

$$\tau_{rz}|_w = \frac{\Phi_w \sqrt{3} \pi \rho_s \varepsilon_s T^{1/2} v_{s,z}}{6 \varepsilon_{s,max} \left[1 - \left(\varepsilon_s / \varepsilon_{s,max} \right)^{1/3} \right]} \Big|_w \quad (3.84)$$

onde Φ_w é um ‘fator de atrito’ partícula-parede, que varia entre 0 (parede lisa) e 1 (parede rugosa). A temperatura granular na parede é obtida a partir do fluxo de energia pseudo-térmica na parede (SINCLAIR and JACKSON, 1989),

$$q_{PT}|_w = \gamma_w - v_{s,z} \tau_{rz}|_w, \quad (3.85)$$

onde,

$$\gamma_w = \frac{\sqrt{3}\pi\epsilon_s^2 \rho_s T^{3/2} (1 - e_w^2)}{4\epsilon_{s,max} \left[1 - \left(\epsilon_s / \epsilon_{s,max} \right) \right]} \Big|_w, \quad (3.86)$$

é a taxa de dissipação de energia pseudo-térmica por unidade de área, devido a inelasticidade das colisões partícula-parede. A concentração de partículas foi obtida a partir de um balanço de quantidade de movimento na direção radial para a região totalmente desenvolvida, conforme DASGUPTA *et al.* (1991),

$$\frac{\partial}{\partial r} (r\epsilon_s T) \Big|_w - \epsilon_s T \Big|_w = \gamma \frac{\partial \epsilon_s}{\partial r} \Big|_w, \quad (3.87)$$

onde incluímos um termo limitante da saturação do sistema, substituindo o de pressão do sólido, de modo que $\gamma = \gamma(\epsilon_s, T)$ é obtido aplicando-se o limite tal que $\epsilon_s|_w \rightarrow \epsilon_{s,max}$, quando $T|_w \rightarrow 0$, evitando-se assim, a condição fisicamente irreal, de termos concentrações de partículas maiores que a do leito fixo.

Convém ressaltar que, a equação da continuidade para a fase particulada é (rearranjada sem o termo de dispersão) uma equação parabólica e que de fato, não há necessidade da condição de contorno para a concentração de partículas na parede na sua solução. Qualquer valor neste ponto seria apenas “decoração”, pois não são utilizados. Entretanto, como as equações são acopladas, o valor neste ponto entra no cálculo da condição de contorno para outras variáveis. No caso específico, ela faz parte da condição de contorno para a temperatura granular de forma que, o resultado da aplicação deste tipo de condição de contorno é na verdade, uma modificação na condição de contorno para a temperatura granular, onde o caso

limite da concentração de partículas ir para a máxima, quando a temperatura granular vai para zero, é incluído. A temperatura granular na parede, por sua vez, afeta diretamente a velocidade axial da fase particulada também na parede, e assim, todo o sistema sente a condição de contorno. Do ponto de vista numérico, para malhas infinitamente refinadas, esta modificação não traz benefícios, porém, para malhas mais grosseiras tem-se um valor mais exato da temperatura granular naquele ponto.

As condições de contorno para a energia cinética turbulenta e taxa de dissipação desta são calculadas por (CARVALHO, 1993) da seguinte forma:

1) Entrada: Obtidas empiricamente, através de relações em função de outras variáveis do gás na entrada e de parâmetros geométricos do tubo:

-Energia cinética turbulenta

$$k_0 = 0,005V_{g0}^2 \quad (3.89)$$

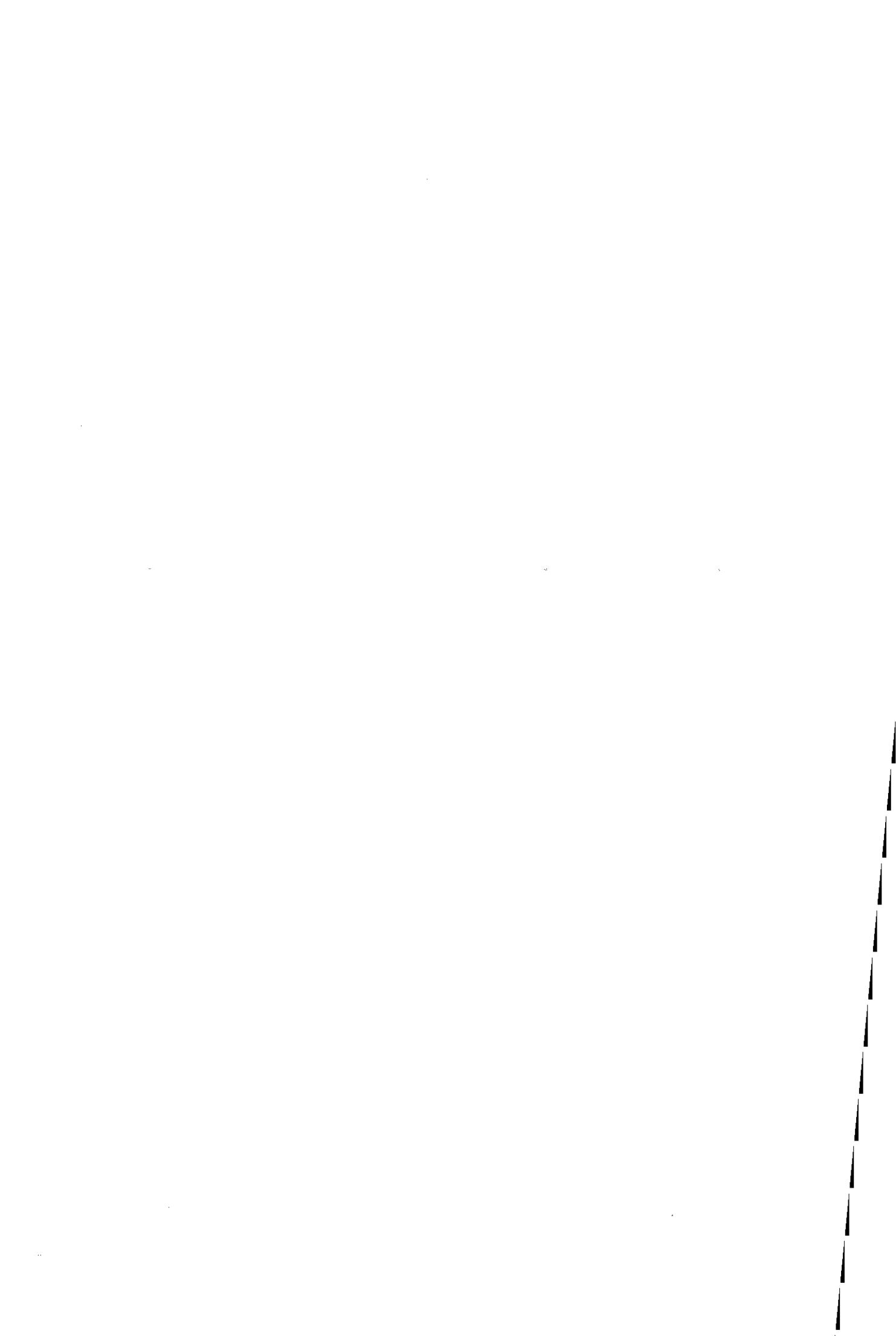
-Taxa de dissipação de Energia cinética turbulenta

$$\varepsilon = 0,09k_0^{3/2} / (0,03R) \quad (3.90)$$

2) Parede: Obtidas a partir de funções de parede. Exatamente na parede, energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação são nulas. Como o k-ε foi desenvolvido para a região totalmente turbulenta, assume-se que o primeiro ponto próximo a parede está neste núcleo turbulento e que a velocidade entre este primeiro ponto e a parede varia de acordo com a lei logarítmica de velocidades (MEIER et al, 1997). Para este primeiro ponto a energia cinética turbulenta é (CARVALHO, 1993):

$$k_{w-1} = U_A^2 / \sqrt{C_\mu} \quad \text{se } U_A > 30 \quad (3.91)$$

e sua taxa de dissipação:



$$\varepsilon_{w-1} = U_{\Lambda}^3 / (0,4L_w) \quad (3.92)$$

onde L_w é a distancia do ponto a parede e U_{Λ} , é a velocidade de atrito calculada por:

$$U^+ = a \ln Y^+ + b \quad (3.93)$$

$$Y^+ = U_{\Lambda} L_w / \nu_g^1 \quad (3.94)$$

$$U^+ = V_{g,z}|_{w-1} / U_{\Lambda} \quad (3.95)$$

3.14 -Resumo do Modelo Matemático para o caso bidimensional em coordenadas cilíndricas.

As equações de conservação, para o sistema bidimensional cilíndrico podem ser escritas de uma forma generalizada, como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \varepsilon_i \phi) + \nabla \cdot (\rho_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_{\phi} \nabla \phi) = S_{\phi} \quad (3.96)$$

ou, particularmente, para o sistema cilíndrico, como:

$$\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i \phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i v_{i,z} \phi)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho_i \varepsilon_i v_{i,r} \phi)}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_i \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon_i \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = S_{\phi} \quad (3.97)$$

onde ϕ é uma grandeza de transporte genérica, v_{ij} é o componente de velocidade da fase “i” na direção “j”, Γ_{ϕ} o coeficiente efetivo de difusão da grandeza ϕ na fase “i”, S_{ϕ} o termo fonte incluindo-se os termos de fluxos que não podem ser agrupados na forma dada pela Equação (3.97). r e z são as coordenadas radial e axial, respectivamente. ρ_i é a massa específica e, ε_i , a

fração volumétrica da fase “i”. A Tabela 3.1 lista os termos da Equação (3.97) para cada grandeza de transporte do modelo matemático.

Temos, portanto, para o modelo bidimensional um conjunto de 9 equações diferenciais não-lineares, o qual deve ser resolvido numericamente. As variáveis básicas a serem determinadas são: Os componentes de velocidades axial e radial para cada fase (v_{gz} , v_{gr} , v_{sz} e v_{sr}), a pressão (P) e concentração das fases (ϵ_s e ϵ_g). Para os componentes de velocidades, as equação de conservação da quantidade de movimento numa determinada direção para cada fase é utilizada para o cálculo daquele componente de velocidade, a concentração das fases é obtida da equação da continuidade para a fase dispersa (partículas) e a pressão é obtida através de um acoplamento entre a continuidade da fase continua (gás) e seu campo de velocidades, através do algoritmo SIMPLE. Qualquer outra variável introduzida no modelo é função das variáveis básicas. Os coeficientes de transporte da fase gás e particulada são obtidos a partir do modelo de turbulência k- ϵ e da teoria cinética dos materiais granulares, respectivamente.

3.15 - Adimensionalização do Modelo

Para solução numérica, a adimensionalização traz a vantagem de aproximar a ordem de grandeza das variáveis. MUNIZ (1995) avalia a qualidade das soluções obtidas com os modelos nas formas dimensional e adimensional para o caso do escoamento laminar na região entrada de um tubo, mostrando a melhor qualidade (ausência de oscilações) do modelo adimensionalizado. Nas equações que seguem L_{ref} o comprimento de referência, foi o raio do tubo e, v_{ref} a velocidade de referência foi a velocidade do gás na entrada do tubo.

As seguintes variáveis adimensionais foram introduzidas:

- Tempo adimensional:

$$t^* = tv_{ref} / L_{ref} \quad (3.98)$$

-distância adimensional:

$$\eta^* = \eta / L_{ref} \quad (3.99)$$

Tabela 3.1 - Coeficientes de difusão e termos fonte para as equações de conservação.

Equação	ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
Continuidade gás	1	0	0
Momentum axial fase gás	$v_{g,z}$	μ_g	$-\epsilon_g \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_g \mu_g \frac{\partial v_{g,z}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\epsilon_g \mu_g r \frac{\partial v_{g,r}}{\partial z} \right) + \epsilon_g \rho_g g_z + \beta(v_{s,z} - v_{g,z}) - \frac{2}{3} \rho_g \epsilon_g \frac{\partial k}{\partial z}$
Momentum radial fase gás	$v_{g,r}$	μ_g	$-\epsilon_g \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_g \mu_g \frac{\partial v_{g,z}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\epsilon_g \mu_g r \frac{\partial v_{g,r}}{\partial r} \right) - \frac{2v_{g,r} \mu_g \epsilon_g}{r^2} + \epsilon_g \rho_g g_r + \beta(v_{s,r} - v_{g,r}) - \frac{2}{3} \rho_g \epsilon_g \frac{\partial k}{\partial r}$
Energia Cinética turbulenta (EK)	k	$\frac{\mu_g}{\sigma_k}$	$\left(G_k - \rho_g \epsilon + \beta_{gs} \overline{v'_g v'_s} - 3k \right) \epsilon_g$
Taxa Dissipação energia EK	ϵ	$\frac{\mu_g}{\sigma_\epsilon}$	$\left(c_1 G_k - c_2 \rho_g \epsilon + \beta_{gs} \overline{v'_g v'_s} - 2k \right) \left(\frac{\epsilon}{k} \right) \epsilon_g$
Cont. partícula	1	0	0
Momentum axial fase particulada	$v_{s,z}$	$\frac{\mu_s}{\epsilon_s}$	$-\epsilon_s \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_s \frac{\partial v_{s,z}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu_s r \frac{\partial v_{s,r}}{\partial z} \right) - \frac{\partial P_s}{\partial z} + \xi_s \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial v_{s,r}}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_{s,r}}{\partial r} \right) + \epsilon_s \rho_s g_z + \beta(v_{g,z} - v_{s,z})$
Momentum radial fase particulada	$v_{s,r}$	$\frac{\mu_s}{\epsilon_s}$	$-\epsilon_s \frac{\partial P}{\partial r} - \frac{\partial P_s}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_s \frac{\partial v_{s,z}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu_s r \frac{\partial v_{s,r}}{\partial r} \right) - \frac{2v_{s,r} \mu_s}{r^2} + \xi_s \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial v_{s,z}}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_{s,r}}{\partial r} \right) + \epsilon_s \rho_s g_r + \beta(v_{g,r} - v_{s,r})$
Energia pseudo-térmica	T	$\frac{\Gamma_T}{\epsilon_s}$	$\left(G_T - \gamma_1 + \beta_{gs} \overline{v'_g v'_s} - 3T \right)$

$$G_k = \mu_g^t \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial v_{g,z}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{g,r}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{v_{g,r}}{r} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial v_{g,z}}{\partial r} + \frac{\partial v_{g,r}}{\partial z} \right)^2 \right\},$$

$$G_T = \frac{2}{3} \left\{ \mu_s \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial v_{s,z}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{s,r}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{v_{s,r}}{r} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial v_{s,z}}{\partial r} + \frac{\partial v_{s,r}}{\partial z} \right)^2 \right\} \right. \\ \left. + \left(\xi_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \left[\left(\frac{\partial v_{s,z}}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial v_{s,r}}{\partial r} \right) + \left(\frac{v_{s,r}}{r} \right) \right]^2 - P_s \left[\left(\frac{\partial v_{s,z}}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial v_{s,r}}{\partial r} \right) + \left(\frac{v_{s,r}}{r} \right) \right] \right\},$$

$$\gamma_1 = 3(1 - e^2) \varepsilon_s^2 \rho_s g_0 \left[\frac{4}{d_p} \sqrt{\frac{T}{\pi}} - \left(\frac{\partial v_{s,z}}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial r v_{s,r}}{\partial r} \right) \right]$$

$$\Gamma_k = \mu_g / \sigma_k, \Gamma_\varepsilon = \mu_g / \sigma_\varepsilon, \sigma_k = 1.00, \sigma_\varepsilon = 1.30, C_1 = 1.44, C_2 = 1.92, g_z = -9.8 \text{ m/s}, g_r = 0 \text{ e } \mu_g = \mu_g^l + \mu_g^t.$$

-velocidade adimensional:

$$v_{i,\eta}^* = v_{i,\eta} / v_{\text{ref}} \quad (3.100)$$

-energia cinética turbulenta:

$$k^* = k / v_{\text{ref}}^2 \quad (3.101)$$

-taxa de dissipação de energia cinética turbulenta:

$$\varepsilon^* = \varepsilon (L_{\text{ref}} / v_{\text{ref}}^3) \quad (3.102)$$

-temperatura granular:

$$T^* = T / v_{\text{ref}}^2 \quad (3.103)$$

Substituindo-se as variáveis dimensionais nas equações de conservação para cada variável, resulta o seguinte modelo adimensional:

3.15.1 - Forma adimensional das equações de conservação da fase gás

-continuidade:

$$\frac{\partial(\varepsilon_g)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot [\varepsilon_g \mathbf{v}_g^*] = 0 \quad (3.104)$$

onde,

$$\nabla^* = \frac{1}{L_{ref}} \nabla \quad (3.05)$$

-momentum:

$$\frac{\partial[\varepsilon_g \mathbf{v}_g^*]}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot [\varepsilon_g \mathbf{v}_g^* \mathbf{v}_g^*] = \varepsilon_g \nabla^* P_g^* + \nabla^* \cdot \varepsilon_g \sigma_g^* + \beta_{sg}^* [\mathbf{v}_s^* - \mathbf{v}_g^*] + \varepsilon_g \mathbf{g}^* \quad (3.106)$$

onde,

$$P_g^* = P_g L_{ref} / (\rho_g v_{ref}^2) \quad (3.107)$$

$$\sigma_g^* = \frac{2\mu_g}{L_{ref} v_{ref} \rho_g} \gamma_g^* \quad (3.108)$$

$$\gamma_g^* = \left\{ \frac{1}{2} \{ \nabla^* \mathbf{v}_g^* + \nabla^* \mathbf{v}_g^{*T} \} - \frac{1}{3} (\nabla^* \cdot \mathbf{v}_g^*) \mathbf{I} \right\} \quad (3.109)$$

$$Re_g = 2L_{ref} v_{ref} \rho_g / \mu_g^{ref} \quad (3.110)$$

$$\beta_{sg}^* = \beta_{sg} L_{ref} / (\rho_g v_{ref}) \quad (3.111)$$

$$\mathbf{g}^* = \mathbf{g} L_{ref} / v_{ref}^2 \quad (3.112)$$

-energia cinética turbulenta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\varepsilon_g k^*)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot [\varepsilon_g \mathbf{v}_g^* k^*] &= \nabla^* \cdot \left[\frac{\varepsilon_g \Gamma_k}{L_{rel} v_{ref} \rho_g} \nabla^* k^* \right] - \\ &- (\tau_g^* : \nabla^* \mathbf{v}_g^* - \varepsilon^k) \varepsilon_g + \beta_{gs}^* (\overline{v_g^* v_s^*} - 2k^*) \end{aligned} \quad (3.113)$$

onde,

$$\overline{v_g^* v_s^*} = (k^* + \frac{3}{2} T^*) \quad (3.114)$$

-taxa de dissipação de energia cinética

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\varepsilon_g \varepsilon^*)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot [\varepsilon_g \mathbf{v}_g^* \varepsilon^*] &= \nabla^* \cdot [\varepsilon_g \Gamma_k \nabla^* \varepsilon^*] \\ &- (C_1 \tau_g^* : \nabla^* \mathbf{v}_g^* - C_2 \varepsilon^* + \beta_{sg}^* (\overline{v_s^* v_g^*} - 2k^*)) \frac{k^*}{\varepsilon^*} \varepsilon_g \end{aligned} \quad (3.115)$$

3.15.2 - Forma adimensional das equações de conservação da fase particulada

-continuidade:

$$\frac{\partial(\varepsilon_s)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot [\varepsilon_s \mathbf{v}_s^*] = 0 \quad (3.116)$$

-momentum:

$$\frac{\partial[\varepsilon_s \mathbf{v}_s^*]}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot [\varepsilon_s \mathbf{v}_s^* \mathbf{v}_s^*] = \frac{\rho_g}{\rho_s} \varepsilon_s \nabla^* P_g^* + \nabla^* \cdot \boldsymbol{\tau}_s^* + \frac{\rho_g}{\rho_s} \beta_{sg}^* [\mathbf{v}_g^* - \mathbf{v}_s^*] + \varepsilon_s \mathbf{g}^* \quad (3.117)$$

onde,

$$\boldsymbol{\tau}_s^* = \left[-P_s^* + \frac{\xi_s}{L_{ref} v_{ref} \rho_s} \nabla^* \cdot \mathbf{v}_s^* \right] \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_s^* \quad (3.118)$$

onde,

$$P_s^* = \varepsilon_s [1 + 2(1 + e) \varepsilon_s g_0] T^* \quad (3.119)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_s^* = \frac{2\mu_s}{L_{ref} v_{ref} \rho_s} \boldsymbol{\gamma}_s^* \quad (3.120)$$

$$\boldsymbol{\gamma}_s^* = \frac{1}{2} \{ \nabla^* \mathbf{v}_s^* + \nabla^* \mathbf{v}_s^{*T} \} - \frac{1}{3} (\nabla^* \cdot \mathbf{v}_s^*) \mathbf{I} \quad (3.121)$$

- temperatura granular

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial \varepsilon_s T^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\varepsilon_s \mathbf{v}_s^* T^*) \right] = \nabla^* \cdot \left(\frac{\Gamma_T}{L_{ref} v_{ref} \rho_s} \nabla^* T^* \right) - \boldsymbol{\sigma}_s^* : \nabla^* \mathbf{v}_s^* - \gamma_1^* + \gamma_2^* \quad (3.122)$$

onde,

$$\gamma_1^* = 3(1 - e^2) \varepsilon_s^2 g_0 \left[\frac{4L_{ref}}{d_p} \sqrt{\frac{T^*}{\pi}} - \nabla^* \cdot \mathbf{v}_s^* \right] \quad (3.123)$$

$$\gamma_2^* = \frac{\rho_g}{\rho_s} \beta_{sg}^* (\overline{v_g^* v_s^*} - 3T^*) \quad (3.124)$$

3.16 - Modelo adimensional generalizado

Pode-se escrever o modelo adimensional numa forma generalizada como:

$$\frac{\partial}{\partial t^*} (\varepsilon_i \phi^*) + \nabla^* \cdot (\varepsilon_i \mathbf{v}_i^* \phi^* - \varepsilon_i \frac{\Gamma_\phi}{L_{\text{ref}} v_{\text{ref}} \rho_i} \nabla^* \phi^*) = S_\phi^* \quad (3.125)$$

que é o modelo geral que será resolvido numericamente.

4 - MÉTODO NUMÉRICO

Temos um sistema de 9 equações diferenciais, parciais, não lineares, cuja solução foi obtida numericamente. As equações foram discretizadas usando-se o método dos volumes finitos (PATANKAR, 1980; MALISKA, 1995). No método dos volumes finitos o domínio de cálculo é dividido em volumes finitos não sobrepostos (Figura (4.1)), sobre os quais a equação de conservação é integrada. A Figura (4.2) mostra o volume de controle para o sistema cilíndrico usado neste trabalho. No método dos volumes finitos existem duas possibilidades de arranjo dos pontos: O deslocado no qual os pontos de velocidades são deslocados em relação aos pontos de pressão (e outras variáveis, chamado de pontos principais) estando localizados nas faces dos volumes de controle principais e, o arranjo co-localizado, no qual todas as variáveis são localizadas num mesmo ponto. Os dois arranjos são ilustrados na Figura (4.3). Tradicionalmente, o método dos volumes finitos têm sido utilizado com o arranjo deslocado, pois este tipo de arranjo evita a possibilidade da obtenção de campos oscilatórios (irreais) de pressão mesmo que satisfazendo a continuidade. A possibilidade da ocorrência destes campos oscilatórios com o uso de malhas co-localizadas, quando a pressão for interpolada linearmente entre os pontos principais, teve grande divulgação com o trabalho de PATANKAR (1980). Entretanto, o arranjo deslocado exige maiores informações geométricas e as grandezas de transporte são conservadas em volumes diferentes. Além disto, na solução de problemas tridimensionais em geometrias complexas, o uso de malha deslocada é impraticável (MALISKA, 1995)). Então, já prevendo uma possível adaptação do programa a casos tridimensionais, e devido a maior facilidade de implementação para o caso bidimensional que estamos resolvendo, é que optou-se pelo arranjo co-localizado.

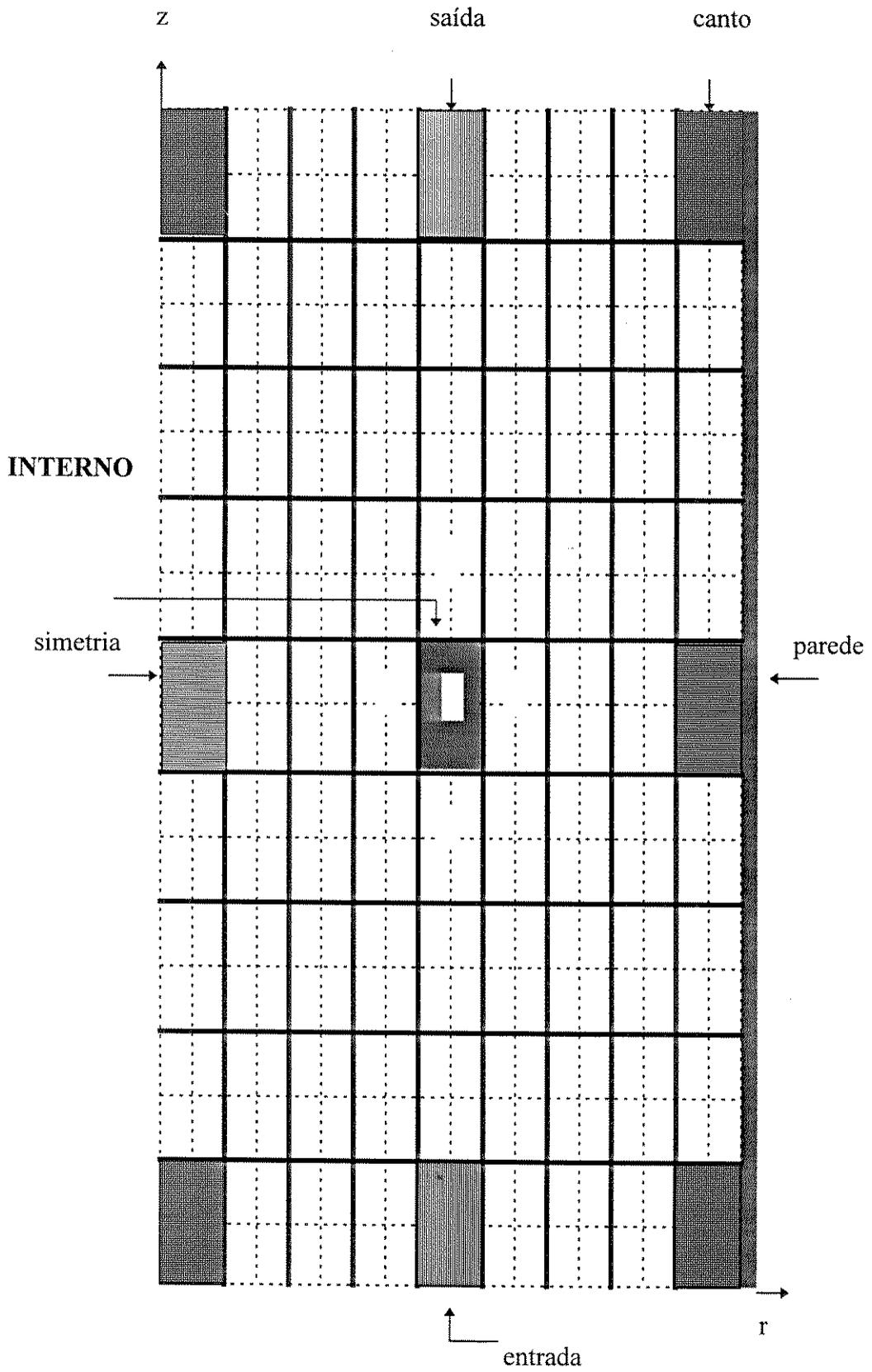


Figura 4.1 - Malha Numérica Bidimensional

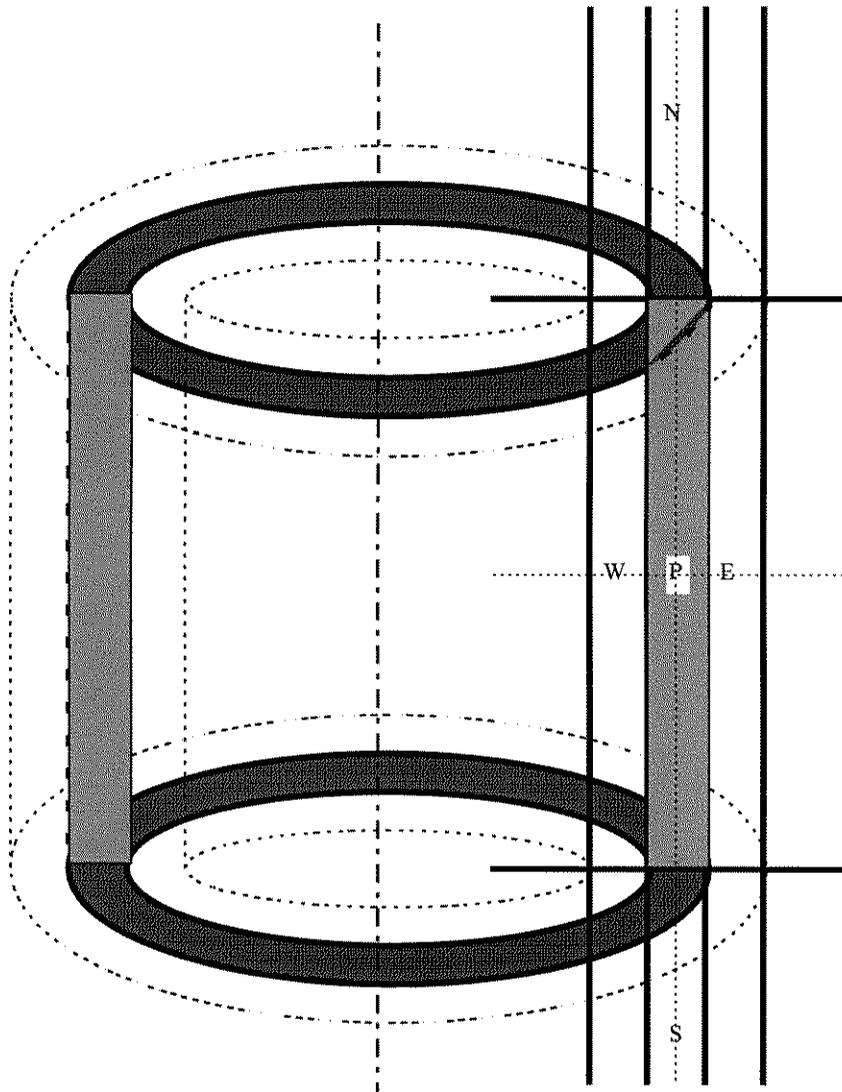
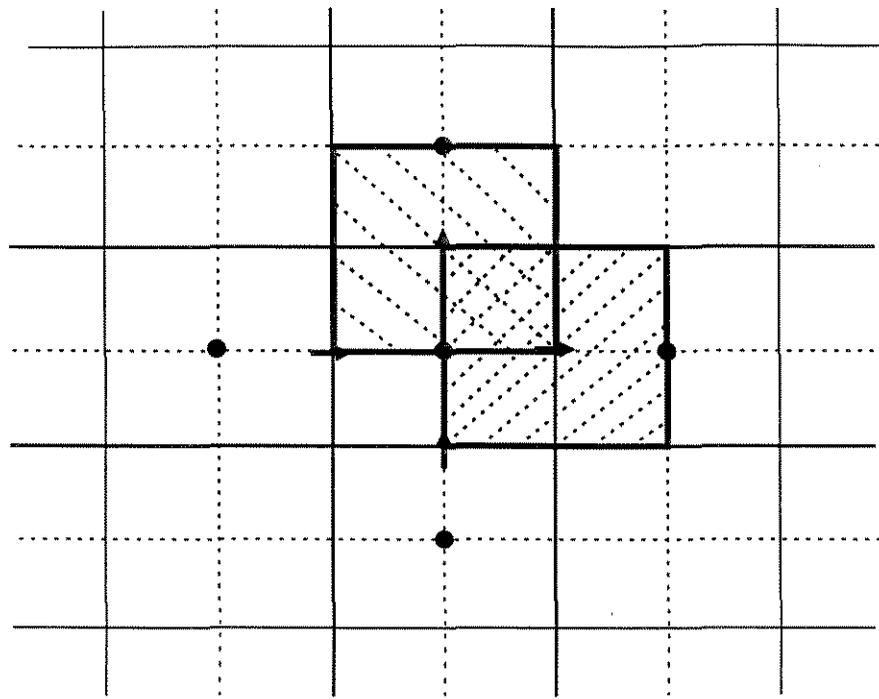
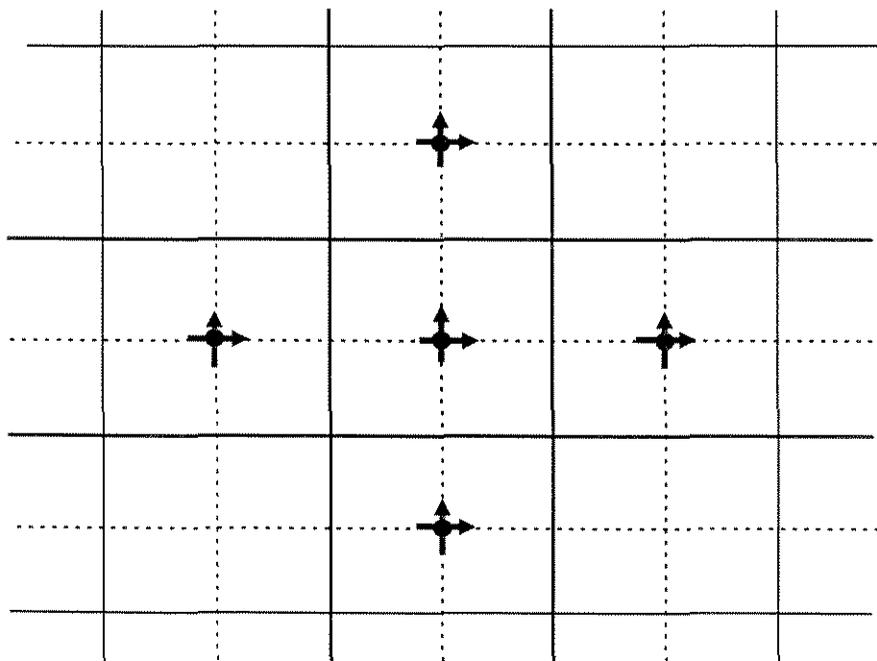


Figura 4.2 - Volume de controle bidimensional cilíndrico



a) Deslocado

● Pressão e outras variáveis
 → Velocidade na direção r
 ↑ Velocidade na direção z



b) Co-localizado

Figura 4.3 - Possibilidades de arranjos no método dos volumes finitos

Em função dos problemas citados anteriormente, vários pesquisadores têm dedicado esforços no sentido de aplicarem o método dos volumes finitos com malhas co-localizadas, minimizando o problema das oscilações numéricas e da obtenção de campos irrealis de pressão. Várias alternativas surgiram destes esforços, entre as quais, DATE (1996), THIART (1990), ABDALLAH (1987), REGGIO and CAMARERO (1986), MAJUNDAR (1988), DATE (1993), PERIC et al (1988), PARAMESWARAN (1992), MILLER and SCHMIDT (1988).

Basicamente estas alternativas podem ser classificadas em dois tipos [MILLER and SCHMIDT, 1988]: a) as que interpolam a equação do momentum e b) as que interpolam o gradiente de pressão. Além disto, estas foram testadas apenas para escoamentos monofásicos e, como será visto no capítulo de resultados, ainda apresentam algumas oscilações quando aplicados a escoamento bifásico. Neste trabalho utiliza-se uma alternativa que combina os métodos de interpolação do momentum e de interpolação do gradiente de pressão e, além disto, algumas estratégias são apresentadas para obtenção dos fluxos nas faces para escoamento gás-sólido.

A discretização das equações será apresentado para as mesmas na forma dimensional, embora elas sejam resolvidas em forma adimensional. A preferência por este desenvolvimento é que, primeiro, tradicionalmente a discretização é apresentada desta forma em livros textos sendo a forma mais familiar e segundo, as equações dimensionais finais na forma discretizada podem ser facilmente transformadas na forma adimensional discretizada, simplesmente pela introdução das variáveis adimensionais definidas no capítulo anterior, diretamente na equação discretizada final.

4.1 - Discretização usando o método dos volumes finitos

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \varepsilon_i \phi) + \nabla \cdot [\rho_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi] = S_\phi \quad (4.1)$$

onde o termo S_ϕ contém o termo fonte de ϕ no interior do volume de controle e todos os outros fluxos de ϕ através das faces do volume de controle que não foram ordenados no segundo termo do lado esquerdo da Equação (4.1). Integrando-se esta equação sobre um volume de controle \mathcal{V} qualquer,

$$\iiint_{\mathcal{V}} \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i \phi)}{\partial t} d\mathcal{V} + \iiint_{\mathcal{V}} \nabla \cdot [\varepsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi] d\mathcal{V} = \iiint_{\mathcal{V}} S_\phi d\mathcal{V} \quad (4.2)$$

Usando o teorema de Leibnitz (BIRD, 1978) para diferenciação de uma integral para permutar a derivada com a integral do primeiro termo do lado esquerdo,

$$\iiint_{\mathcal{V}} \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i \phi)}{\partial t} d\mathcal{V} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\iiint_{\mathcal{V}} \varepsilon_i \rho_i \phi d\mathcal{V} \right) - \iint_S \rho_i \varepsilon_i \phi (\mathbf{v}_s \cdot \mathbf{n}) dS \quad (4.3)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal unitário e externo a superfície de contorno do volume de controle e \mathbf{v}_s é a velocidade de deslocamento da superfície.

Como o volume de controle não muda com o tempo ($\mathbf{v}_s \equiv 0$), tem-se:

$$\iiint_{\mathcal{V}} \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i \phi)}{\partial t} d\mathcal{V} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\iiint_{\mathcal{V}} \varepsilon_i \rho_i \phi d\mathcal{V} \right) \quad (4.4)$$

Usando-se, agora, o teorema da divergência de Gauss para transformar a segunda integral de volume do lado esquerdo da Equação (4.2) numa integral de superfície,

$$\iiint_{\mathcal{V}} \nabla \cdot [\varepsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi] d\mathcal{V} = \iint_S [\varepsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi] \cdot \mathbf{n} dS \quad (4.5)$$

e substituindo-se as Equações (4.4) e (4.5) na Equação (4.2), tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\iiint_{\mathcal{V}} (\varepsilon_i \rho_i \phi) d\mathcal{V} \right] + \iint_{\mathcal{A}} [\varepsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi] \cdot \mathbf{n} dA = \iiint_{\mathcal{V}} S_\phi d\mathcal{V} \quad (4.6)$$

Estas integrais para o volume de controle finito $\Delta\mathcal{V}$ indicado na Figura (4.2), são aproximados da seguinte forma:

a) - termo transiente

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\iiint_{\mathcal{V}} \rho_i \varepsilon_i \phi d\mathcal{V} \right) \cong \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i \phi)}{\partial t} \mathcal{V}_p \cong \frac{(\rho_i \varepsilon_i \phi) - (\rho_i \varepsilon_i \phi)^0}{\Delta t} \mathcal{V}_p \quad (4.7)$$

b) - termo fonte

$$\iiint_{\mathcal{V}} S_\phi d\mathcal{V} \cong S_\phi \mathcal{V}_p \quad (4.8)$$

c) - termo de fluxo nas faces

$$\begin{aligned} \iint_{\mathcal{A}} [\rho_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi] \cdot \mathbf{n} dA &= A_w \left(\rho_i \varepsilon_i v_{i,r} \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_w \\ &\quad - A_c \left(\rho_i \varepsilon_i v_{i,r} \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_c \\ &\quad + A_s \left(\rho_i \varepsilon_i v_{i,z} \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_s \\ &\quad - A_n \left(\rho_i \varepsilon_i v_{i,z} \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_n \end{aligned} \quad (4.9)$$

ou numa notação mais compacta,

$$\iint_{\mathcal{A}} [\rho_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi] \cdot \mathbf{n} dA = \sum_{j=1}^4 [\rho_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi]_j \cdot \mathbf{n} A_j \quad (4.10)$$

onde os A_j 's são as áreas indicadas na Figura (4.2). Substituindo-se as aproximações dadas pelas Equações. (4.7) a (4.10) na Equação. (4.6), tem-se a forma discreta das equações de conservação, para uma variável genérica ϕ em um ponto P da malha:

$$\frac{(\varepsilon_i \rho_i \phi)_P - (\varepsilon_i \rho_i \phi)_P^0}{\Delta t} \vartheta_P + \sum_{j=1}^4 [\rho_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi]_j \cdot \mathbf{n} A_j = S_\phi \vartheta_P \quad (4.11)$$

4.2 - Linearização da equação e geração do sistema linear

No sistema de Equação. (4.11), não linearidades estão presentes explicitamente, como nos termos $\varepsilon_i \mathbf{v}_i \phi$ e S_ϕ , por exemplo e, implicitamente em praticamente todos termos, pois por exemplo, ε_i , \mathbf{v}_i e Γ_ϕ e S_ϕ , podem ser, e geralmente são, funções da variável ϕ . A solução direta do sistema exige grande capacidade de armazenamento, o que, dependendo do tamanho da malha utilizada, inviabiliza a solução direta. Tradicionalmente, este sistema é resolvido iterativamente, onde em cada iteração resolve-se sistemas lineares. Por isto, faz-se a linearização do modelo. A linearização, consiste em simplesmente assumir constante e igual ao valor da iteração anterior, o valor das variáveis, exceto logicamente, a que está sendo resolvida. Assim temos, para cada termo na iteração atual:

- Termo transiente:

$$\frac{(\varepsilon_i \rho_i \phi)_P - (\varepsilon_i \rho_i \phi)_P^0}{\Delta t} \vartheta_P = \frac{\left((\varepsilon_i \rho_i)^* \phi \right)_P - (\varepsilon_i \rho_i \phi)_P^0}{\Delta t} \vartheta_P \quad (4.12)$$

- Fluxo nas faces:

$$\sum_{j=1}^4 [\rho_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_\phi \nabla \phi]_j \cdot \mathbf{n} A_j = \sum_{j=1}^4 \left[(\rho_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i)^* \phi - (\varepsilon_i \Gamma_\phi)^* \nabla \phi \right]_j \cdot \mathbf{n} A_j \quad (4.13)$$

- Termo fonte: linearizado como da seguinte forma:

$$S_\phi = S_c(\phi^*) + S_p(\phi^*)\phi \quad (4.14)$$

onde S_c e S_p são, respectivamente, os coeficientes linear e angular da reta.

Como regra básica, $S_p < 0$, (PATANKAR, 1980), para não termos coeficientes negativos, pois passará a compor o coeficiente do ponto principal e deverá somar positivamente.

Substituindo-se as Equações. (4.12) a (4.14) na Equação. (4.11), tem-se:

$$\frac{[(\varepsilon_i \rho_i)^* \phi]_p - (\varepsilon_i \rho_i \phi)_p^0}{\Delta t} \vartheta_p + \sum_{j=1}^4 \left[(\rho_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i)^* \phi - (\varepsilon_i \Gamma_\phi)^* \nabla \phi \right]_j \cdot \mathbf{n} A_j = (S_c^* + S_p^* \phi) \vartheta_p \quad (4.15)$$

Por conveniência de notação, a partir deste ponto omite-se o asteriscos indicando que a variável refere-se ao valor da iteração anterior, exceto para a variável ϕ que está sendo resolvida, todas as outras são conhecidas da iteração anterior.

Introduzindo a variável $\mathbf{N}(\phi)$, representando o fluxo total de ϕ nas faces do volume de controle,

$$\mathbf{N}(\phi) = [\varepsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i \phi - \varepsilon_i \Gamma_i \nabla \phi] \quad (4.16)$$

tem-se:

$$\vartheta_p \frac{(\varepsilon_i \rho_i \phi)_p - (\varepsilon_i \rho_i \phi)_p^0}{\Delta t} + \sum_{k=1}^4 (\mathbf{N}(\phi) \cdot \mathbf{n}) A_k = \vartheta_p (S_c + S_p \phi) \quad (4.17)$$

onde k indica as faces do volume de controle (varia de 1 a 4 para o caso bidimensional-k= e, w, n, s)

O fluxo total $N(\phi)$ na face “k” depende do valor de ϕ e de sua derivada espacial nesta face, os quais são obtidos por interpolação entre os pontos do domínio no qual está situado a face “k”. Por exemplo, para a face “e”, a função $N(\phi) \big|_e$ é:

$$N(\phi_e) = A_e \left(\varepsilon_i \rho_i v_{i,r} \phi - \varepsilon_i \Gamma_i \frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_e \quad (4.18)$$

Por exemplo, para uma interpolação linear (esquema de diferença central), tem-se:

$$N(\phi_e) = A_e \left(\frac{\varepsilon_i \rho_i v_{i,r}}{2} - \frac{\varepsilon_i \Gamma_i}{\Delta r} \right) \phi_P + A_e \left(\frac{\varepsilon_i \rho_i v_{i,r}}{2} - \frac{\varepsilon_i \Gamma_i}{\Delta r} \right) \phi_E \quad (4.19)$$

e assim tem-se o valor do fluxo na face em função dos valores de ϕ nos pontos principais. A Figura (4.4) mostra as dimensões finitas que aparecem nas equações discretas. Obtém-se expressões análogas para os fluxos nas outras faces. Esquemas como o de diferença central mostrado linhas acima, pode trazer problemas no avanço da solução iterativa, pois pode gerar coeficientes negativos, infringindo uma das regras básicas para solução iterativa do sistema (PATANKAR, 1980).

Porem, vários esquemas de interpolação foram desenvolvidos, os quais evitam este problema (para detalhes do desenvolvimento ver PATANKAR (1980) e MALISKA (1995)).

Para obtenção das equações de conservação ϕ_p , primeiro faz-se uma modificação na Equação. (4.17) pela introdução da equação de conservação da massa. Então com $\phi=1$, $\Gamma_\phi=0$ e $S_\phi=0$, tem-se a equação da continuidade:

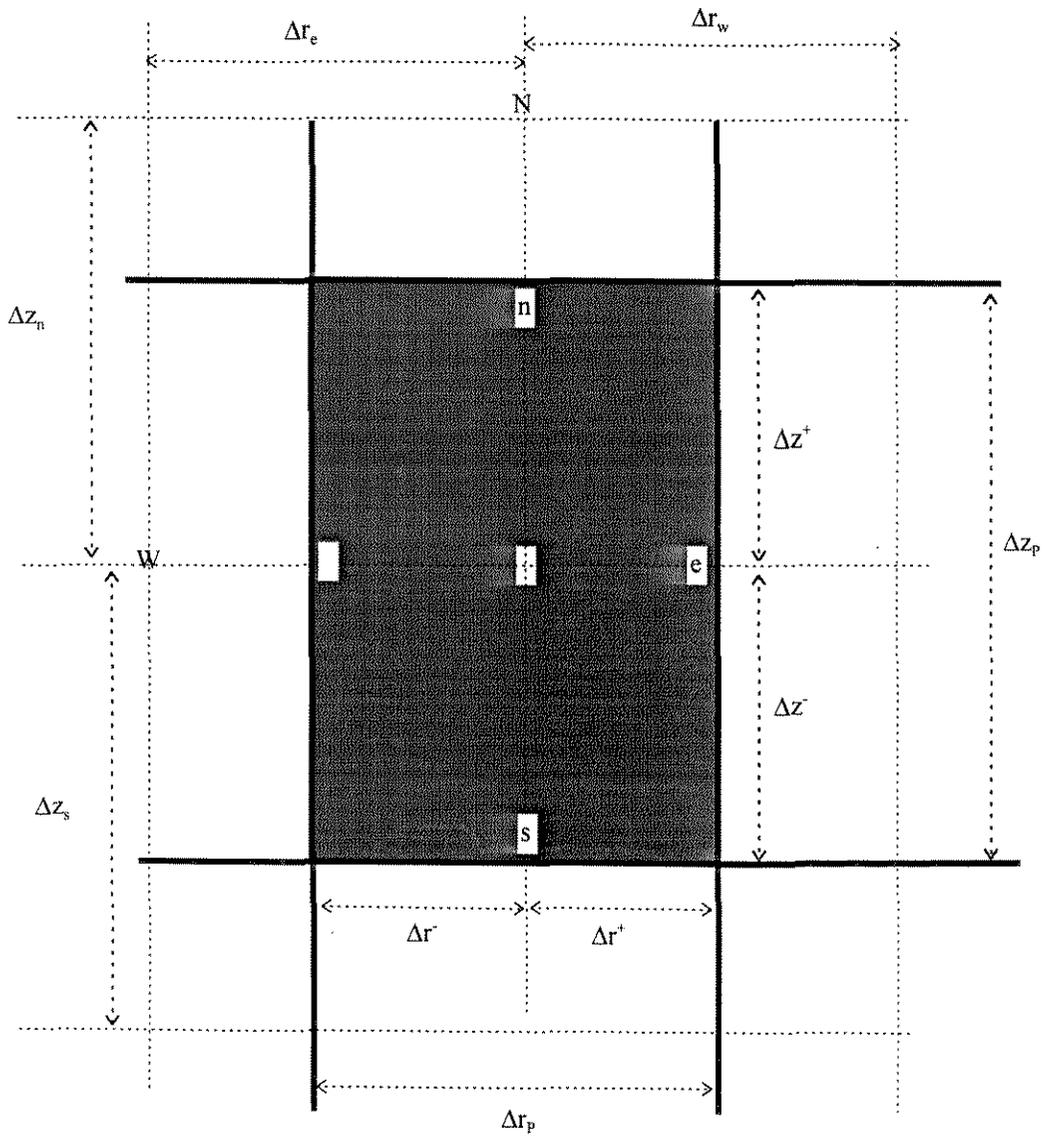


Figura 4.4 - Dimensões do Volume de Controle

$$\frac{(\rho_i \varepsilon_i) - (\rho_i \varepsilon_i)^0}{\Delta t} \vartheta_p + A_w \rho_i \varepsilon_i v_{i,r} \Big|_w - A_e \rho_i \varepsilon_i v_{i,r} \Big|_e + A_s \rho_i \varepsilon_i v_{i,z} \Big|_s - A_n \rho_i \varepsilon_i v_{i,z} \Big|_n = 0 \quad (4.20)$$

da qual, obtém-se o valor do termo $\frac{(\rho_i \varepsilon_i)}{\Delta t} \vartheta_p$:

$$\frac{(\rho_i \varepsilon_i)}{\Delta t} \vartheta_p = \frac{(\rho_i \varepsilon_i)^0}{\Delta t} \vartheta_p - (A_w \rho_i \varepsilon_i v_{i,r} \Big|_w - A_e \rho_i \varepsilon_i v_{i,r} \Big|_e + A_s \rho_i \varepsilon_i v_{i,z} \Big|_s - A_n \rho_i \varepsilon_i v_{i,z} \Big|_n) \quad (4.21)$$

então substituindo a Equação. (4.21) na (4.17) e rearranjando, tem-se:

$$\vartheta_p \frac{(\varepsilon_i \rho_i)^0 (\phi_p - \phi_p^0)}{\Delta t} + \sum_{k=1}^4 [N(\phi) - \varepsilon_i \rho_i v_i \phi_p] \cdot \mathbf{n} A_k = \vartheta_p (S_c + S_p \phi) \quad (4.22)$$

PATANKAR (1980) apresenta uma formulação generalizada para a representação do termo entre colchetes da Equação. (4.22), de tal forma que a conservação da massa é satisfeita, quando uma variável ϕ qualquer está sendo resolvida:

$$N(\phi_e) - F_e \phi_p = a_e (\phi_p - \phi_e) \quad (4.23.a)$$

$$N(\phi_w) - F_w \phi_p = a_w (\phi_w - \phi_p) \quad (4.23.b)$$

$$N(\phi_n) - F_n \phi_p = a_n (\phi_p - \phi_n) \quad (4.23.c)$$

$$N(\phi_s) - F_s \phi_p = a_s (\phi_s - \phi_p) \quad (4.23.d)$$

onde,

$$a_E = D_e A(Pe_e) + \left\| -F_e, 0 \right\| \quad (4.24.a)$$

$$a_W = D_w A(Pe_w) + \left\| F_w, 0 \right\| \quad (4.24.b)$$

$$a_N = D_n A(Pe_n) + \left\| -F_n, 0 \right\| \quad (4.24.c)$$

$$a_S = D_s A(Pe_s) + \left\| F_s, 0 \right\| \quad (4.24.d)$$

$$b = S_C \vartheta_P + a_P^0 \phi_P^0 \quad (4.24.e)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_S + a_N + a_P^0 - S_P \vartheta_P \quad (4.24.f)$$

sendo,

$$F_k = (\rho_i \varepsilon_i v_i A_f)_k \quad (4.25)$$

o fluxo de massa na face “k”, onde v_i é o componente de velocidade normal a face “k”.

$$D_k = (A_f \varepsilon_i \Gamma_i / \Delta \eta)_k, \quad (4.26)$$

$$Pe_k = F_k / D_k, \quad (4.27)$$

$$a_P^0 = \vartheta_P \frac{(\varepsilon_i \rho_i)^0}{\Delta t} \quad (4.28)$$

e a função $A(Pe)$, que depende do esquema de interpolação é dada na Tabela 4.1.

Logo a Equação. (4.22) pode ser escrita de forma generalizada como:

$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b. \quad (4.29)$$

onde o sub-índice "nb" indica os pontos vizinhos do ponto P.

Tabela 4.1 - Função A(Pe) (Fonte: PATANKAR, 1980)

Esquema de interpolação	Função A(Pe)
Diferença central	$1 - 0.5 Pe $
“Upwind”	1
Híbrido	$[[0, (1 - 0.5 Pe)]]$
Lei de Potência	$[[0, (1 - 0.1 Pe)^5]]$
Exponencial	$ Pe / (\exp Pe - 1)$

4.3 - Acoplamento pressão - velocidade

A discretização apresentada até então serve para todas variáveis, exceto a pressão do gás a qual é obtida através de um acoplamento do campo de velocidades desta fase com a equação da continuidade para a fase gás, num procedimento análogo aquele utilizado para os sistemas monofásicos (PATANKAR(1980), MALISKA(1995)). Neste trabalho, o arranjo co-localizado está sendo utilizado, ou seja, os componentes de velocidades e a pressão (como as outras variáveis) são calculadas num mesmo ponto da malha. Como dito no início do capítulo, convencionalmente o arranjo deslocado tem sido utilizado na solução de problemas de fluidodinâmica, por este evitar o problema da obtenção de campos irrealis de pressão (oscilações do tipo “zig-zag” ou “cheker-boarder”) satisfazendo a continuidade. Mas, as vantagens anteriormente assinaladas para o arranjo co-localizado levou vários pesquisadores a

desenvolverem métodos alternativos de acoplamento pressão velocidade eliminando o problema da obtenção de tais campos irrealis (PERIC et al, 1988, DATE, 1993; DATE, 1996), sendo os mais conhecidos os métodos de “interpolação do momentum” (PERIC, 1988) e o de interpolação do gradiente de pressão (DATE, 1996). MEIER *et al.* (1997) mostraram que estes algoritmos, com as mesmas etapas do acoplamento para o arranjo deslocado, ainda apresentam o problema de oscilações numéricas em situações onde altos gradientes estão presentes, de modo que o problema da oscilação numérica devido ao arranjo co-localizado não é um problema totalmente solucionado. Identificou-se neste trabalho, uma fonte de oscilação q será discutida no capítulo de resultados.

4.3.1- O algoritmo SIMPLE para o arranjo Co-localizado

Neste trabalho, o acoplamento SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) - ou uma derivação deste, o SIMPLE-Consistent - foi utilizado no acoplamento pressão velocidade. Detalhes do método para o arranjo deslocado é apresentado por PATANKAR (1980) e MALISKA (1995). Aqui, apresentamos o desenvolvimento do acoplamento para o caso co-localizado. Os passos são os mesmos do deslocado, porem as equações mudam devido a necessidade de interpolação da velocidade para obtenção das velocidades nas faces. Como esta interpolação não é única, adotamos o tipo sugerido por PERIC et al (1988).

A equação da continuidade em forma discretizada é:

$$\frac{(\rho_g \epsilon_g) - (\rho_g \epsilon_g)^0}{\Delta t} \Delta \vartheta + A_w \rho_g \epsilon_g v_{g,r} \Big|_w - A_c \rho_g \epsilon_g v_{g,r} \Big|_c + A_s \rho_g \epsilon_g v_{g,z} \Big|_s - A_n \rho_g \epsilon_g v_{g,z} \Big|_n = 0 \quad (4.30)$$

No processo iterativo as velocidades conhecidas nas faces são as da iteração anterior (v_g^*), os quais podem não satisfazer a continuidade. Estas velocidades são então corrigidas por uma

correção v_g' tal que a continuidade seja satisfeita. As correções de velocidades v_g' são obtidas a partir das correções de pressão, as quais são obtidas pela substituição das velocidades obtidas da equação do momentum na equação da continuidade. A pressão é corrigida como:

$$P = P^* + P' \quad (4.31)$$

onde P' , a correção de pressão é obtida através do acoplamento entre o campo de velocidades e a continuidade do gás. As velocidades nas faces são corrigidas também como:

$$v_{g,\eta} = v_{g,\eta}^* + v'_{g,\eta} \quad (4.32)$$

No arranjo co-localizado, as velocidades nas faces são obtidas interpolando-se as equações do momento entre os pontos principais da malha e substituindo-se na equação da continuidade (Equação (4.30)). As expressões para as velocidades nos pontos principais da malha são escritas como:

$$a_P v_P = \sum a_{nb} v_{nb} + b^- + L \left\{ \frac{\partial P}{\partial \eta} \right\} \quad (4.33)$$

para o ponto "P", tem-se

$$a_P v_P|_P = \sum a_{nb} v_{nb}|_P + b^-|_P + L \left\{ \frac{\partial P}{\partial \eta} \right\}_P \quad (4.34a)$$

e para o ponto "E"

$$a_P v_P|_E = \sum a_{nb} v_{nb}|_E + b^-|_E + L \left\{ \frac{\partial P}{\partial \eta} \right\}_E \quad (4.34b)$$

onde b^- representa o termo fonte da equação geral menos o termo de pressão. $L\{\partial P/\partial \eta\}_P$ representa o termo de pressão no ponto “P” o qual pode ser interpolado de diferentes maneiras. A expressão para a velocidade nas faces do volume de controle é independente da forma como o termo de pressão nos pontos principais é interpolado. A interpolação da velocidade propriamente dita é uma opção, mas que, conforme observado por alguns autores (PERIC et al (1988); MALISKA (1995)) não é um procedimento adequado, pois o acoplamento restabelecido é deficiente no sentido de tempo e qualidade da solução. O procedimento mais adequado é escrever-se uma pseudo-equação para a velocidade na face “e” a partir das equações nos pontos “P” e “E”, entre os quais está situado o ponto. Por exemplo, para a face “e” entre os pontos P e E, temos:

$$a_P^{v_{g,r}} v_{g,r}|_e = \sum a_{nb} v_{nb}|_e + b^-|_e + L\left\{\frac{\partial P}{\partial r}\right\}_e \quad (4.35)$$

onde todos os termos são obtidos por interpolação destes dos pontos principais:

$$a_P^{v_{g,r}} v_{g,r}|_e = \frac{a_P^{v_{g,r}} v_{g,r}|_P + a_P^{v_{g,r}} v_{g,r}|_E}{2} \approx \left(\frac{a_P^{v_{g,r}}|_P + a_P^{v_{g,r}}|_E}{2}\right) v_{g,r}|_e \quad (4.36)$$

$$\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^-\right]_e = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^-\right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^-\right]_E}{2} \quad (4.37)$$

A interpolação linear do gradiente de pressão, resultaria:

$$L\left\{\frac{\partial P}{\partial r}\right\}_e = \frac{L\left\{\frac{\partial P}{\partial r}\right\}_P + L\left\{\frac{\partial P}{\partial r}\right\}_E}{2} \quad (4.38)$$

mas, o termo de pressão é substituído pelo termo calculado diretamente da diferença entre estes dois pontos, ou seja:

$$L\left\{\frac{\partial P}{\partial r}\right\}_e \approx \frac{(P_E - P_P)}{\Delta r_e} \quad (4.39)$$

portanto,

$$a_{P,e}^{v_{g,r}} v_{g,r}|_e = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^-\right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^-\right]_E}{2} + \varepsilon_e \vartheta_e \frac{(P_P - P_E)}{\Delta r_e} \quad (4.40a)$$

onde, neste trabalho, como sugerido por DATE (1996), o $a_{p,e}$ também foi obtido fazendo-se uma interpolação linear entre os a_p 's dos pontos principais. Para a face “e”, por exemplo, tem-se:

$$a_{p,e}^{v_{g,r}} = (a_{P,P}^{v_{g,r}} + a_{P,E}^{v_{g,r}}) / 2 \quad (4.41a)$$

então a velocidade na face “e”, é dada por:

$$v_{g,r}|_e = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^-\right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^-\right]_E}{2a_{P,e}^{v_{g,r}}} + \frac{\varepsilon_e \vartheta_e (P_P - P_E)}{a_{P,e}^{v_{g,r}} \Delta r_e} \quad (4.42a)$$

Substituindo-se as equações de correção (4.31) e (4.32) em (4.40), temos a pseudo-equação de velocidade, para a face “e”:

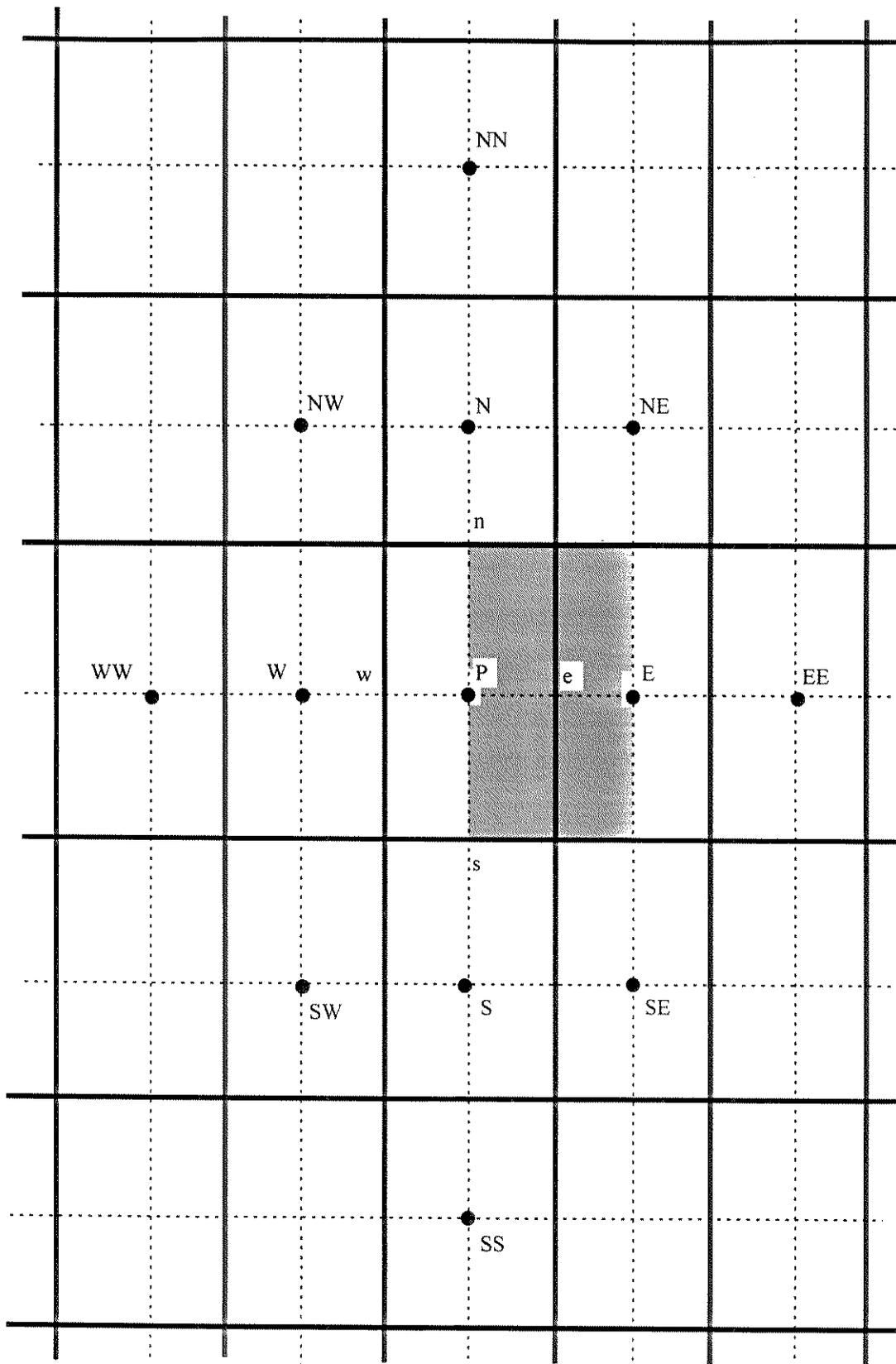


Figura 4.5 - Volume de controle para a pseudo equação da face “e”.

$$a_{P,e}^{v_{g,r}} \Big|_e = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r}^* + b^- \right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r}^* + b^- \right]_E}{2} + \varepsilon_e \vartheta_e \frac{(P_P^* - P_E^*)}{\Delta r} + \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v'_{g,r} \right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v'_{g,r} \right]_E}{2} + \varepsilon_e \vartheta_e \frac{(P_P' - P_E')}{\Delta r} \quad (4.43)$$

A soma dos dois primeiros termos do lado direito da Equação (4.43) é exatamente a pseudo-equação de velocidade na iteração anterior, enquanto a soma dos dois últimos é a equação para a correção de velocidade:

$$a_{P,e}^{v_{g,r}} \Big|_e = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v'_{g,r} \right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v'_{g,r} \right]_E}{2} + \varepsilon_e \vartheta_e \frac{(P_P' - P_E')}{\Delta r} \quad (4.44)$$

No algoritmo SIMPLE, os termos relacionados as correções de velocidades dos pontos vizinhos na equação da correção de velocidade (3º termo do lado direito da Equação. (4.43) são desprezados. Se estes termos fossem mantidos, desencadearia uma dependência que ao final englobaria todos os pontos, já que o vizinho de um ponto depende do seu vizinho e assim sucessivamente (PATANKAR, 1980). Logo, a equação (4.43), com esta simplificação reduz-se a:

$$a_{P,e}^{v_{g,r}} \Big|_e = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r}^* + b^- \right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r}^* + b^- \right]_E}{2} + \varepsilon_e \vartheta_e \frac{(P_P^* - P_E^*)}{\Delta r} + \varepsilon_e \vartheta_e \frac{(P_P' - P_E')}{\Delta r} \quad (4.45)$$

da qual obtém-se a velocidade do gás na face “e”:

$$v_{g,r}|_e = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r}^* + b^- \right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r}^* + b^- \right]_E}{2a_{P,e}^{v_{g,r}}} + \frac{\varepsilon_e \vartheta_e (P_P^* - P_E^*)}{a_{P,e}^{v_{g,r}} \Delta r} + \frac{\varepsilon_e \vartheta_e (P_P' - P_E')}{a_{P,e}^{v_{g,r}} \Delta r} \quad (4.46a)$$

comparando-se as Equações (4.46a) com a Equação (4.32), reconhecemos a soma dos dois primeiros termos do lado direito da equação (4.46a) como sendo a estimativa anterior da velocidade na face “e”, portanto:

$$v_{g,r}|_e = v_{g,r}|_e^* + \frac{\varepsilon_e \vartheta_e (P_P' - P_E')}{a_{P,e}^{v_{g,r}} \Delta r_e} \quad (4.47a)$$

onde:

$$v_{g,r}|_e^* = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^* \right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^* \right]_E}{a_{P,e}^{v_{g,r}}} + \frac{\varepsilon_e \vartheta_e (P_P^* - P_E^*)}{a_{P,e}^{v_{g,r}} \Delta r} \quad (4.48a)$$

e assim o último termo do lado direito da Equação (4.46a) é a correção de velocidade:

$$v_{g,r}|_e' = \frac{\varepsilon_e \vartheta_e (P_P' - P_E')}{a_{P,e}^{v_{g,r}} \Delta r_e} \quad (4.49a)$$

Do mesmo modo, têm-se as equações para a velocidade nas outras faces:

-face “w”:

$$a_{P,w}^{v_{g,r}} v_{g,r} \Big|_w = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^- \right]_W + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^- \right]_P}{2} + \varepsilon_w \vartheta_w \frac{(P_W - P_P)}{\Delta r_w} \quad (4.40b)$$

$$a_{P,w}^{v_{g,r}} = (a_{P,W}^{v_{g,r}} + a_{P,P}^{v_{g,r}}) / 2 \quad (4.41b)$$

$$v_{g,r} \Big|_w = v_{g,r}^* \Big|_w + \frac{\varepsilon_w \vartheta_w (P'_W - P'_P)}{a_{P,w}^{v_{g,r}}} \Delta r_w \quad (4.47b)$$

onde

$$v_{g,r}^* \Big|_w = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^* \right]_W + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^* \right]_P}{a_{P,w}^{v_{g,r}}} + \frac{\varepsilon_w \vartheta_w (P_W^* - P_P^*)}{a_{P,w}^{v_{g,r}}} \Delta r_w \quad (4.48.b)$$

e

$$v_{g,r}^* \Big|_w = \frac{\varepsilon_w \vartheta_w (P'_W - P'_P)}{a_{P,w}^{v_{g,r}}} \Delta r_w \quad (4.49b)$$

-face “s”:

$$a_{P,s}^{v_{g,z}} v_{g,z} \Big|_s = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,z} + b^- \right]_S + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,z} + b^- \right]_P}{2} + \varepsilon_s \vartheta_s \frac{(P_S - P_P)}{\Delta r_s} \quad (4.40c)$$

$$a_{P,s}^{v_{g,z}} = (a_{P,S}^{v_{g,z}} + a_{P,P}^{v_{g,z}}) / 2 \quad (4.41c)$$

$$v_{g,z}|_s = v_{g,z}^*|_s + \frac{\varepsilon_s \vartheta_s (P'_s - P'_p)}{a_{p,s}^{v_{g,z}} \Delta z_s} \quad (4.47c)$$

onde

$$v_{g,z}^*|_s = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,z} + b^* \right]_s + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,z} + b^* \right]_p}{a_{p,s}^{v_{g,z}}} + \frac{\varepsilon_s \vartheta_s (P'_s - P'_p)}{a_{p,s}^{v_{g,z}} \Delta r_s} \quad (4.48c)$$

e

$$v_{g,r}|_s = \frac{\varepsilon_s \vartheta_s (P'_s - P'_p)}{a_{p,s}^{v_{g,r}} \Delta z_s} \quad (4.49c)$$

- face "n":

$$v_{g,z}|_n = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,z} + b^- \right]_p + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^- \right]_n}{a_{p,n}^{v_{g,z}}} + \frac{\varepsilon_n \vartheta_n (P_p - P'_n)}{a_{p,n}^{v_{g,z}} \Delta r_n} \quad (4.40d)$$

$$a_{p,n}^{v_{g,z}} = (a_{p,p}^{v_{g,z}} + a_{p,n}^{v_{g,z}}) / 2 \quad (4.41d)$$

ou

$$v_{g,z}|_n = v_{g,z}^*|_n + \frac{\varepsilon_n \vartheta_n (P_p - P'_n)}{a_{p,n}^{v_{g,z}} \Delta z_n} \quad (4.47d)$$

onde

$$v_{g,z}^* \Big|_n = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,z} + b^* \right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{g,r} + b^* \right]_N}{a_{P,n}^{v_{g,z}}} + \frac{\varepsilon_n \vartheta_n (P_P^* - P_N^*)}{a_{P,n}^{v_{g,z}} \Delta r_n} \quad (4.48d)$$

e

$$v_{g,r}^* \Big|_n = \frac{\varepsilon_n \vartheta_n (P_P^* - P_N^*)}{a_{P,n}^{v_{g,r}} \Delta z_n} \quad (4.49d)$$

A Figura (4.6) mostra, para as quatro faces do volume de controle, os pontos vizinhos que entram no cálculo da velocidade nestas faces.

Substituindo as Equações 4.47a-d, na equação da continuidade, Equação (4.30), obtém-se a seguinte equação para a correção de pressão P' :

$$a_P^{P'} P_P' = \sum a_{nb} P_{nb}' + b^{P'} \quad (4.50)$$

onde

$$a_E^{P'} = \frac{A_e \vartheta_e \varepsilon_{g,e}^2 \rho_{g,e}}{a_{P,e}^{v_{g,r}} \Delta r} \quad (4.51a)$$

$$a_W^{P'} = \frac{A_w \vartheta_w \varepsilon_{gw}^2 \rho_{gw}}{a_{P,w}^{v_{g,r}} \Delta r} \quad (4.51b)$$

$$a_N^{P'} = \frac{A_n \vartheta_n \varepsilon_{gn}^2 \rho_{gn}}{a_{P,n}^{v_{g,z}} \Delta z} \quad (4.51c)$$

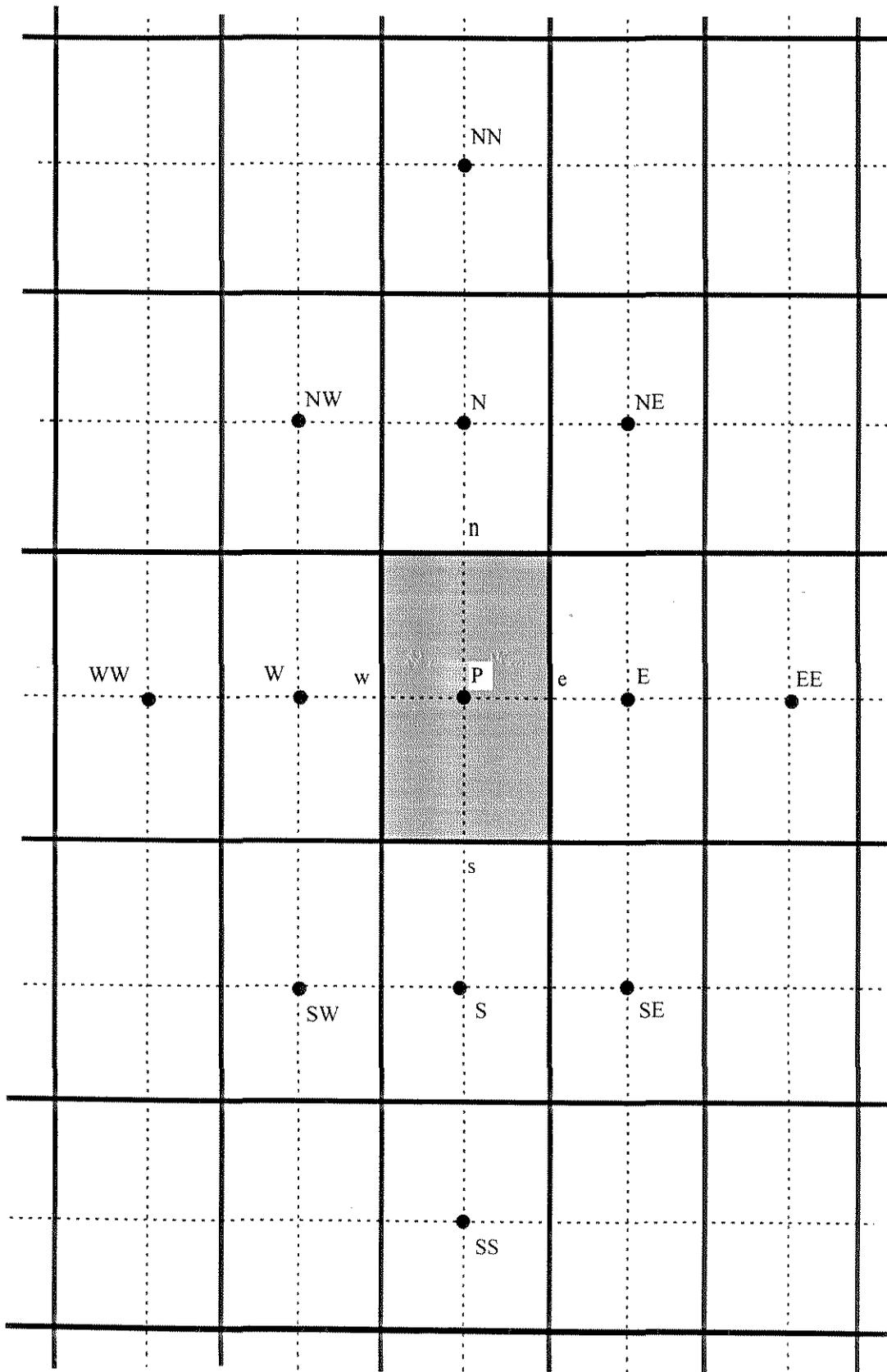


Figura 4.6 - Pontos envolvidos no calculo das velocidades nas faces.

$$a_s^{P'} = \frac{A_s \vartheta_s \varepsilon_{gs}^2 \rho_{gs}}{a_{p,s}^{v_{g,z}} \Delta z} \quad (4.51d)$$

$$b_{P'} = A_w \rho_g \varepsilon_g v_{g,r}^* \Big|_w - A_e \rho_g \varepsilon_g v_{g,r}^* \Big|_e + A_s \rho_g \varepsilon_g v_{g,z}^* \Big|_s - A_n \rho_g \varepsilon_g v_{g,z}^* \Big|_n + \frac{(\rho_g \varepsilon_g) - (\rho_g \varepsilon_g)^0}{\Delta t} \Delta \vartheta \quad (4.52)$$

$$a_p^{P'} = a_E^{P'} + a_W^{P'} + a_N^{P'} + a_S^{P'} \quad (4.53)$$

4.3.2 - O SIMPLE - “Consistent”

Uma derivação do SIMPLE, o SIMPLEC, foi implementado como acoplamento alternativo e, algumas vantagens do SIMPLEC em relação ao SIMPLE, foram observadas e assinaladas no capítulo de resultados. A diferença básica entre o SIMPLE e o SIMPLEC, é que neste último para manter uma “consistência” no instante em que se despreza as correções de velocidades, subtrai-se nos dois lados da equação (3.38) o termo, por exemplo, para o ponto “e”,

$$\sum_{nb} a_{nb} v'_e : \left\{ \frac{a_p^{v_{g,r}} \Big|_p + a_p^{v_{g,r}} \Big|_E}{2} - \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} \right]_p + \left[\sum_{nb} a_{nb} \right]_E}{2} \right\} v'_{g,r} \Big|_e = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v'_{g,r} \right]_p + \left[\sum_{nb} a_{nb} v'_{g,r} \right]_E}{2} - \left\{ \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} \right]_p + \left[\sum_{nb} a_{nb} \right]_E}{2} \right\} v'_{g,r} \Big|_e + \varepsilon_e \vartheta_e \frac{(P'_p - P'_E)}{\Delta r} \quad (4.54)$$

ou

$$\left\{ \frac{\left(\mathbf{a}_{P'}^{v_{g,r}} \Big|_P - \left[\sum_{nb} \mathbf{a}_{nb} \right]_P \right) + \left(\mathbf{a}_{P'}^{v_{g,r}} \Big|_E - \left[\sum_{nb} \mathbf{a}_{nb} \right]_E \right)}{2} \right\} \mathbf{v}'_{g,r} \Big|_e = \frac{\left[\sum_{nb} \mathbf{a}_{nb} (\mathbf{v}'_{g,r} - \mathbf{v}'_{g,r} \Big|_e) \right]_P + \left[\sum_{nb} \mathbf{a}_{nb} (\mathbf{v}'_{g,r} - \mathbf{v}'_{g,r} \Big|_e) \right]_E}{2} + \varepsilon_e \vartheta_e \frac{(P'_P - P'_E)}{\Delta r} \quad (4.55)$$

No SIMPLEC, as diferenças entre as correções de velocidades dos pontos vizinhos e a correção de velocidade no ponto “e” (média entre os pontos “P” e “E”) são desprezadas. Portanto:

$$\hat{\mathbf{a}}_{P',e}^{v_{g,r}} \mathbf{v}'_{g,r} \Big|_e = \varepsilon_e \vartheta_e \frac{(P'_P - P'_E)}{\Delta r_e} \quad (4.56a)$$

ou

$$\mathbf{v}'_{g,r} \Big|_e = \frac{\varepsilon_e \vartheta_e (P'_P - P'_E)}{\hat{\mathbf{a}}_{P',e}^{v_{g,r}} \Delta r_e} \quad (4.57a)$$

onde

$$\hat{\mathbf{a}}_P^{v_{g,r}} = \frac{\left(\mathbf{a}_{P'}^{v_{g,r}} \Big|_P - \left[\sum_{nb} \mathbf{a}_{nb} \right]_P \right) + \left(\mathbf{a}_{P'}^{v_{g,r}} \Big|_E - \left[\sum_{nb} \mathbf{a}_{nb} \right]_E \right)}{2} \quad (4.58a)$$

Obtém-se expressões análogas para as faces “w”, “s” e “n”:

-face "w":

$$v'_{g,r}|_w = \frac{\varepsilon_w \vartheta_w (P'_w - P'_p)}{\hat{a}_{p,w}^{v_{g,r}}} \Delta r_w \quad (4.57b)$$

onde

$$\hat{a}_{p,w}^{v_{g,r}} = \frac{\left(a_{p,w}^{v_{g,r}}|_w - \left[\sum_{nb} a_{nb} \right]_w \right) + \left(a_{p,w}^{v_{g,r}}|_p - \left[\sum_{nb} a_{nb} \right]_p \right)}{2} \quad (4.58b)$$

- face "s"

$$v'_{g,r}|_s = \frac{\varepsilon_s \vartheta_s (P'_s - P'_p)}{\hat{a}_{p,s}^{v_{g,r}}} \Delta r_s \quad (4.57c)$$

onde

$$\hat{a}_{p,s}^{v_{g,r}} = \frac{\left(a_{p,s}^{v_{g,r}}|_s - \left[\sum_{nb} a_{nb} \right]_s \right) + \left(a_{p,s}^{v_{g,r}}|_p - \left[\sum_{nb} a_{nb} \right]_p \right)}{2} \quad (4.58c)$$

- face "n":

$$v'_{g,r}|_n = \frac{\varepsilon_n \vartheta_n (P'_p - P'_s)}{\hat{a}_{p,n}^{v_{g,r}}} \Delta r_n \quad (4.57d)$$

onde

$$\hat{a}_p^{v_{g,r}}|_n = \frac{\left(a_p^{v_{g,r}}|_P - \left[\sum_{nb} a_{nb} \right]_P \right) + \left(a_p^{v_{g,r}}|_N - \left[\sum_{nb} a_{nb} \right]_N \right)}{2} \quad (4.58d)$$

Os passos do SIMPLE e do SIMPLER são exatamente os mesmos. A única diferença está exatamente nas expressões de correção das velocidades e nos coeficientes da equação de correção de pressão, P' , onde no lugar de a_p aparece o valor deste menos a soma dos a_i 's vizinhos.

4.4 - Velocidades nas faces para a fase particulada

As velocidades nas faces do volume de controle dado pelas Equações (4.47a - d) são utilizadas no cálculo do termo convectivo na equação do momentum, para a fase gasosa. Desta forma, tal como no caso deslocado, o processo iterativo é sempre reiniciado com um campo de velocidades que satisfaz a equação de conservação da massa da fase gás. Outro fato é que no cálculo das velocidades nas faces o gradiente de pressão é calculado usando-se pontos adjacentes, e não pontos alternados, da mesma forma que é feito no cálculo das velocidades nos pontos principais para o arranjo deslocado. Neste trabalho, para o cálculo das velocidades do sólido nas faces, é feita uma interpolação das equações de conservação da quantidade de movimento na forma discreta e não da velocidade propriamente na face para o cálculo do coeficiente convectivo desta fase. Isto é apenas uma extensão, da idéia de interpolação do momentum, já utilizado para a fase gás no acoplamento pressão-velocidade, para obtermos a velocidade do gás nas faces que compõe o termo convectivo deste. Este tipo de interpolação, como será mostrado no capítulo de resultados elimina oscilações numéricas observadas quando outro tipo de interpolação, por exemplo a velocidade linearmente, é utilizada. Como dito, a interpolação das equações do momentum para a fase particulada, segue um desenvolvimento análogo ao da interpolação do momentum do gás no acoplamento pressão-velocidade. Assim, partindo da equação do momentum da partícula na sua forma discreta:

$$a_p^{v_s} v_{s,\eta}|_p = \sum a_{nb} v_{nb}|_p + b^*|_p + L \left\{ \frac{\partial P}{\partial \eta} \right\}_p + C_M L \left\{ \frac{\partial P_s}{\partial \eta} \right\}_p \quad (4.59)$$

onde C_M é uma constante que identifica o modelo de tensões para a fase particulada, assumindo o valor 1 para o modelo cinético dos materiais granulares e zero para os demais (invíscido e newtoniano). $L\{\partial P_s/\partial \eta\}$ representa o termo de pressão do sólido. Porém, a expressão para as velocidades (v_s) nas faces do volume de controle é independente da forma como o termo de pressão nos pontos principais é interpolado. Por exemplo, para a face “e” entre os pontos P e E, temos:

$$v_{s,r}|_e = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{s,r} + b^* \right]_P + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{s,r} + b^* \right]_E}{a_{p,e}^{v_{s,r}}} + \frac{\varepsilon_e \vartheta_e (P_P - P_E)}{a_{p,e}^{v_{s,r}} \Delta r} + \kappa \frac{\vartheta_e (P_{SP} - P_{SE})}{a_{p,e}^{v_{s,r}} \Delta r} \quad (4.60a)$$

onde

$$a_p^{v_{s,r}} = (a_{p,P}^{v_{s,r}} + a_{p,E}^{v_{s,r}}) / 2 \quad (4.61a)$$

e expressões análogas são obtidas para a velocidade da fase particulada nas outras faces.

- face “w”:

$$v_{s,r}|_w = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{s,r} + b^* \right]_w + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{s,r} + b^* \right]_p}{a_{p,w}^{v_{s,r}}} + \frac{\varepsilon_w \vartheta_w (P_p - P_E)}{a_{p,w}^{v_{s,r}} \Delta r_w} + \kappa \frac{\vartheta_w (P_{sw} - P_{sp})}{a_{p,w}^{v_{s,r}} \Delta r_w} \quad (4.60b)$$

$$a_{p,w}^{v_{s,r}} = (a_{p,w}^{v_{s,r}} + a_{p,p}^{v_{s,r}}) / 2 \quad (4.61b)$$

- face "s":

$$v_{s,z}|_s = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{s,z} + b^* \right]_s + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{s,z} + b^* \right]_p}{a_{p,s}^{v_{s,z}}} + \frac{\varepsilon_w \vartheta_w (P_p - P_E)}{a_{p,s}^{v_{s,z}} \Delta z_s} + \kappa \frac{\vartheta_w (P_{sw} - P_{sp})}{a_{p,s}^{v_{s,z}} \Delta z_s} \quad (4.60c)$$

$$a_{p,s}^{v_{s,z}} = (a_{p,s}^{v_{s,z}} + a_{p,p}^{v_{s,z}}) / 2 \quad (4.61c)$$

- face "n":

$$v_{s,z}|_n = \frac{\left[\sum_{nb} a_{nb} v_{s,z} + b^* \right]_p + \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{s,z} + b^* \right]_p}{a_{p,n}^{v_{s,z}}} + \frac{\varepsilon_w \vartheta_w (P_p - P_E)}{a_{p,n}^{v_{s,z}} \Delta z_s} + \kappa \frac{\vartheta_w (P_{sw} - P_{sp})}{a_{p,n}^{v_{s,z}} \Delta z_s} \quad (4.60d)$$

$$a_{p,n}^{v_{s,z}} = (a_{p,n}^{v_{s,z}} + a_{p,p}^{v_{s,z}}) / 2 \quad (4.61d)$$

4.5 - O algoritmo SIMPLE

Como dissemos, o sistema de equações foi resolvido iterativamente utilizando o algoritmo SIMPLE, cujas etapas, para o escoamento bifásico, são:

1. Estima-se todas as variáveis, inclusive a pressão.
2. Calcula-se as propriedades físicas para as equações do momentum da fase gás, e resolva-as.
3. Resolve-se a equação de correção da pressão.
4. Corrige-se a pressão e as velocidades da fase gasosa. Nesta etapa a conservação da massa para a fase gasosa é satisfeita.
5. Resolve-se as equações para as outras variáveis da fase gasosa (energia cinética turbulenta e taxa de dissipação desta)
6. Calcula-se as propriedades físicas para as equações do momentum da fase particulada, e resolva-as.
7. Resolve-se a equação da continuidade da fase particulada para obter a fração volumétrica das fases particulada e gasosa. Nesta etapa a conservação da massa para a fase particulada é satisfeita.
8. Resolve-se a equação para a temperatura granular
9. Verifica-se a convergência global e, se necessário, volte-se a etapa 2.

4.6 - Relaxações

Para garantir ou acelerar a convergência no processo iterativo, as técnicas de relaxação tem papel importante. As relaxações podem ser feitas via fator relaxação “clássico”, fator de inércia ou transiente distorcido. Na verdade, a relaxação com transiente distorcido é um fator de inércia, só que tem origem física no termo transiente e é normalmente preferido em relação ao inércia. As 3 alternativas podem ser utilizadas no programa desenvolvido. A relaxação clássica consiste em substituir o resultado do cálculo do novo valor de ϕ pela soma de uma fração deste, mais uma fração do valor na iteração anterior:

$$a_p \phi_p = \alpha (\sum a_{nb} \phi_{nb} + b) + (1 - \alpha) a_p \phi_p^* \quad (4.62)$$

ou

$$\frac{a_p}{\alpha} \phi_p = (\sum a_{nb} \phi_{nb} + b) + \frac{(1 - \alpha)}{\alpha} a_p \phi_p^* \quad (4.63)$$

a relaxação por inércia é introduzida nesta equação, somando-se o produto do fator de inércia pelo valor atual, ao lado esquerdo, e pelo valor anterior ao lado direito da equação acima:

$$\left(\frac{a_p}{\alpha} + i \right) \phi_p = (\sum a_{nb} \phi_{nb} + b) + \left(\frac{(1 - \alpha)}{\alpha} a_p + i \right) \phi_p^* \quad (4.64)$$

este sistema pode ser reescrito na forma:

$$\hat{a}_p \phi_p = \sum a_{nb} \phi_{nb} + \hat{b} \quad (4.65)$$

que tem a forma padrão a ser resolvido pelo TDMA, onde,

$$\hat{a}_p = \left(\frac{a_p}{\alpha} + i \right) \quad (4.66)$$

$$\hat{b} = b + \left(\frac{(1 - \alpha)}{\alpha} a_p + i \right) \phi_p^* \quad (4.67)$$

mais uma vez, omite-se o sobrescrito “^”, a partir deste ponto, por conveniência de notação.

4.7 - Solução do sistema

O sistema de equações foi resolvido Linha por Linha com TDMA (Tri-Diagonal Matriz Algorihtm) [PATANKAR, 1988]. Este procedimento consiste em, dado o sistema na forma:

$$a_p \phi_p = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (4.68)$$

ou

$$a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (4.69a)$$

rescreve-lo na forma:

$$a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_W \phi_W + (a_N \phi_N + a_S \phi_S + b)^* \quad (4.69b)$$

$$a_p \phi_p = a_N \phi_N + a_S \phi_S + (a_E \phi_E + a_W \phi_W + b)^* \quad (4.69c)$$

onde o asterisco denota valores obtidos na iteração anterior e o termo entre parênteses passa a ser o termo independente do sistema de equações, o qual pode agora ser escrito como um sistema Tri-diagonal para cada linha (4.69b) ou coluna (4.69c) do domínio bidimensional de cálculo, ou seja:

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i \quad (4.70)$$

que é a forma padrão a ser resolvida pelo TDMA.

4.8 - Critérios de Convergência

Dentro do algoritmo SIMPLE, existem dois ciclos distintos que devem ser verificados: a convergência dos ciclos internos referente a cada variável e a convergência global. Para os ciclos internos, verifica-se o resíduo da equação para a variável ϕ que está sendo resolvido. O resíduo é definido como:

$$R_p = \left[a_p \phi_p - \left(\sum a_{nb} \phi_{nb} + b \right) \right] \quad (4.71)$$

e a norma euclidiana deste resíduo,

$$N_{R_p} = \sum_p \sqrt{\left[a_p \phi_p - \left(\sum a_{nb} \phi_{nb} + b \right) \right]^2} \quad (4.72)$$

Neste trabalho, existem as opções de se utilizar o máximo resíduo absoluto ou a norma euclidiana do resíduo como critérios de convergência para os ciclos internos em todas as variáveis, exceto a correção de pressão. Para a equação da correção de pressão, o critério é o da redução da norma euclidiana do resíduo a um percentual do resíduo na primeira iteração. Este é variado entre 5 e 20% do resíduo inicial. Este procedimento, segundo PERIC et al. (1988), otimiza o tempo de convergência.

4.9 - Linearização das condições de Contorno

As condições de contorno para a temperatura granular, obtidas a partir de um balanço de momentum na parede, são não-lineares e, como estamos utilizando um processo iterativo onde em cada iteração um sistema linear é resolvido para cada variável ϕ , faz-se necessário linearizar também as condições de contorno. De um modo geral, as condições de contorno para uma variável ϕ_1 , qualquer, é escrita da seguinte forma:

$$f_1(\phi_1, \dots, \phi_n)^* \frac{\partial \phi_i}{\partial \eta} + f_2(\phi_1, \dots, \phi_n)^* \phi_i = f_3(\phi_1, \dots, \phi_n)^* \quad (4.73)$$

onde as funções f_i 's são calculadas utilizando-se o valor das variáveis conhecidas da iteração anterior.

Aproximando a derivada por:

$$\left. \frac{\partial \phi_i}{\partial \eta} \right|_C \cong \frac{(\phi_{i,C} - \phi_{i,C\pm 1})}{\Delta \eta} \quad (4.74)$$

substituindo a Equação (4.74) na (4.73), obtêm-se a seguinte expressão geral para a condição de contorno:

$$\phi_i|_C = \frac{f_1^* \phi_i|_{C\pm 1} + f_3^* \Delta \eta}{f_1^* + f_2^* \Delta \eta} \quad (4.75)$$

onde o sinal assume + ou -, se o contorno está no sentido crescente ou decrescente do índice "i". Nesta forma o valor de ϕ_i depende explicitamente apenas do seu valor no ponto vizinho. As condições de contorno utilizadas são dos seguintes tipos:

1) Condição de simetria em relação a η : neste caso, $f_1=1, f_2=f_3=0$.

$$\phi_i = \phi_{i\pm 1} \quad (4.76)$$

2) Continuidade do fluxo na direção η : neste caso também, $f_1=1, f_2=f_3=0$, e

$$\phi_i = \phi_{i\pm 1} \quad (4.77)$$

3) Especificação da variável ϕ_i : neste caso, $f_1=0$, $f_2=1$ e $f_3=\phi_{\text{esp}}$

$$\phi_i|_C = \phi_i|_{\text{esp}} \quad (4.78)$$

5 - CONCEPÇÃO E TESTES DO PROGRAMA

Apresentam-se neste capítulo, alguns resultados relativos aos testes e concepção do programa, no qual mostra-se que erros de concepção e lógica foram eliminados, resolvendo-se casos simples e de soluções conhecidas. Faz-se também, neste capítulo, uma rápida descrição do programa desenvolvido, as funções de cada subrotina, e as ligações entre as mesmas, comandadas pelo programa principal.

O código de calculo foi desenvolvido em linguagem FORTRAN, compatível com o WINDOWS95, compilador FORTRAN POWER STATION VERSAO 4.0. O programa é constituído pelo programa principal e 30 subrotinas, em mais de 4000 linhas. O programa principal gerencia a ativação das subrotinas, cujas funções são descritas resumidamente em seguida. Algumas funções internas foram utilizadas, e fazem a interface com o usuário. Estas não são comentadas aqui. Apenas aquelas desenvolvidas neste trabalho são comentadas. A Figura (5.1) mostra o algoritmo do programa.

5.1 - Subrotinas

As subrotinas que compõem o programa, com as respectivas funções são:

1. COEFV

Calcula os coeficientes da matriz para todas as a variáveis, exceto para a correção.

2. FVZ

Calcula o termo fonte linearizado (S_c e S_p) do componente axial da velocidade da fase particulada.

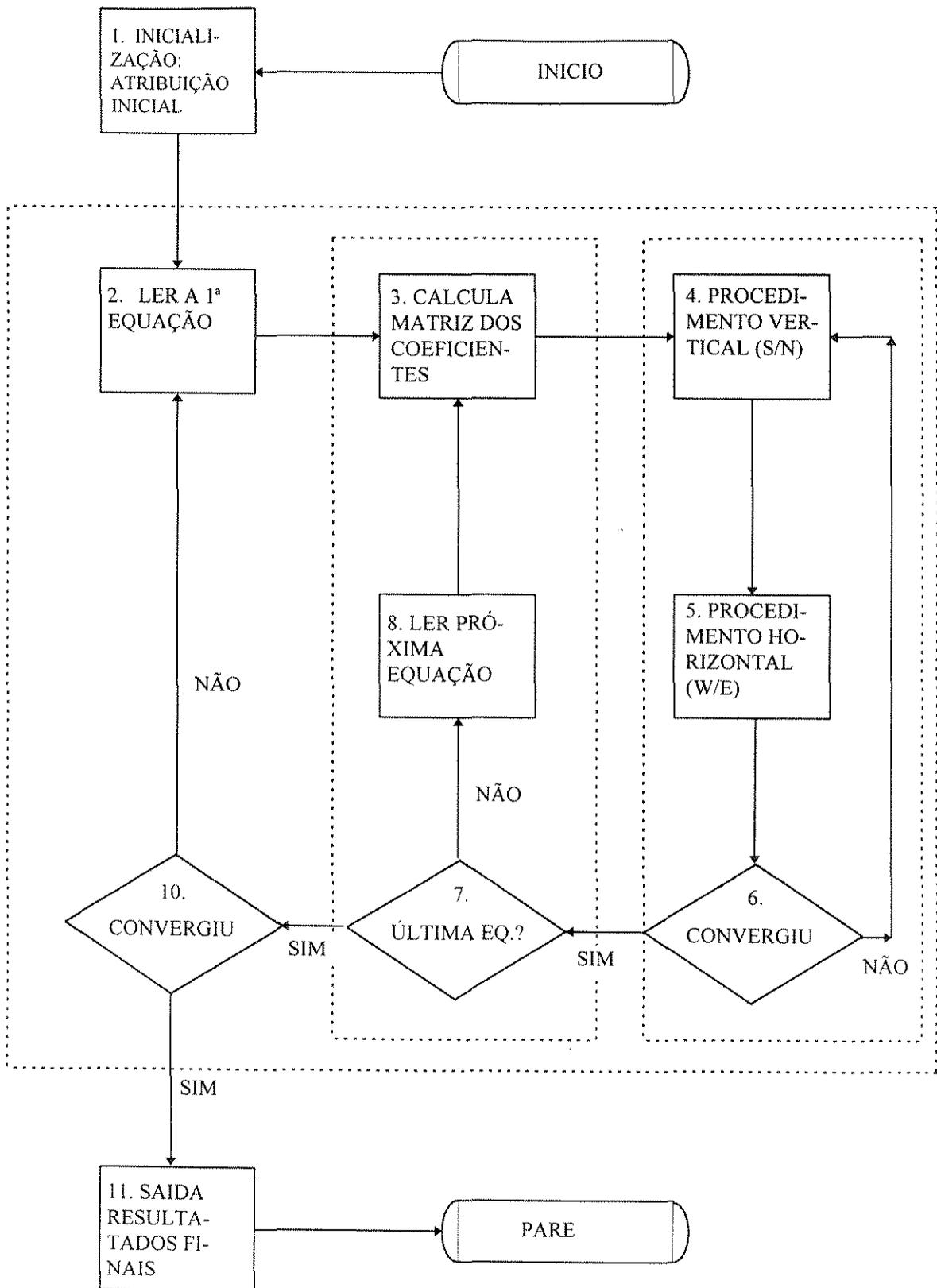


Figura 5.1 - Algoritmo do Programa

3. FVR

Calcula o termo fonte linearizado (Sc e Sp) do componente radial da velocidade da fase particulada.

4. FUZ

Calcula o termo fonte linearizado (Sc e Sp) do componente axial da velocidade da fase gasosa.

5. FUR

Calcula o termo fonte linearizado (Sc e Sp) do componente radial da velocidade da fase gasosa.

6. FPORO

Calcula o termo fonte linearizado (Sc e Sp) da fração volumétrica de partículas.

7. FECT

Calcula o termo fonte linearizado (Sc e Sp) da energia cinética turbulenta do gás.

8. FTGRAN

Calcula o termo fonte linearizado (Sc e Sp) da energia cinética turbulenta das partículas (temperatura granular).

9. COEFP

Calcula os coeficientes da matriz para a correção de pressão.

10. FMASSA

Calcula as velocidades da fase particulada nas faces usando a interpolação do momentum.

11. GRID

Gera a malha numérica e calcula todas as informações geométricas dos volumes finitos (posição do ponto, áreas das faces e volumes).

12. SAIDA

Gera os arquivos de saída com os resultados numéricos

13. INICIO

Inicializa todas as variáveis, por atribuição do usuário.

14. CONTORN

Aplica as condições de contorno para todas as variáveis.

15. ANTER

Armazena as variáveis calculadas na iteração anterior do SIMPLE (ou SIMPLEC).

16. UGAXI

Calcula a velocidade axial do gás nos ciclos internos do SIMPLE.

17. URAD

Calcula a velocidade radial do gás nos ciclos internos do SIMPLE.

18. VSAXI

Calcula a velocidade axial do sólido nos ciclos internos do SIMPLE.

19. VSRAD

Calcula a velocidade radial do gás nos ciclos internos do SIMPLE.

20. ECTURB

Calculo da energia cinética turbulenta do gás. Percorre linhas e colunas.

21. NEWTON

Resolve a equação algébrica não-linear da determinação velocidade de atrito.

22. TECTURB

Calculo da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta do gás. Percorre linhas e colunas.

23. PORO

Calculo da fração volumétrica das partículas e do gás. Percorre linhas e colunas.

24. TGRAN

Calculo da temperatura granular das partículas. Percorre linhas e colunas.

25. ECTURB

Calculo da correção de pressão. Percorre linhas e colunas.

26. CORUZ

Corrige a velocidade axial do gás com a correção de pressão.

27. CORUR

Corrige a velocidade radial do gás com a correção de pressão.

28. INTERF

Calculo do coeficiente de transferencia de momentum entre as fases.

29. TRIDAG

Solução por linha ou coluna do sistema, usando o TDMA.

30. FCOR

Calcula a função corrente para o gás e as partículas.

5.2- Caso Teste: Escoamento monofásico no interior de um tubo

Como o trabalho está sendo desenvolvido com a utilização de um novo código de cálculo, é necessário a execução de casos testes para a verificação e validação do programa. Comparou-se os resultados com soluções analíticas e/ou dados experimentais com o objetivo de validação do programa. Um problema clássico da literatura foi escolhido para ilustrar a etapa de validação do programa, para registrar a etapa de eliminação de possíveis existentes no mesmo. O escoamento no interior de um tubo em regimes laminar, para o qual tem-se uma solução analítica para a região totalmente desenvolvida, e turbulento, para o qual dispõem-se de dados experimentais e do perfil $1/7$ (lei de potência) foram utilizados como testes. A escolha deste caso foi devido a semelhança geométrica com o reator do CFB, objeto final deste estudo. O escoamento no interior de um tubo cilíndrico apresenta duas regiões distintas. Uma que corresponde a região de entrada, onde há o desenvolvimento da camada limite em direção ao centro do tubo. Nesta região tem-se variações nas direções radial e axial do tubo. Quando a camada limite atinge o centro do tubo, tem-se o escoamento totalmente desenvolvido, com velocidade e gradiente de pressão radiais nulos, sem variação axial de velocidade axial e com gradiente de pressão constante (axial). MEIER et al (1997) apresentam uma extensa análise para o escoamento gás-sólido diluído em um tubo vertical e fazem uma comparação entre os arranjos deslocado e co-localizado no método dos volumes finitos para estes sistemas multifásicos.

5.2.1 - Regime laminar

Para o regime laminar, na região totalmente desenvolvida, pode-se obter uma solução analítica (exata) das Equações de Navier-Stokes (SLATTERY, 1972). A solução exata das equações de Navier-Stokes para a região totalmente desenvolvida é o bem conhecido perfil parabólico de velocidades.

$$v_z(r) = v_{z,\max} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (5.1)$$

onde a velocidade máxima ocorre no centro do tubo sendo dada por:

$$v_{z,\max} = - \frac{R^2}{4\mu} \frac{dP}{dz} \Big|_{z>L_c} = 2v_{z,\text{med}} \quad (5.2)$$

Estes são as referências para verificação do programa. Comparam-se os resultados obtidos com o perfil teórico na região complementemente desenvolvida para vários números de Reynolds, e ilustrados aqui para $Re=1000$. Mostra-se também a influência da malha e do esquema de interpolação. O comprimento de entrada pode ser estimado pela relação de Langhaar (BENNET and MYERS, 1978):

$$\frac{L_c}{D} = 0,0575 Re \quad (5.3)$$

e assim, pode-se utilizar um tubo de comprimento maior que o comprimento de desenvolvimento da camada limite, para se ter certeza de que o comprimento do tubo é suficiente para o escoamento atingir a condição de totalmente desenvolvido. A Tabela 5.1 mostra as condições do escoamento e as propriedades físicas do sistema. A Tabela 5.2 mostra os coeficientes de transporte e os termos fontes para o escoamento laminar em um tubo. As condições de contorno do problema são dados na Tabela 5.3.

Tabela 5.1 - Características do sistema

Raio do Tubo (m)	0.05
Altura (m)	10
Velocidade do gás (m/s)	1×10^{-3}
Densidade do gás (kg/m ³)	1×10^3
Viscosidade do gás (kg/m.s)	1×10^{-4}
Numero de Reynolds	1000
L_e (m) (Eq. 5.3)	5,75

Tabela 5.2 - Coeficientes de transporte e termos fonte para as equações de conservação.

Equação	ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
Continuidade	1	0	0
Momentum axial fase gás	$v_{g,z}$	μ_g	$-\frac{\partial P}{\partial z} + \rho_g g_z$
Momentum radial fase gás	$v_{g,r}$	μ_g	$-\frac{\partial P}{\partial r} + \rho_g g_r$

Tabela 5.3 - Condições de contorno para o monofásico laminar

	entrada	saída	simetria	parede
v_z	v_0	$\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial v_z}{\partial r} = 0$	$v_z = 0$
v_r	0	0	0	0
P'	$\frac{\partial P'}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial r} = 0$

5.2.1.1 - Efeito dos fatores de relaxação na taxa de convergência

Para uma malha fixa de 10×10 , analisou-se o efeito dos parâmetros de relaxação na taxa de convergência. A Figura (5.2) mostra a influência dos parâmetros de relaxação para as velocidades radial e axial e do fator de redução da pressão. Fatores de redução maiores que 0,2 levam à divergência do processo iterativo para este caso. A relaxação “convencional” foi suficiente para garantir a convergência.

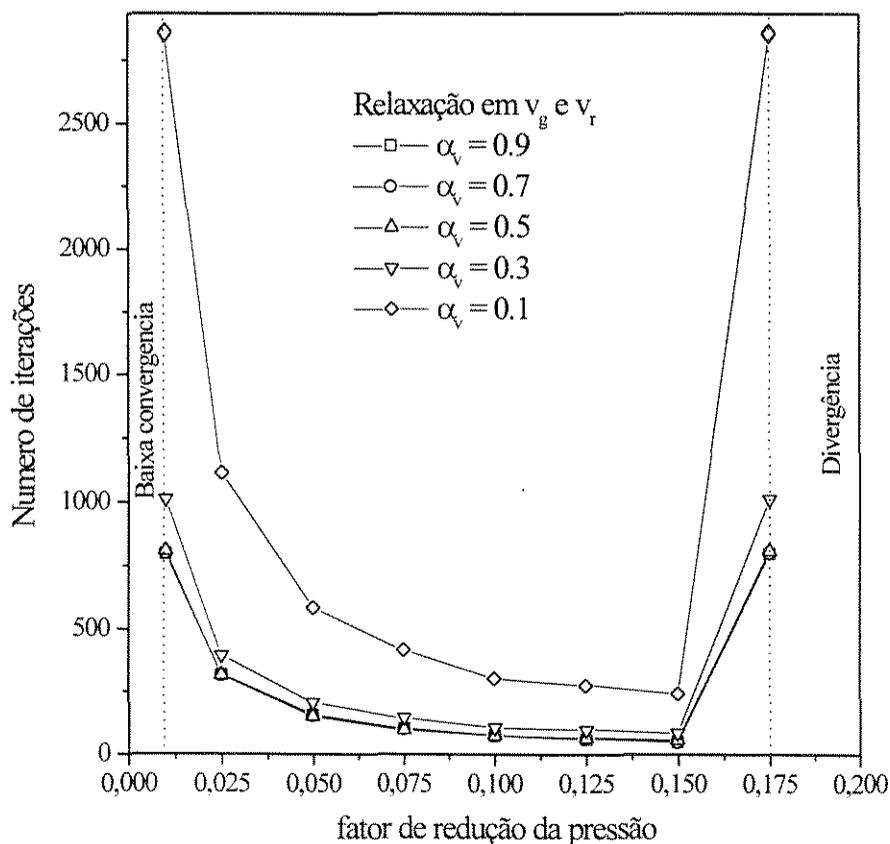


Figura 5.2 - Efeito dos fatores de relaxação na taxa de convergência

5.2.1.2 - Taxa de convergência

As Figuras (5.3) a (5.9) mostram o comportamento da convergência, acompanhando a variação da norma euclidiana do resíduo de massa e a velocidade axial na região totalmente desenvolvida (saída do tubo), tendo a malha como parâmetro, sendo os fatores de relaxação ótimos obtidos da Figura (5.2) (relaxação para velocidade=0,9 e fator de redução da pressão=0,15), para a malha 10x10, de forma tal que estes podem não ser parâmetros ótimos para as malhas diferentes da 10x10, com a qual foram otimizados. Mas queremos avaliar a taxa de convergência, para diferentes malhas, mantidos constantes os outros parâmetros, inclusive os fatores de relaxação.

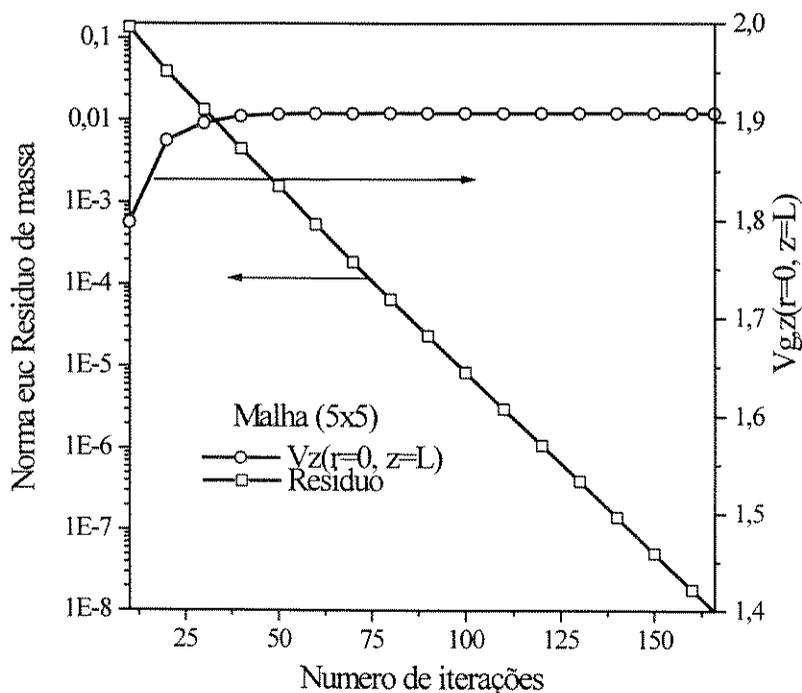


Figura 5.3 - Convergência para a malha 5 x 5

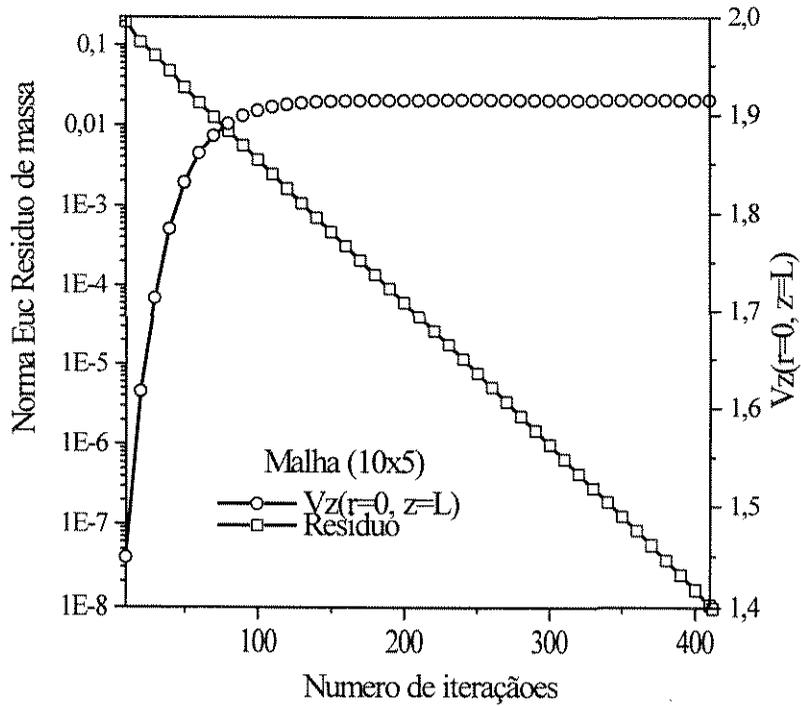


Figura 5.4 - Convergência para a malha 10 x 5

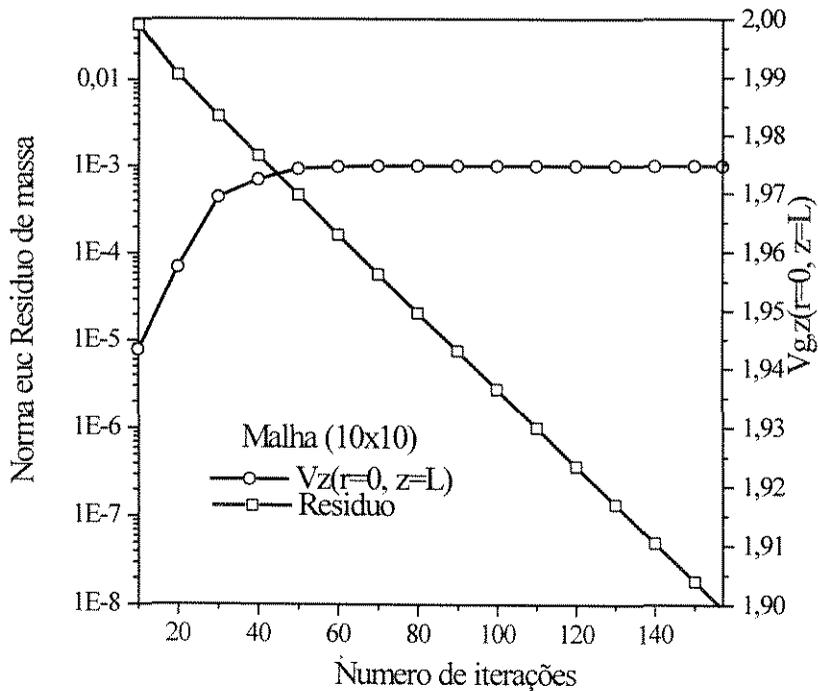


Figura 5.5 - Convergência para a malha 10 x 10

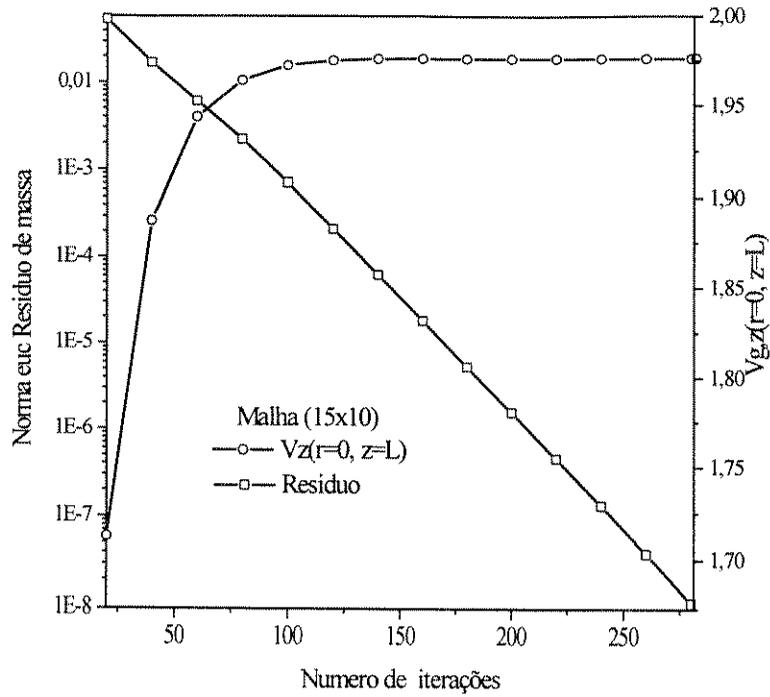


Figura 5.6 - Convergência para a malha 15 x 10

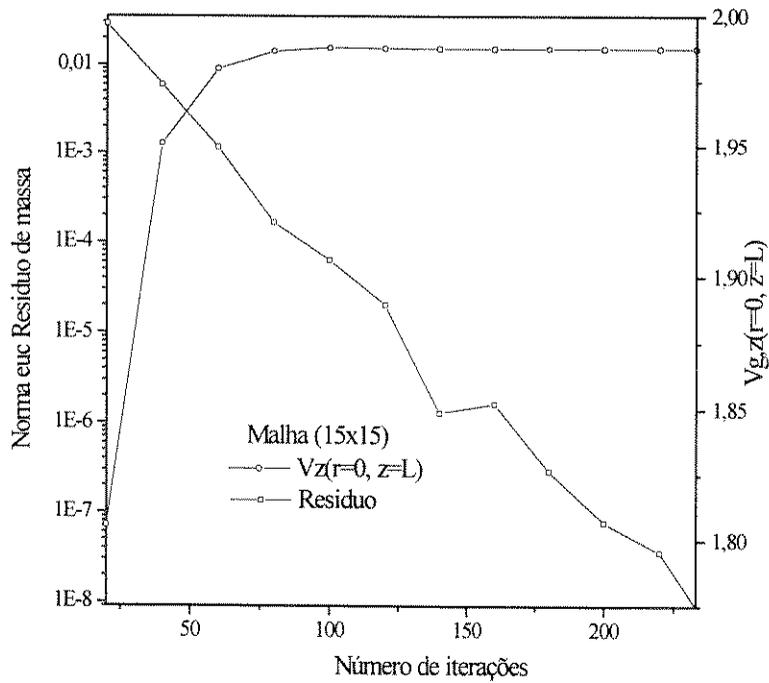


Figura 5.7 - Convergência para a malha 15 x 15

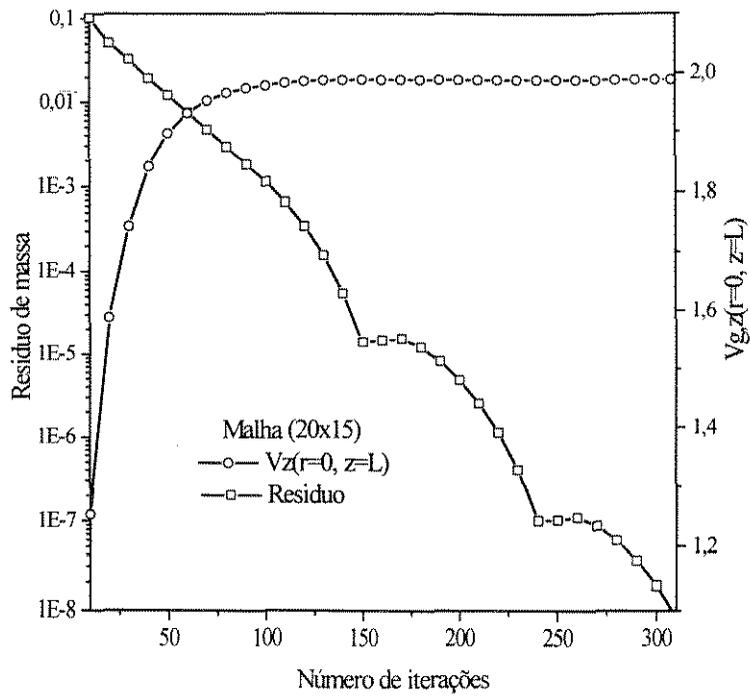


Figura 5.8 - Convergência para a malha 20 x 15

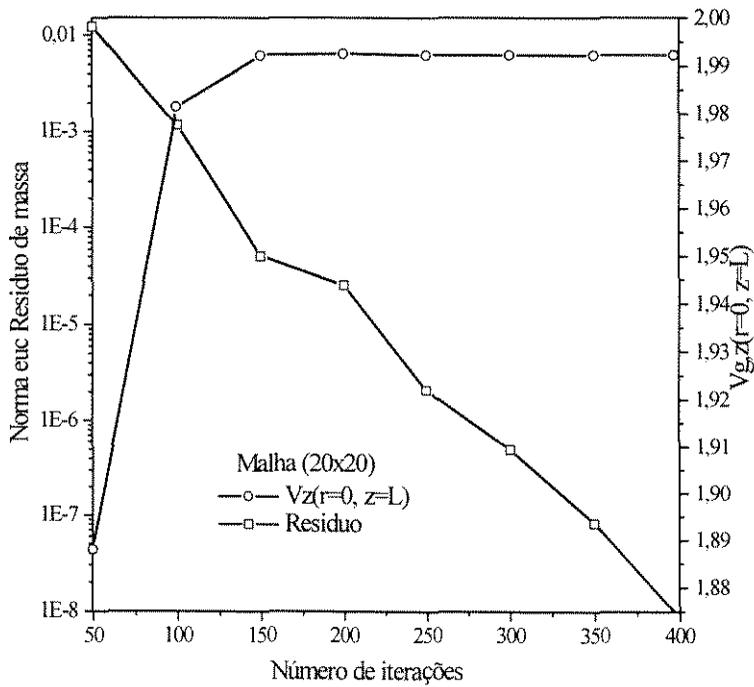


Figura 5.9 - Convergência para a malha 20 x 20

Uma observação importante já pode ser obtida da análise da variação do tempo de execução e do número de iterações com a malha. A Figura (5.10) mostra o número de iterações e o tempo de execução em função da malha. O esquema “upwind” foi utilizado. Esta figura foi construída a partir dos valores do número de iterações total das Figuras (5.3) a (5.5) (para estas três malhas, utilizam-se os parâmetros de relaxações (ótimos obtidos da Figura (5.2)): relaxação de velocidade=0,9 e redução de pressão=0,15, que correspondem aos valores “ótimos” dentro dos verificados) e está sendo apresentada, pelo seguinte motivo: sempre que a malha foi refinada, por um mesmo fator nas direções radial e axial, mantendo-se os mesmos parâmetros de relaxação, tinha-se uma redução no número de iterações e um aumento no tempo de execução. Porém, se a malha é refinada com fatores diferentes nas direções radial e axial, pode acontecer de termos um aumento no número de iterações, com o refino da malha. Isto pode ser atribuído ao fato de que existe uma relação ótima das dimensões da malha ou por que os parâmetros utilizados foram otimizados para a malha de 10x10. Talvez para as malhas de 5x5 e 10x5 existam parâmetros tais que o número de iterações e o tempo de execução sejam menores do que aqueles da malha de 10x10. Registramos este fato porque isto mostra que generalizar conclusões através de experimentação numérica parece um tanto difícil, dependendo da variável em análise. Este fato é ilustrado na Figura (5.10). Este comportamento está sendo enfatizado aqui, por que como veremos, comportamento semelhante foi observado no caso do “riser” e, a princípio isto havia nos parecido um comportamento atípico, mas que na verdade é bastante comum, que ocorre também em problemas simples, como é o caso do escoamento laminar em um tubo.

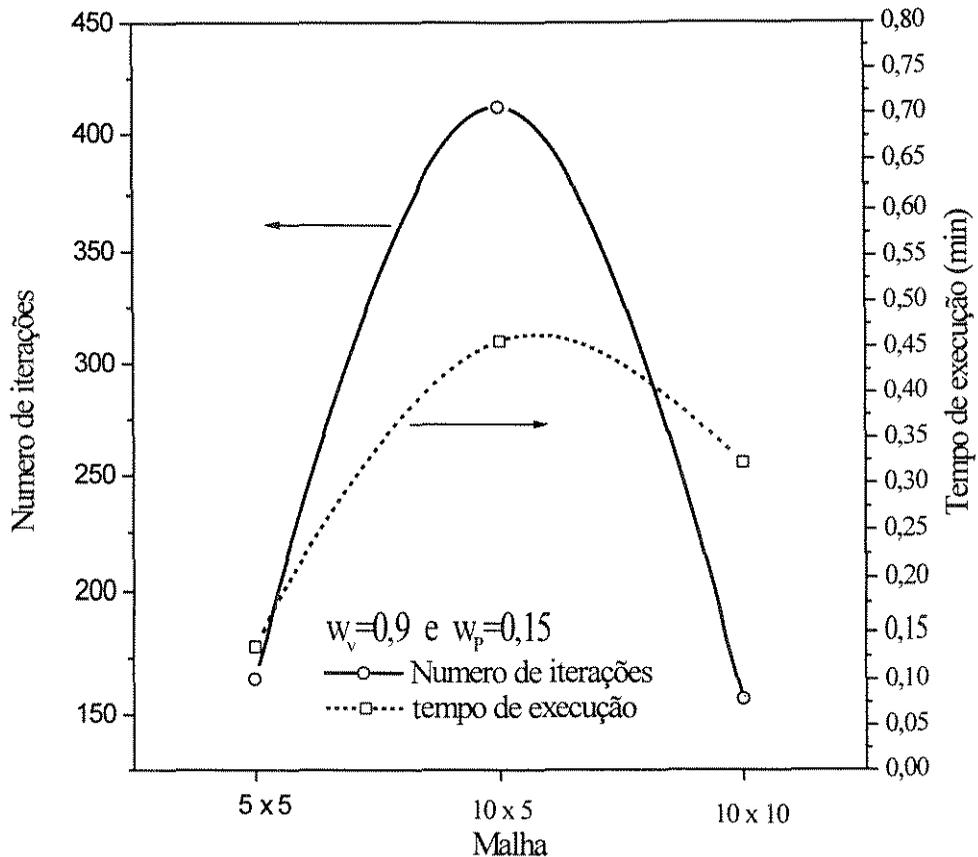


Figura 5.10 - Taxa de convergência em função da malha

5.2.1.3 - Independência com a malha

Uma análise de dependência da solução com a malha é necessário por dois motivos: primeiro, claro, buscar soluções independentes desta e, segundo, quando existe limitação ao refino da malha por limitações de máquina, se ter, pelo menos por extrapolação, uma noção da grandeza do erro que está sendo introduzido na solução em função da malha utilizada. Em alguns casos mais complexos, uma solução independente da malha torna-se praticamente impossível, claro, quando existe limitações de máquina. A Figura (5.11) mostra a dependência da solução com a malha. Acompanhamos neste caso, a velocidade axial do gás e o gradiente de pressão na saída (região totalmente desenvolvida). Para uma malha de 15x15 praticamente já

tem-se uma solução independente desta, para este caso. Para o escoamento laminar em um tubo, temos a solução analítica como referência, para se analisar este tipo de dependência. Entretanto, em problemas mais complexos, isto não é disponível e, portanto, é necessária estabelecer algum critério para definir uma solução independente com a malha. Acompanhar a mudança de todas as variáveis em todos os pontos com a malha é o critério mais seguro, pois em um ponto as variáveis podem não mudar praticamente com o refino da malha, mas em outros, esta mudança pode estar ocorrendo. Além disso, este ponto pode mudar de uma malha para outra de modo que este parece um critério um tanto exagerado e impraticável de se acompanhar. A idéia então, é identificar alguma função do problema, sensível a mudança em todos e qualquer ponto do domínio. Vamos eleger a queda de pressão total como sendo tal função e acompanhá-la para este caso, pois pode-se adiantar neste ponto, esta será a função utilizada como critério de definição de independência da solução com a malha (MEIER, 1998), por ser uma função que depende dos valores em todos os pontos internos do domínio e, supostamente, leva todos os efeitos de mudança nestes. A Figura (5.12) mostra também a queda de pressão total para o caso do escoamento laminar no tubo. Como pode-se observar, para uma malha superior 15x15, praticamente já se tem uma solução independente desta. A queda de pressão total não é a função que mais sente a mudança e, com isto, a hipótese anterior fica, pelo menos para este caso, comprovada. Como pode-se observar da Figura (5.12) a queda total de pressão não muda para soluções independentes da malha, como logicamente, tem que acontecer. Enfatizamos isto apenas porque isto será o critério para situações na qual não dispomos de outra referência para avaliar esta dependência.

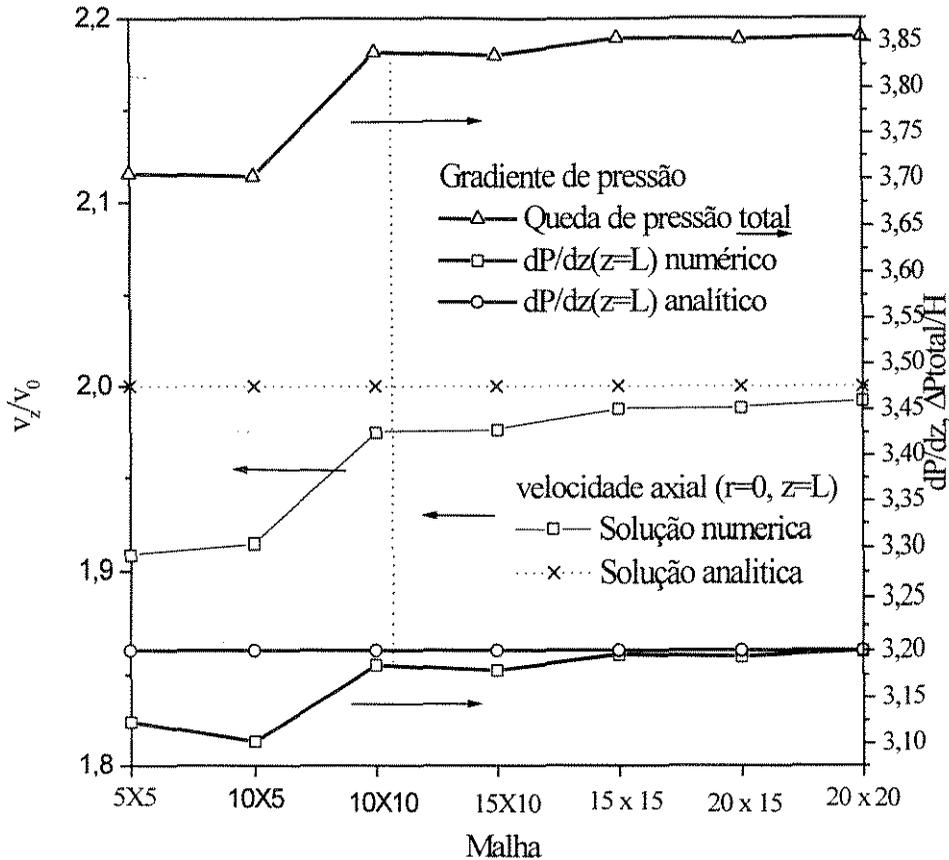


Figura 5.11 - Independência com a malha.

Para ilustrar a solução obtida para este caso, o desenvolvimento dos perfis de velocidade axial, velocidade radial e pressão são mostrados na Figuras (5.12), (5.13) e (5.14), respectivamente. Como pode-se observar, os resultados do perfil de velocidade axial, na região totalmente desenvolvida, corresponde ao perfil parabólico que pode ser obtido analiticamente (Equação (5.1)), como queríamos verificar. Pouco discussão cabe sobre estas soluções (perfil de velocidades axial, radial e pressão), pois são bastantes conhecidas e apenas mostram que o programa não apresenta erros de lógica e gera soluções perfeitas.

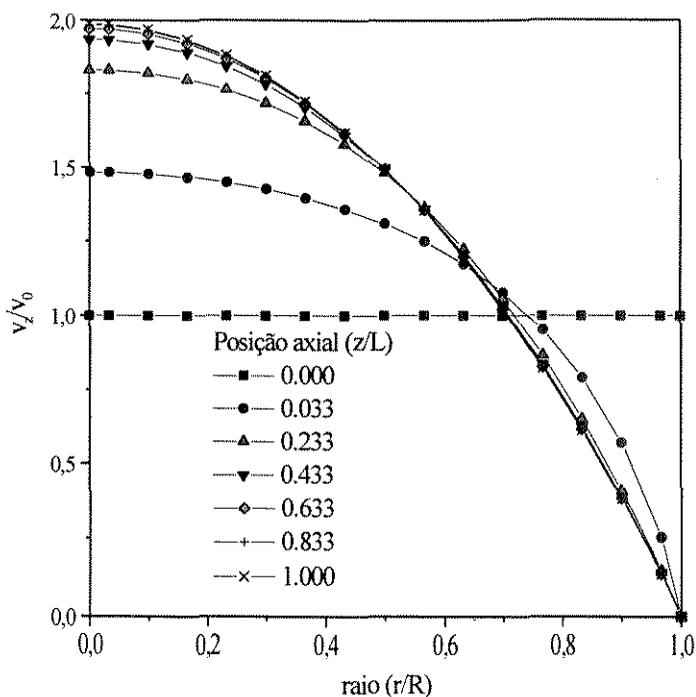


Figura 5.12 - Perfis de velocidade axial

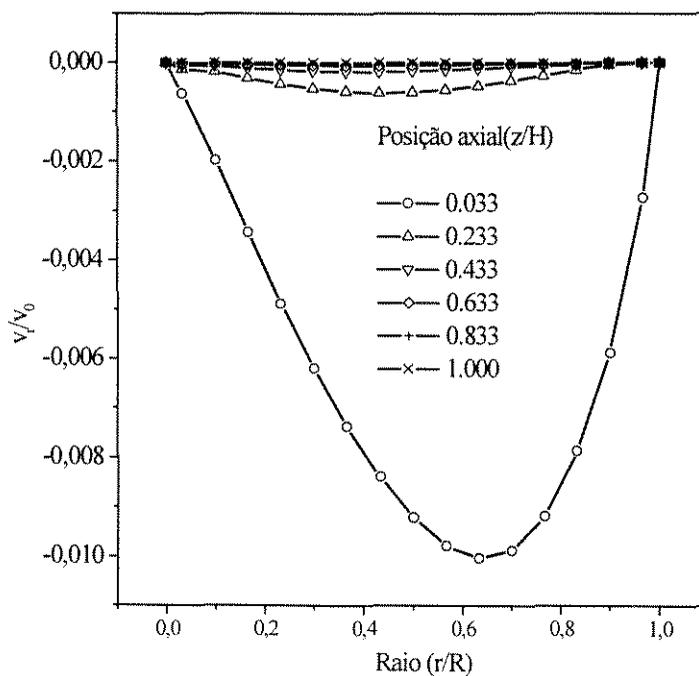


Figura 5.13 - Perfis de velocidade radial

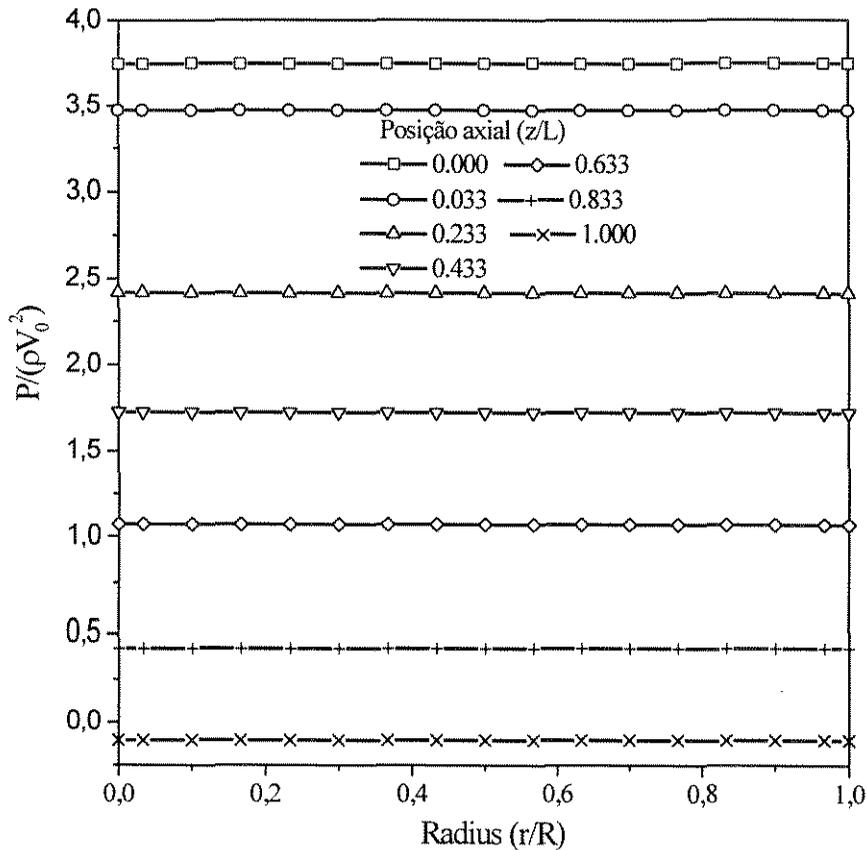


Figura 5.14 - Perfis de pressão

5.3 - Regime Turbulento

Para o regime turbulento, na região totalmente desenvolvida, a lei de potência 1/7 representa bem a distribuição radial da velocidade axial (BIRD, 1972).

$$v_z(r) = v_{z,\max} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^{1/7} \right] \quad (5.4)$$

onde a velocidade máxima ocorre no centro do tubo sendo dada por:

$$v_{z,max} = 1,25v_{z,med} \tag{5.5}$$

Dispõe-se também de dados experimentais da energia cinética turbulenta e da taxa de dissipação desta na região totalmente desenvolvida, os quais são usadas na comparação dos resultados. Estes são as referências para verificação do programa. Compara-se os resultados obtidos com o perfil teórico na região completamente desenvolvida para o numero de Reynolds 10000. A tabela 5.5 mostra os coeficientes de transporte e os termos fontes para o escoamento turbulento em um tubo. As condições de contorno do problema são dados na tabela 5.6.

Tabela 5.4 - Características do sistema

Raio do Tubo (m)	0.05
Altura (m)	10
Velocidade do gás (m/s)	10×10^{-3}
Densidade do gás (kg/m ³)	1×10^3
Viscosidade do gás (kg/m.s)	1×10^{-4}
Numero de Reynolds	10000

Tabela 5.5 -Coeficientes de transporte e termos fonte para as equações de conservação.

Equação	ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
Continuidade	1	0	0
Momentum axial fase gás	$v_{g,z}$	μ_g	$-\frac{\partial P}{\partial z} + \rho_g g_z$
Momentum radial fase gás	$v_{g,r}$	μ_g	$-\frac{\partial P}{\partial r} + \rho_g g_r$
Energia Cinética turbulenta	k	$\frac{\mu_g}{\sigma_k}$	$(G_k - \rho_g \epsilon)$
TDK	ϵ	$\frac{\mu_g}{\sigma_\epsilon}$	$(c_1 G_k - c_2 \rho_g \epsilon) \left(\frac{\epsilon}{k} \right)$

Tabela 5:6 - Condições de contorno para o monofásico turbulento

	entrada	saída	simetria	parede
v_z	v_0	$\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial v_z}{\partial r} = 0$	$v_z = 0$
v_r	0	0	0	0
P'	$\frac{\partial P'}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial r} = 0$
k	$k_0 = 0,005v_0^2$	$\frac{\partial k}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial k}{\partial r} = 0$	função de parede + $k = 0$
ε	$\varepsilon_0 = \frac{0,009k_0^{1,5}}{0,03R}$	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = 0$	função de parede + $\varepsilon = 0$

O comportamento da solução numérica para o caso turbulento é análogo ao laminar. Apresentam-se apenas os resultados finais obtidos para este caso. A Figura (5.15) mostra a dependência da solução com a malha. Neste caso, uma solução praticamente independente da malha é obtida para malhas superiores (mais refinadas) a 25x25 pontos internos. Mais uma vez, verifica-se a capacidade do programa em obter soluções perfeitas dos problemas testes, o que é necessário para tornar confiáveis as soluções daqueles problemas que estamos querendo resolver.

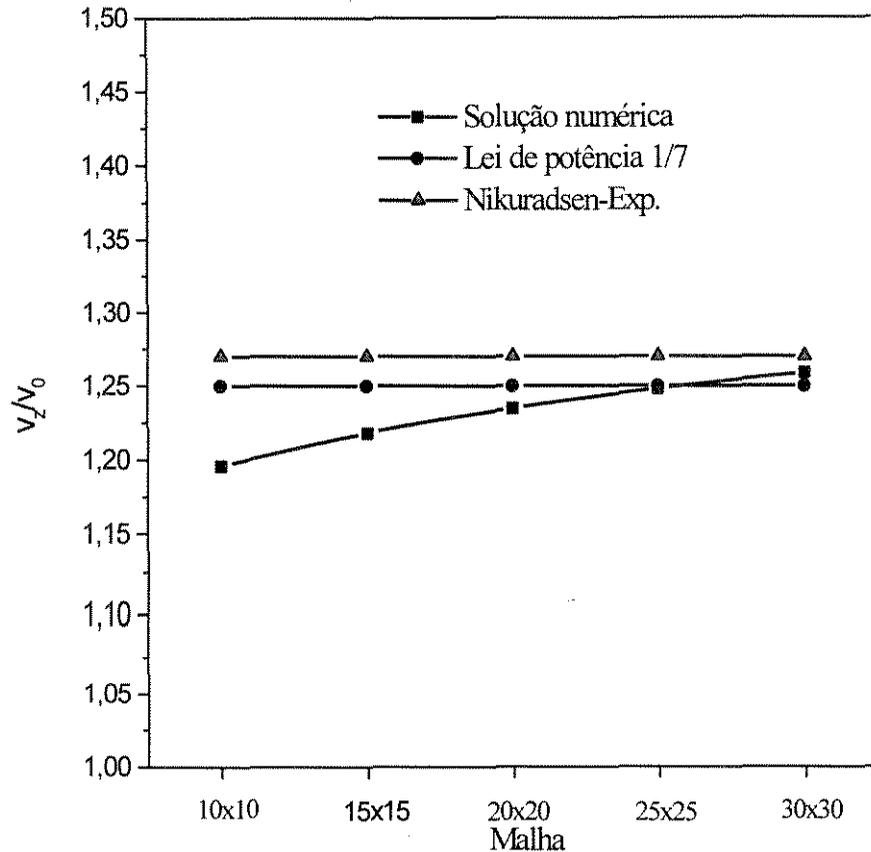


Figura 5.15 - Dependência com a malha

Uma observação pertinente neste caso, é que o uso de função de parede, da forma como foi usado neste trabalho, ou seja, para o ponto mais próximo à parede calcula-se a energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação desta usando-se uma função de parede, pois próximo a parede tem-se uma região onde o escoamento não é totalmente turbulento (sub-camada de transição e laminar). Com isto, estamos assumindo que entre a parede e o primeiro ponto, encontra-se a região de transição, e que no ponto mais próximo da parede, a região já é totalmente turbulenta. Este é o tipo de tratamento usado nas condições de contornos para k e ϵ , porém, alguns problemas relacionados a este tratamento foram observados. Por exemplo, as Figuras (5.16) e (5.17) mostram o perfis de energia cinética turbulenta e taxa de dissipação, respectivamente. Estas duas variáveis são, principalmente na região próximo a parede, muito sensíveis a malha, sugerindo que podemos ter um problema sempre “dependente” da malha, quando definirmos o

primeiro ponto como estando na região totalmente turbulenta. O interessante é que a viscosidade turbulenta calculada a partir destes valores não muda consideravelmente. Estamos adiando esta conclusão por que para escoamento gás-sólido, com alta concentração de partículas, onde o número de variáveis é duas vezes maior, a dependência com a malha é menos acentuada do que no caso do gás puro ou gás-sólido diluído. Isto ocorre por que no caso concentrado, o termo de dispersão na fase gasosa perde importância frente ao termo de interface, e o problema torna-se desprezível.

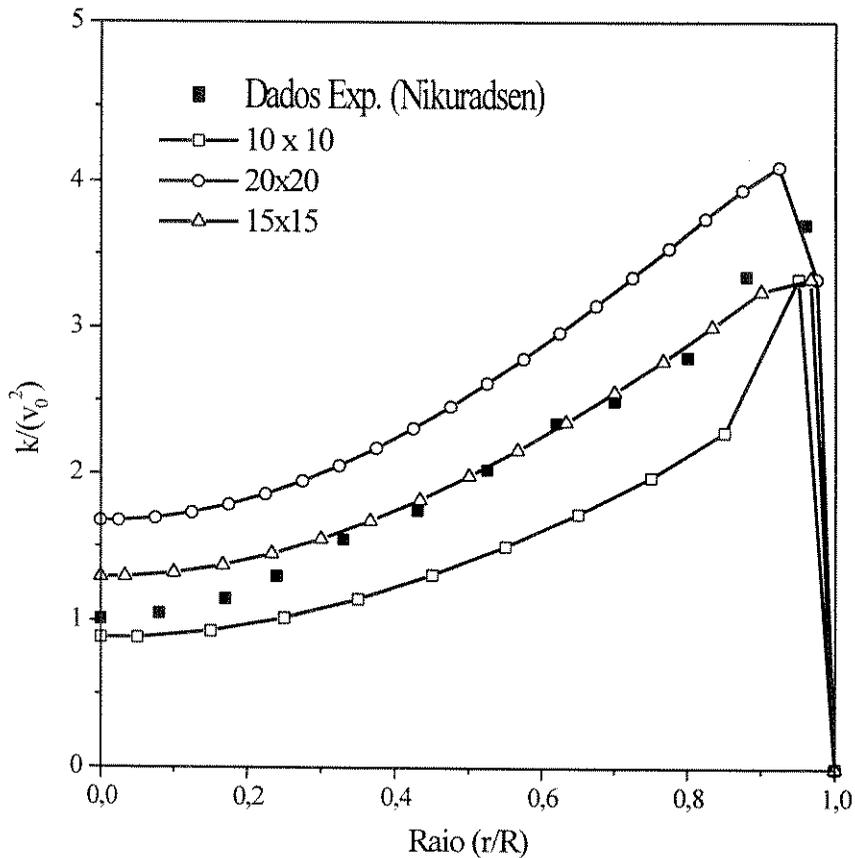


Figura 5.16 - Energia cinética turbulenta na região totalmente desenvolvida em função da malha

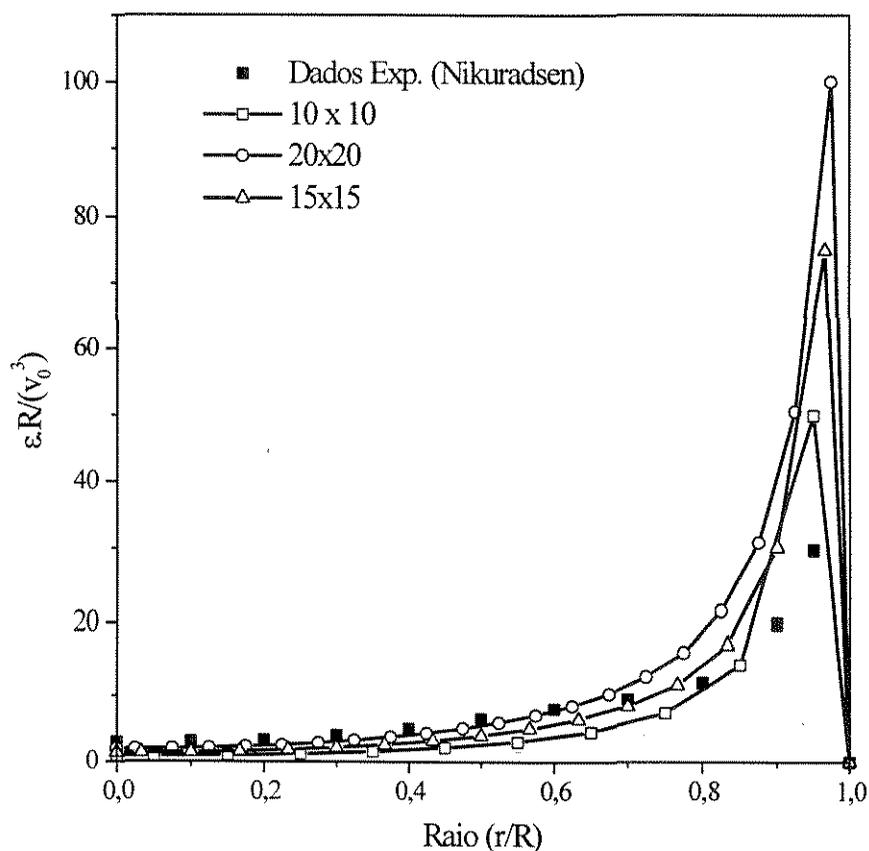


Figura 5.17 - Taxa de Dissipação de Energia cinética turbulenta na região totalmente desenvolvida em função da malha

Apenas como ilustração, para finalizar o capítulo de concepção e testes do programa, a Figura (5.18) mostra o desenvolvimento do perfil de velocidades para o escoamento turbulento no tubo cilíndrico.

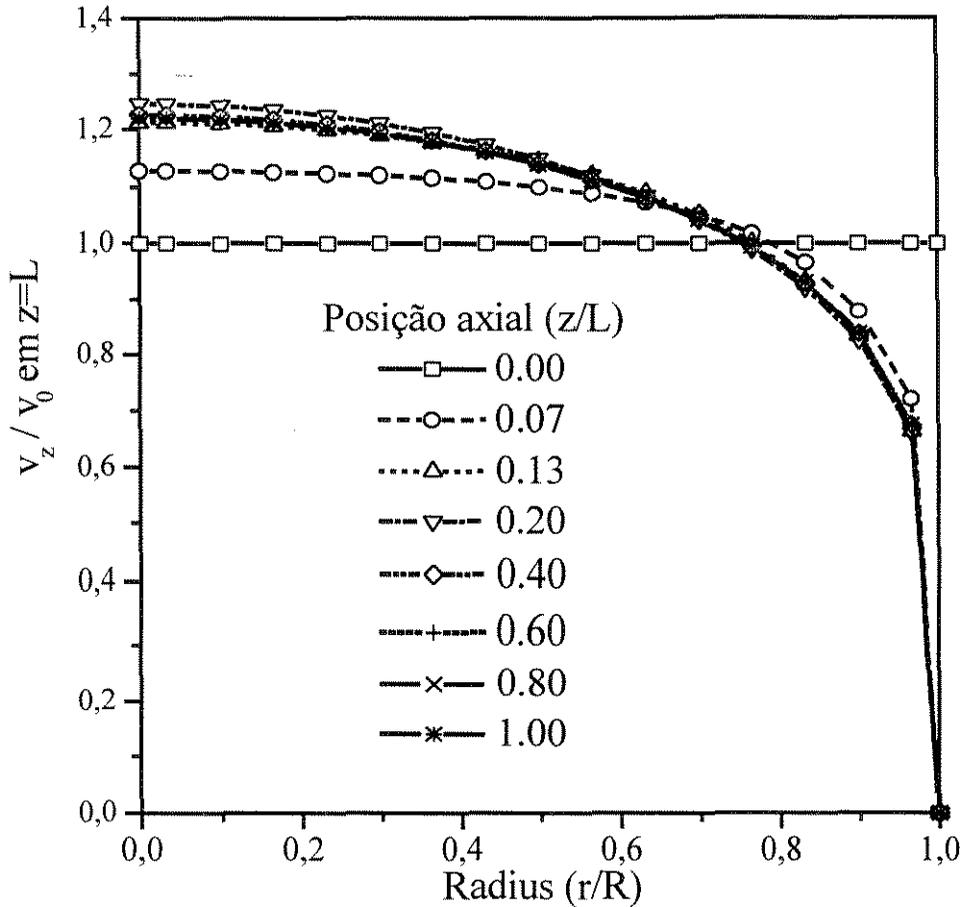


Figura 5.18 - Desenvolvimento da velocidade axial para o escoamento monofásico através de um tubo. $Re=10.000$

Uma das características do escoamento turbulento na entrada de um tubo é que o máximo de velocidade no centro do tubo próximo a entrada é maior do que o máximo na região totalmente desenvolvida. Isto pode ser visto na Figura (5.18), onde o máximo no centro ocorre próximo a $z/H=0,20$.

Um outro problema que, inicialmente seria utilizado como caso teste foi o transporte pneumático através de um tubo vertical. Para este caso dispõe-se de dados experimentais. Porém, alguns problemas de oscilação numérica foram observados por MEIER et al (1997), quando o arranjo co-localizado é utilizado. A análise do problema da oscilação numérica, neste caso, onde os gradientes de concentração de partículas são pequenos, levou a uma investigação

do problema cujos resultados são apresentados no capítulo de resultados. Uma solução simples para o problema da oscilação na concentração de partículas foi usada com sucesso neste trabalho, como será visto no capítulo de resultados.

5.4 - Conclusões preliminares

O programa foi testado em casos testes de soluções conhecidas de forma a se eliminar erros de lógica.

As características mais relevantes do comportamento numérico da solução dos problemas testes foram registradas e serviram de referência para o problema objeto deste trabalho, a simulação da fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado circulante.

6 - RESULTADOS E DISCUSSÕES

O objetivo da análise que segue é, com relação ao modelo matemático, mostrar qual o mais representativo da fluidodinâmica dos CFB's e, com relação ao método numérico, apontar algumas técnicas identificadas que melhoram a qualidade da solução aproximada do modelo.

Apresentam-se, neste capítulo, os resultados da simulação numérica obtidos para alguns reatores de leito fluidizado circulante, com diferentes características. Os resultados foram comparados com dados experimentais disponíveis na literatura. Para cada caso, faz-se uma avaliação numérica do problema e interpreta-se os resultados obtidos através da simulação numérica. Os casos foram escolhidos levando-se em conta a disponibilidade de dados experimentais na literatura, envolvendo os diferentes regimes de fluxos utilizados em transporte pneumático, combustores e em unidades de FCC. Os casos utilizados com as respectivas referências e autores são mostrados na Tabela 6.1. Logicamente que uma mesma unidade poderá ser utilizado como combustor ou unidade de FCC. A caracterização mostrada na Tabela 6.1 foi com base no tamanho das partículas e velocidades utilizadas. As configurações, com entradas e saídas idealizadas são mostradas nas Figuras (6.1) e (6.2). Apenas os efeitos de saída foram analisados.

Tabela 6.1 - Casos estudados

Caso	Autor	Referências	Características
1	Tsuji et al	TSUJI et al (1985)	Transporte Pneumático
2	Bader	TSUO and GIDASPOW(1990) PITA and SUNDARESAN(1993)	Unidade FCC
3	Luo	TSUO and GIDASPOW (1990)	Combustor

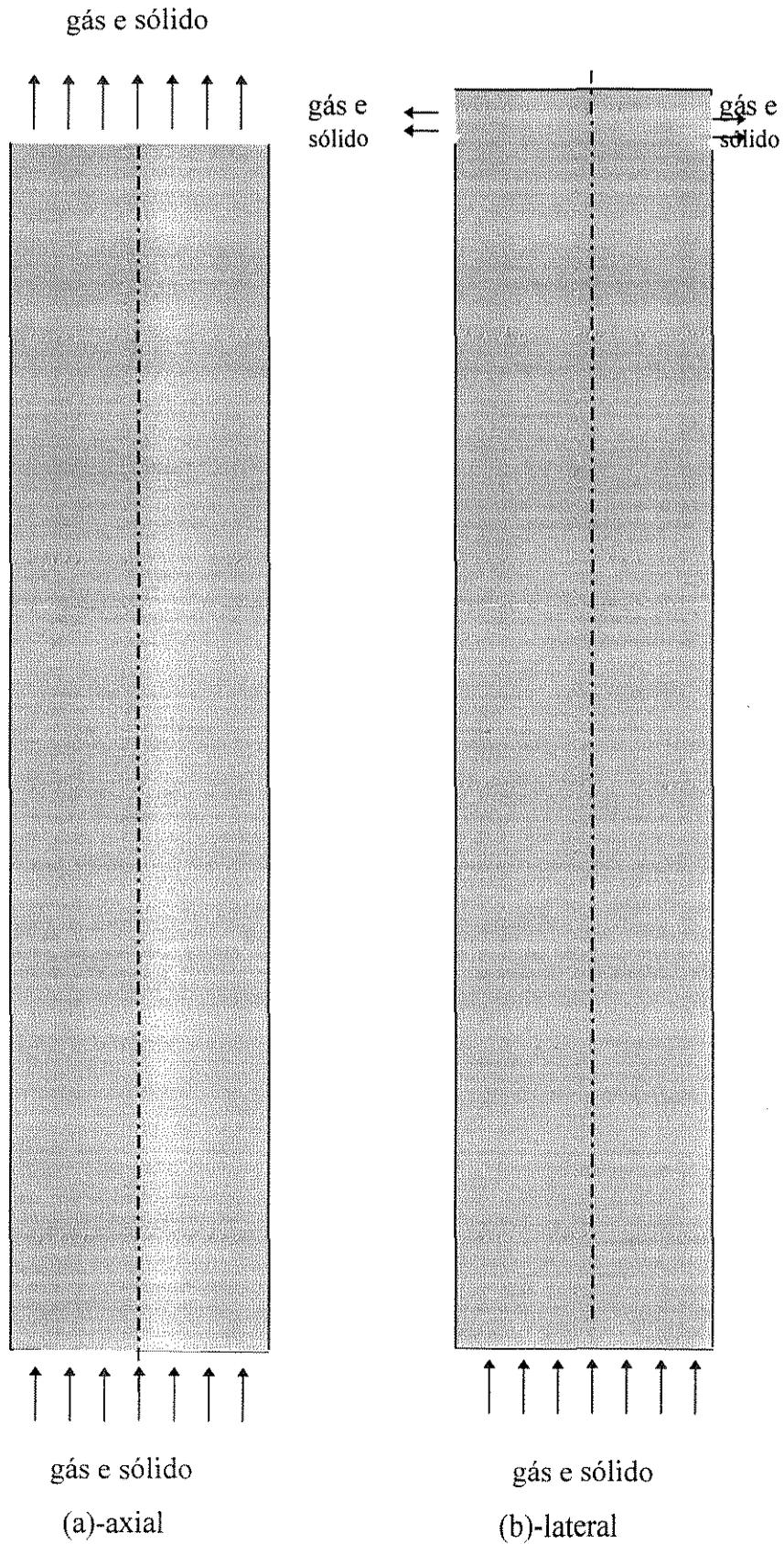


Figura 6.1 - Saídas idealizadas para o caso cilíndrico simétrico.

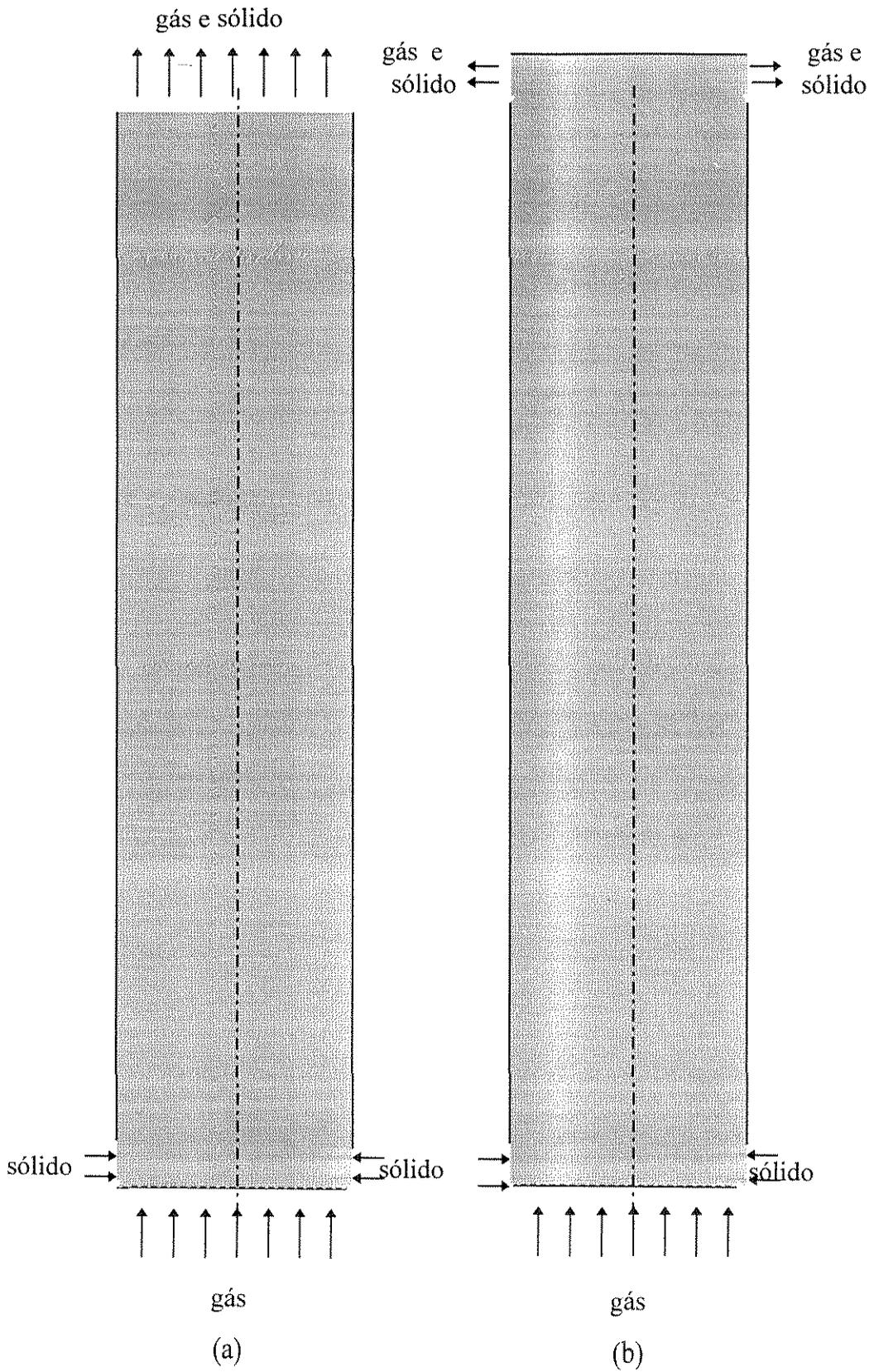


Figura 6.2 - Entradas idealizadas para os casos cilíndricos simétricos.

Para o primeiro caso, por ser o relativamente mais simples, analisou-se a eficiência relativa dos algoritmos SIMPLE e SIMPLEC na solução do sistema gás-sólido. Para os casos 1 e 2 fez-se uma avaliação dos esquemas de interpolação. Para todos os casos fez-se avaliação de dependência com a malha. Os resultados, para todos os casos, foram comparados com dados experimentais disponíveis na literatura.

O segundo e o terceiro caso são os que nos interessam diretamente. O segundo caso apresenta características típicas de unidades de FCC e o terceiro de reatores de combustão em CFB. Estes dois casos, como os demais, foram resolvidos usando-se o algoritmo definidos pelo primeiro caso.

Para o segundo e terceiro casos, com o algoritmo definido no caso 1, faz-se, uma análise de sensibilidade paramétrica, para determinação dos parâmetros do modelo cinético do escoamento de materiais granulares, com o objetivo de obter-se parâmetros genéricos, aplicáveis a todos os casos, pelo fato dos mesmos ainda não estarem bem definidos na literatura. Para o caso 2, faz-se ainda uma análise do problema da dispersão numérica, comparando-se os esquemas “upwind”, Híbrido e “Power-law” e para o caso 3 analisa-se o problema da oscilação numérica, relatado por MEIER et al (1997), que pode existir quando o arranjo co-localizado é utilizado na simulação de sistemas multifásicos. Para os casos 2 e 3, analisam-se os efeitos de saída sobre a concentração de partículas e sobre o comportamento fluidodinâmico em geral. Faz-se uma comparação do modelo de tensões para a pseudo-fase (fase particulada), comparando-se o modelo cinético do escoamento de materiais granulares, um modelo newtoniano com viscosidade efetiva obtida experimentalmente e o modelo inviscido. Ainda com relação aos casos 2 e 3, analisa-se o efeito da transferência de energia cinética do movimento flutuante (energia cinética turbulenta da fase gás e temperatura granular da fase particulada) na fluidodinâmica destes reatores.

Ao final, definido o modelo mais completo, com os parâmetros, algoritmo e esquemas de interpolação otimizados do ponto de vista numérico e ainda extrapolando-se a análise de dependência da solução com a malha, os resultados são comparados com os dados experimentais disponíveis na literatura.

6.1 - Caso 1: Transporte pneumático - Sistema Diluído

O sistema de escoamento gás-sólido mais simples, que apresenta características semelhantes a dos reatores de leito fluidizado circulante, é o transporte pneumático vertical. Esta é uma situação onde a concentração de partículas é baixa e com uma distribuição radial praticamente uniforme. Para sistemas diluídos o contato partícula-partícula pode ser desprezado e assim o pseudo-fluido (fase particulada) pode ser tratado como invíscido. Devido a relativa simplicidade deste sistema e fácil convergência, será utilizado na avaliação das características numéricas das aproximações. Para uma malha relativamente grosseira ($20 \times 10 \times r$) os algoritmos SIMPLE e SIMPLEC foram comparados em termos de taxa de convergência e flexibilidade dos parâmetros de relaxação (neste caso, passo de tempo). A Tabela 6.2 mostra as características do sistema. As características foram apresentadas em termos das variáveis a serem resolvidas. A Tabela 6.3 mostra as condições de contorno para o sistema. Para este caso, analisa-se o sistema com entrada e saída axial.

Tabela 6.2 - Características do sistema do caso 1

Raio do Tubo (m)	0,016
Altura (m)	5,11
Velocidade do gás (m/s)	15,6
Densidade do gás (kg/m^3)	1,16
Viscosidade do gás (kg/m.s)	$1,85 \times 10^{-5}$
Fração volumétrica de sólidos	0,0013
Velocidade do sólido (m/s)	13,9
Densidade do sólido (kg/m^3)	1020
Diâmetro das partículas (m) * 10^{-6}	200
Fração volumétrica máxima de partículas	0,5
Esfericidade das partículas	1
Reynolds da partícula	21,32
Reynolds do tubo (gás)	31207,29

Tabela 6.3 - Condições de contorno para o caso 1

	entrada	saída	simetria	parede
$v_{g,z}$	v_{g0}	$\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial v_z}{\partial r} = 0$	$v_z = 0$
$v_{g,r}$	0	0	0	0
P'	$\frac{\partial P'}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial r} = 0$
k	$k_0 = 0,005v_0^2$	$\frac{\partial k}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial k}{\partial r} = 0$	função de parede + $k = 0$
ε	$\varepsilon_0 = \frac{0,009k_0^{1,5}}{0,03R}$	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = 0$	função de parede + $\varepsilon = 0$
ε_s	$\varepsilon_{s,0}$	$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial r} = 0$
$v_{s,z}$	v_{s0}	$\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial v_z}{\partial r} = 0$	$v_z = 0$
$v_{s,r}$	0	0	0	0

6.1.1 - Comparação dos algoritmos SIMPLE x SIMPLEC

Iniciou-se a análise numérica buscando-se informações sobre a eficiência relativa dos algoritmos SIMPLE e SIMPLEC, na solução do problema do escoamento gás-sólido. De antemão, sabe-se que o algoritmo SIMPLEC para sistemas nos quais o termo fonte é significativo, como é o nosso caso, seria mais eficiente. Para verificar este fato, o escoamento gás sólido diluído foi escolhido, devido a sua semelhança com o CFB e devido a sua simplicidade. A simplicidade neste caso deve-se ao fato de que como o sistema é diluído, não há concentração de partículas próximo a parede e, conseqüentemente, não existe recirculações internas. O modelo invíscido pode ser assumido para a fase particulada. A Figura (6.3) mostra o tempo de execução em função do passo de tempo usado como relaxação na solução via transiente distorcido. Os resultados foram obtidos com uma malha de 20 x 10 (r x z) volumes internos, uniformemente distribuídos e o esquema de interpolação "upwind" para todas as variáveis foi utilizado na solução numérica. As curvas foram obtidas

sem nenhum outro tipo de relaxação para todas as variáveis, exceto aquela via transiente distorcido.

Como pode-se observar da Figura (6.3), é visível a superioridade do SIMPLEX sobre o SIMPLE, para este caso. O SIMPLEX apresenta um tempo de execução ótimo melhor do que o ótimo do SIMPLE e funciona numa maior faixa de passo de tempo (é mais estável). Diante disto, o algoritmo SIMPLEX foi utilizado em todas as análises que seguem.

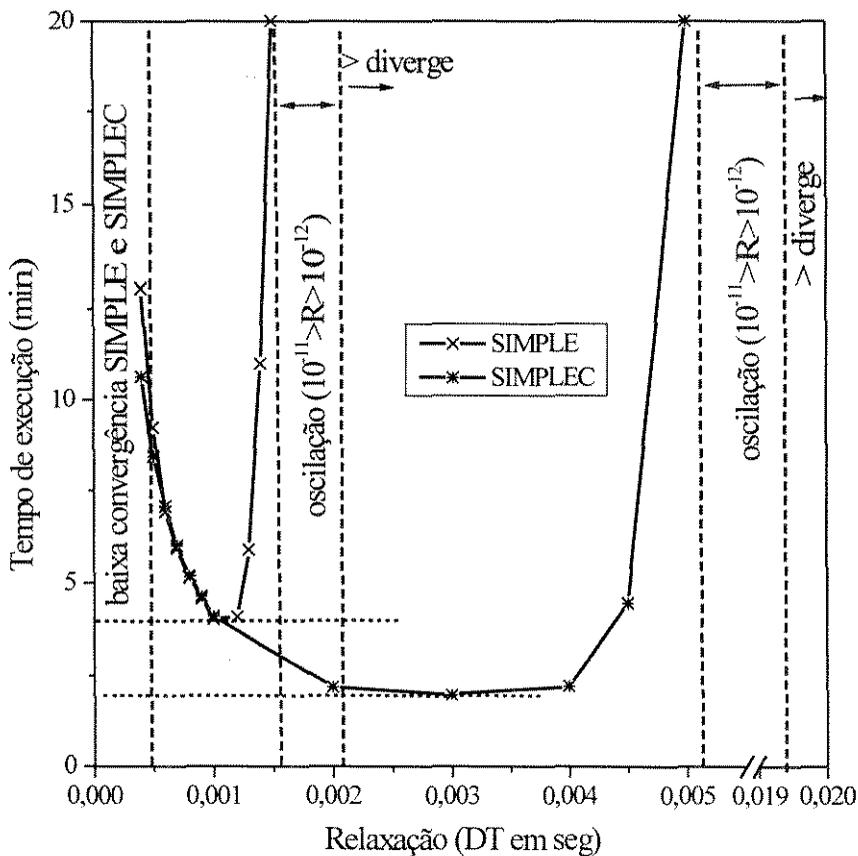


Figura 6.3 - Eficiência relativa dos algoritmos SIMPLE e SIMPLEX.

6.1.2 - “Upwind” x Híbrido x “Power-law”

Sabe-se que as soluções numéricas podem ser contaminadas por erros de aproximação devido as aproximações que são feitas através dos esquemas de interpolação. Compara-se os resultados obtidos com os esquemas “upwind”, híbrido e “power-law”. Para ilustrar o efeito destes esquemas, o perfil de velocidade axial do gás e das partículas na saída do reator são

mostrados nas Figuras (6.4) e (6.5), respectivamente. Para este caso especificamente, o que observa-se é o problema da difusão numérica não é tão acentuado. Todos os esquemas dão o mesmo resultado. O algoritmo SIMPLEC foi utilizado na solução numérica. Para este caso particularmente, mesmo para malhas grosseiras, os três esquemas dão o mesmo resultado. O tempo de execução para os três esquemas, mostrados na Tabela 6.4, para uma malha de 20×10 ($r \times z$) volumes internos, também é praticamente o mesmo. Portanto, com relação aos esquemas de interpolação, qualquer um entre os verificados poderia ser utilizado sem perda de precisão nos resultados, para este caso particularmente. Esta conclusão, entretanto, não pode ser estendida a todos os casos e por isto esta mesma análise será feita para aquelas situações onde alta concentração de partículas e elevados gradientes nos perfis das variáveis estão presentes, tornando o problema da difusão numérica mais acentuado.

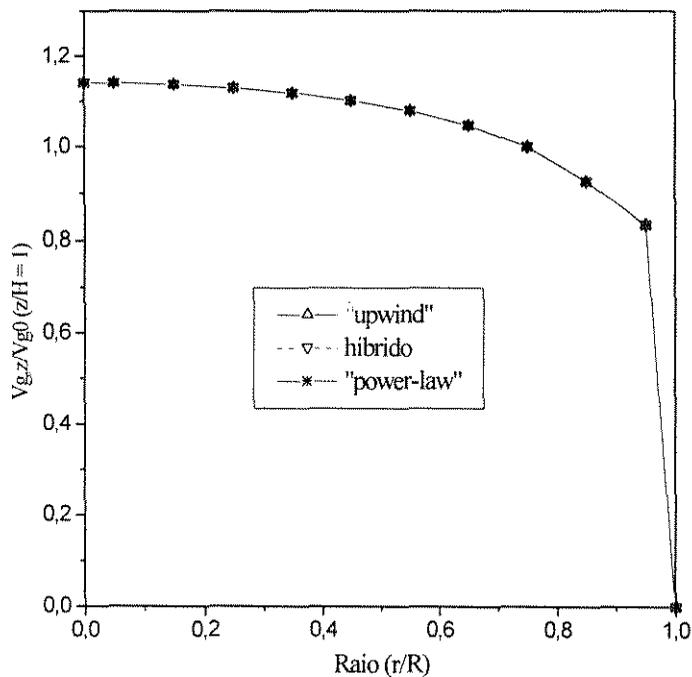


Figura 6.4 - Velocidade axial do gás na saída: Efeito do esquema de interpolação.

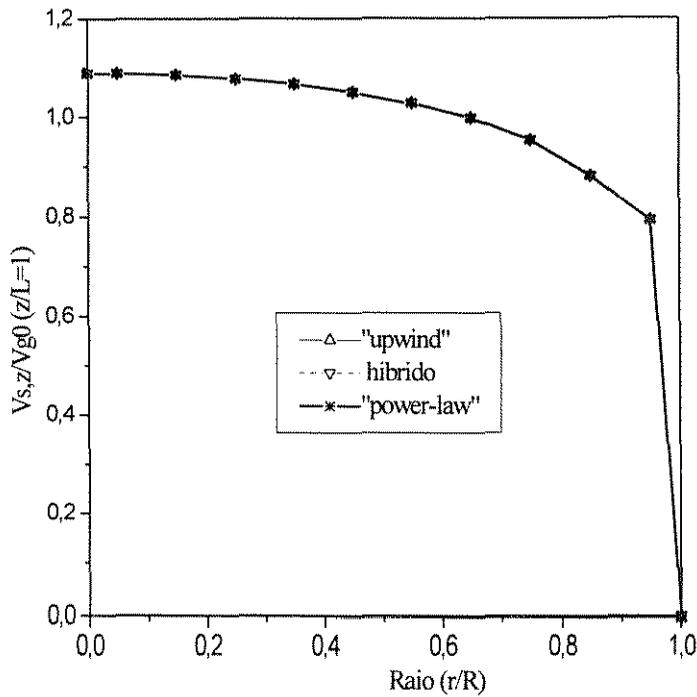


Figura 6.5- Velocidade axial da partícula na saída: Efeito do esquema de interpolação.

Tabela 6.4 - Tempos de execução para os diferentes esquemas e algoritmos.

Malha: 20 x 10 (z x r)	Tempo de execução (minutos)	
	SIMPLE	SIMPLEC
esquema		
“upwind”	4,02	4,10
híbrido	4,06	4,08
“power-law”	4,17	4,33

6.1.3 - Dependência com a malha

Como discutido no capítulo de concepção e testes, a queda de pressão foi definida como a função global a ser usada na análise de dependência da solução com a malha. A Figura (6.6) mostra a variação desta função com a malha utilizada, para o caso 1 em análise. Observa-se que a queda de pressão total é uma função realmente bem mais sensível do que, por exemplo, a velocidade axial do gás na saída (Figura (6.7)) e a concentração de sólidos

também na saída (Figura (6.8)). Estas curvas de perfis de concentração de partículas e velocidade axial do gás foram obtidas para a menor e maior malha usadas na Figura (6.6). Enquanto a queda de pressão total variou cerca de 60% em relação a malha mais grosseira ($(|\phi_i - \phi_{ii}|/|\phi_{ii}|)$) a variação na velocidade axial na saída, no centro do tubo, foi de aproximadamente 5%, enquanto a de fração volumétrica de sólidos foi de 22%.

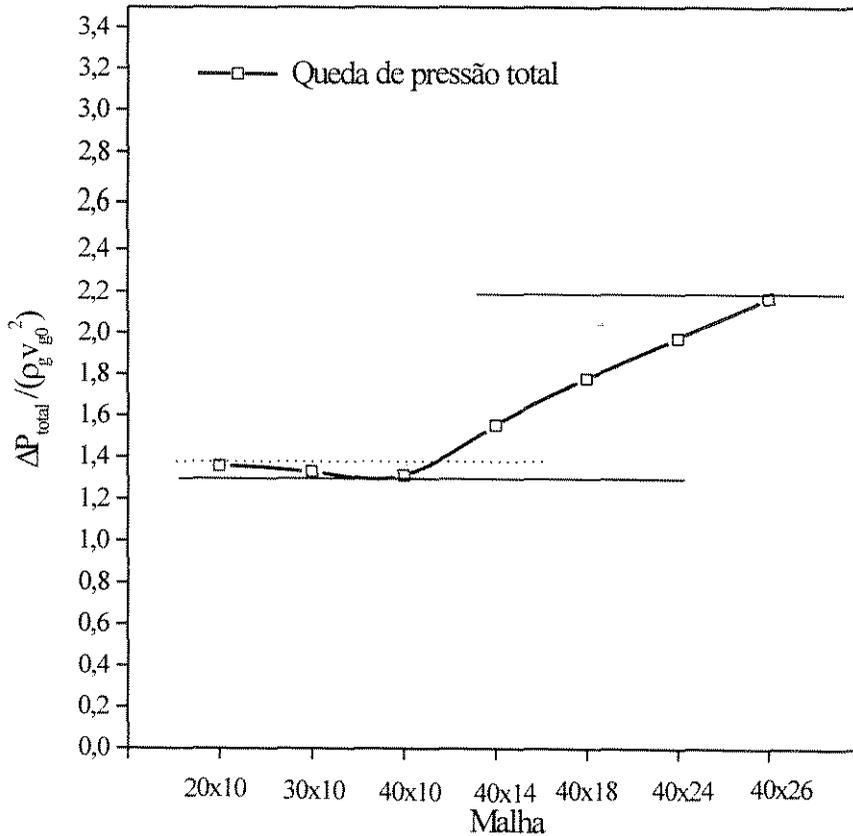


Figura 6.6 - Queda de pressão total

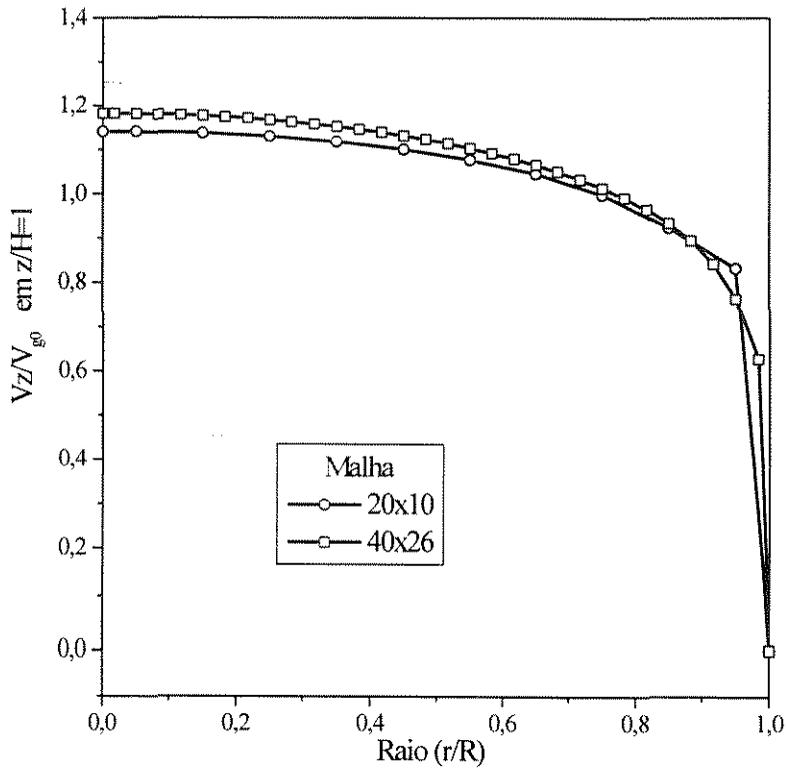


Figura 6.7 - Efeito da malha sobre velocidade axial do gás.

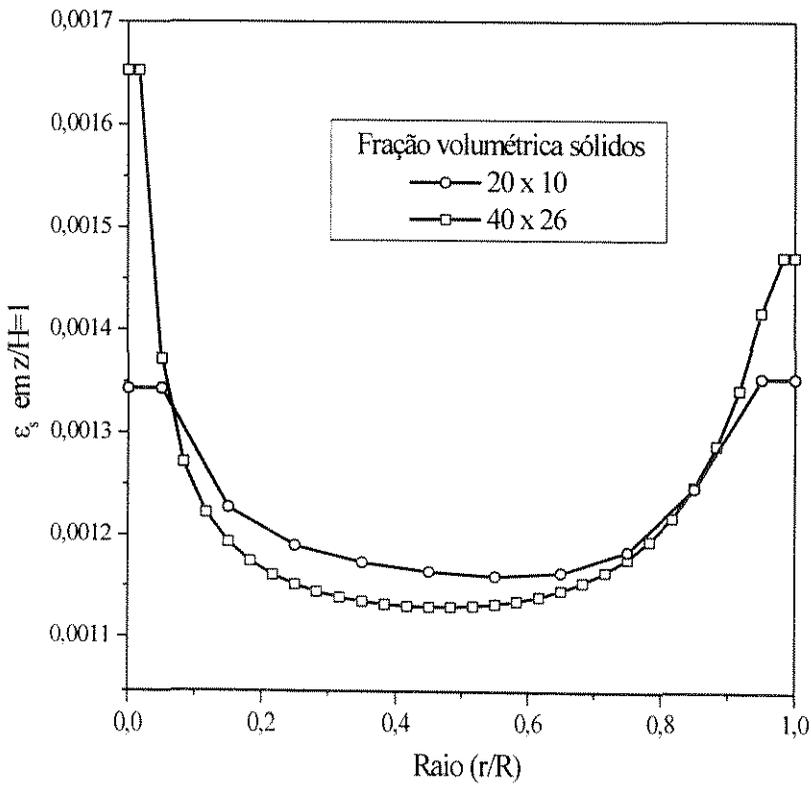


Figura 6.8 - Efeito da malha sobre a fração volumétrica de sólidos na saída do tubo.

Das Figuras (6.6) a (6.8), conclui-se que a obtenção de soluções totalmente independentes da malha, para este tipo de problema é um tanto difícil, principalmente quando se analisa a Figura (6.6), a dependência da queda de pressão total com a malha. Entretanto, das Figuras (6.7) e (6.8), observa-se que a sensibilidade de outras variáveis com a malha é menor de forma que, o truncamento pode ser feito, em favor de um menor tempo de computação ou como veremos nos casos seguintes, limitados pelo equipamento, mas sem perda de confiabilidade dos resultados.

6.1.5 - Comparação com dados experimentais

Os resultados numéricos para este caso foram comparados com dados experimentais disponíveis na literatura (TSUJI, 1983). A Figura (6.9) mostra a velocidade axial do gás e das partículas na saída do tubo ($z/H=1$). Observa-se que, para este caso, o modelo invíscido para a fase particulada é suficiente para termos uma boa aproximação da solução, pois tem-se uma excelente concordância da solução numérica com os dados experimentais, para os componentes axiais de velocidades do gás e das partículas. Isto já era esperado, devido a baixa taxa de alimentação de partículas. Dados experimentais para outras variáveis como pressão e concentração das fases, não constavam na referência (TSUJI et al, 1983) e por isto não são comparados.

Observa-se dos dados experimentais da Figura (6.9), que a presença do sólido, mesmo em baixa concentração, provoca uma pequena redução no máximo de velocidade, em relação ao escoamento do gás puro, fato que foi detectado também pelo modelo, como pode-se observar comparando-se as Figuras (6.9) e (5.18). O registro desta observação, neste ponto, deve-se ao fato de que como veremos, para situações de alta concentração de partículas, este máximo, ao invés de diminuir, eleva-se em relação ao do gás puro, chegando, dependendo da situação (recirculação interna), a 2 ou 3 vezes a velocidade média.

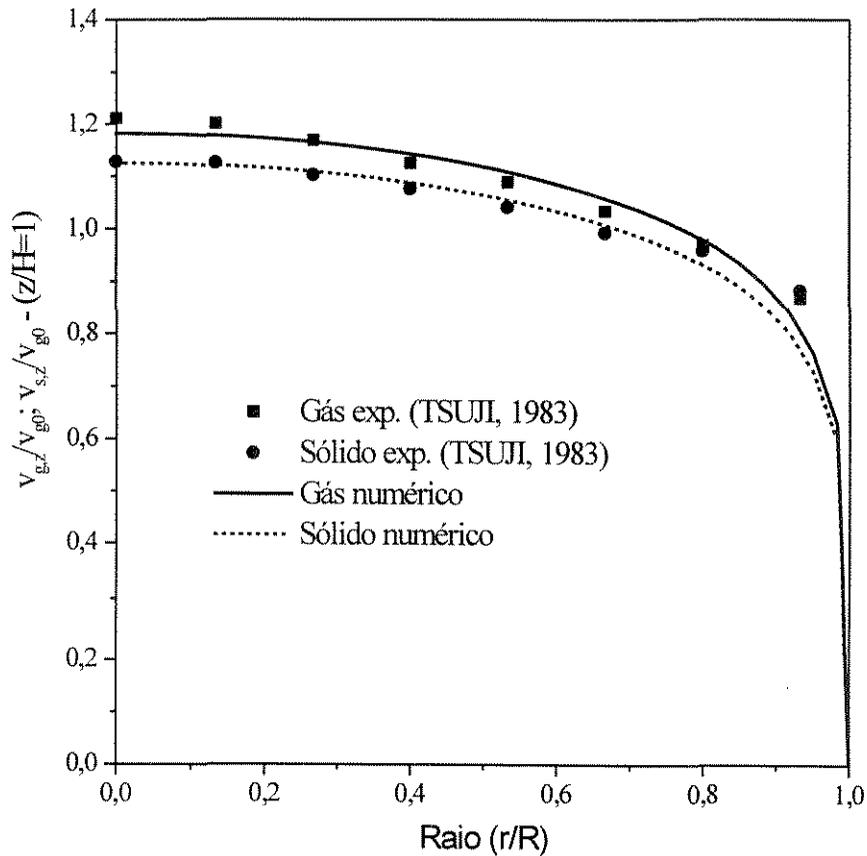


Figura 6.9 - Comparação dos numéricos com experimentais, para o componente axial da velocidade.

6.1.6 - Resultados de Simulação - Padrão do Escoamento

Para ilustrar a capacidade de previsão do comportamento fluidodinâmico, apresenta-se os mapas de contorno das variáveis fluidodinâmicas básicas (componentes de velocidade das fases, pressão e concentração) e de outras propriedades do escoamento (energia cinética turbulenta e taxa de dissipação desta). Os resultados foram obtidos com a malha de 40x26, cuja história da convergência é mostrada na Figura (6.10).

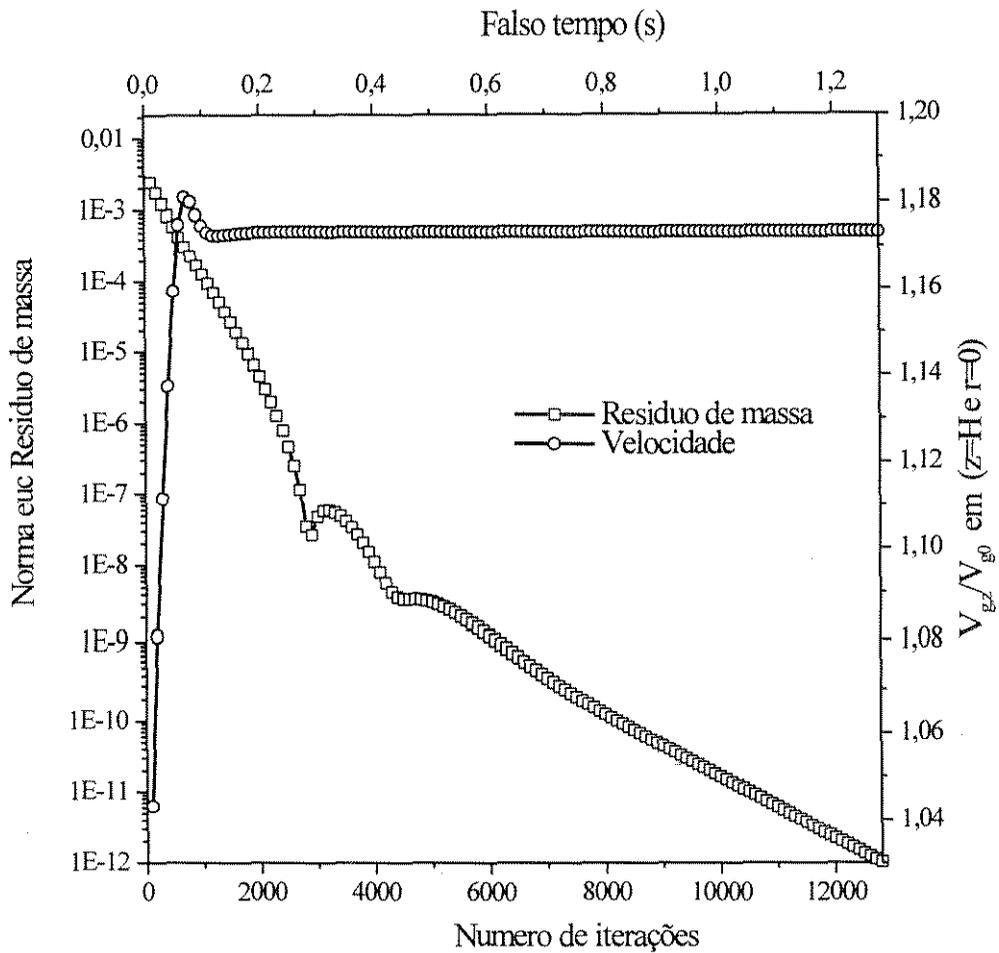


Figura 6.10 - História da convergência para o caso 1.

Um comentário sobre a convergência mostrada na Figura (6.10) torna-se conveniente neste ponto. Observa-se que para a norma euclidiana da fonte de massa ser reduzida à 10^{-8} foram necessárias, aproximadamente, 3000 iterações e a esta altura a velocidade axial e provavelmente outras variáveis, já haviam estacionadas, de forma que as 9000 iterações seguintes até atingir o resíduo de 10^{-12} , são desnecessárias e para os casos seguintes, como critério de convergência global utilizou-se a norma euclidiana da fonte de massa menor que 10^{-8} .

As Figuras (6.11) a (6.21) mostram os mapas de contorno das variáveis fluidodinâmicas para o caso 1. Estes resultados serão comparadas com os de outros casos simulados neste trabalho.

A Figura (6.11) mostra que o modelo prevê uma maior concentração de partículas no centro do tubo, embora a variação radial na concentração de partículas seja pequena, como é característico dos transportadores pneumáticos.

A Figura (6.12) mostra que o mesmo acontece com a pressão do gás, ou seja, pequenas variações radiais nesta. Neste caso, isto acontece por que a partir de z/H aproximadamente igual a 0,2 os perfis de velocidade da fase gás, que determinam a distribuição de pressão desta fase, já foram praticamente desenvolvidos, como pode ser visto das Figuras (6.13) e (6.14). Poderia acontecer também de, como será visto em casos futuros, termos pequena variação radial da pressão, mas elevados gradientes nesta direção, devido ao pequeno raio do tubo.

Comparando-se as Figuras (6.15), (6.16) e (6.17), observa-se que associado à alta turbulência (áreas indicadas nestas figuras) está uma alta taxa de dissipação desta, de forma que a viscosidade efetiva naquelas regiões de alta turbulência é menor inclusive do que em outras áreas de menor turbulência, de forma tal que esta alta turbulência associada a altas taxas de dissipação não contribui para um aumento da viscosidade efetiva e da dispersão de quantidade de movimento.

A Figura (6.18) mostra as linhas de corrente da fase gás revelando que este é um problema sem tendência a recirculações internas.

As figuras (6.19) e (6.20) mostram os perfis axial e radial, respectivamente, da velocidade da fase particulada. Para este caso, a força de arraste é dominante no movimento da fase particulada, de forma que a velocidade do gás praticamente atinge a da partícula. Devido a esta predominância da força de arraste as partículas seguem praticamente o movimento do gás, de forma tal que estas também não apresentam tendência a recirculações, como pode ser visto da Figura (6.21), as linhas de corrente da fase particulada.

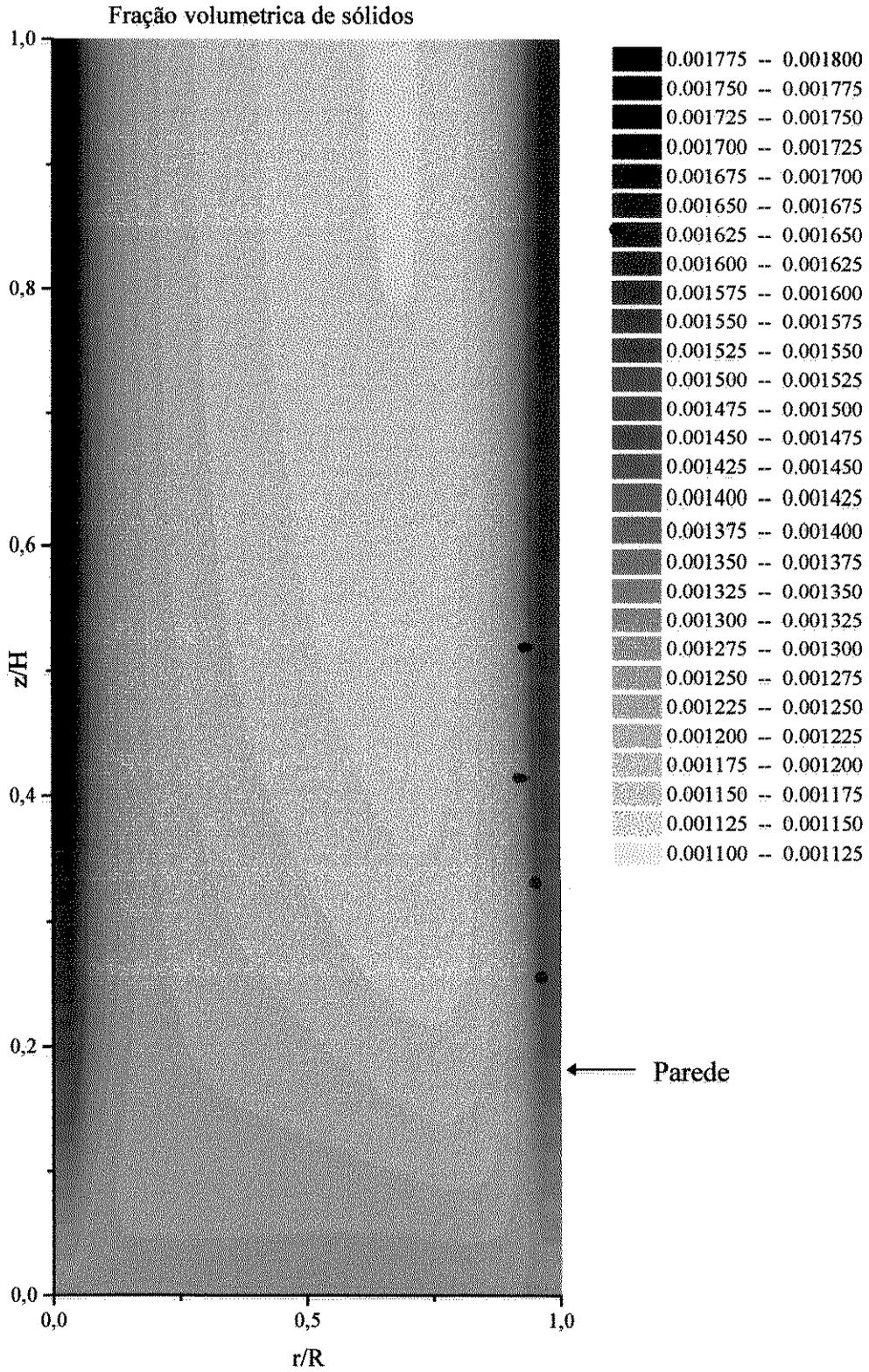


Figura 6.11 - Concentração de partículas

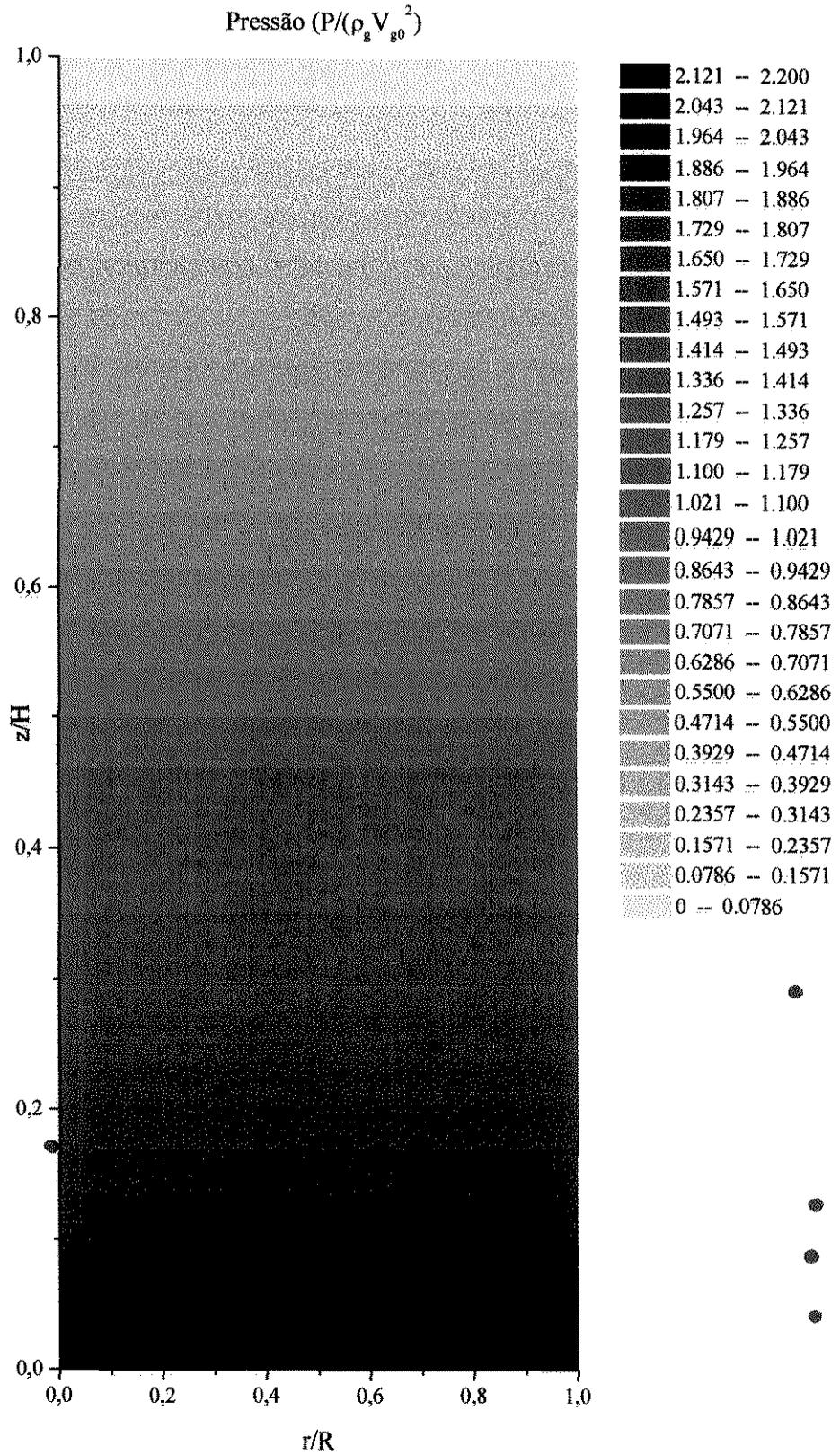


Figura 6.12 - Pressão do gás

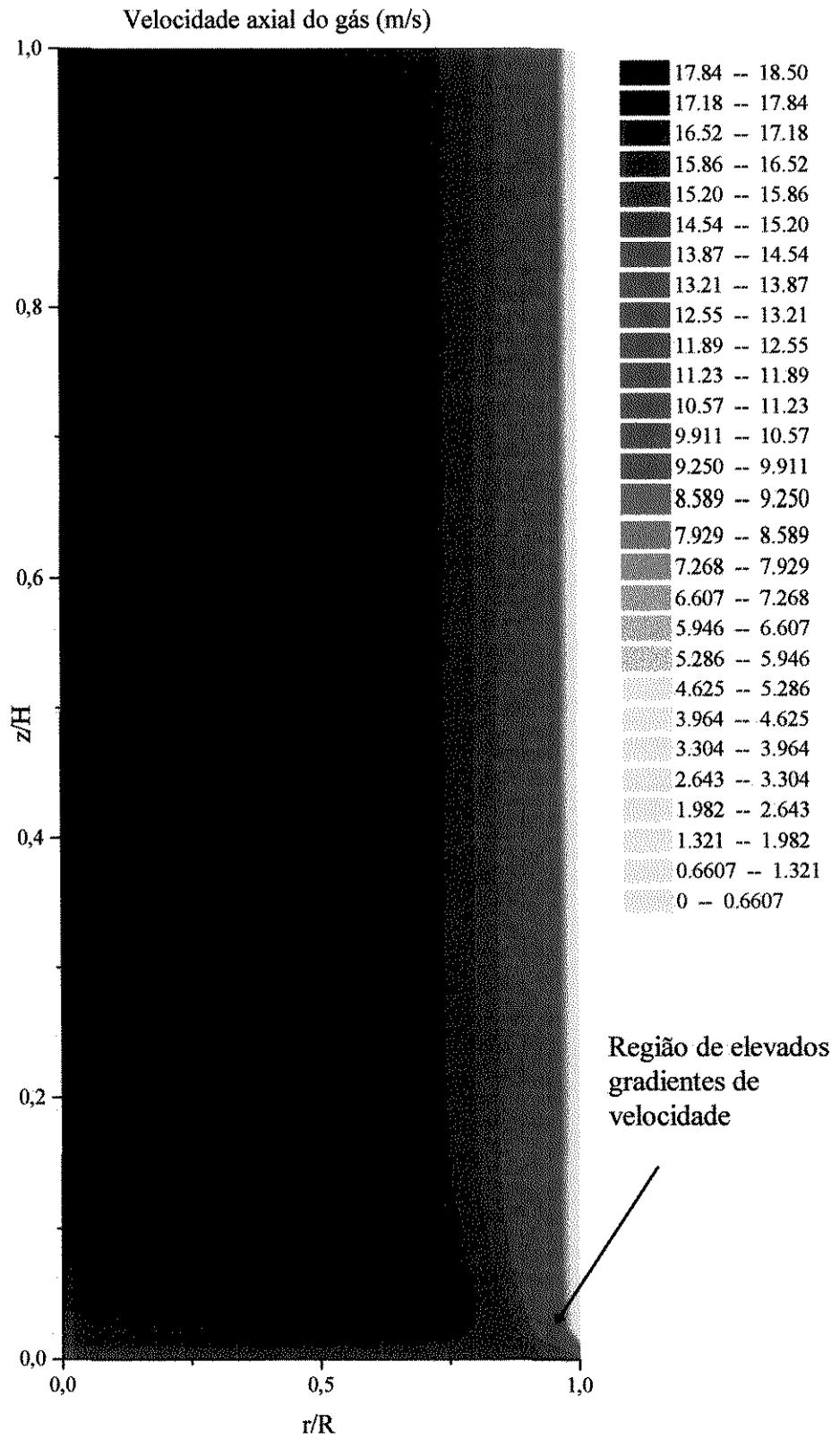


Figura 6.13 - Velocidade axial do gás

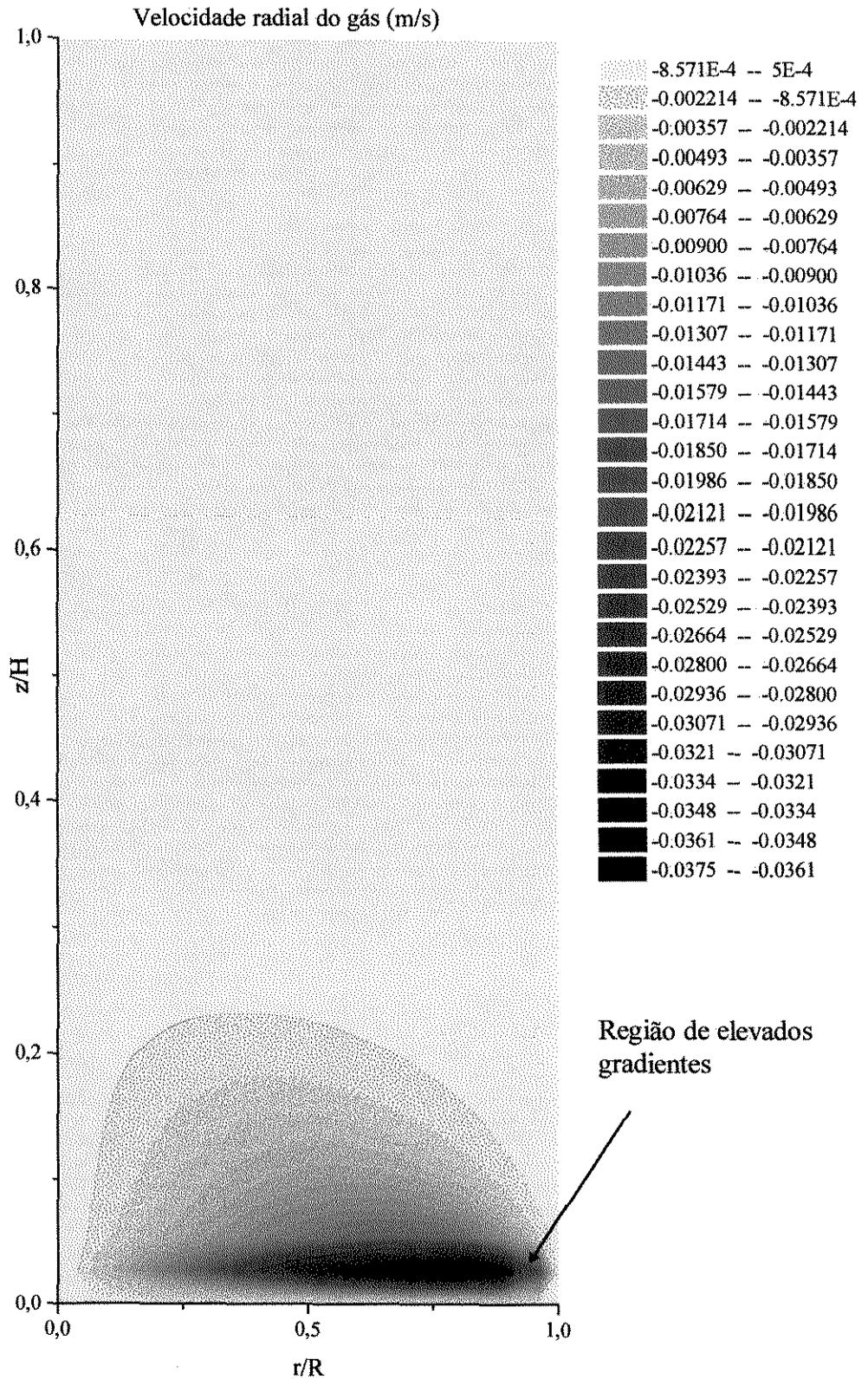


Figura 6.14 - Velocidade radial do gás

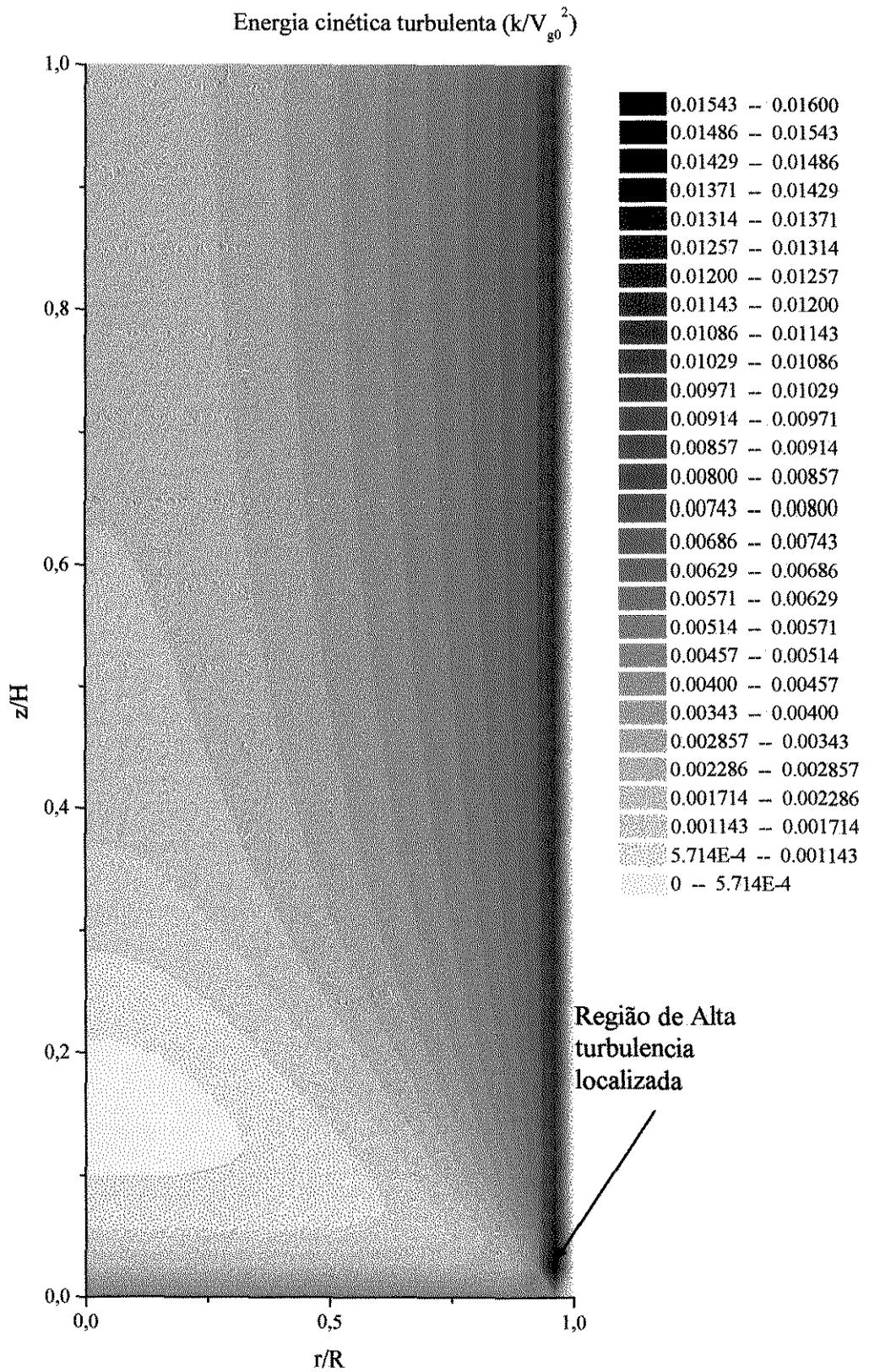


Figura 6.15 - Energia cinética turbulenta

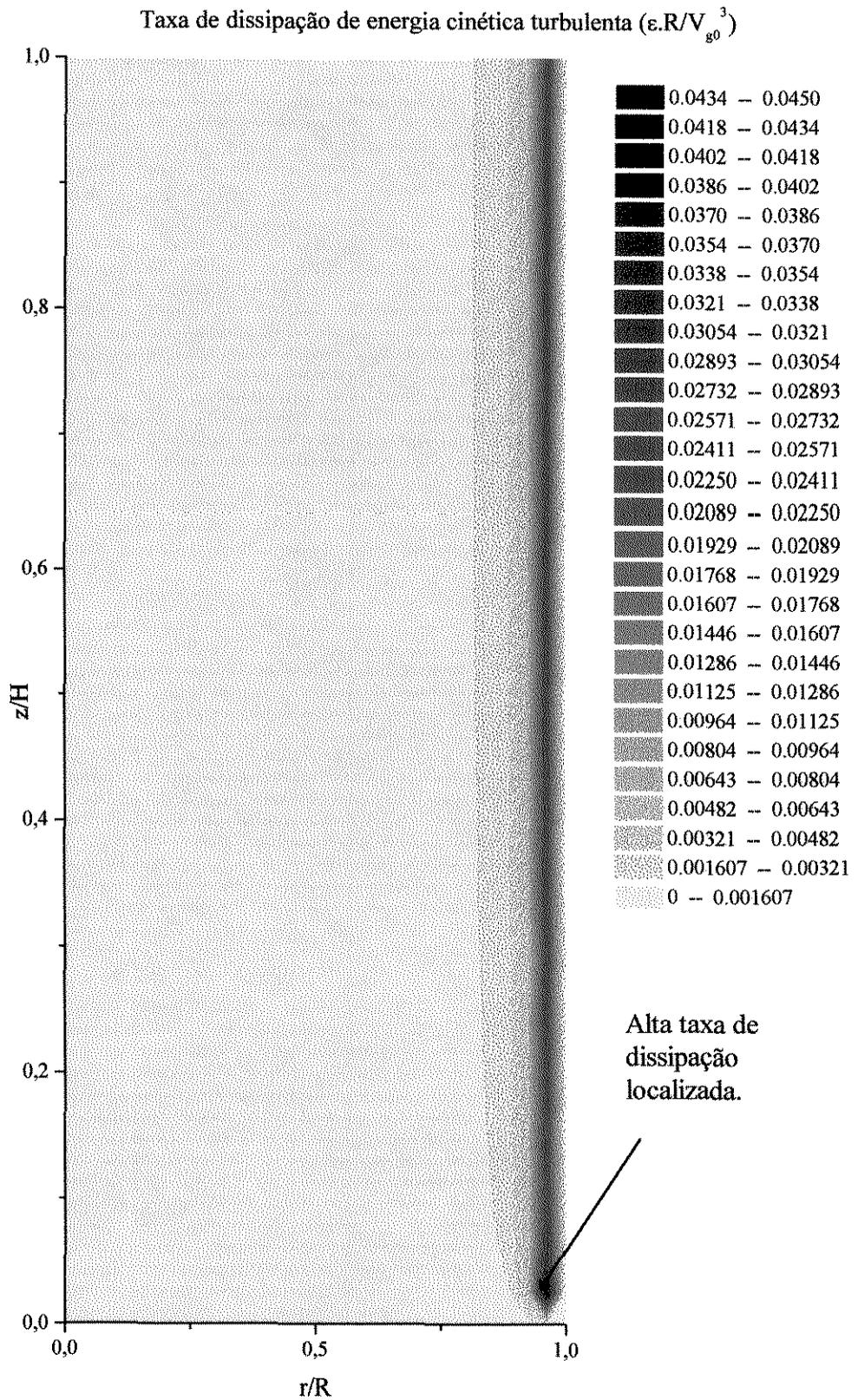


Figura 6.16 - Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta

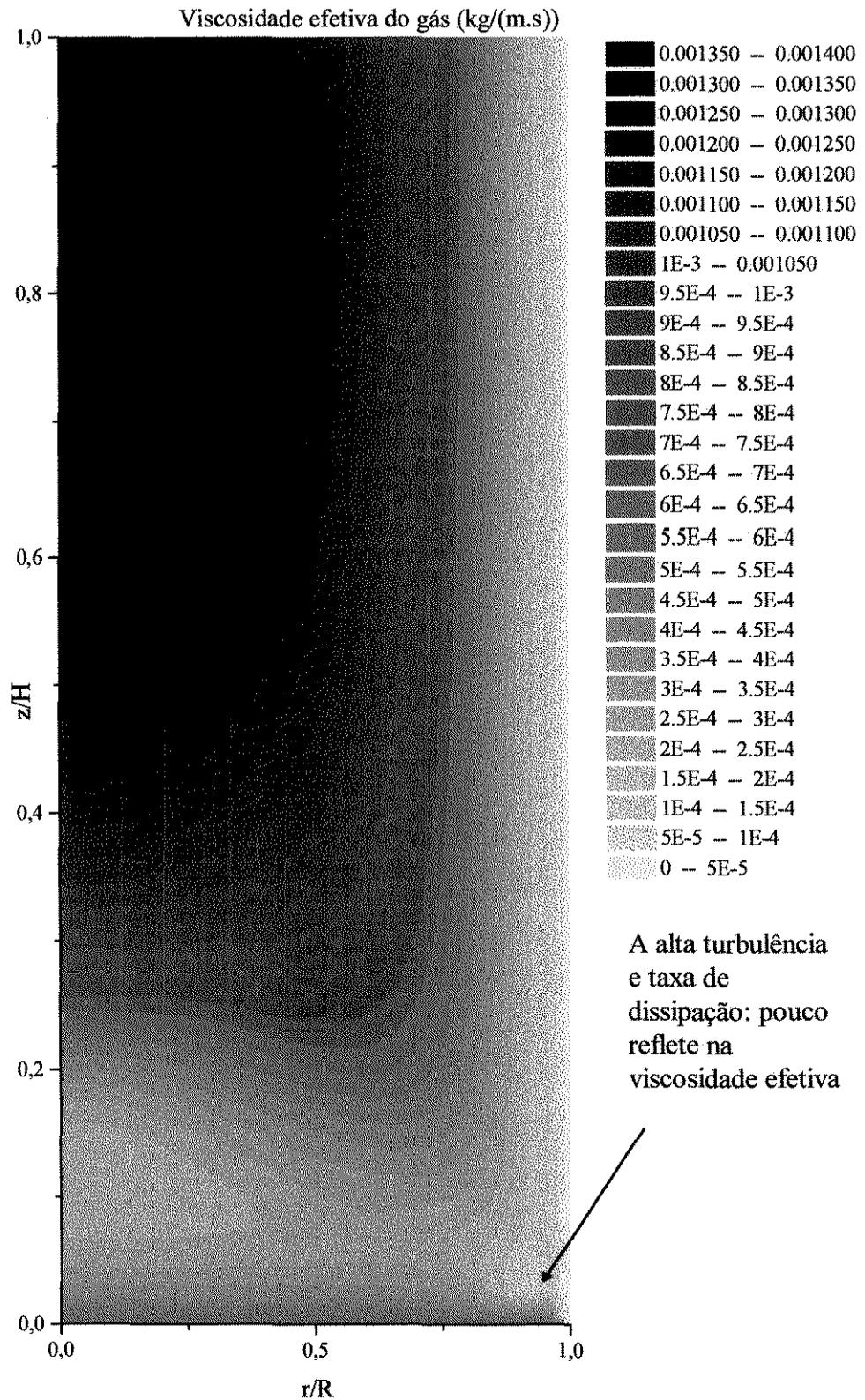


Figura 6.17 - Viscosidade efetiva da fase gasosa

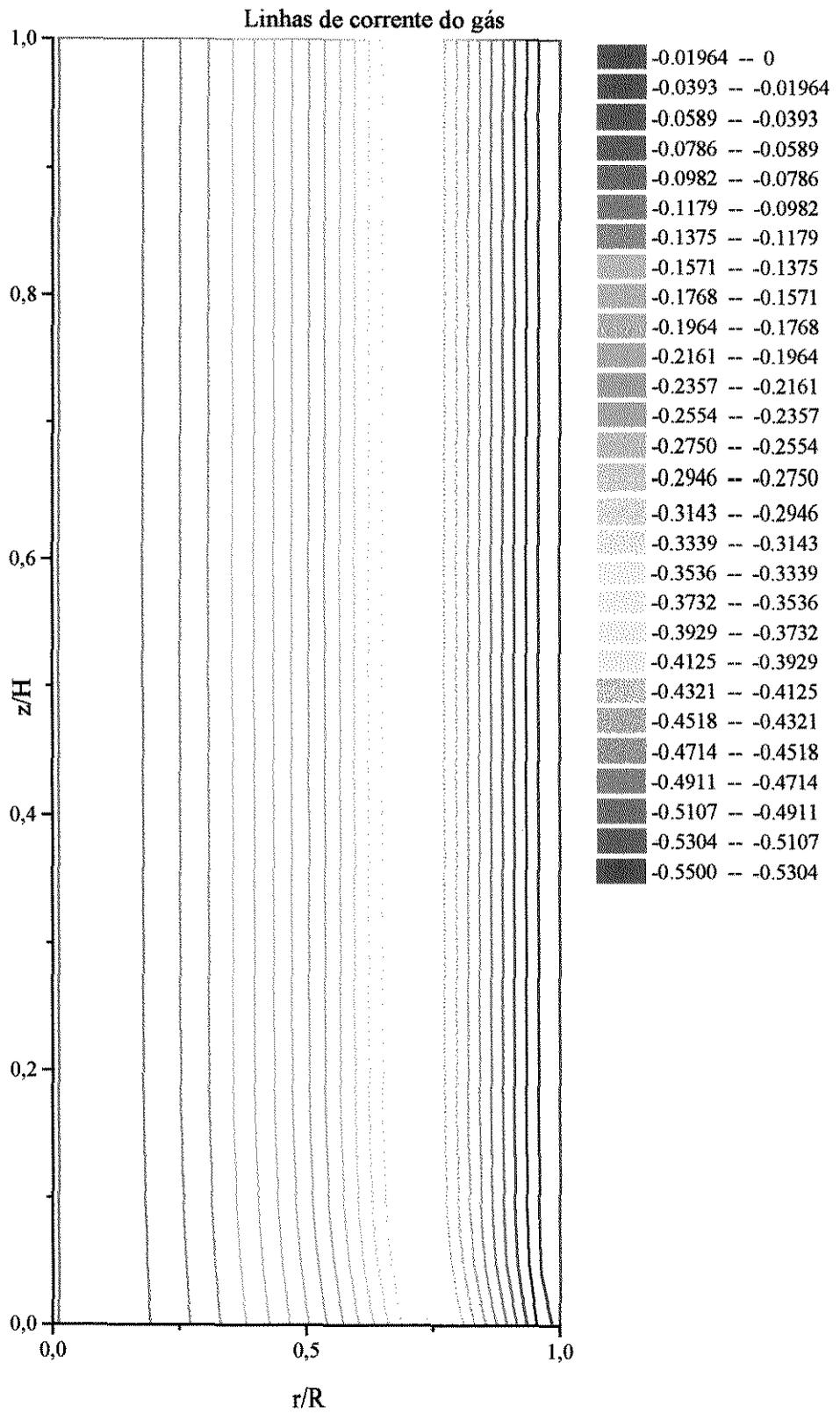


Figura 6.18 - Linhas de corrente do gás

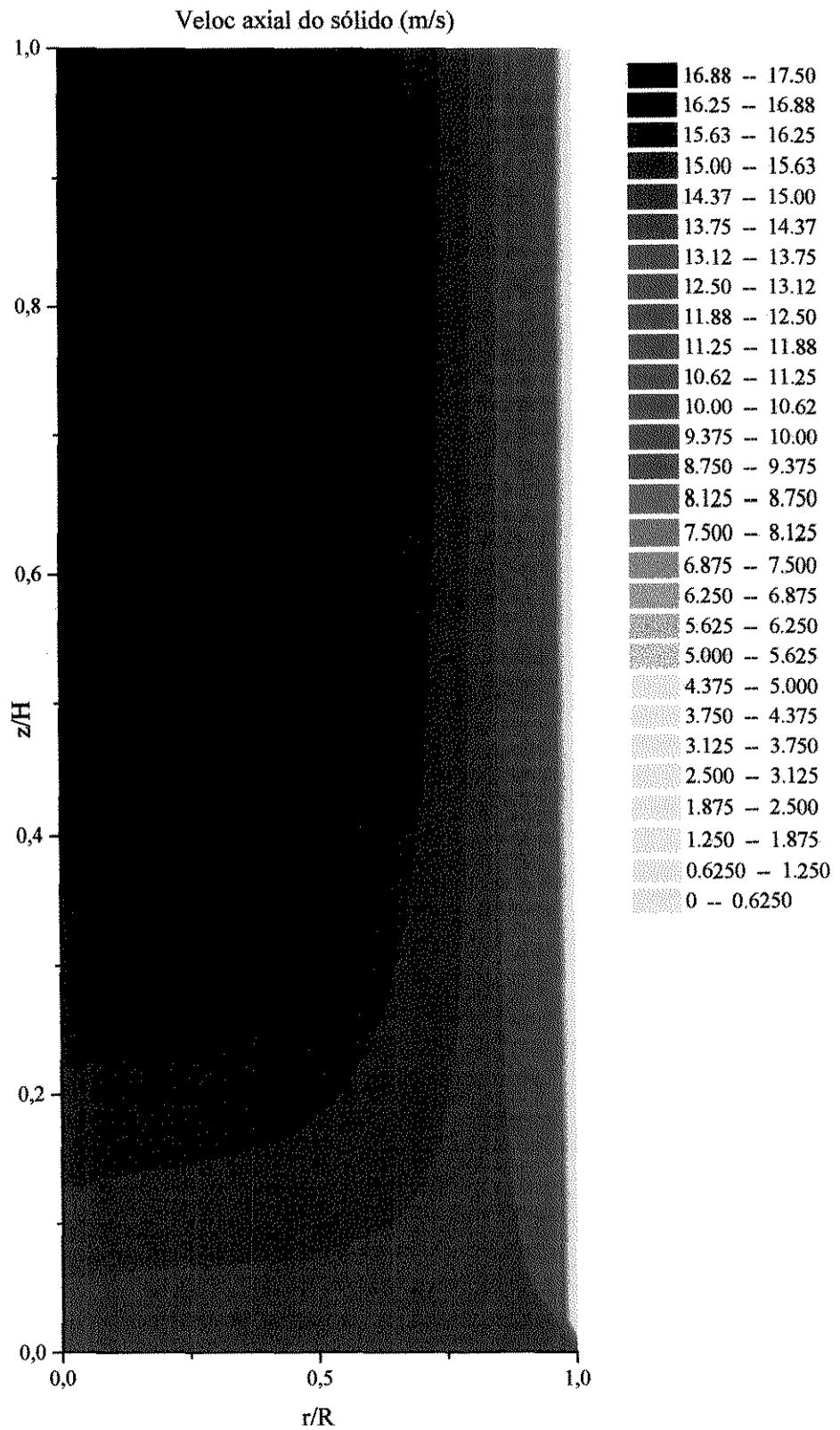


Figura 6.19 - Velocidade axial do sólido

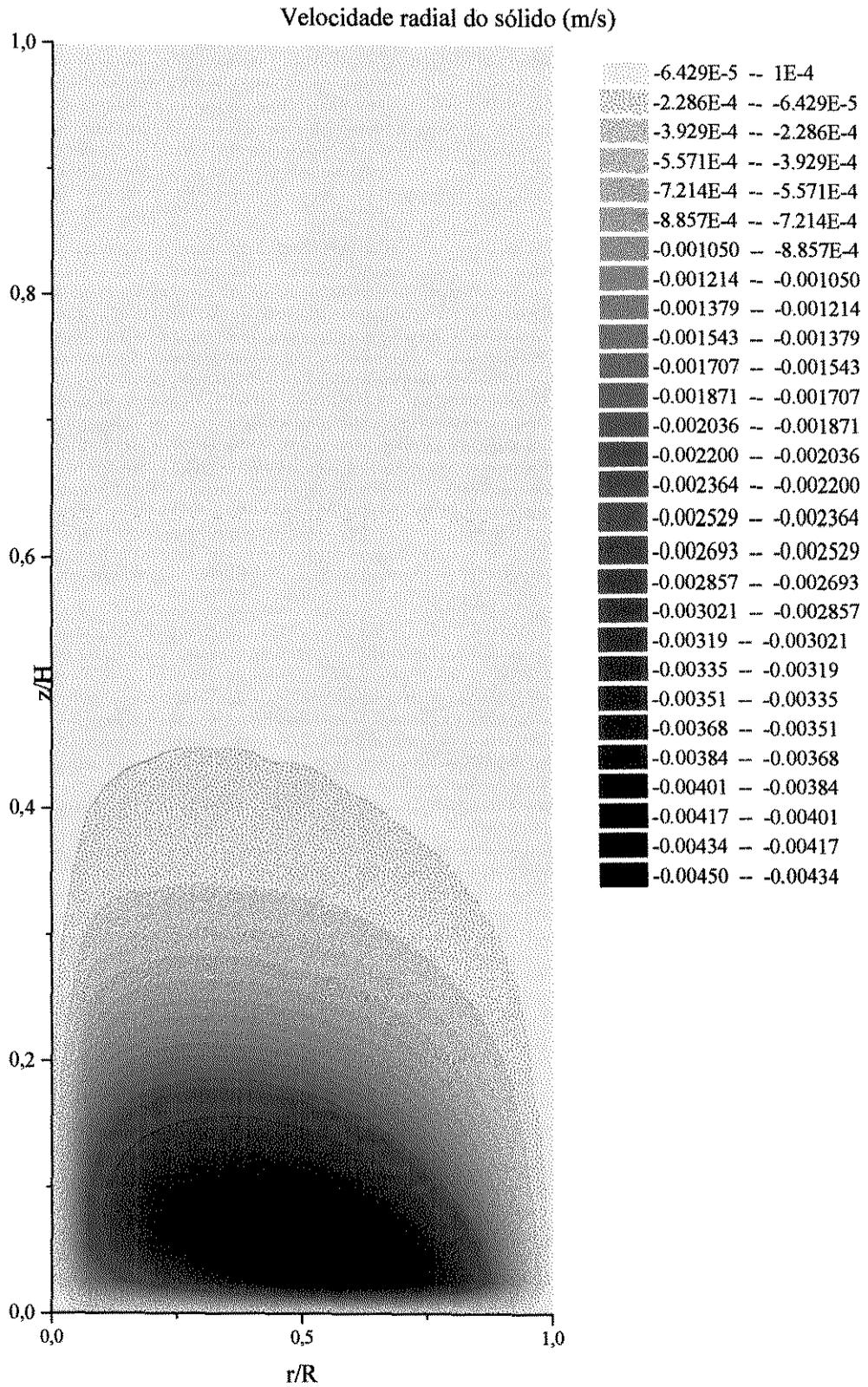


Figura 6.20 - velocidade radial do sólido.

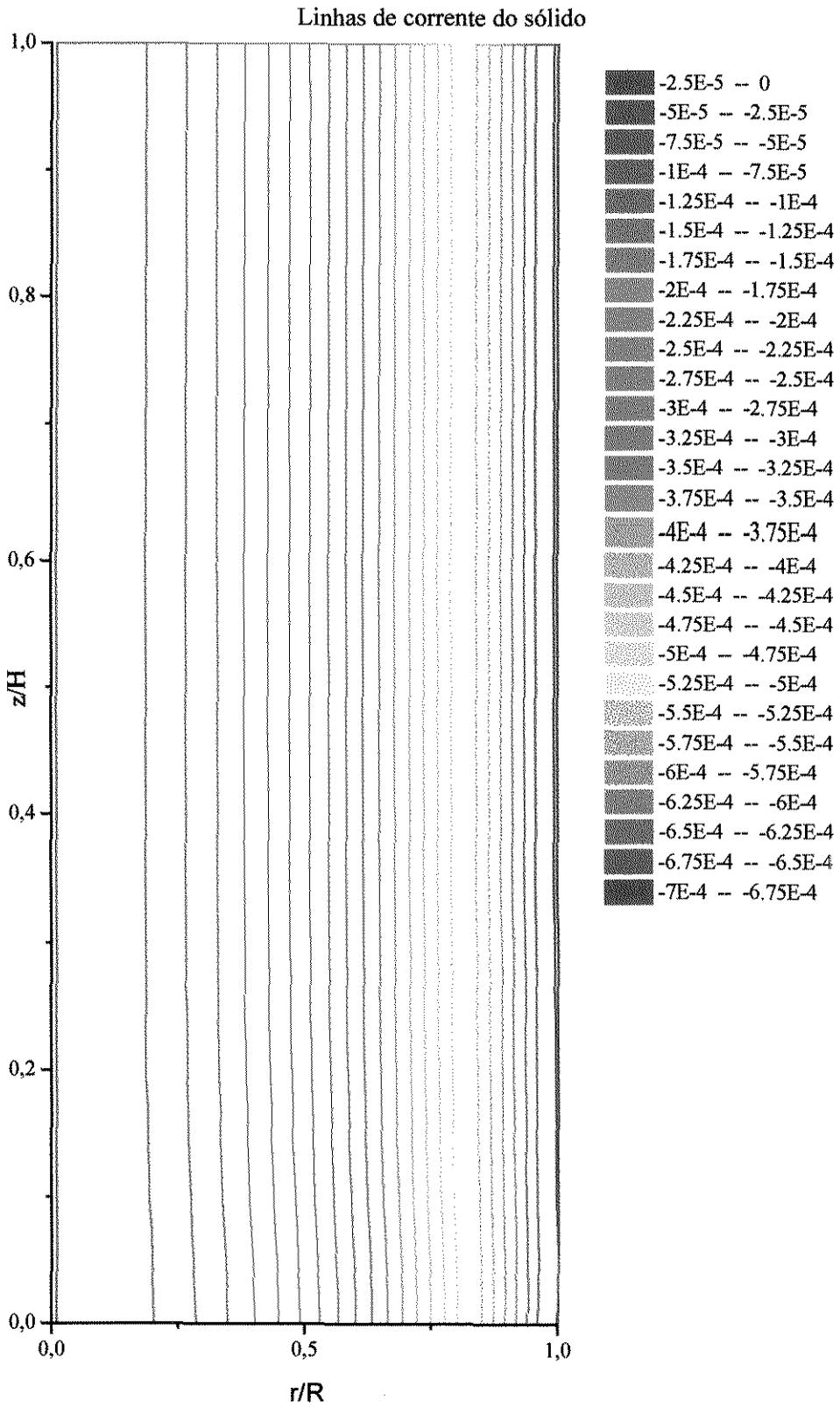


Figura 6.21 - Linhas de corrente do sólido

Comentários: este caso de baixa concentração de partículas serviu também como teste de concepção do programa e principalmente para mostrar a ausência de oscilações numéricas na concentração de partículas, bem como indicar a superioridade do algoritmo SIMPLEC sobre o SIMPLE, para este tipo de problema.

6.2 - Caso 2: “Riser” com partículas típicas de Unidades de Craqueamento Catalítico

O primeiro caso de interesse é aquele que simula as condições normalmente encontradas em unidades de FCC. Utilizamos este caso para fazer uma avaliação do efeito de parâmetros do modelo cinético do escoamento de materiais granulares na fluidodinâmica dos reatores de leito fluidizado circulante e para confirmar que o principal mecanismo que promove a alta concentração de partículas próximo à parede é a flutuação de velocidade da fase particulada (temperatura granular).

Tabela 6.5 - Características do sistema do caso 2

Raio do Tubo (m)	$R = 0.152$
Altura (m)	$H = 10,0$
Velocidade do gás (m/s)	$v_{g,0} = 3.78$
Densidade do gás (kg/m ³)	$\rho_g = 1.22$
Viscosidade do gás (kg/m.s)	$\mu_g^l = 4.0 \times 10^{-5}$
Fração volumétrica de sólidos	$\epsilon_{s,0} = 0.0218$
Velocidade do sólido (m/s)	$v_{s,0} = 2.62$
Densidade do sólido (kg/m ³)	$\rho_s = 1714$
Diâmetro das partículas (m) * 10 ⁻⁶	$d_p = 76$
Máxima fração volumétrica de sólidos	$\epsilon_{s,max} = 0.65$
Esfericidade	$\phi = 1$
Reynolds partícula	2,69
Reynolds tubo	34284,11

6.2.1 -Saída axial: Análise de Sensibilidade Paramétrica para o modelo cinético do escoamento de materiais granulares

Para este sistema, usando-se uma saída axial, analisou-se o efeito dos parâmetros do modelo na fluidodinâmica do processo. A análise com a saída axial, embora traga a possibilidade de termos uma situação fisicamente irreal com entrada de sólidos por cima, é necessária para isolar os efeitos da geometria na formação do perfil de concentração de partículas. Para esta situação, as condições de contorno, para a fase gasosa, são as mesmas dadas na Tabela 6.3, para o caso 1, porém, para a fase particulada, as condições são as dadas na Tabela 6.6.

Tabela 6.6 - Condições de contorno para o caso 2

	entrada	saída	simetria	parede
$v_{g,z}$	v_{g0}	$\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial v_z}{\partial r} = 0$	$v_z = 0$
$v_{g,r}$	0	0	0	0
P'	$\frac{\partial P'}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial P'}{\partial r} = 0$
k	$k_0 = 0,005v_0^2$	$\frac{\partial k}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial k}{\partial r} = 0$	função de parede + $k = 0$
ε	$\varepsilon_0 = \frac{0,009k_0^{1,5}}{0,03R}$	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = 0$	função de parede + $\varepsilon = 0$
ε_s	$\varepsilon_{s,0}$	$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial r} = 0$	Balanço Q.M. radial partícula
$v_{s,z}$	v_{s0}	$\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial v_z}{\partial r} = 0$	Balanço Q.M. axial partícula
$v_{s,r}$	0	0	0	0
T_g	$T_0 = \frac{1}{3}v_{s0}^2$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial r} = 0$	Balanço Energ. na parede

Para a geometria com saída axial, analisa-se a sensibilidade do modelo a parâmetros da teoria cinética dos materiais granulares. Ilustra-se a solução obtida para a esta geometria mostrando-se algumas variáveis fluidodinâmicas, para a combinação de parâmetros encontrada como ótima.

As condições de contorno para a temperatura granular na entrada e o valor dos coeficientes de restituição partícula-partícula e partícula parede e o coeficiente de atrito partícula-parede, são questões ainda em aberto na literatura, na utilização do modelo cinético do escoamento de materiais granulares. Para a temperatura granular de entrada, algumas diferentes condições são utilizadas, por exemplo:

1 - SAMUELSBERG and HJERTAGER (1996) assumem, sem justificativa, o valor zero.

2 - PITA and SUNDARESAN (1996) utilizam para o caso 1 aqui utilizado o valor de $30 \text{ m}^2/\text{s}^2$, com base em trabalhos que mediram experimentalmente este valor, o que para a velocidade da fase particulada na entrada, significaria que as flutuações de velocidade da partícula excedem a velocidade média da partícula.

3 - NIEUWLAND et al (1996) sugere que as flutuações de velocidade e a velocidade média sejam da mesma ordem.

Das três referências acima as duas últimas estão resolvendo o mesmo sistema. Preferiu-se o argumento da última citação entre as três anteriores, por que primeiro, os dados experimentais da literatura mostraram que as flutuações não são nulas como usado por SAMUELSBERG and HJERTAGER (1996) e segundo, porque como normalmente não se dispõe de medidas experimentais para este valor, ela mantém a consistência para qualquer caso analisado.

Com relação aos coeficientes de restituição partícula-partícula e partícula-parede, e ao coeficiente de atrito partícula-parede, sabe-se que estes pela própria definição, estão entre zero e um. Mas na verdade eles são dependentes do problema. Os valores comumente utilizados na literatura, para diferentes sistemas, são:

coeficiente de atrito partícula-parede: 0,5

coeficiente de restituição partícula-partícula: $0,9 < e < 1$

coeficiente de restituição partícula-parede: $0,5 < e_w < 0,9$

Alguns sistemas, como o caso 2 aqui analisado são altamente sensíveis a estes parâmetros, principalmente aos coeficiente de restituição partícula-partícula e partícula-parede. Sensibilidade idêntica foi observado por alguns autores (GIDASPOW, 1994) para o coeficiente de restituição partícula-partícula, o que é de fato um problema, pois é necessário uma definição precisa destes parâmetros para que se tenha resultados consistentes. Além de se confirmar a sensibilidade a estes parâmetros, mostra-se que este sistema é sensível também ao coeficiente de restituição partícula-parede e a especificação da temperatura granular de entrada, embora para este último assumimos que ela seja proporcional à velocidade da fase particulada.

Ainda para este caso faz-se uma análise do método de interpolação e obtenção da velocidade da fase particulada nas faces, comparando-se os resultados quando interpola-se a velocidade propriamente dita linearmente e quando se interpola as equações de conservação do momentum da fase particulada para se obter a velocidade nas faces. MEIER et al (1997) mostraram que o arranjo co-localizado pode resultar em oscilações numéricas, fato mais acentuado na concentração de partículas. Mostra-se que esta oscilação pode ser eliminada por uma adequada interpolação da velocidade

A Tabela 6.7 mostra as combinações de parâmetros usadas para ilustrar a sensibilidade do modelo a estes.

Tabela 6.7: Combinação de parâmetros

caso	a	b	c	d	e	f	g*	h	i
e	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	0,9999	0,999
e _w	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	0,95	0,9	0,9	0,9
Φ _w	1,0	1,0	1,0	0,1	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
T ₀ (m ² /s ²)	23	0,0	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3

As Figuras (6.22) a (6.25) mostram o efeito da variação dos parâmetros sobre a solução do modelo fluidodinâmico do CFB, para as condições especificadas na Tabela 6.6, em $z/H=0,9$. Os resultados foram obtidos utilizando-se uma malha uniforme de 20×14 ($r \times z$) volumes internos e, como critério de convergência, utilizou-se a norma euclidiana da fonte de massa em relação a vazão mássica de entrada menor que 10^{-8} . Utilizou-se um passo de tempo de 10^{-3} segundos para todas as variáveis, e a solução de estado estacionário foi obtida via falso transiente. Os resultados numéricos foram comparados com dados experimentais obtidos por Bader (círculos cheios, Figuras (6.22) e (6.24)), apresentados por NIEUWLAND *et al* (1996). Observa-se, que as partículas tendem a concentrar-se nas regiões de menor temperatura granular, um alto grau de sensibilidade do modelo ao coeficiente de restituição partícula-partícula, menos ao coeficiente de restituição partícula-parede e pouca ao coeficiente de atrito partícula-parede (Φ_w), e também que a temperatura granular de entrada influencia a solução. A Figura (6.22) mostra que quanto menor “ e_w ” (quanto menos elástica as colisões partícula-parede) maior a concentração de partículas próximo a parede. Em relação ao coeficiente de restituição partícula-partícula, o valor $e=1$ é o que dá melhores resultados (as colisões partícula-partícula são, para o caso estudado, praticamente 100% elásticas). Quanto a temperatura granular de entrada, assumimos neste trabalho que as flutuações de velocidade da partícula são da mesma ordem da velocidade média das partículas ($T_0^* = v_{g,0}^2/3$) (NIEUWLAND *et al*, 1996). A combinação “g” é a que dá melhores resultados. Entretanto, variando-se T_0 em torno de T_0^* a solução é afetada. Por exemplo, aumentando-se a temperatura granular de entrada para $10T_0^*$, com os outros parâmetros dados no caso “a”, melhorou-se a concordância com os dados experimentais de concentração e velocidade das partículas. Conclui-se, então, que é necessário estabelecer uma condição para a temperatura granular na entrada, fato não observado na literatura. Comparando-se as Figuras (6.22) e (6.23), confirma-se a previsão teórica (DASGUPTA *et al*, 1993) de que as partículas tendem a concentrar-se nas regiões de menor temperatura granular. As Figuras (6.24) e (6.25) mostram a diversidade de possíveis perfis de velocidade, em função dos parâmetros. Dependendo das características das colisões, teríamos, segundo os resultados de simulação, a possibilidade de formação de regiões de alta concentração também no centro com movimento das fases descendentes nesta região. Para isto, bastaria ter colisões partícula-partícula inelásticas.

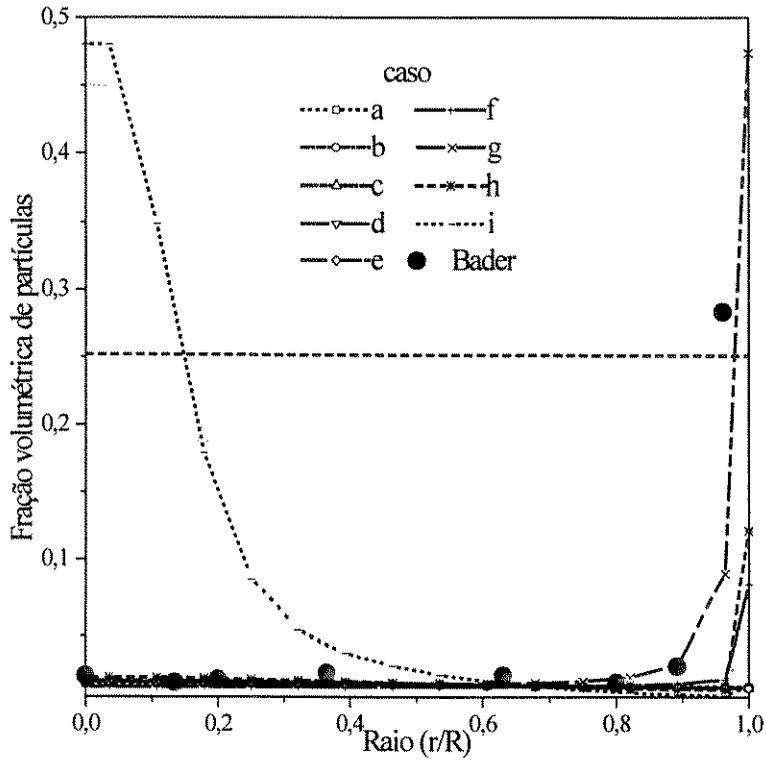


Figura 6.22 - Concentração de partículas

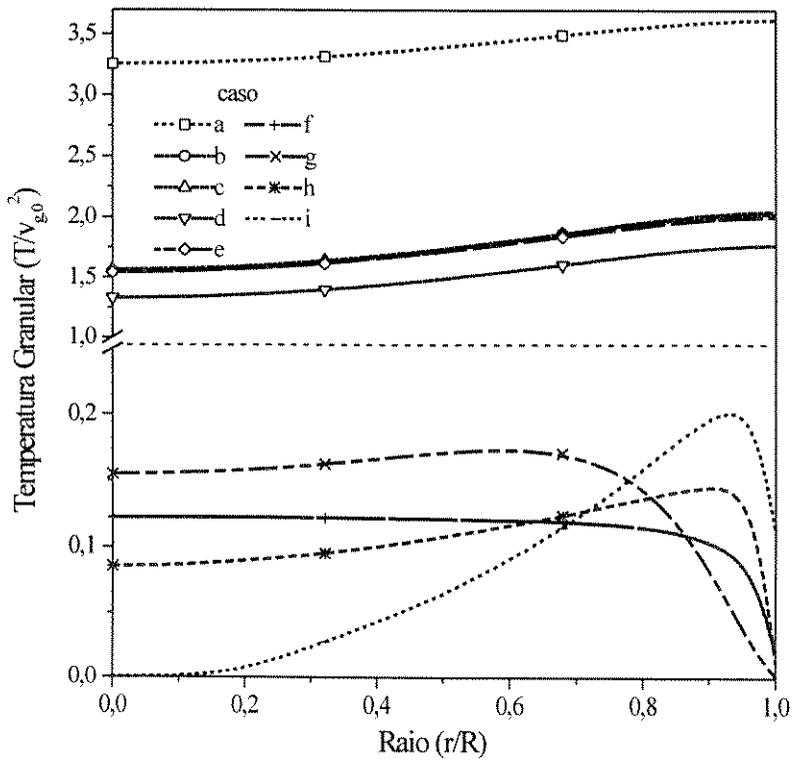


Figura 6.23 - Temperatura granular

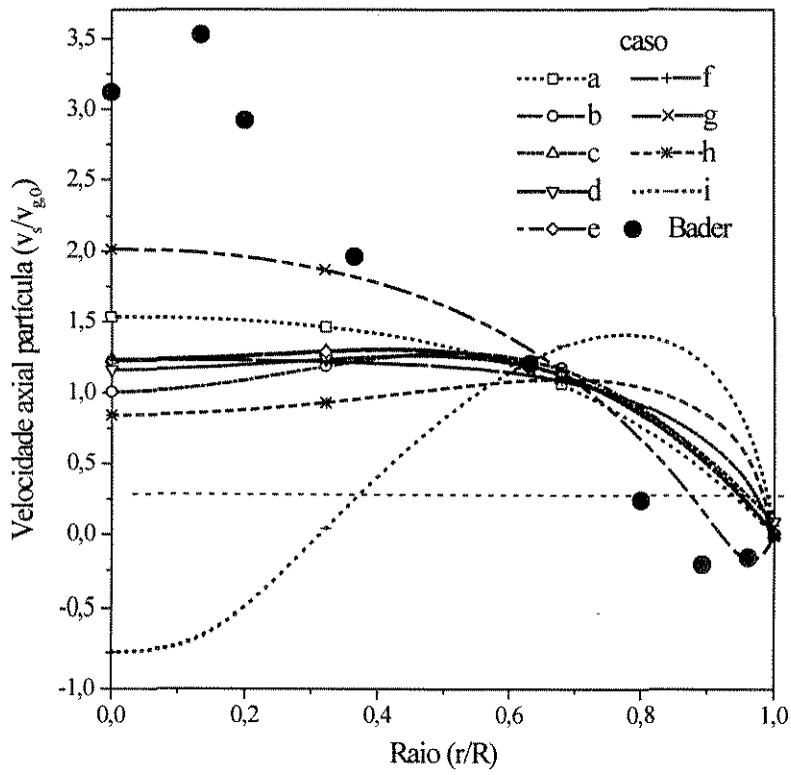


Figura 6.24 -Velocidade das partículas

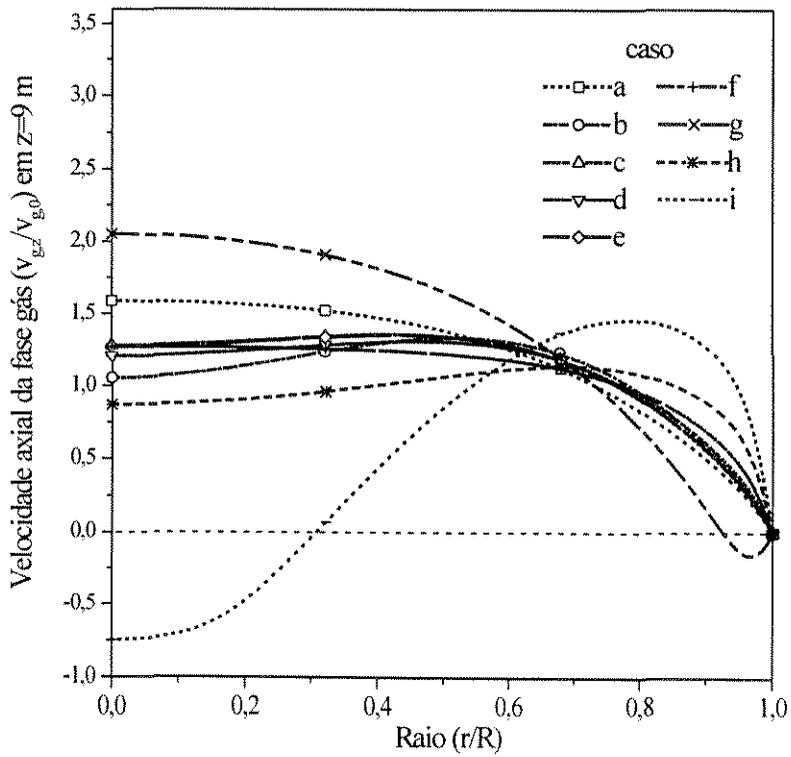


Figura 6.25- Velocidade do gás

Convém, salientar que a sensibilidade observada vale para o sistema em questão, pois testes preliminares com outros sistemas de partículas maiores - $520\ \mu\text{m}$ - e diâmetro do tubo menor - $7,5\ \text{cm}$ - não apresentaram sensibilidade tão acentuada. Os resultados obtidos numericamente são importantes qualitativamente, pois utilizou-se uma malha relativamente grosseira, já que a sensibilidade aos parâmetros analisados não devem depender da malha, pois representam características físicas do sistema.

6.2.2 - Análise qualitativa da dispersão numérica: Efeito do esquema de interpolação

Definidos os parâmetros do modelo cinético do escoamento de materiais granulares, analisa-se o problema da dispersão numérica, comparando-se três esquemas de interpolação. Os esquemas “upwind”, híbrido e exponencial foram utilizados em simulações com uma malha grosseira, e os relativos efeitos de difusão numérica foram avaliados qualitativamente. As Figuras (6.26) a (6.28) mostram os perfis de concentração de sólidos e velocidades das fases para os esquemas “upwind”, híbrido e “power-law”. Como podemos observar, o problema de dispersão numérica não é acentuado neste caso, de modo que qualquer um destes esquemas pode ser usado na solução deste problema, sem perda de precisão da solução devido as aproximações das interpolações.

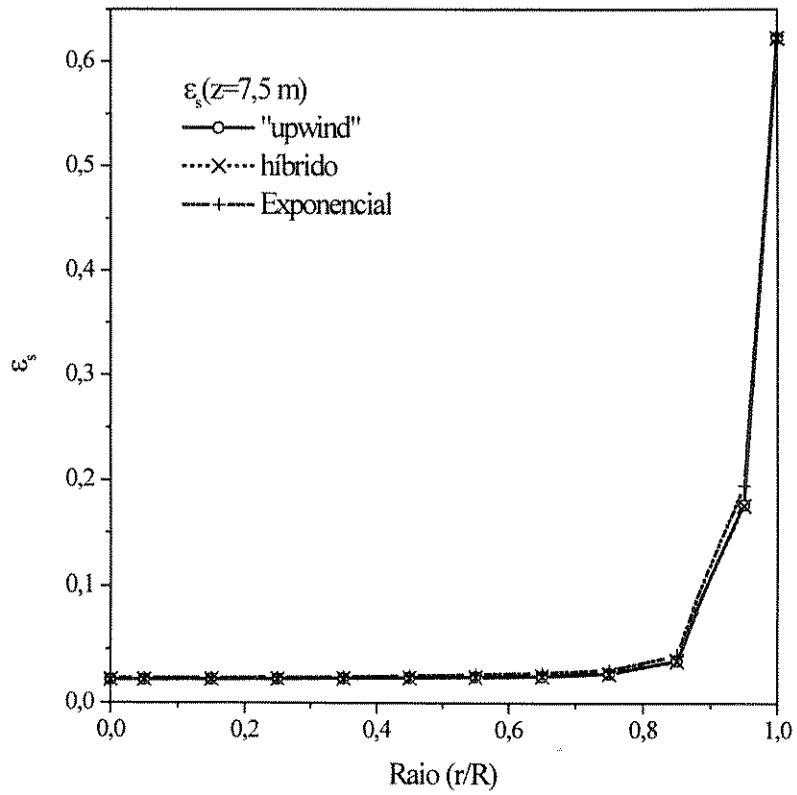


Figura 6.26 - Fração volumétrica de partículas. Efeito do esquema de interpolação.

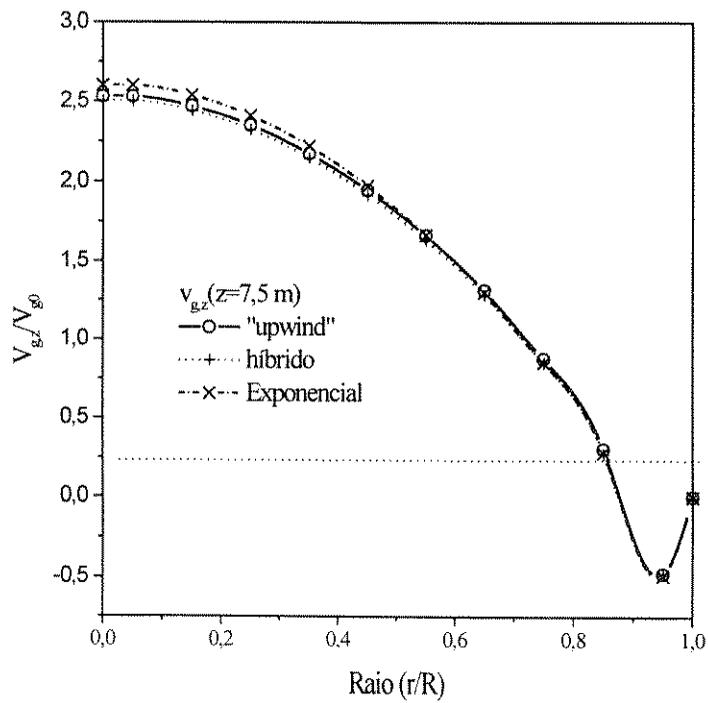


Figura 6.27 - Dispersão numérica. $V_{g,z}$ em $z=7,5$ m (maior pico de velocidade)

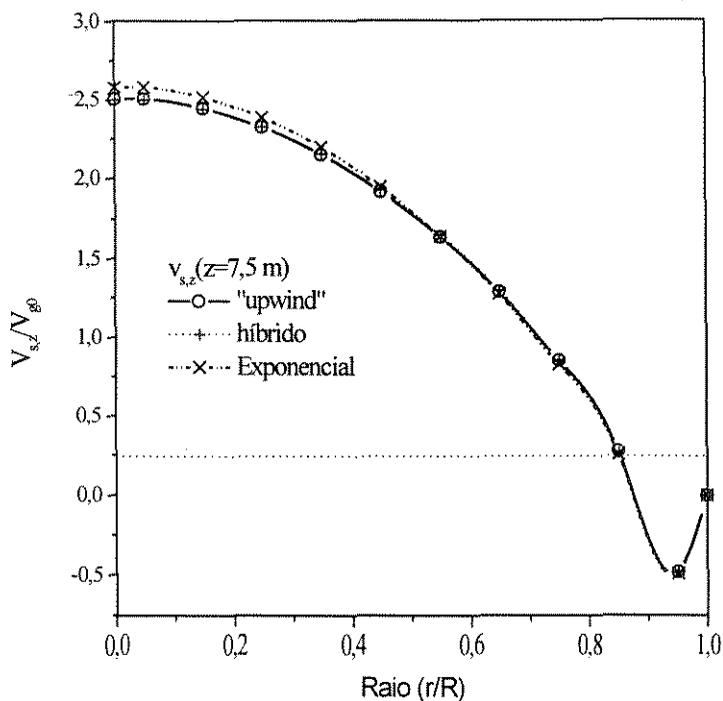


Figura 6.28 - Dispersão numérica. $V_{s,z}$ em $z=7,5$ m (maior pico de velocidade)

6.2.3 - Modelos de tensões para a fase particulada: Invíscido x Newtoniano x Cinético

Definido o algoritmo, os parâmetros do modelo cinético e o esquema de interpolação (Tabela 6.8), faz-se agora uma análise dos modelos de tensões para a fase particulada. O termo de transferência de energia cinética do movimento flutuante foi omitido nesta análise, pois será avaliado adiante. Para a fase gasosa, qualquer modelo de turbulência, modificado para levar em conta a presença da outra fase pode ser usado. Porém, o modelo $k-\epsilon$ apresenta a vantagem de permitir a inclusão do termo de transferência da energia cinética do movimento turbulento entre as fases, o que não é possível com, por exemplo, comprimento de mistura de Prandtl.

Tabela 6.8 - Parâmetros numéricas: caso 2

Parâmetro numérico	Utilizado
Algoritmo	SIMPLEC
Malha	20 x 10
Esquema	Híbrido
Passo de tempo	$7,5 \times 10^{-3}$
Relaxações todas as variáveis	1,0
Fator de redução da pressão	1,0

Inicialmente, neste trabalho, conduziu-se a simulação do CFB, com a hipótese de que a fase particulada comportava-se como fluido invíscido, desprezando-se as interações partícula-partícula. Com este modelo, não se obteve resultados consistentes com os dados experimentais. Observou-se na literatura que a provável explicação para a formação de um perfil de concentração de partículas com regiões de alta concentração próxima à parede são as tensões viscosas na fase particulada, devido as flutuações de velocidade desta fase. GIDASPOW (1990) usou um modelo de tensões para esta fase, análogo a de um fluido newtoniano, e obteve a viscosidade desta fase experimentalmente. Algumas correlações para a viscosidade da fase particulada em função da concentração de partículas foram propostas na literatura. Analisando-se o modelo de um fluido newtoniano, os resultados, como no caso do modelo investido, também não concordavam com os resultados experimentais. Somente o modelo cinético do escoamento de materiais granulares foi capaz de prever satisfatoriamente a fluidodinâmica dos reatores de leito fluidizado circulante. Nas Figuras (6.29) a (6.31) comparam-se os resultados obtidos com os 3 modelos de tensões, através dos perfis de concentração de partículas, velocidade do gás e das partículas, respectivamente. Como pode-se observar, frisa-se mais uma vez, apenas os resultados obtidos com o modelo cinético do escoamento de materiais granulares foi capaz de prever a formação do perfil de concentração de partículas e recirculações internas.

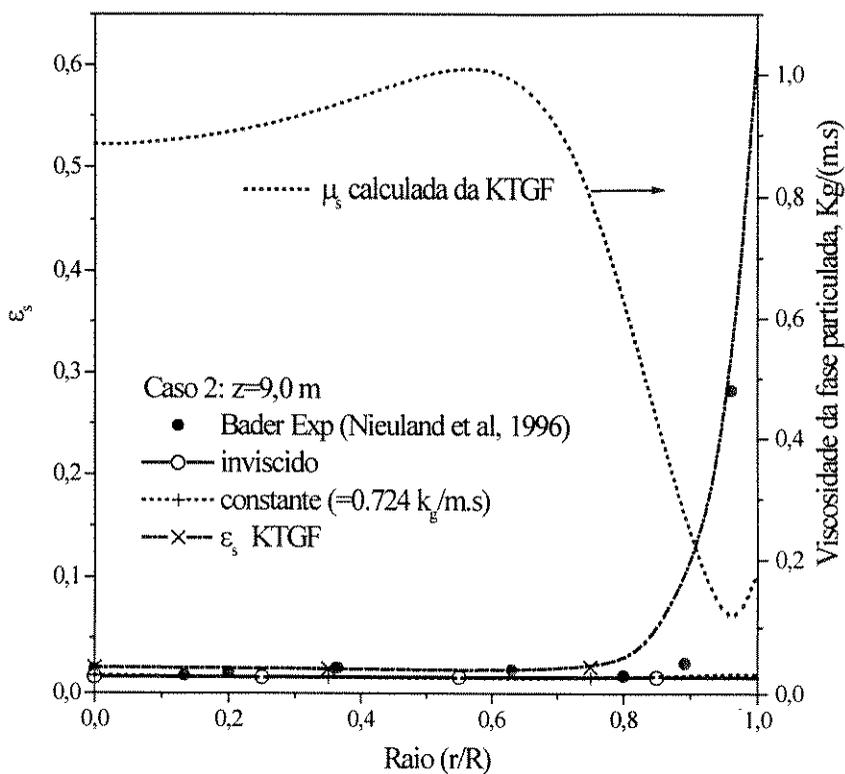


Figura 6.29 - Concentração de partículas para os 3 modelos de tensões

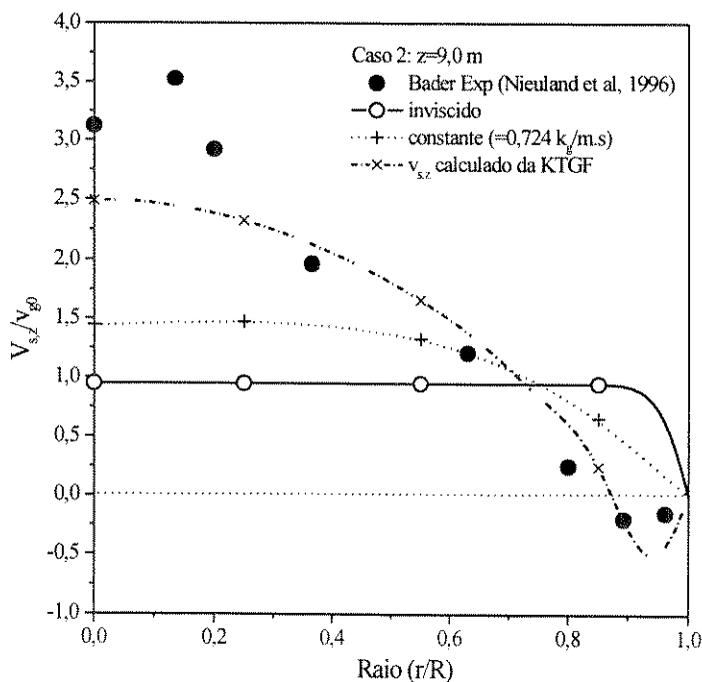
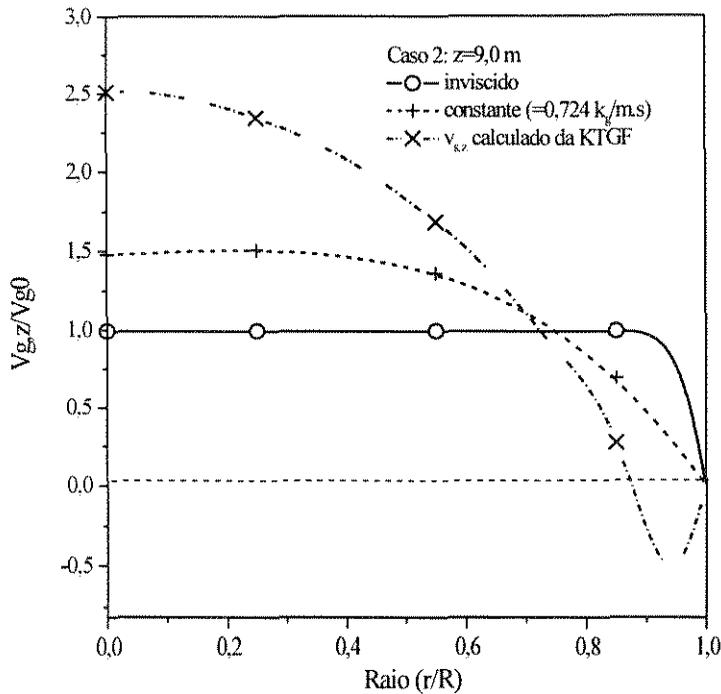


Figura 6.30 - Velocidade axial do sólido para os 3 modelos de tensões



6.31 - Velocidade axial do gás para os 3 modelos de tensão

Comentário: apenas o modelo cinético do escoamento de materiais granulares representou, satisfatoriamente, a fluidodinâmica dos reatores de leito fluidizado circulante com alta concentração de partículas próximo a parede e com movimento descendente das fases nestas regiões de alta concentração de partículas. Assim, a análise numérica que segue é feita apenas para o modelo cinético do escoamento de materiais granulares.

6.2.4 - Dependência com a malha: caso 2 com saída axial

Para o modelo cinético do escoamento de materiais granulares, fez-se uma análise de dependência da solução com a malha numérica utilizada para se obter resultados que não levem, dentro das limitações de tempo e de máquina, erros de aproximação. Analisa ainda o tempo de execução. Estes resultados são questionáveis por que para a malha de 20×10 , usou-se o passo de tempo dado na Tabela 6.8, porém para as malhas menores, este passo teve que ser diminuído até termos um processo de solução estável. A Figura (6.32) mostra o tempo de

execução e o número de iterações em função da malha. O número de iterações e o tempo de execução aumentam com o refino da malha na direção axial, mas reduzem-se com o refino na direção radial. Assim, o que acontece com, por exemplo, escoamento monofásico laminar no tubo, e dos problemas monofásicos em geral, onde observamos que com o refino da malha sempre tínhamos um aumento no tempo de execução devido ao aumento do número de operações, mas uma redução no número de iterações total, aconteceu por que naquele caso, refinava-se a malha proporcionalmente nas duas direções. Quando isto não é feito, nenhuma conclusão pode ser tirada, até porque, sempre chegaremos numa situação em que os parâmetros utilizados para a malha anterior não servem mais para garantir a estabilidade da convergência com a malha atual (mais refinada), embora possa existir outros parâmetros tais que a solução com a malha atual seja mais rápida do que a anterior (mais grosseira)

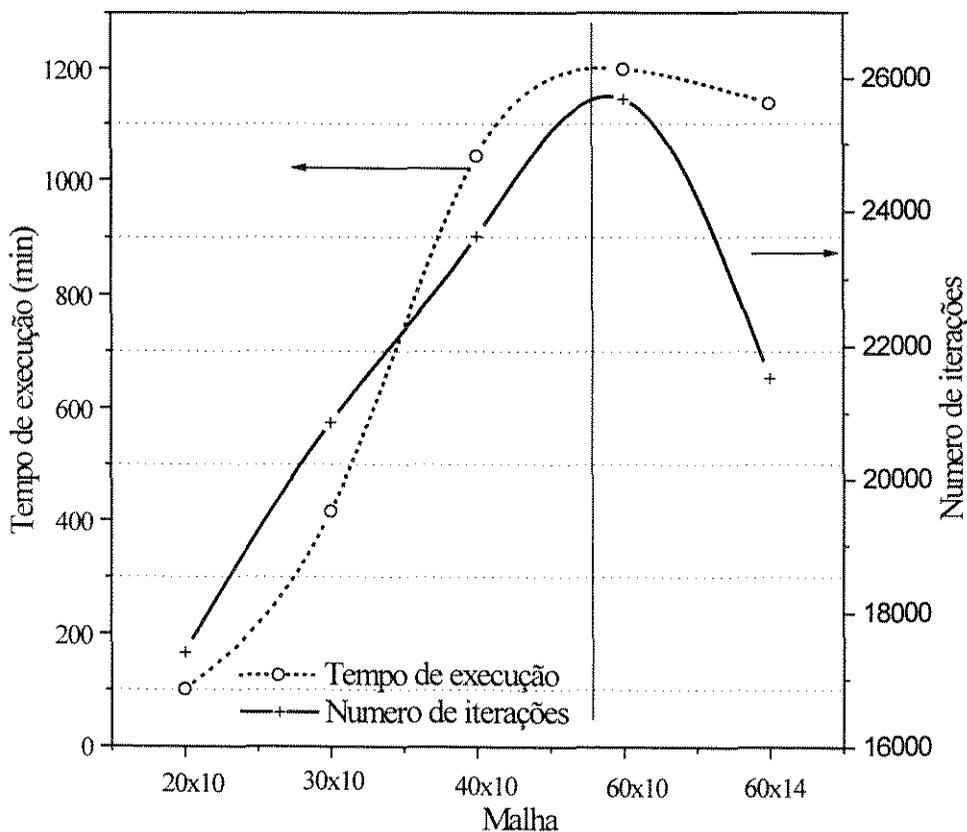


Figura 6.32- Tempo de execução e número de iterações em função da malha.

A Figura (6.33) mostra a dependência da solução com a malha, acompanhando a queda de pressão total e a velocidade axial do gás no centro da saída do tubo. Como pode-se observar, neste caso, para uma malha de 60x14, a variação na queda de pressão é de

praticamente a mesma da malha anterior de 60x10. Estes resultados foram obtidos sem a inclusão do termo de transferência de energia cinética do movimento flutuante entre as fases, que será incluído no modelo e avaliado na seção 6.27 para o caso com saída lateral. Observa-se que neste caso, diferentemente do invíscido, uma independência assintótica é atingida mais rapidamente. Isto acontece porque, como foi dito, no caso invíscido, existe o problema da aplicação da condição de contorno para a energia cinética turbulenta e para a taxa de dissipação desta, pois neste caso, o termo de dispersão (a viscosidade efetiva do gás) é afetada pela mudança da posição do ponto com a mudança do número de pontos radiais. Já no caso concentrado, o termo de interface é grande frente ao termo dispersivo do gás, e este problema torna-se insignificante. Isto justifica o porque de não tentarmos resolve-lo, quando o mesmo foi identificado no caso invíscido.

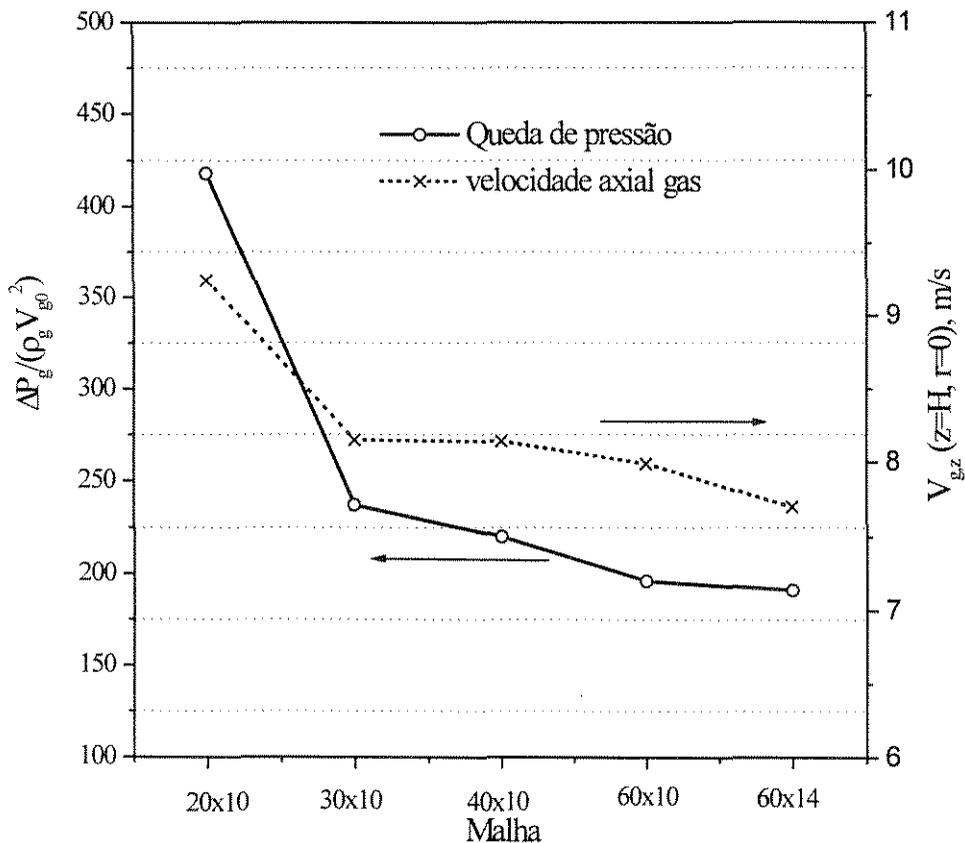


Figura 6.33 - Dependência da solução com a malha: queda de pressão e velocidade axial na saída (r=0)

6.2.5 - Resultados de Simulação - Padrão do escoamento para o caso 2 saída axial

Para o sistema com saída axial, as Figuras (6.35) a (6.48) ilustram a fluidodinâmica do reator (“riser”) do sistema de leito fluidizado circulante. Para ilustrar a aplicação da previsão do comportamento fluidodinâmico, apresenta-se os mapas de contorno das variáveis fluidodinâmicas básicas (componentes de velocidade das fases, pressão e concentração) e de outras propriedades do escoamento (energia cinética turbulenta e taxa de dissipação desta). Os resultados foram obtidos com a malha grosseira de 20x10, cuja história da convergência é mostrada na Figura (6.34), mas com a inclusão do termo de transferência de energia cinética turbulenta entre as fases (o que dificultou a convergência e levou mais iterações do que a malha 60 x 14, sem o termo de interface (Figura (6.33))), o qual é discutido na seção 6.2.7.

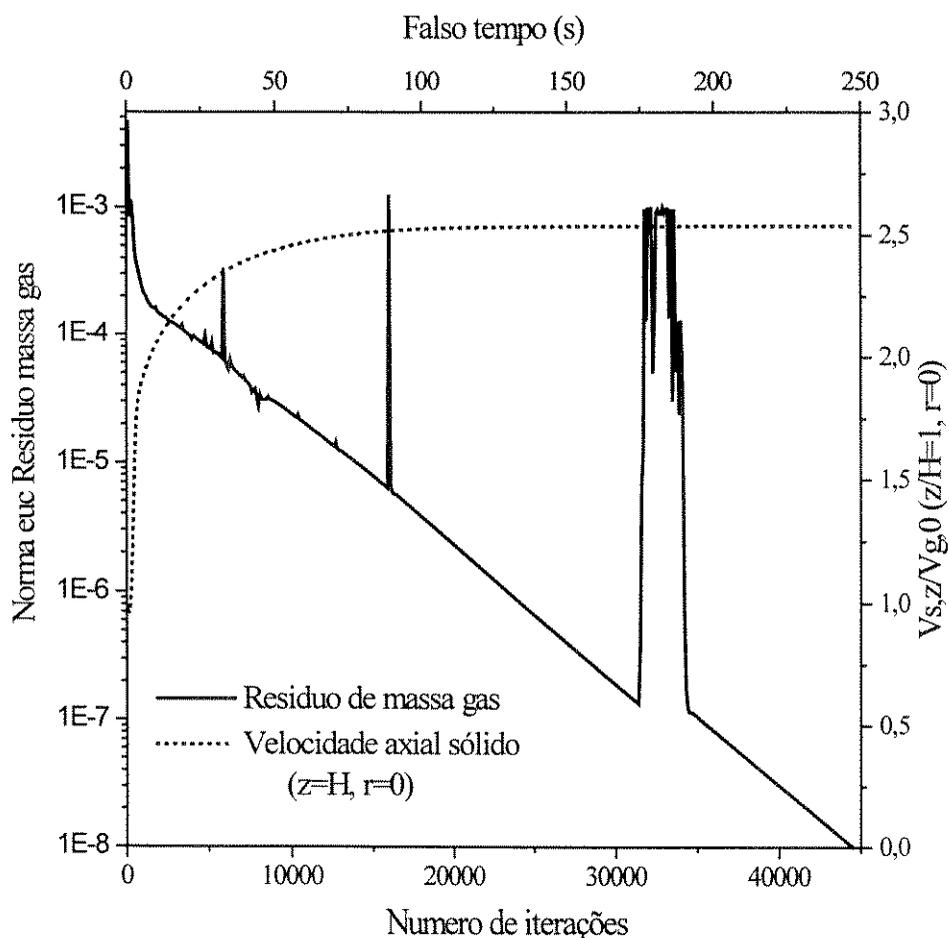


Figura 6.34 - História da convergência para o caso 2.

Os picos que aparecem na norma euclidiana da fonte de massa da Figura (6.34), podem ser devido à descontinuidade no coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases. Se em algum volume interno, a fração volumétrica de sólidos esta no limite de 20%, para valores maiores temos uma expressão e para valores menores temos outra. Assim, nesta mudança descontínua, pode acontecer do volume sofrer a perturbação, a qual é refletida na conservação da massa, através dos picos que aparecem. Como a norma euclidiana leva em conta a soma dos resíduos em todos os pontos, a perturbação pode estar localizada em apenas um ponto, já que por exemplo, a velocidade axial do sólido na saída (curva tracejada na Figura (6.34)), não sente esta descontinuidade, ou não apresenta picos como a norma euclidiana da fonte de massa.

A Figura (6.35) mostra que o modelo prevê uma alta concentração de partículas ao logo de toda parede do tubo, chegando inclusive a valores próximos a concentração máxima nesta região, fato observado em alguns reatores de CFB. Esta alta concentração de partículas provoca o movimento das mesmas para baixo devido ao peso e arrasta o gás consigo, como pode ser observado das Figuras (6.37) e (6.43), respectivamente, fato observado também experimentalmente para este caso. A diferença entre este caso e o anterior é que neste o termo de dispersão na fase particulada é considerado. Efeitos de geometria da saída não existem, pois temos uma saída axial e, portanto, o termo de dispersão devido a interações partícula-partícula é o responsável pela formação do perfil de concentração e consequentemente pelas diferentes características fluidodinâmica dos reatores gás-sólido.

A Figura (6.36) mostra, pequenas variações radiais na pressão do gás.

Comparando-se as Figuras (6.39), (6.40) e (6.41), tal como aconteceu no caso diluído, associado a alta turbulência (áreas indicadas nestas figuras) está uma alta taxa de dissipação desta, de forma que a viscosidade efetiva naquelas regiões de alta turbulência é menor inclusive do que em outras áreas de menor turbulenta, de forma tal que esta alta turbulência associada a alta taxas de dissipação não contribui para um aumento da viscosidade efetiva e da dispersão de quantidade de movimento.

A Figura (6.42) mostra as linhas de corrente da fase gás mostrando as recirculações, que são fechadas por uma “alimentação” na parte superior do tubo, próximo a parede. Claro que isto é uma situação irreal, pois na prática existe a parede superior do tubo e esta alimentação não existe mas pode ser entendida como parte da fase que recircula internamente no leito.

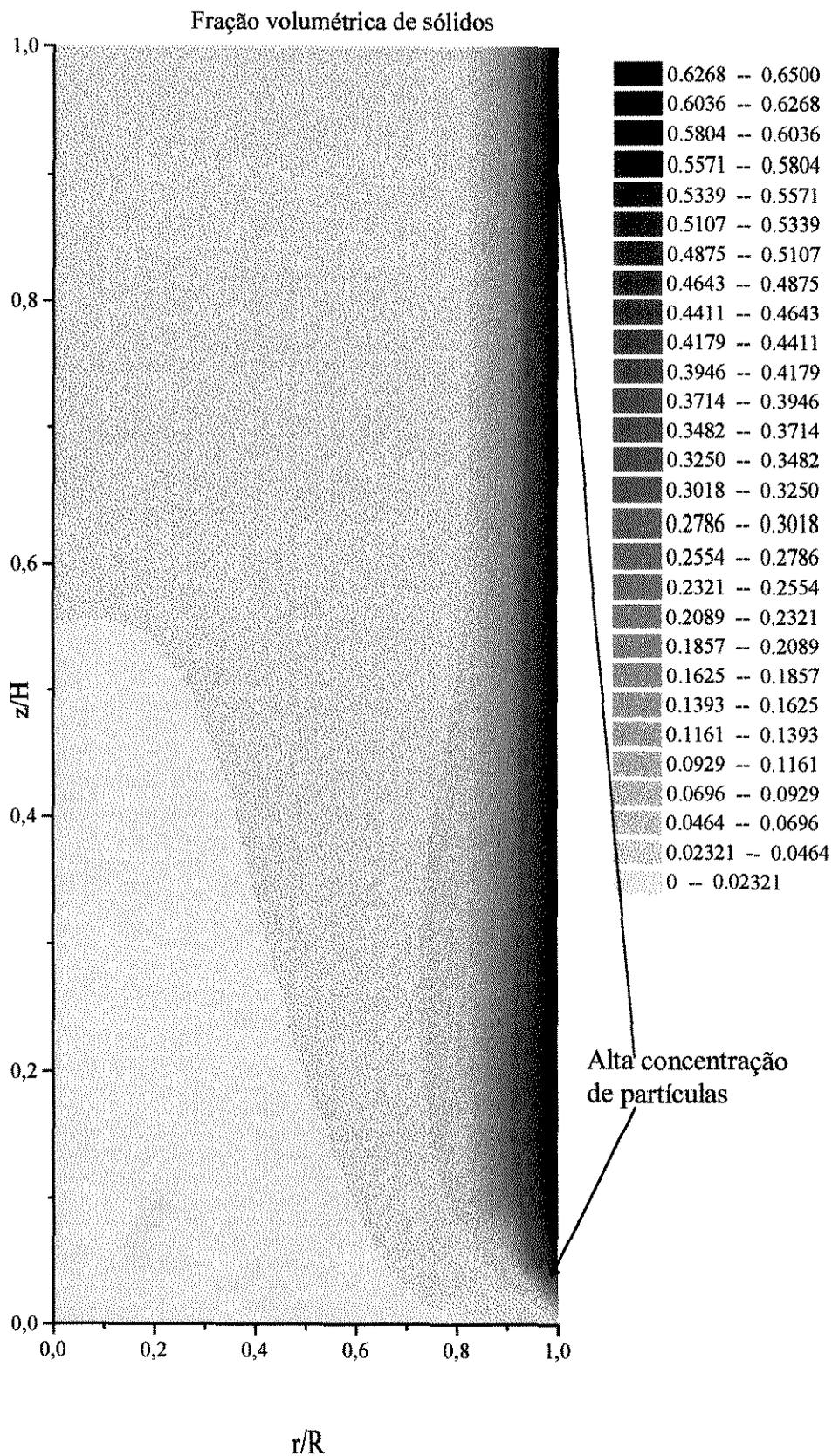


Figura 6.35 - Concentração de partículas

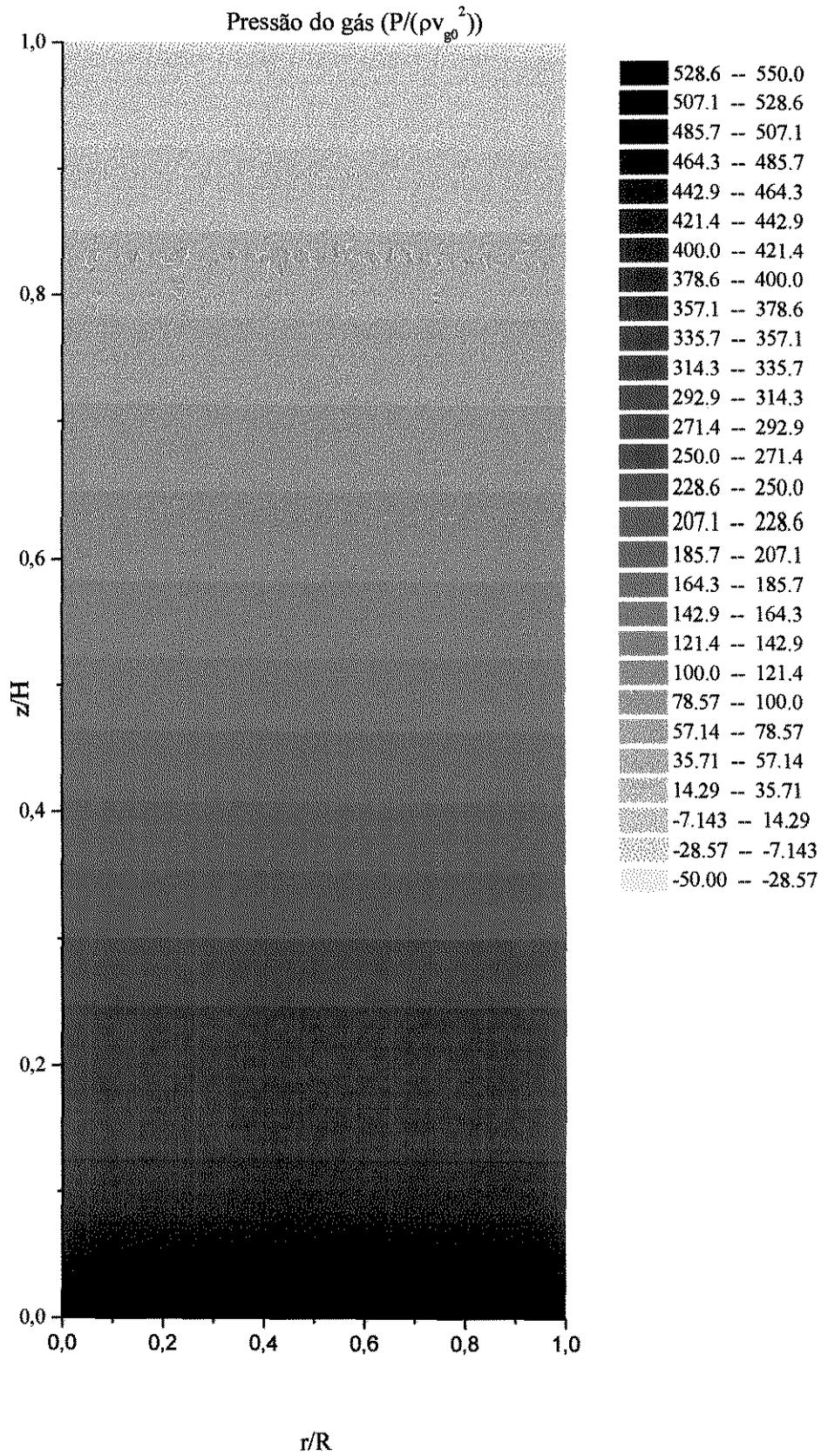


Figura 6.36 - Pressão do gás

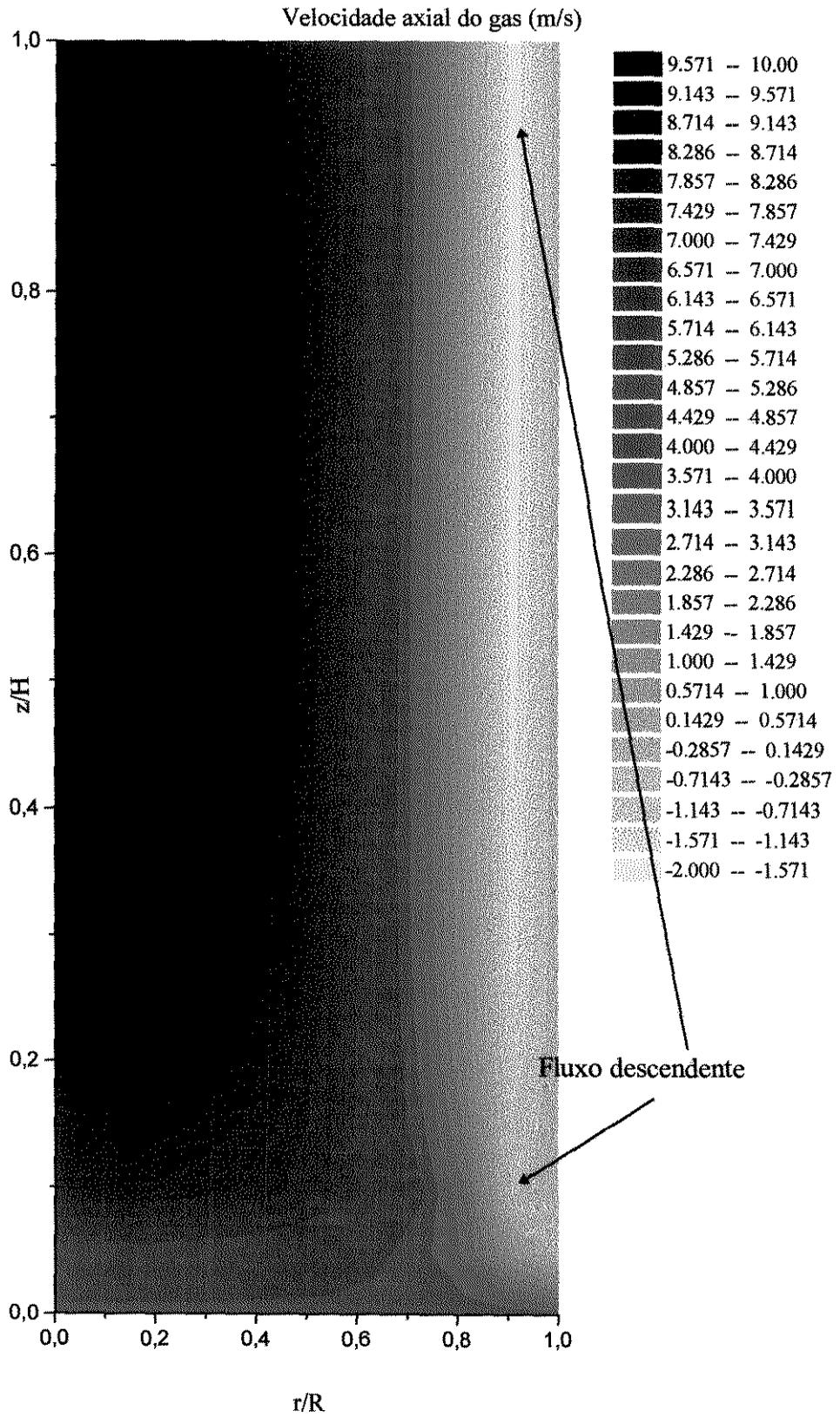


Figura 6.37 - velocidade axial do gás

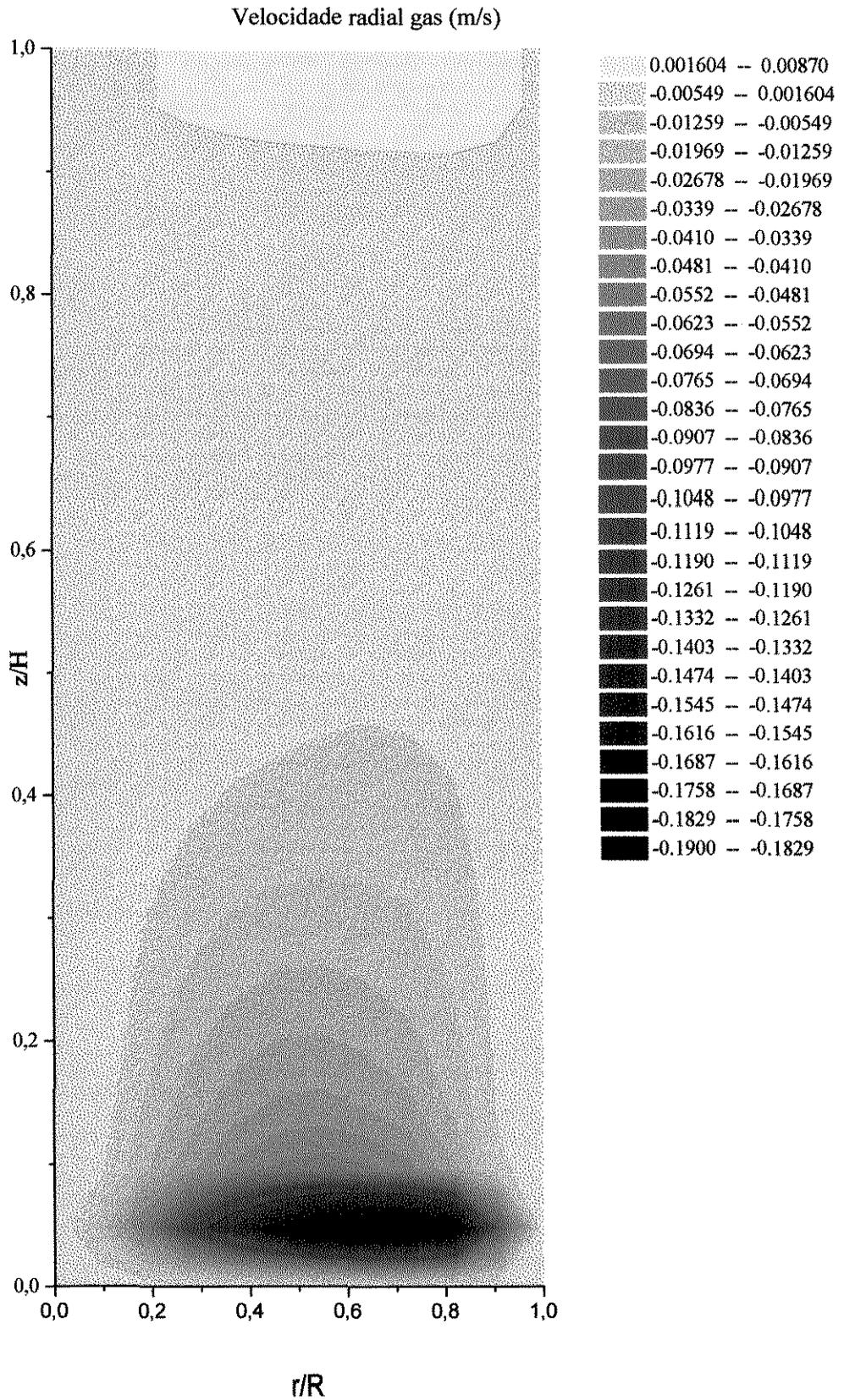


Figura 6.38 - velocidade radial do gás

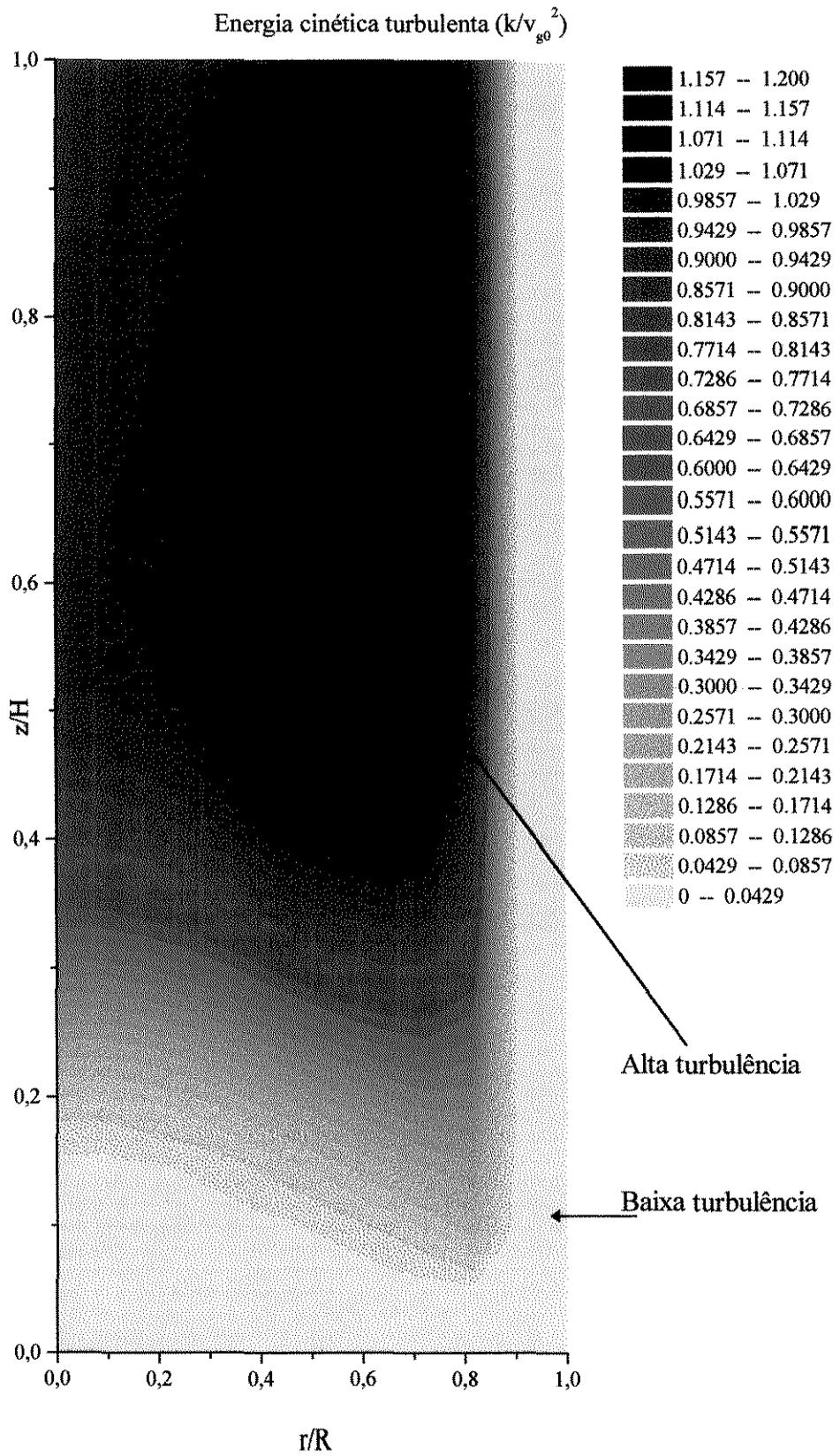


Figura 6.39 - Energia cinética turbulenta do gás

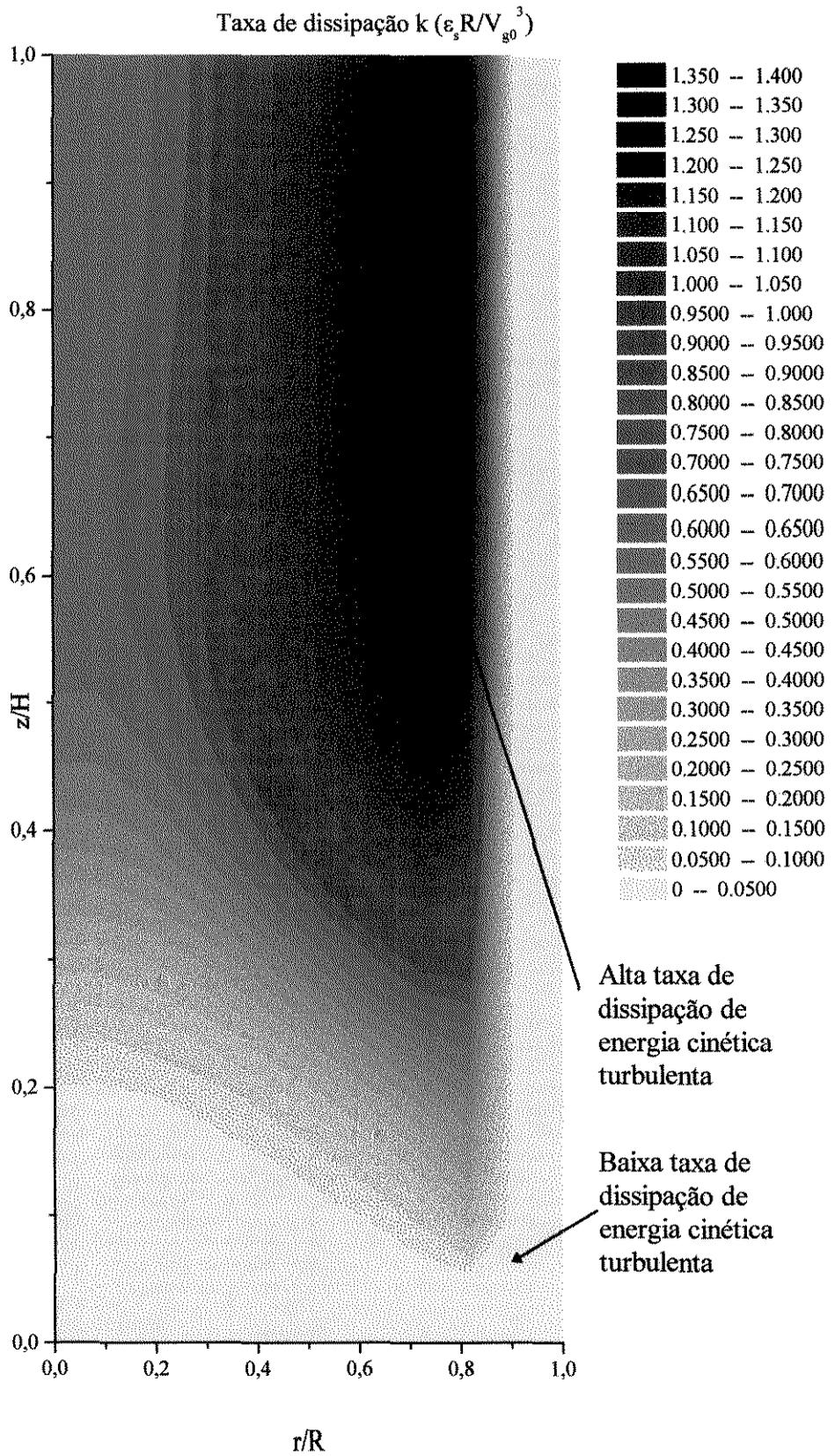


Figura 6.40 - Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta

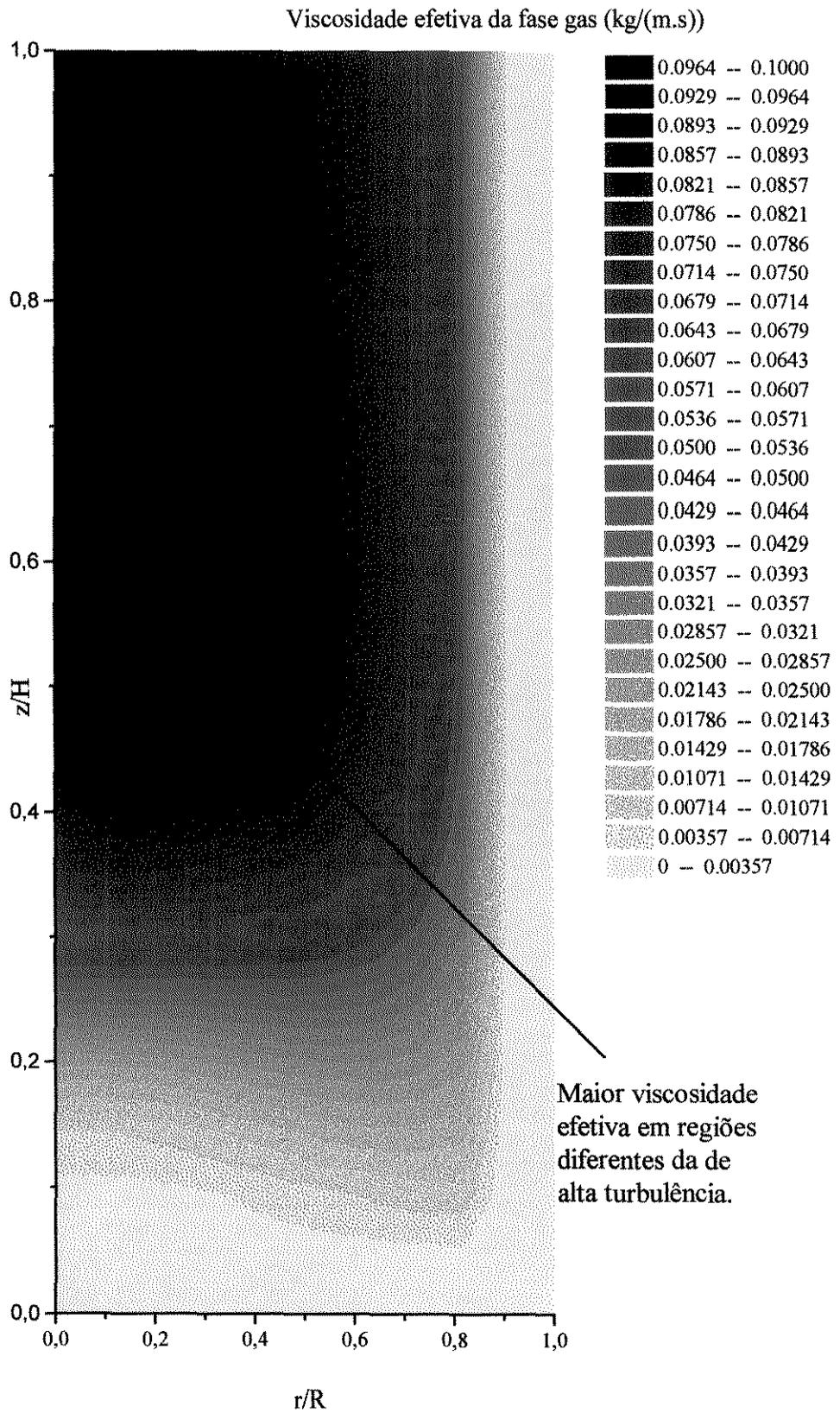


Figura 6.41 - viscosidade efetiva da fase gasosa

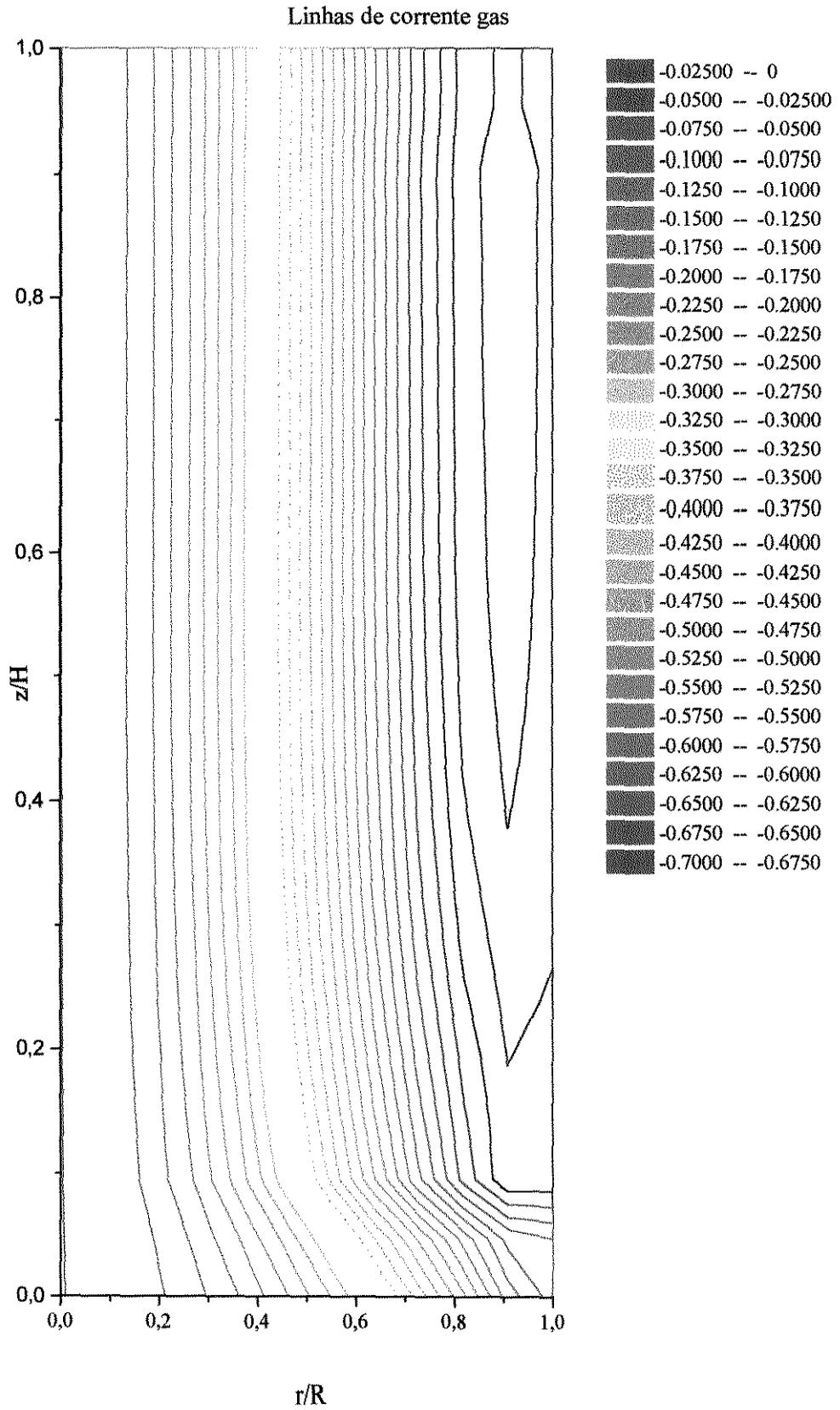


Figura 6.42 - Linhas de corrente do gás

A Figura (6.43) mostra os mapas de contorno da velocidade axial das partículas, da qual pode-se observar o movimento descendente próximo a parede em praticamente toda extensão desta. A Figura (6.44) mostra o perfil de velocidade radial da fase particulada e neste caso, diferente do caso diluído, o sistema não atinge a condição de totalmente desenvolvido.

Comparando-se as Figuras (6.35) e (6.45), observa-se que as partículas concentram-se nas regiões de menor temperatura granular.

A Figura (6.46) mostra o efeito da pressão do sólido, como resultado da alta concentração de partículas e alta temperatura granular. Se estes dois, ou até mesmo apenas um destes, tendem a valores elevados, surgem as regiões de alta pressão de sólido de tal forma que este termo de pressão tende a desfazer estes pontos de forma tal que a concentração de partículas não atinge a condição de máxima concentração. A Figura (6.47) mostra a viscosidade efetiva da fase particulada. Próximo a parede a viscosidade cresce por que nesta região a concentração de partículas atingiu valores elevados de modo que as partículas por estarem muito próxima tendem a dispersarem mais facilmente o seu movimento. A Figura (6.48) mostra as linhas de corrente da fase particulada, de onde observa-se as recirculações internas, que são também fechadas por uma “alimentação” na parte superior do tubo, próximo a parede e como explicado para as linhas de corrente do gás, isto é uma situação irreal, pois ratificamos novamente, na prática existe a parede superior do tubo e esta alimentação não existe mas pode ser entendida como parte da fase que recircula internamente no leito.

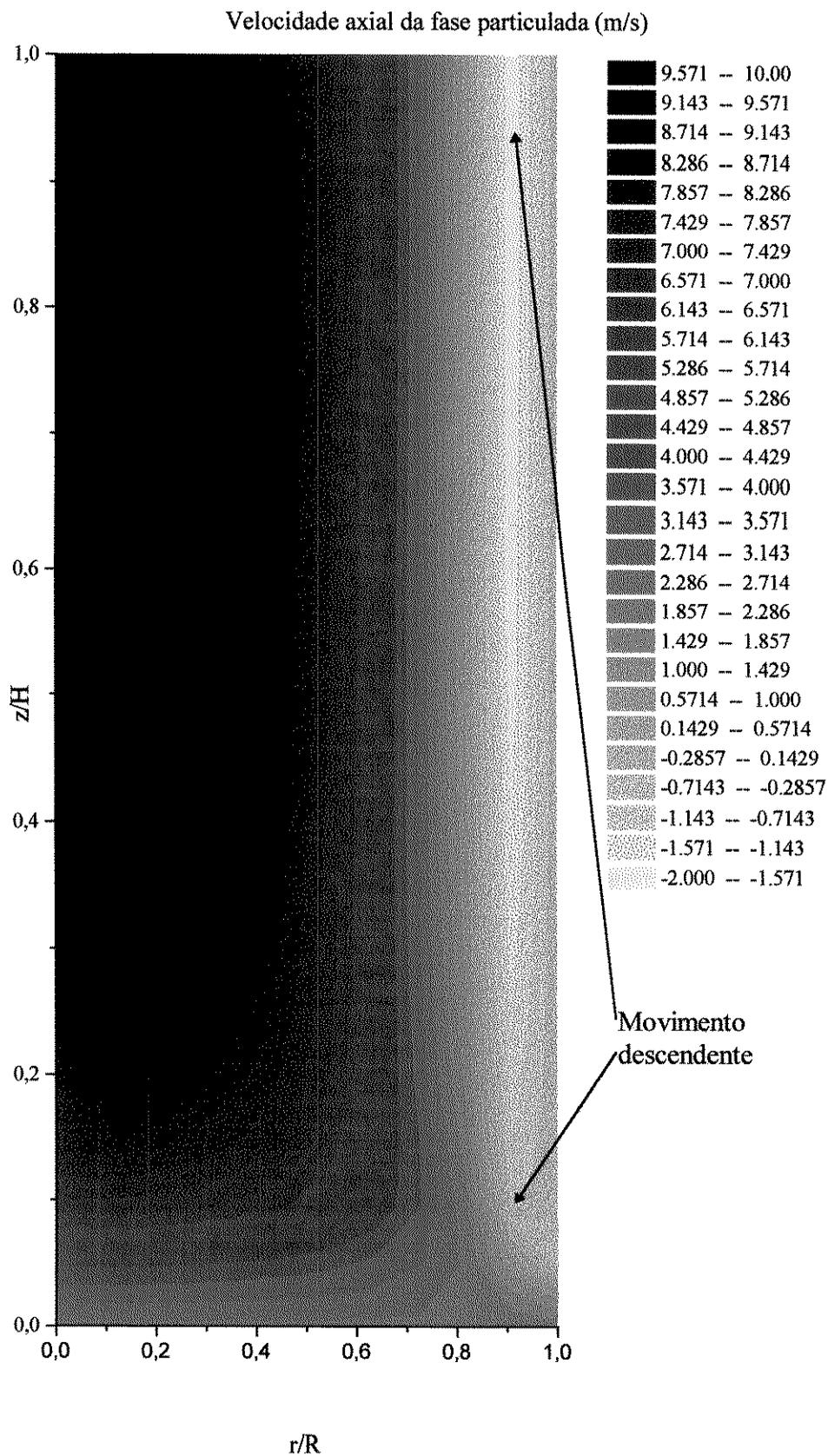


Figura 6.43 - Velocidade axial do sólido

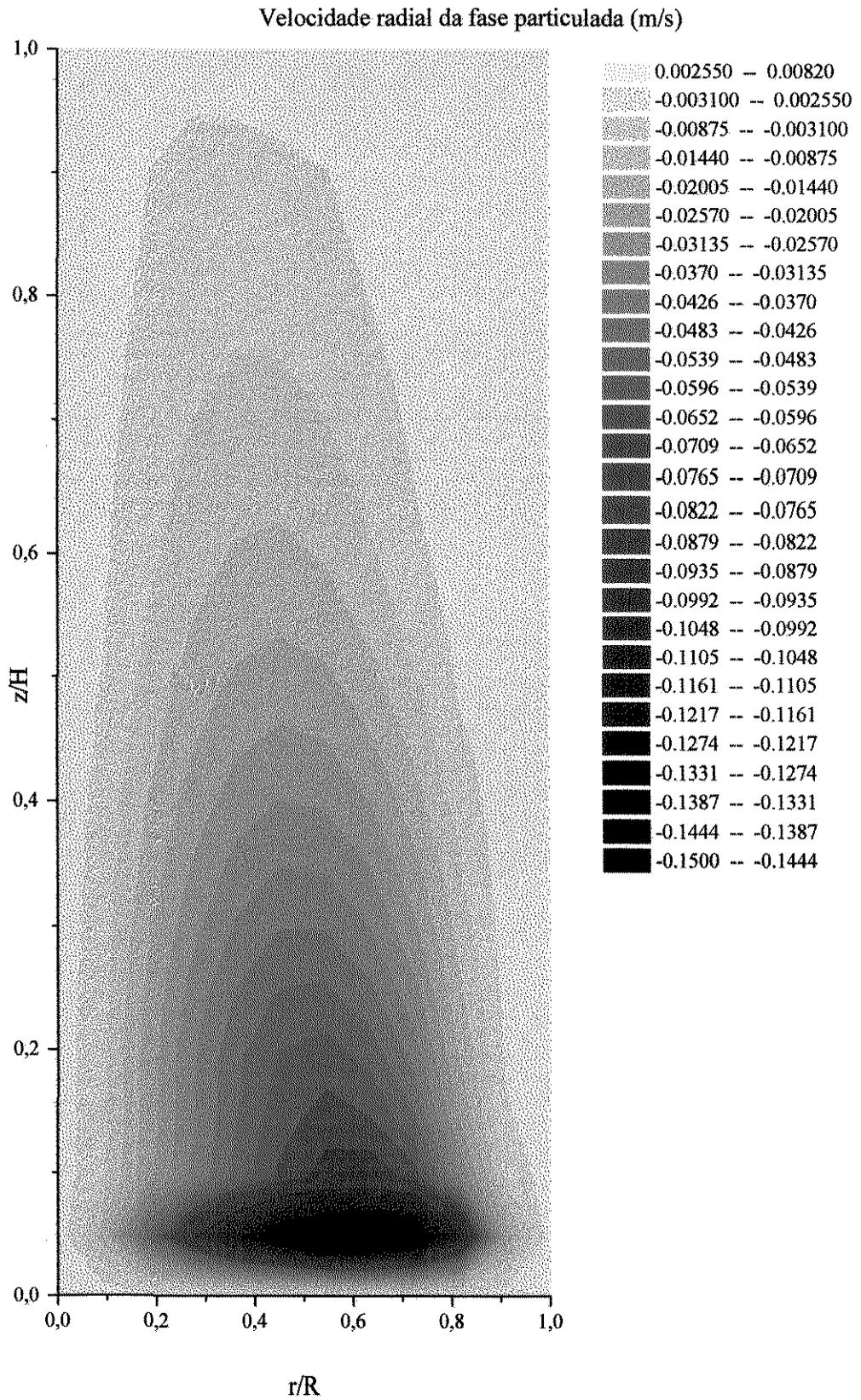


Figura 6.44 - Velocidade radial do sólido.

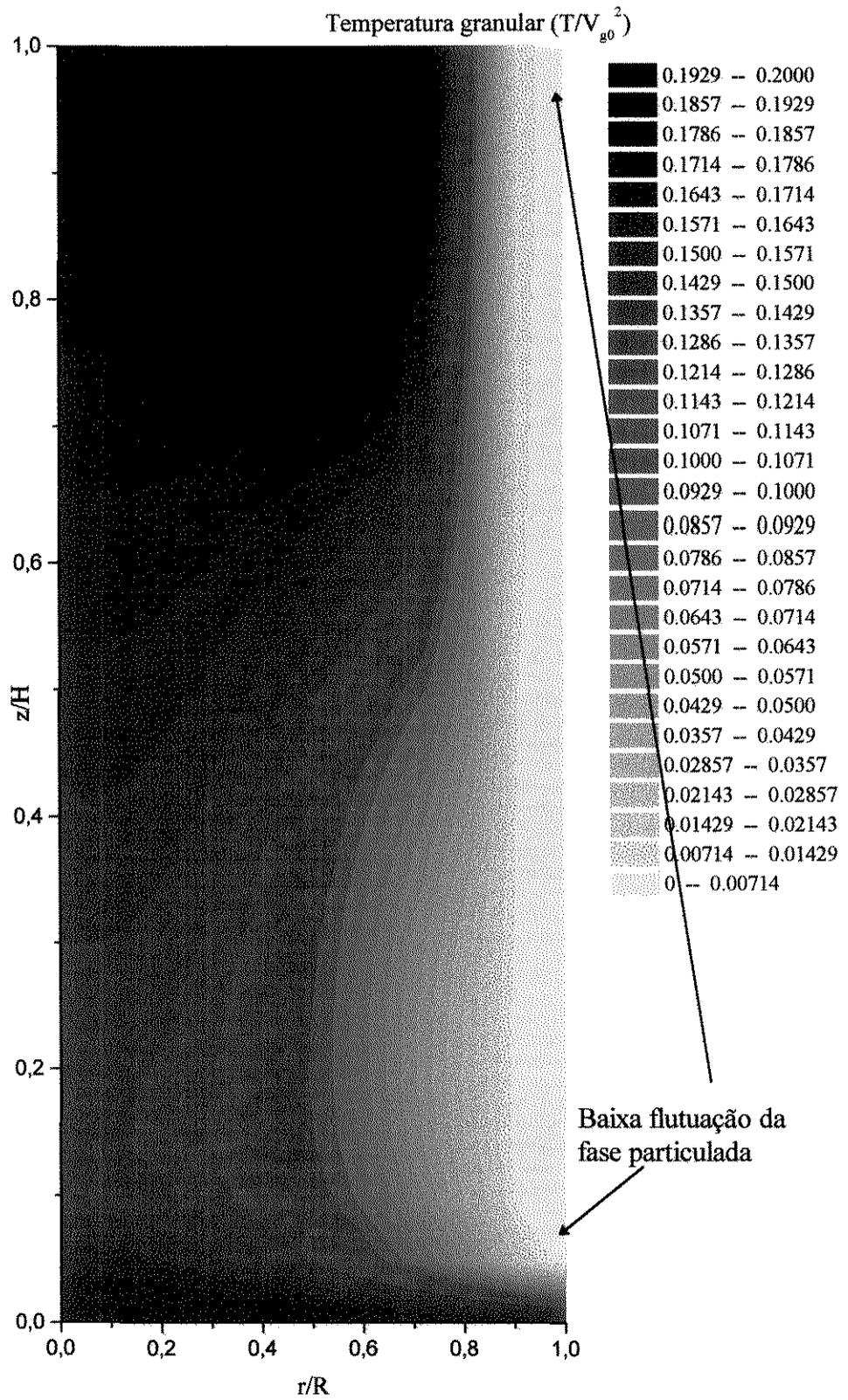


Figura 6.45 - Temperatura granular

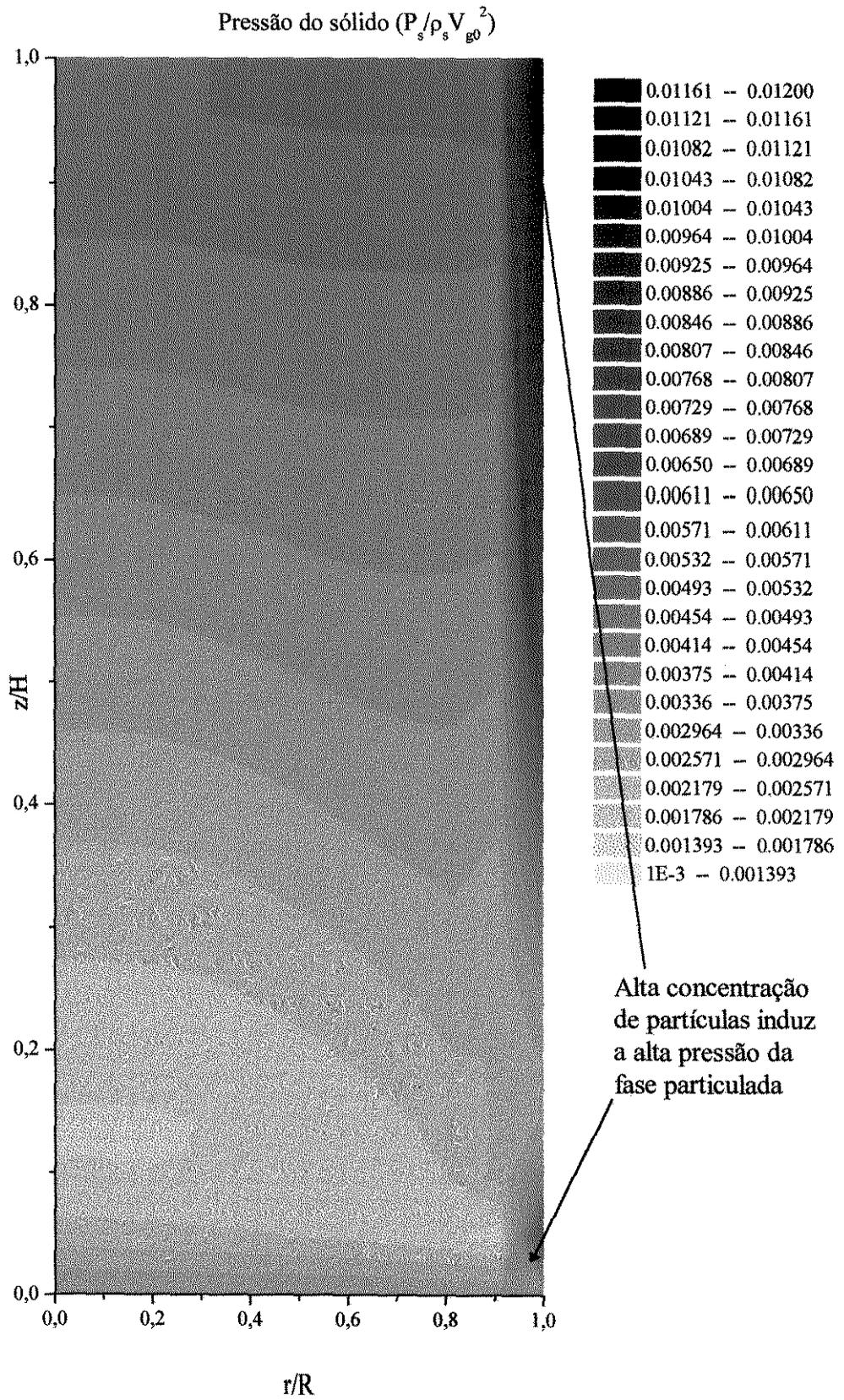


Figura 6.46 - Pressão do sólido

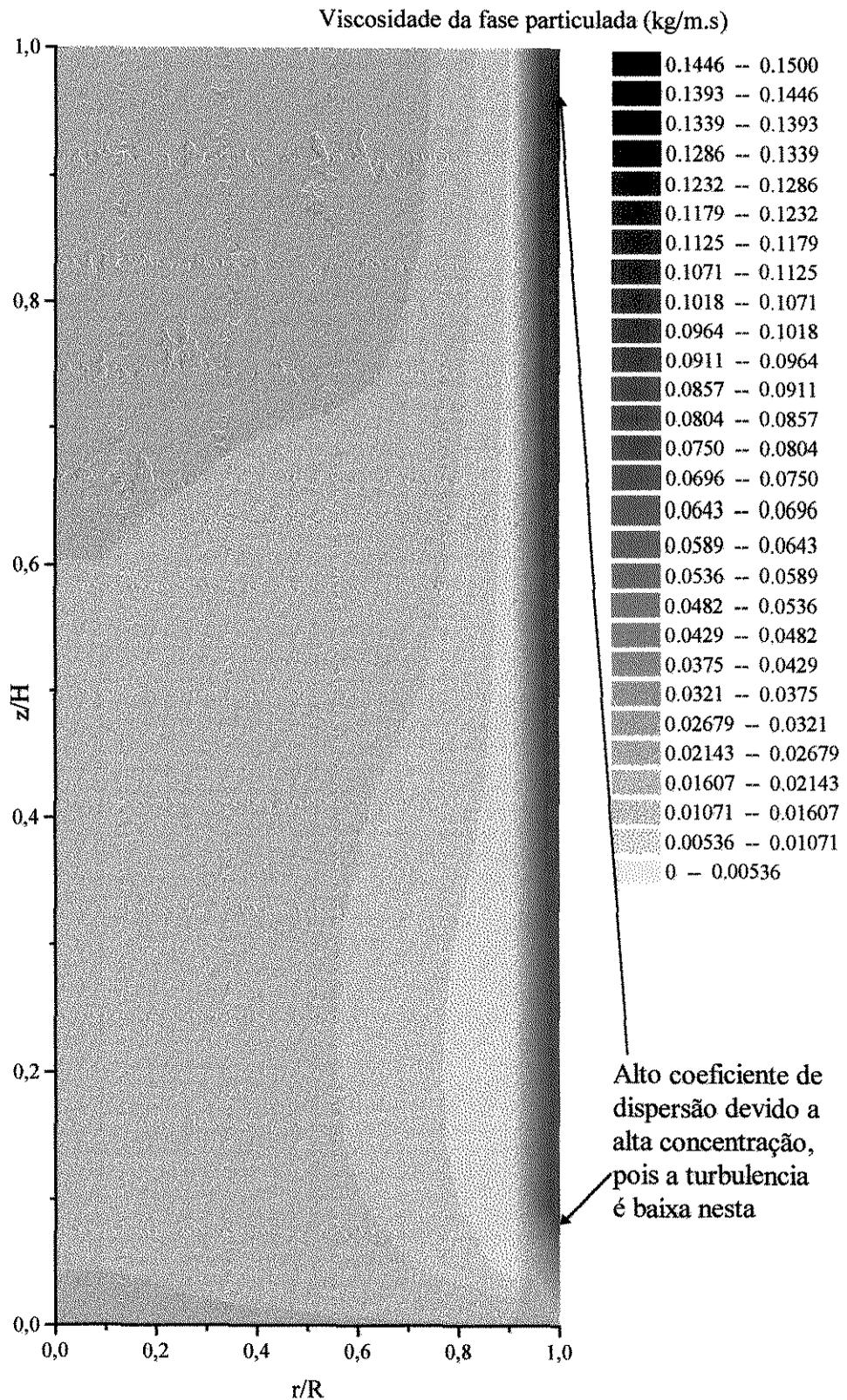


Figura 6.47 - Viscosidade efetiva do fase particulada

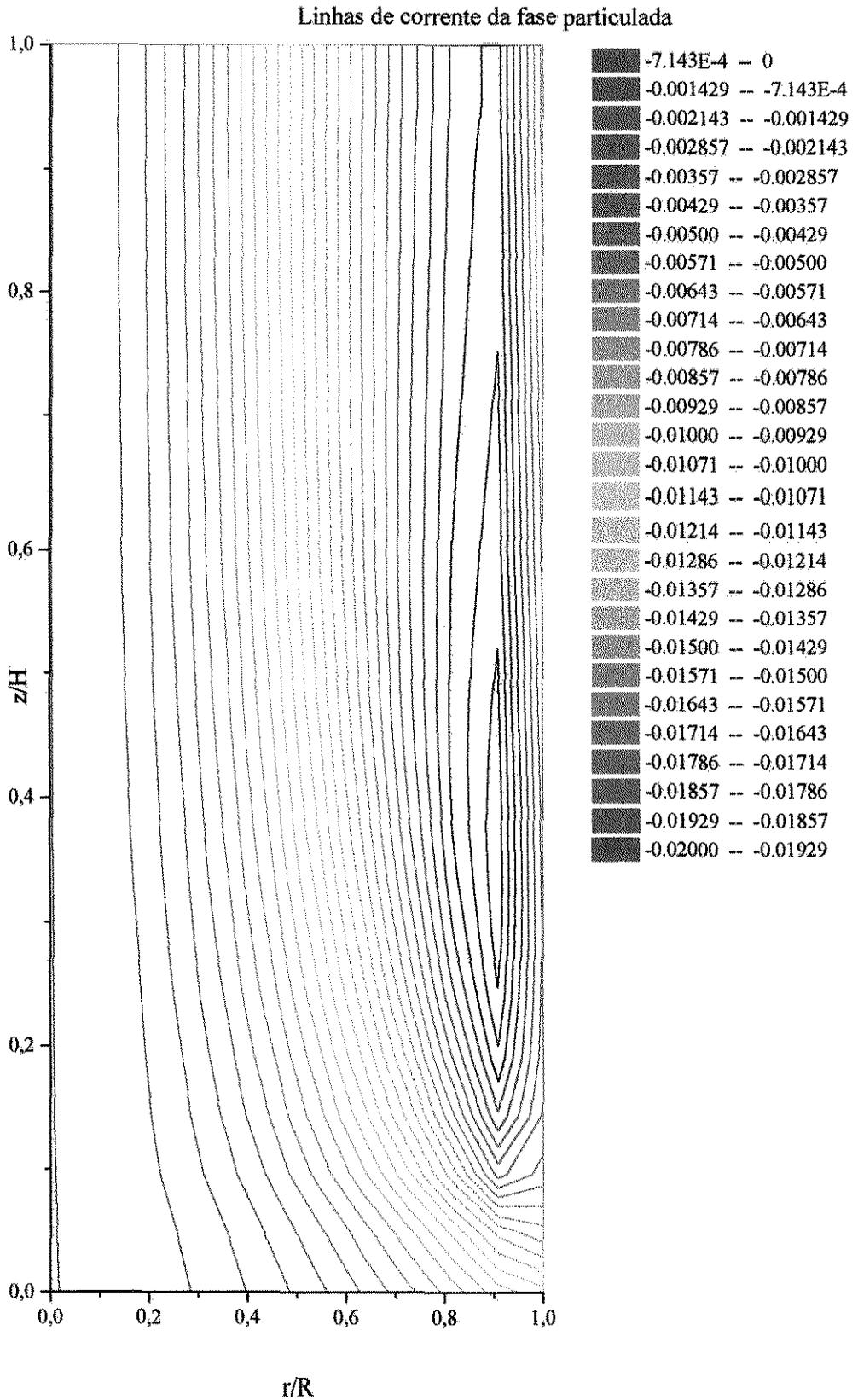


Figura 6.48 - linhas de corrente da fase particulada

6.2.6 - Saída lateral: Dependência com a malha

A situação com saída axial foi útil na avaliação de parâmetros, esquemas de interpolação e algoritmo. Porém, uma situação idealizada bidimensional simétrica mais real é aquela com saída lateral. Neste caso, a possibilidade da entrada de sólidos pela parte superior não existe. Para esta geometria de saída, analisa-se o efeito do termo de transferência de energia cinética do movimento turbulento entre as fases.

Para este caso, assumimos os mesmos parâmetros, esquema e algoritmo definidos no caso com saída axial. Faz-se, neste caso, apenas uma análise de dependência com a malha e, em seguida, analisam-se os resultados “independentes” desta..

A Figura (6.49) mostra a dependência da solução com a malha, para o caso 2 com saída lateral e a Figura (6.50) mostra o número de iterações e o tempo de execução em função da malha, para este mesmo caso. A grande variação da velocidade na saída com a malha na direção axial, deve-se ao fato de que a abertura de saída não é mesma (equivale a altura dividida pelo número de pontos na direção axial), a velocidade aumenta porque a área diminui, garantindo a conservação global da massa. Convém ressaltar que a variação na abertura de saída tem pouco efeito sobre a solução, conforme concluiu PITA and SUNDARESAN (1996).

Aumentando-se o número de pontos na direção axial, temos sempre um aumento no tempo de execução e uma diminuição no número de iterações. Porém, quando aumentou-se o número de pontos na direção radial, tivemos um aumento no número de iterações e no tempo de execução. Comparando-se a Figura (6.33), para o caso com saída axial, com a Figura (6.49), para o caso com saída lateral, observamos que o comportamento da variação da queda de pressão total com a malha é diferente para estes dois casos. A única conclusão que se pode tirar disto é que, de fato, não é possível estabelecer algum critério que possa ser usado de forma generalizada na avaliação numérica do problema em questão. A avaliação tem que ser realmente caso a caso.

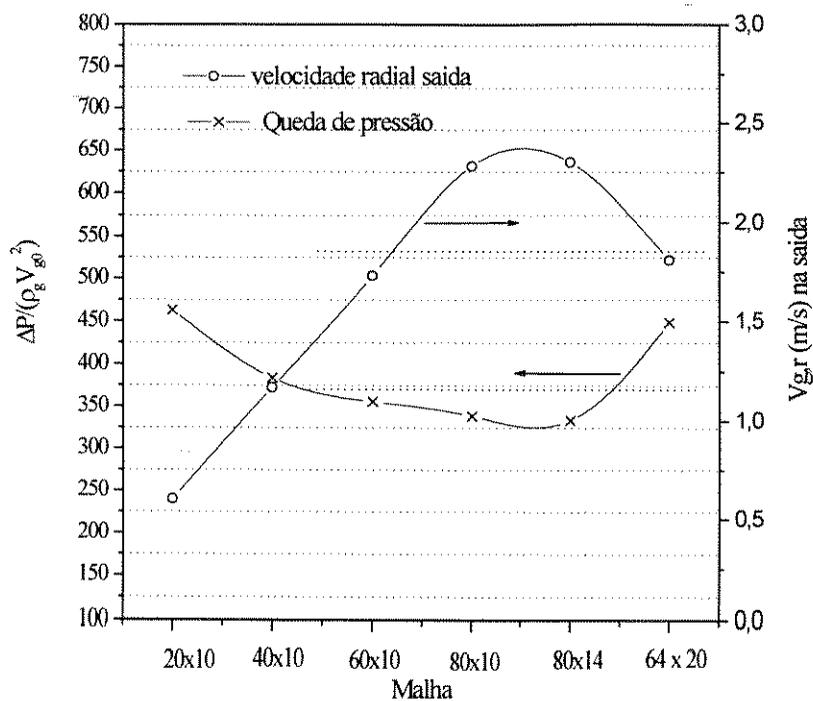


Figura 6.49 - Dependência com a malha. Queda de pressão e velocidade na saída

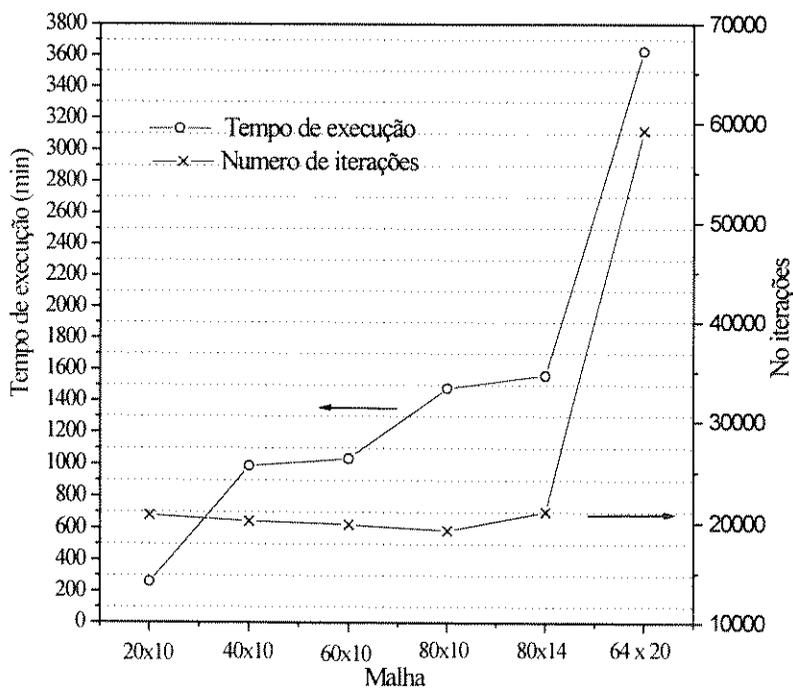


Figura 6.50 - Tempo de execução e número de iterações

6.2.7 - Análise do termo de interface de energia cinética turbulenta

Para a geometria com saída radial, fez-se uma avaliação do efeito do termo de transferência de energia cinética turbulenta entre as fases na fluidodinâmica dos reatores de leito fluidizado circulante. Usou-se uma malha de 64X20 (z x r) volumes internos, sendo esta a malha mais refinada dentro das limitações de máquina e de tempo de execução, que foi usado na simulação da fluidodinâmica do reator de leito fluidizado circulante. As Figuras (6.51) e (6.52) mostram o efeito da presença do termo de interface na concentração de partículas e na velocidade axial das partículas. A comparação com os dados experimentais de Bader (TSUO and GIDASPOW, 1990; NIEUWLAND, 1996) mostra que o termo de transferência de energia cinética do movimento flutuante entre as fases é importante, neste caso, trazendo uma pequena melhora nos perfis de concentração mas, principalmente, uma grande melhora no perfil de velocidade axial da fase partícula (Figura (6.52)). Na Figura (6.53), mostram-se as linhas de corrente para as situações com e sem o termo de interface, dando uma idéia geral das diferentes recirculações previstas nos casos. Com o termo de interface, a intensidade das recirculações previstas é mais intensa.

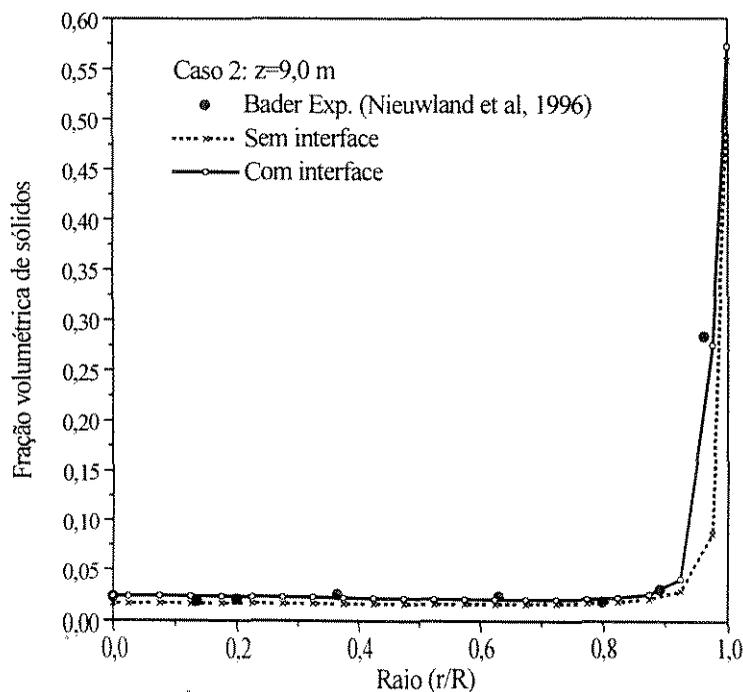


Figura 6.51 - Efeito do termo de interface na distribuição de partículas em uma dada posição axial.

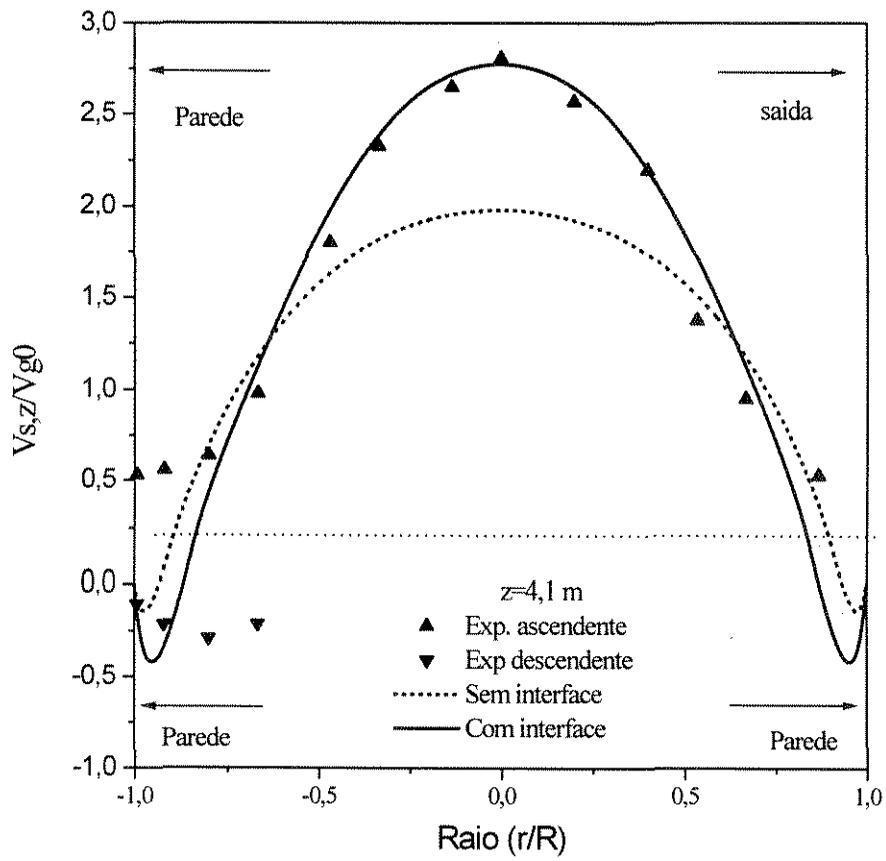


Figura 6.52 - Velocidade axial da fase particulada

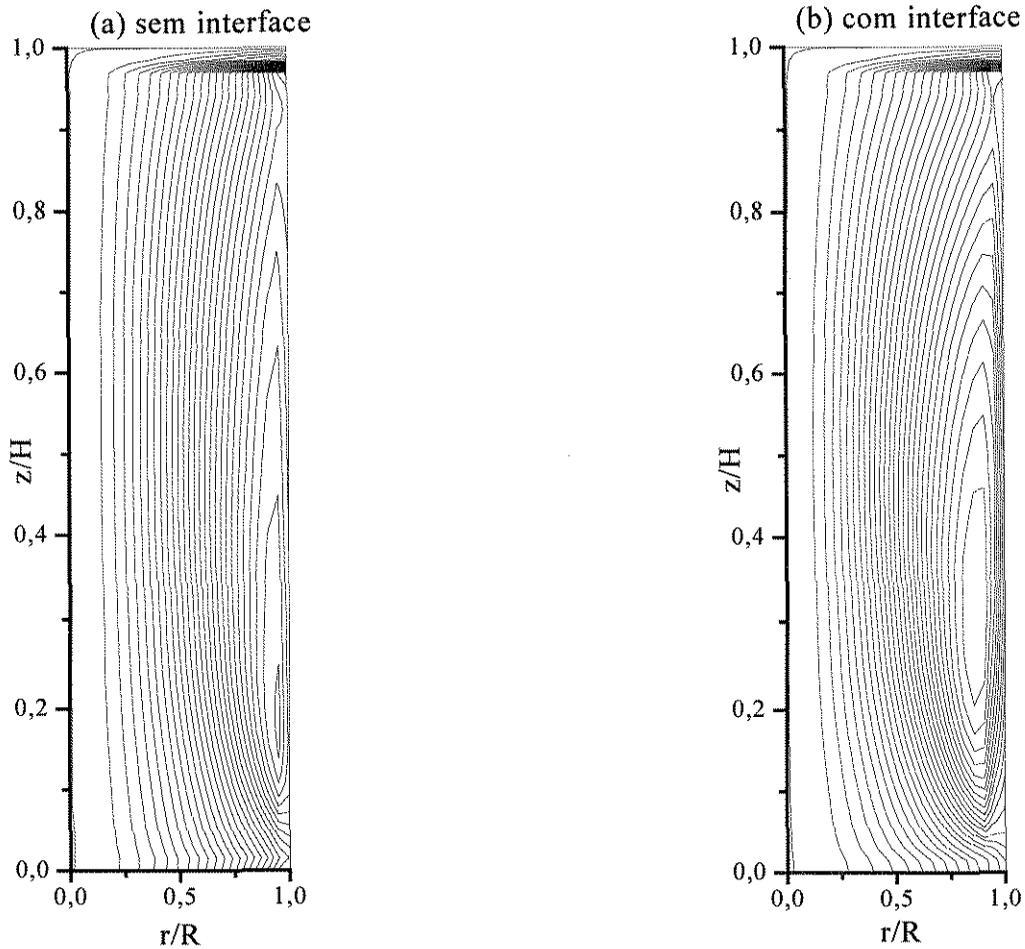


Figura 6.53 - Linhas de corrente (a) Sem interface e, b) com interface

6.2.8 - Resultados de Simulação - Padrão do escoamento para o caso 2 com saída lateral

Para o sistema com saída lateral, incluindo o termo de transferência de energia cinética turbulenta entre as fases, as Figuras (6.55) a (6.68) ilustram a fluidodinâmica do “riser”. Apresentam-se mais uma vez, os mapas de contorno das variáveis fluidodinâmicas básicas (componentes de velocidade das fases, pressão e concentração) e de outras propriedades do escoamento (energia cinética turbulenta e taxa de dissipação desta). Os resultados foram obtidos com a malha de 64x20, cuja história da convergência é mostrada na Figura (6.54).

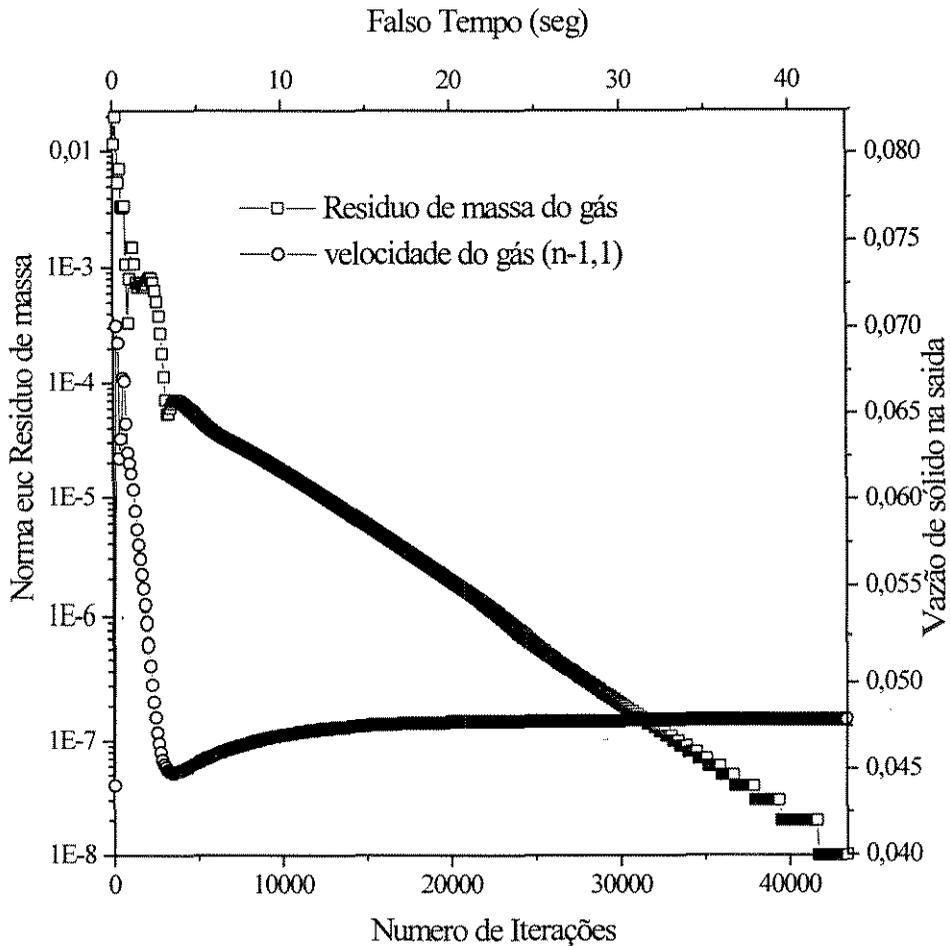


Figura 6.54 - História da convergência para o caso 2, com saída lateral.

Os picos que aparecem na norma euclidiana da fonte de massa da Figura (6.34), no caso com saída axial, não aparecem aqui. No caso com saída lateral (Fig. (6.54)), o sistema apresentou uma convergência mais estável, o que chega a ser surpreendente, pois, teoricamente, seria uma situação mais complexa, devido à geometria de saída. É verdade também que, no caso com saída axial, tínhamos um retorno de sólidos entrado próximo a parede, numa situação irreal, que não acontece no caso com saída lateral. Talvez isto explique a maior estabilidade neste caso. O tempo de execução para o caso com saída lateral foi de 3625 minutos (2,5 dias).

Comparando-se os mapas de contorno do sistema com saída axial com os mapas do sistema com saída lateral, observa-se que um dos efeitos é o de deslocamento dos máximos de velocidade axial do gás e das partículas, da saída para o caso com saída axial, para uma

região numa posição intermediária do tubo, para o caso com saída lateral. Mas alguns detalhes localizados surgem, como por exemplo, as mudanças na distribuição das grandezas turbulentas (energia cinética turbulenta, taxa de dissipação desta (fase gás) e a temperatura granular e pressão de sólidos (fase particulada)). Os efeitos da geometria de saída são exatamente os pontos indicados. Por exemplo, as Figura (6.59) e (6.65) mostram o surgimento de duas regiões com alta energia cinética turbulenta do gás e alta temperatura granular da fase particulada, exatamente nas mesmas regiões. Isto pode ser devido também ao termo de transferência de energia cinética turbulenta entre as fases.

Uma característica que foi revelada também com a saída lateral, foi a existência de regiões de zonas mortas, indicadas nas linhas de corrente do gás e das partículas, nas Figuras (6.62) e (6.68), respectivamente. Estas regiões podem causar problemas localizados em reatores, tais como pontos localizados de altas temperaturas ou mesmo de baixa conversão.

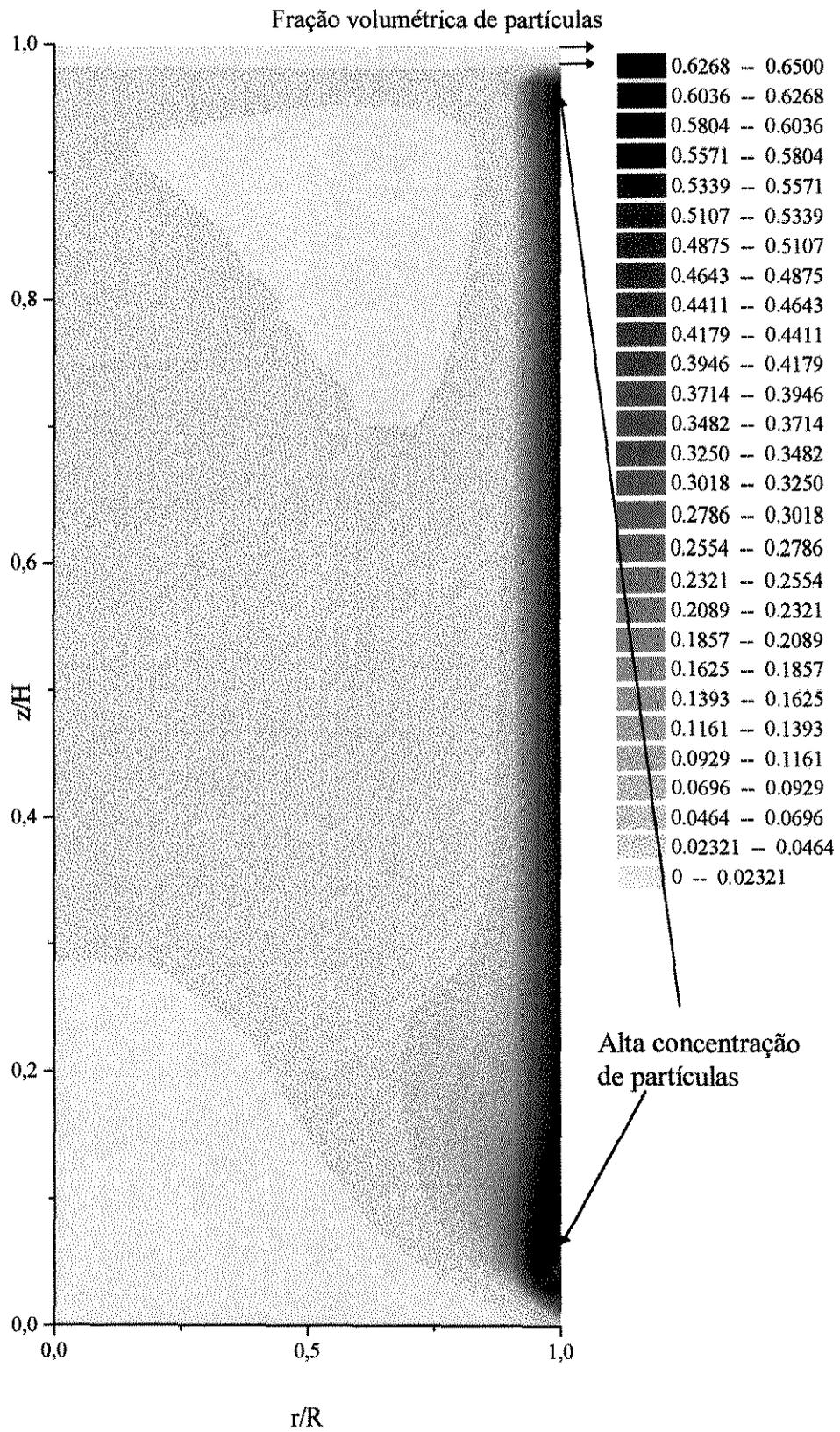


Figura 6.55 - Concentração de partículas

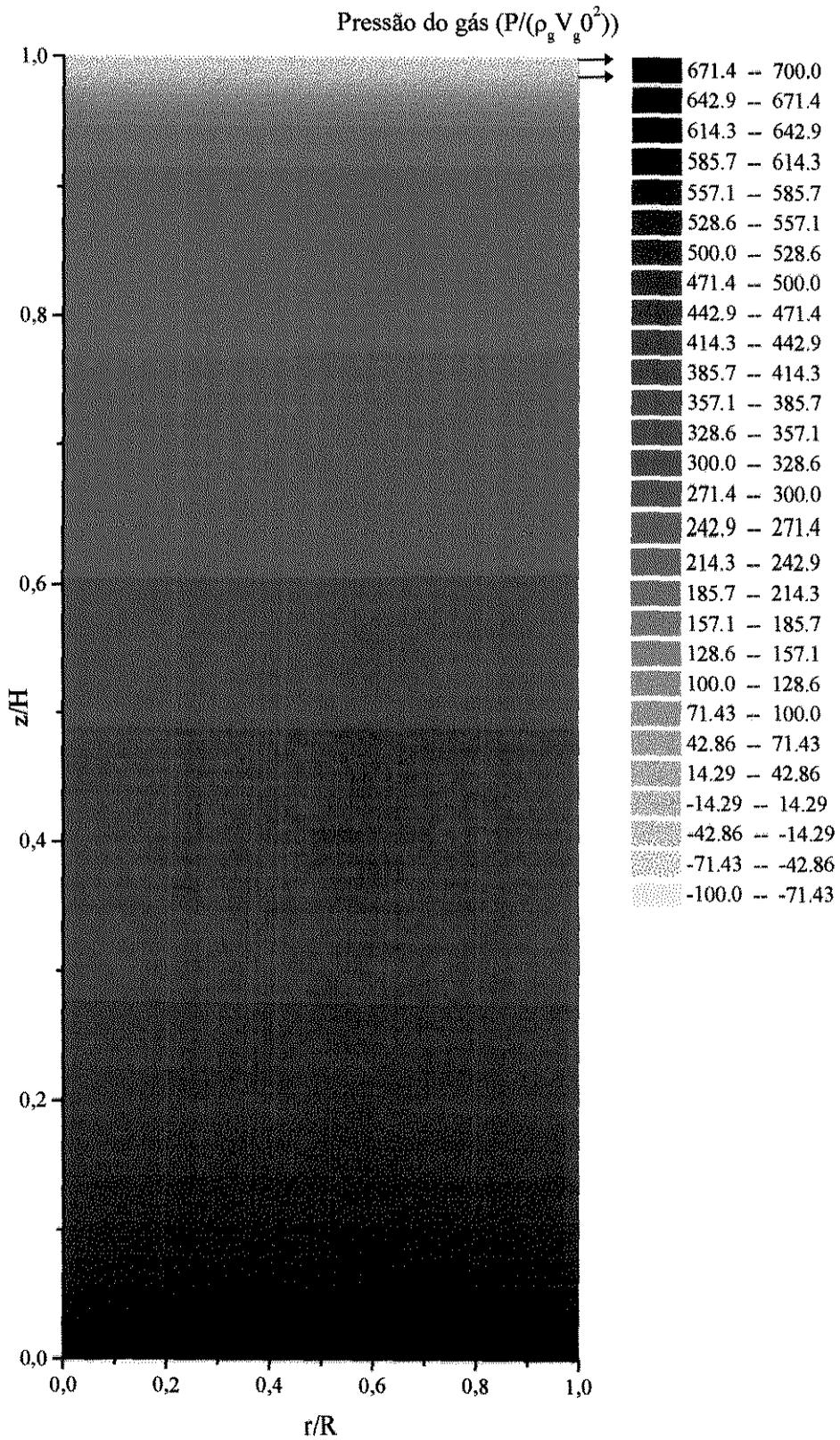


Figura 6.56 - Pressão do gás

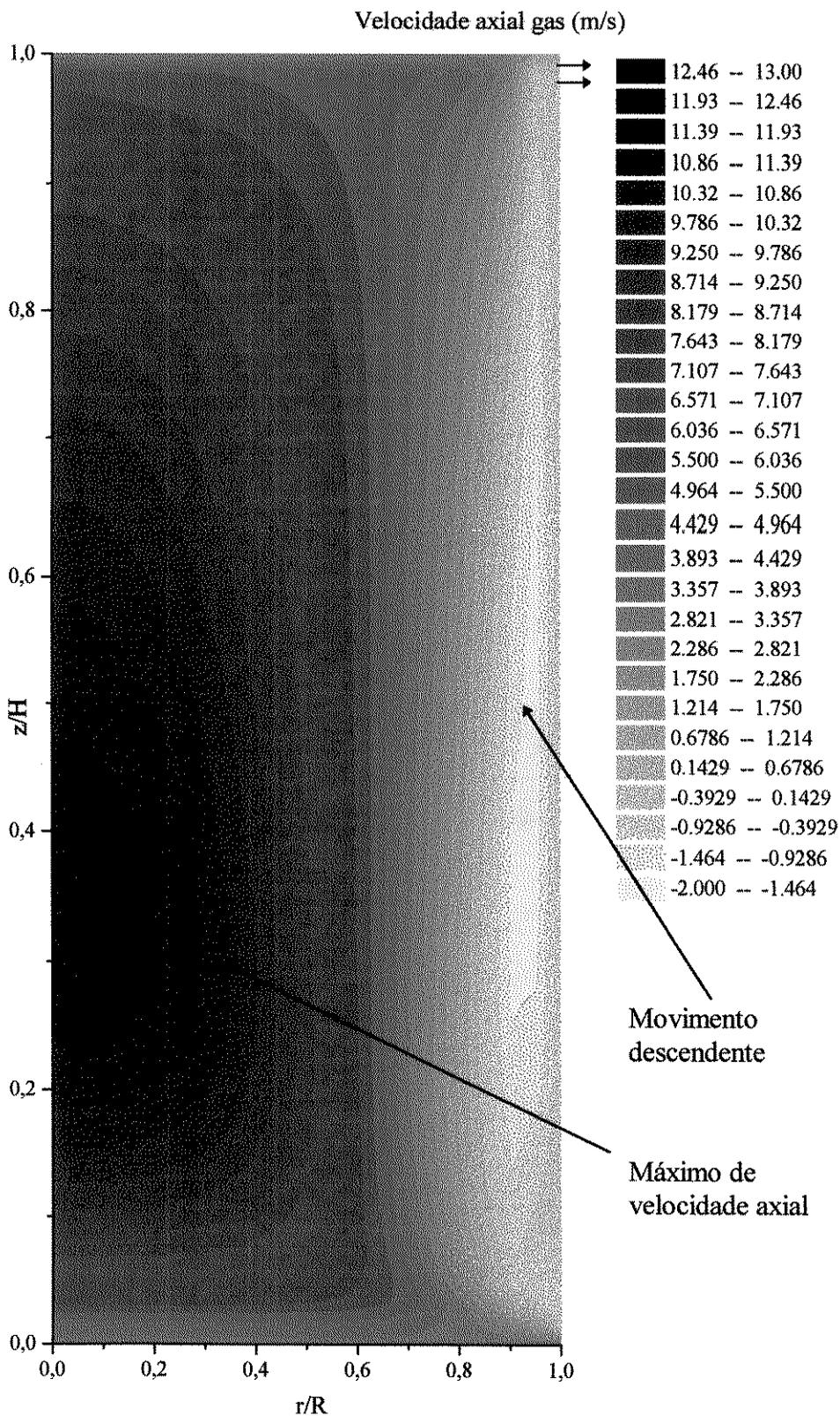


Figura 6.57 - Velocidade axial do gás

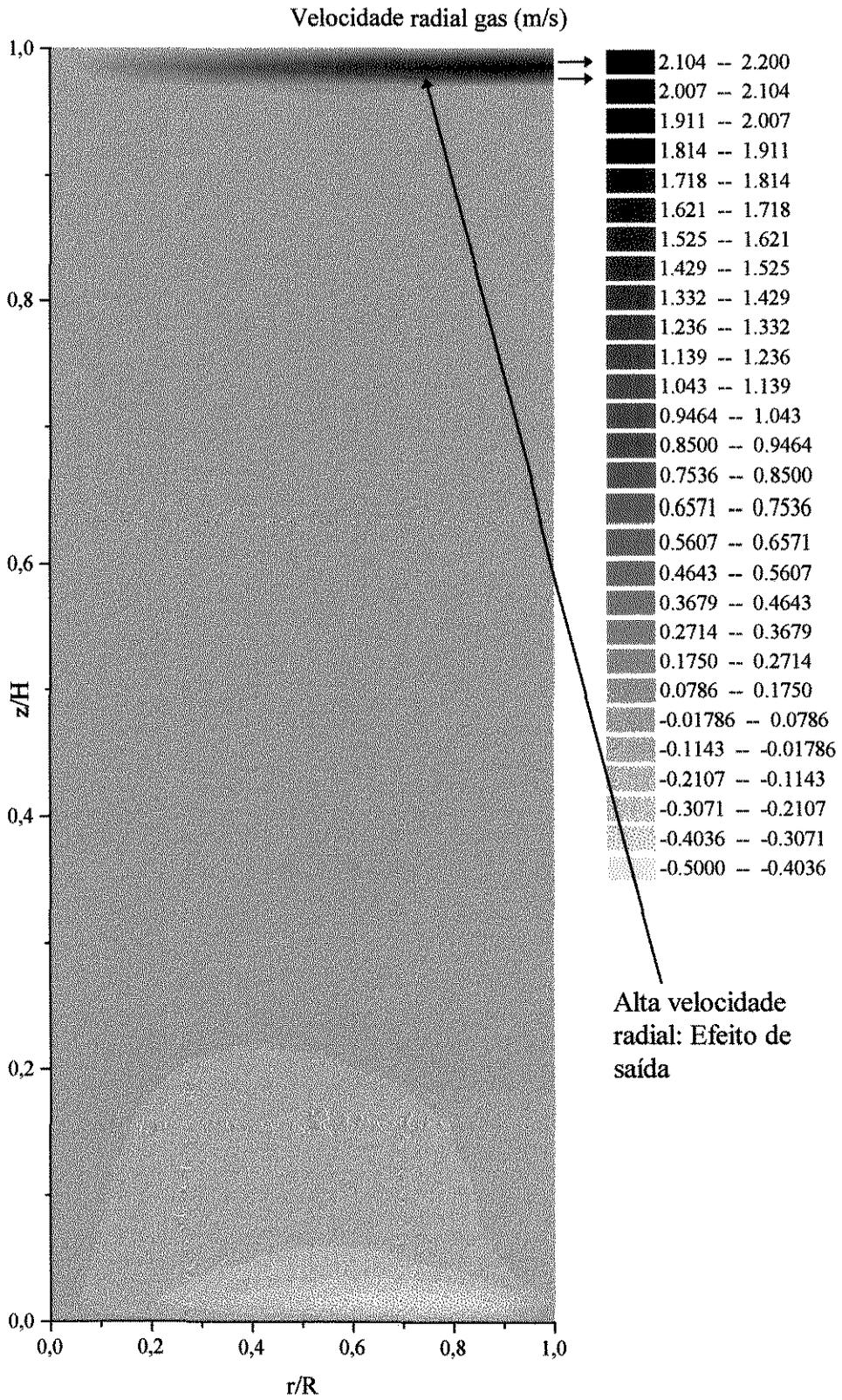


Figura 6.58 - velocidade radial do gás

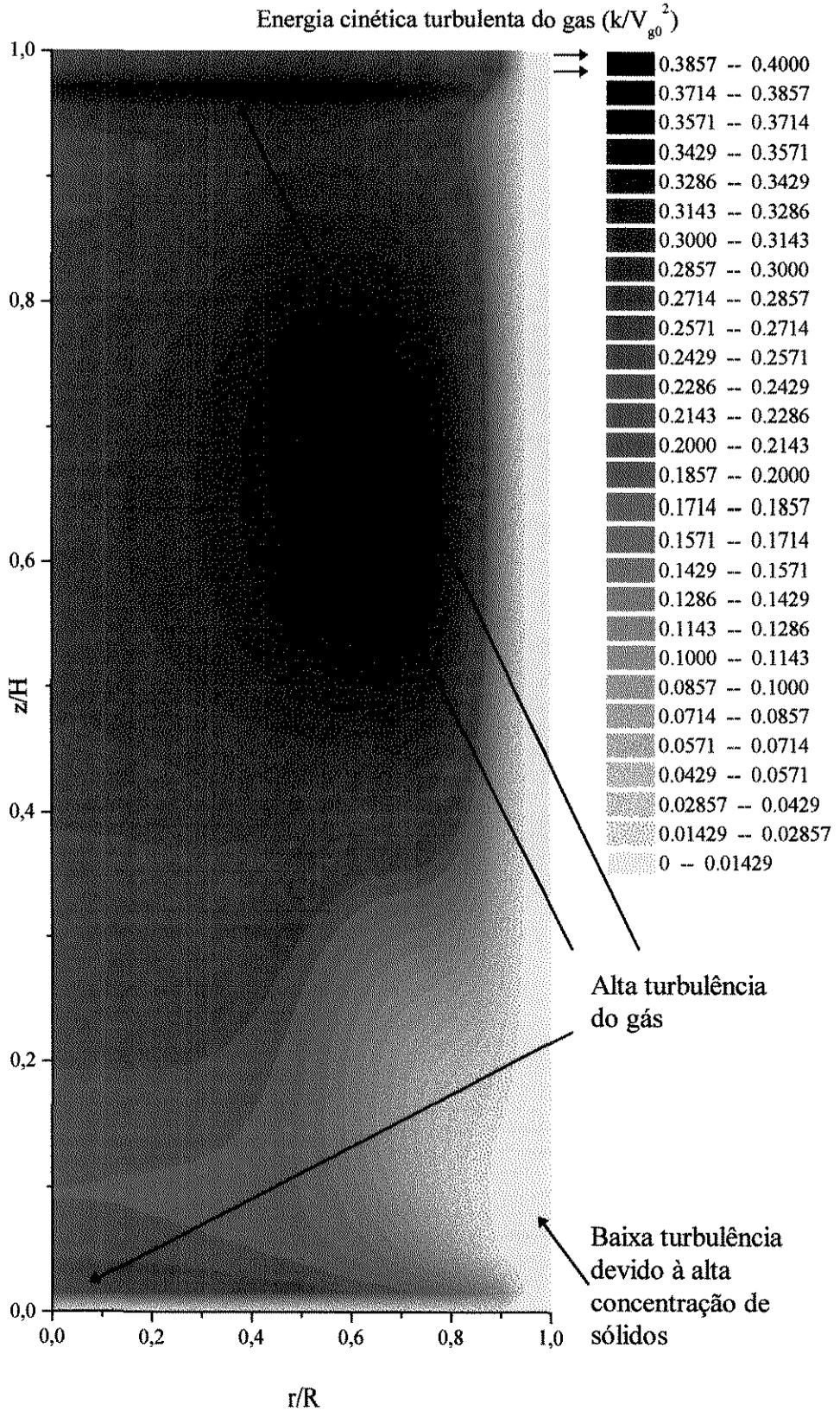


Figura 6.59 - Energia cinética turbulenta

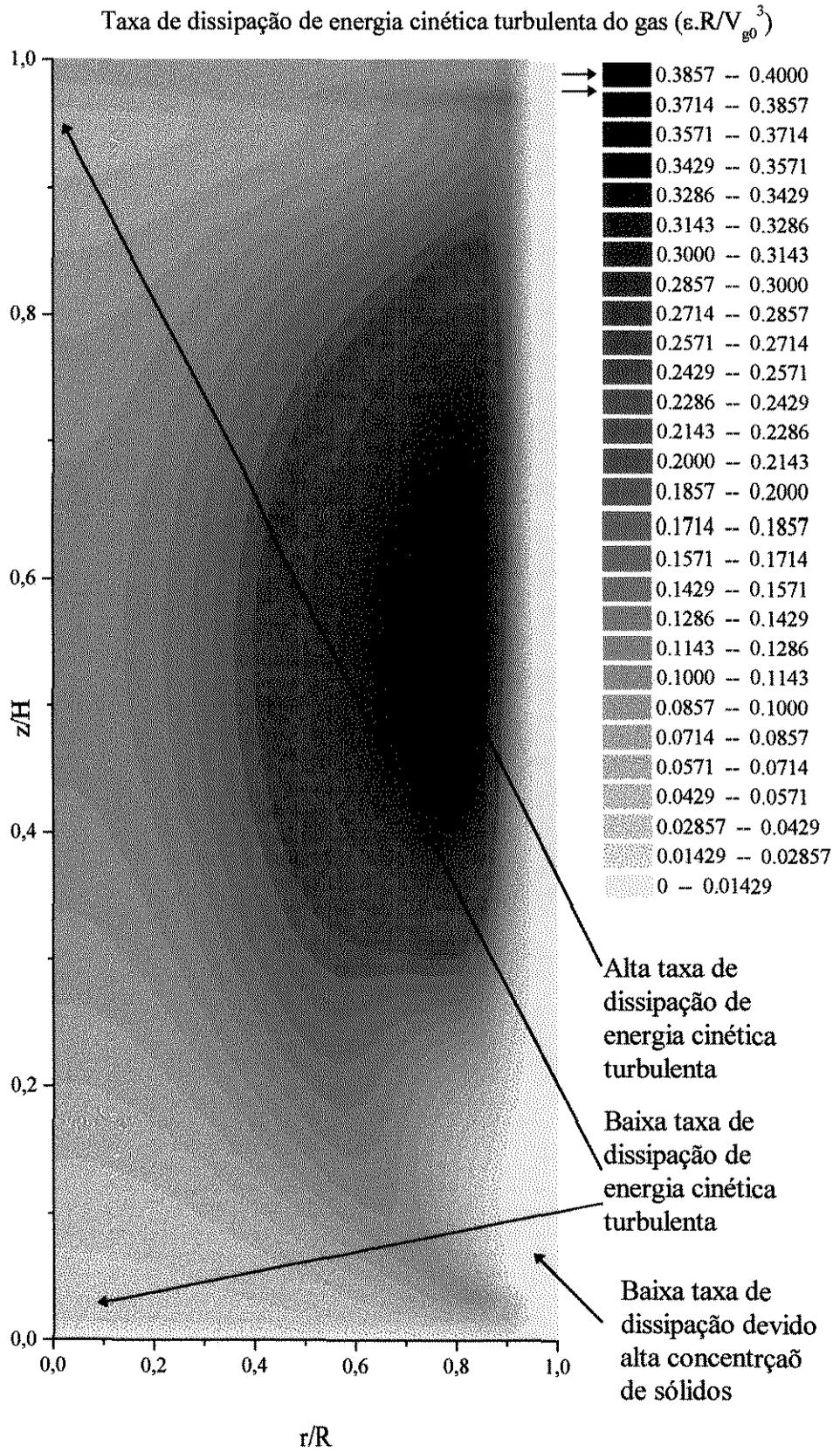


Figura 6.60 - Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta

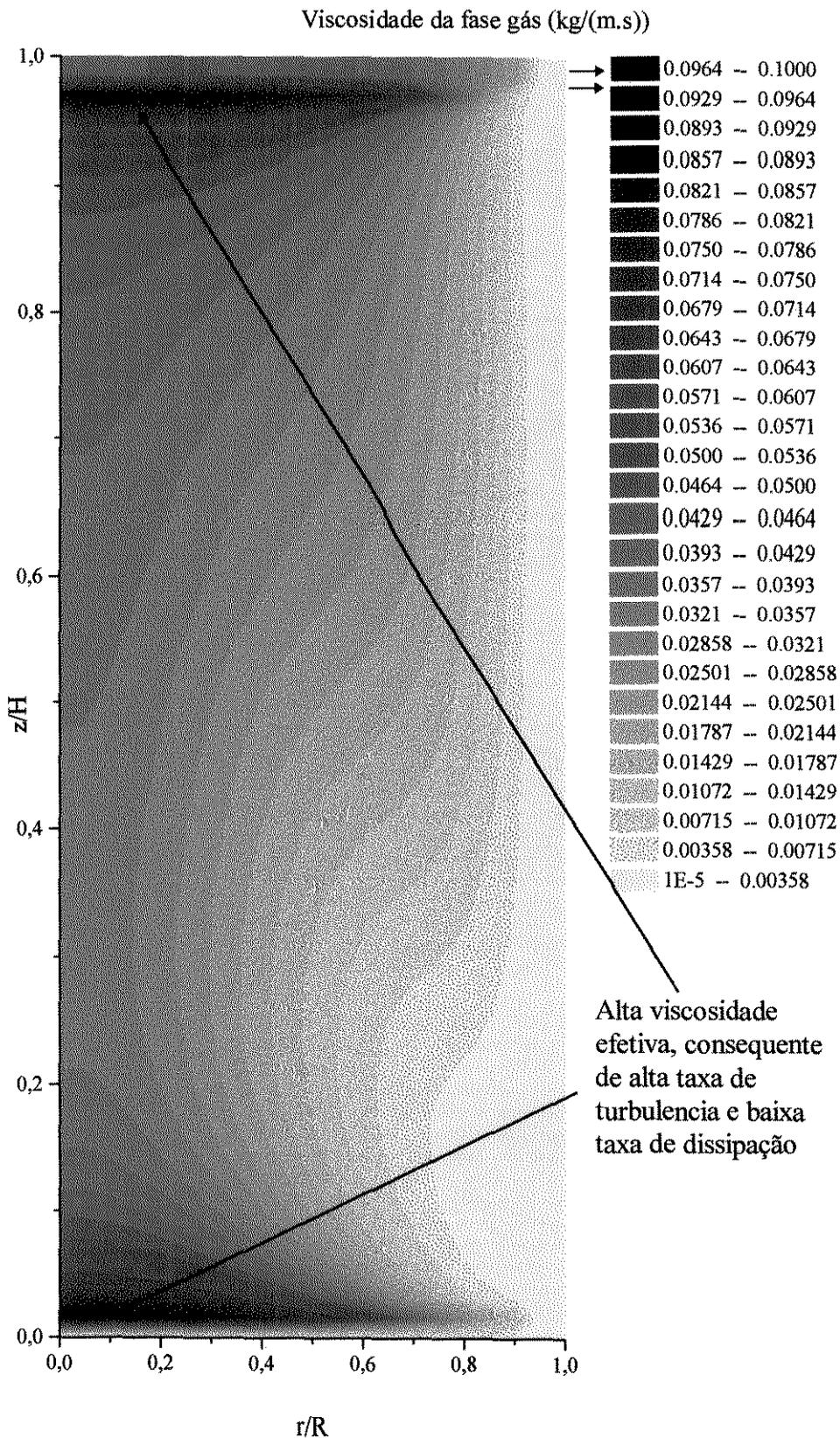


Figura 6.61 - Viscosidade efetiva da fase gasosa

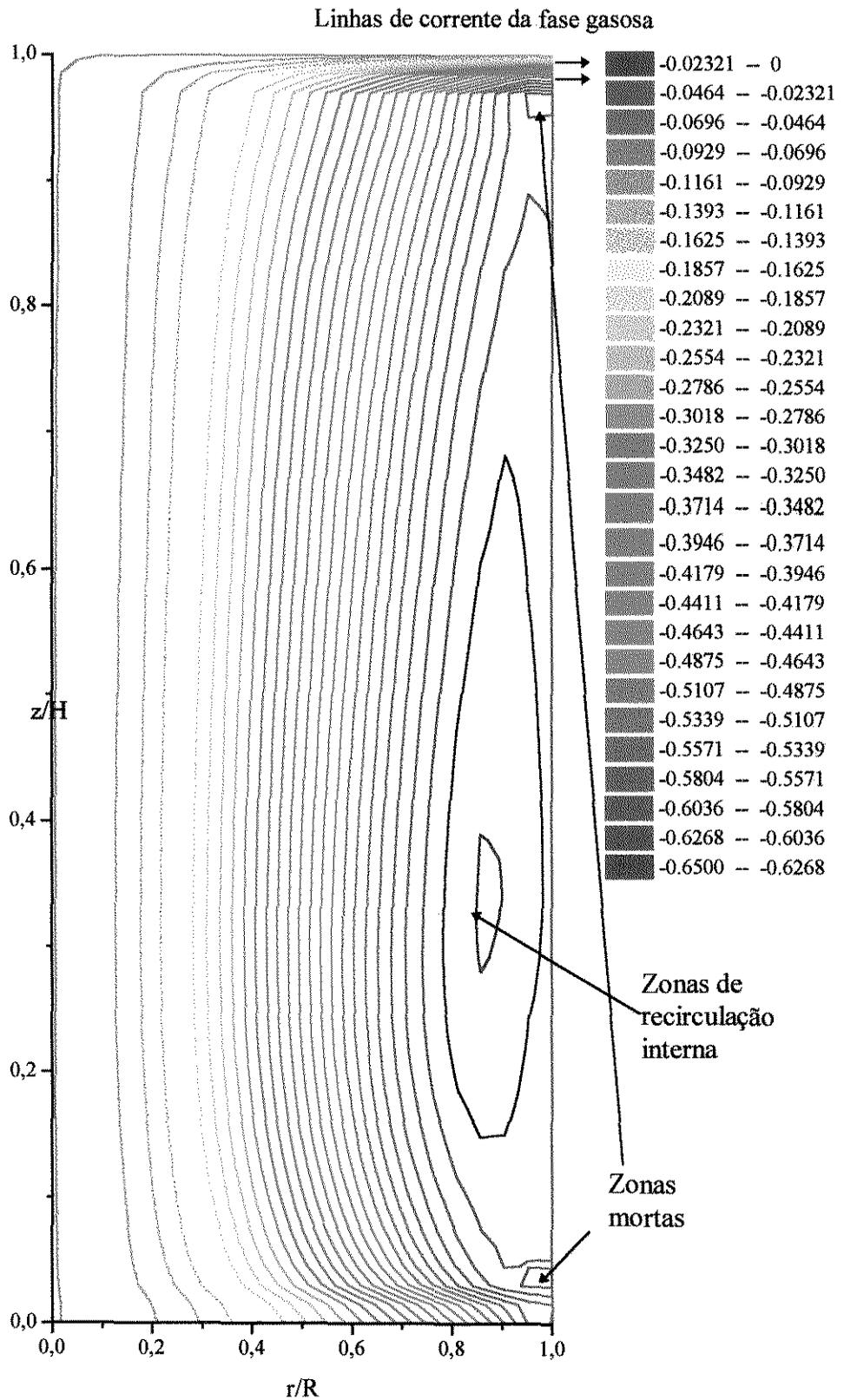


Figura 6.62 - Linhas de corrente do gás

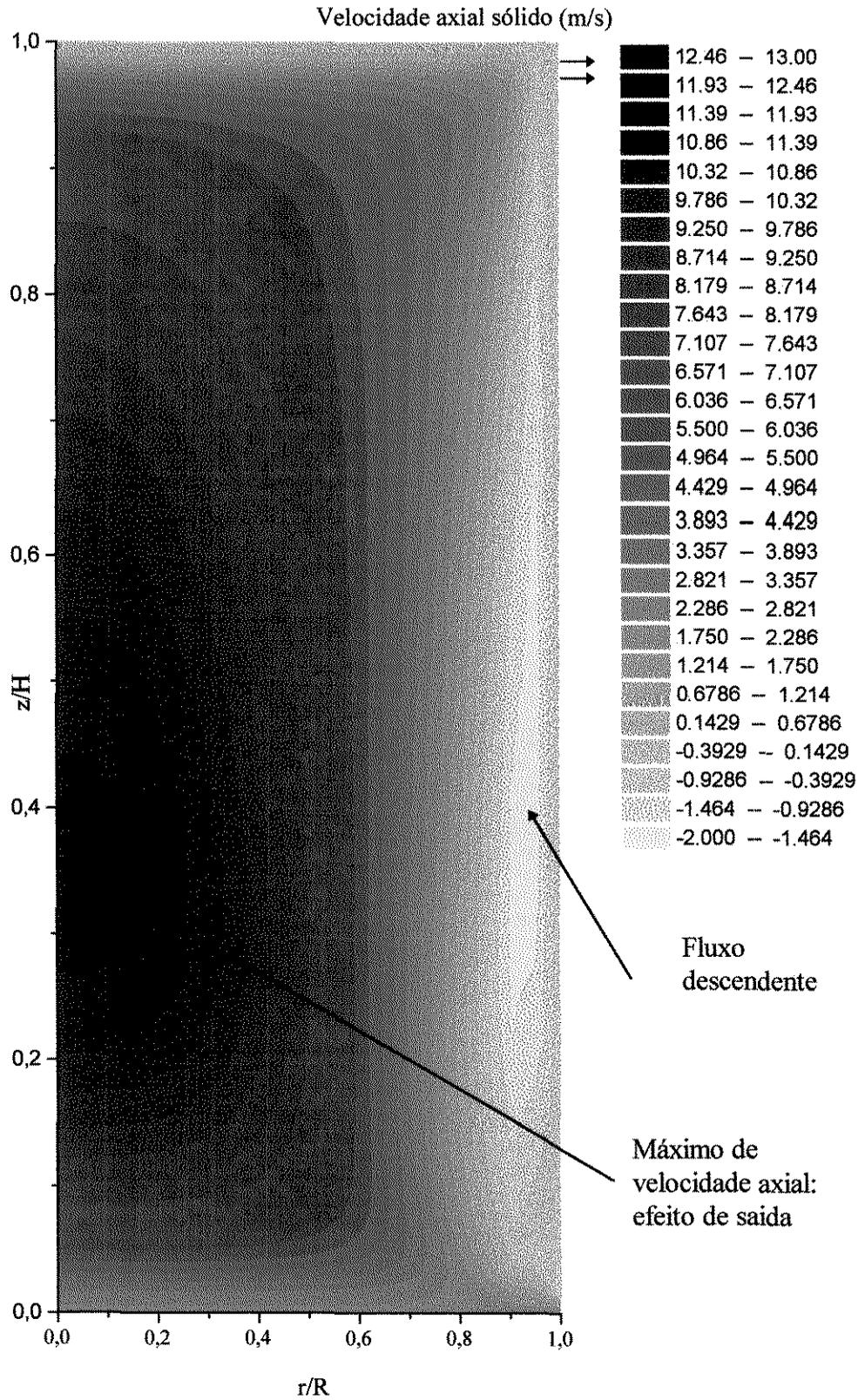


Figura 6.63 - Velocidade axial do sólido

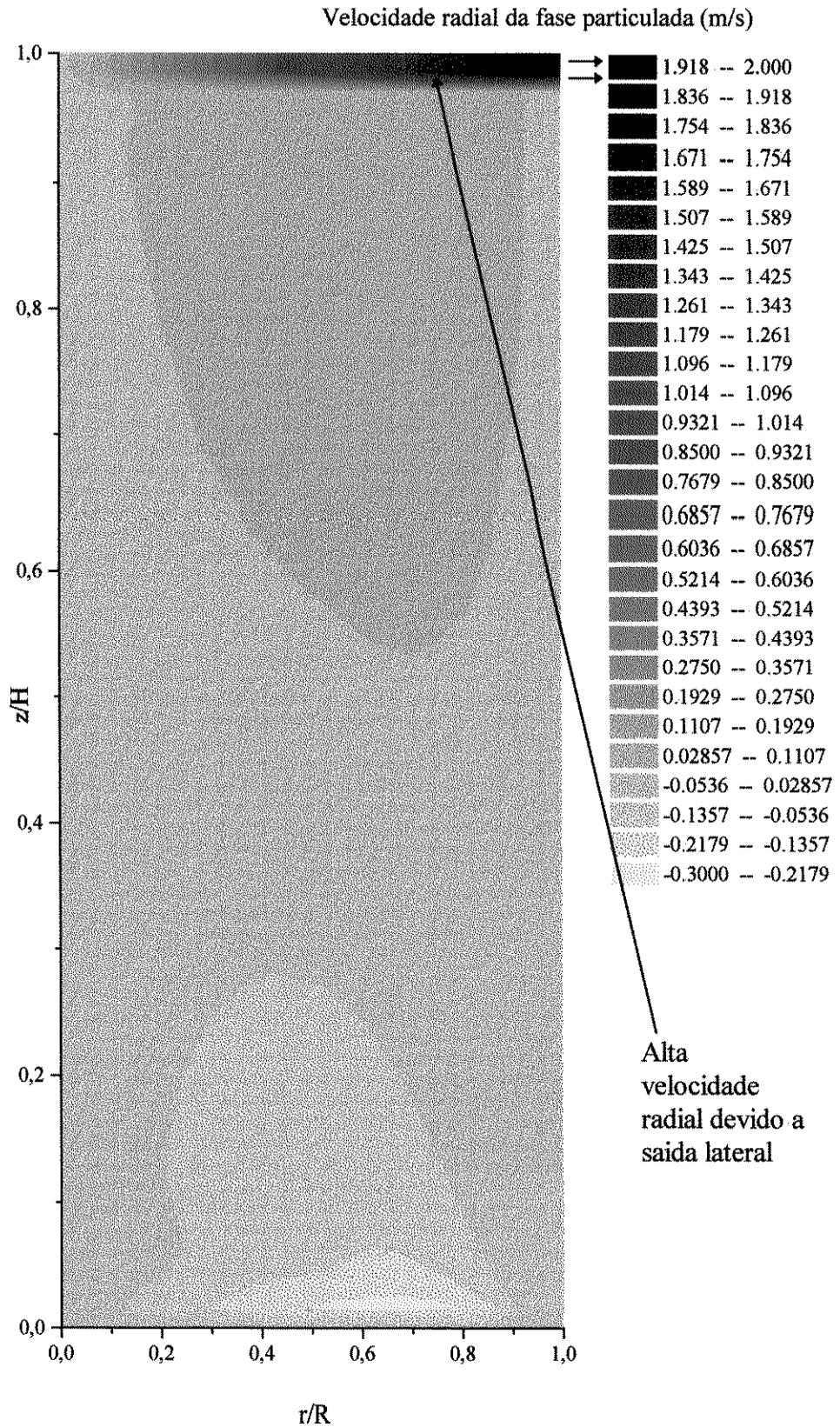


Figura 6.64 -Velocidade radial do sólido.

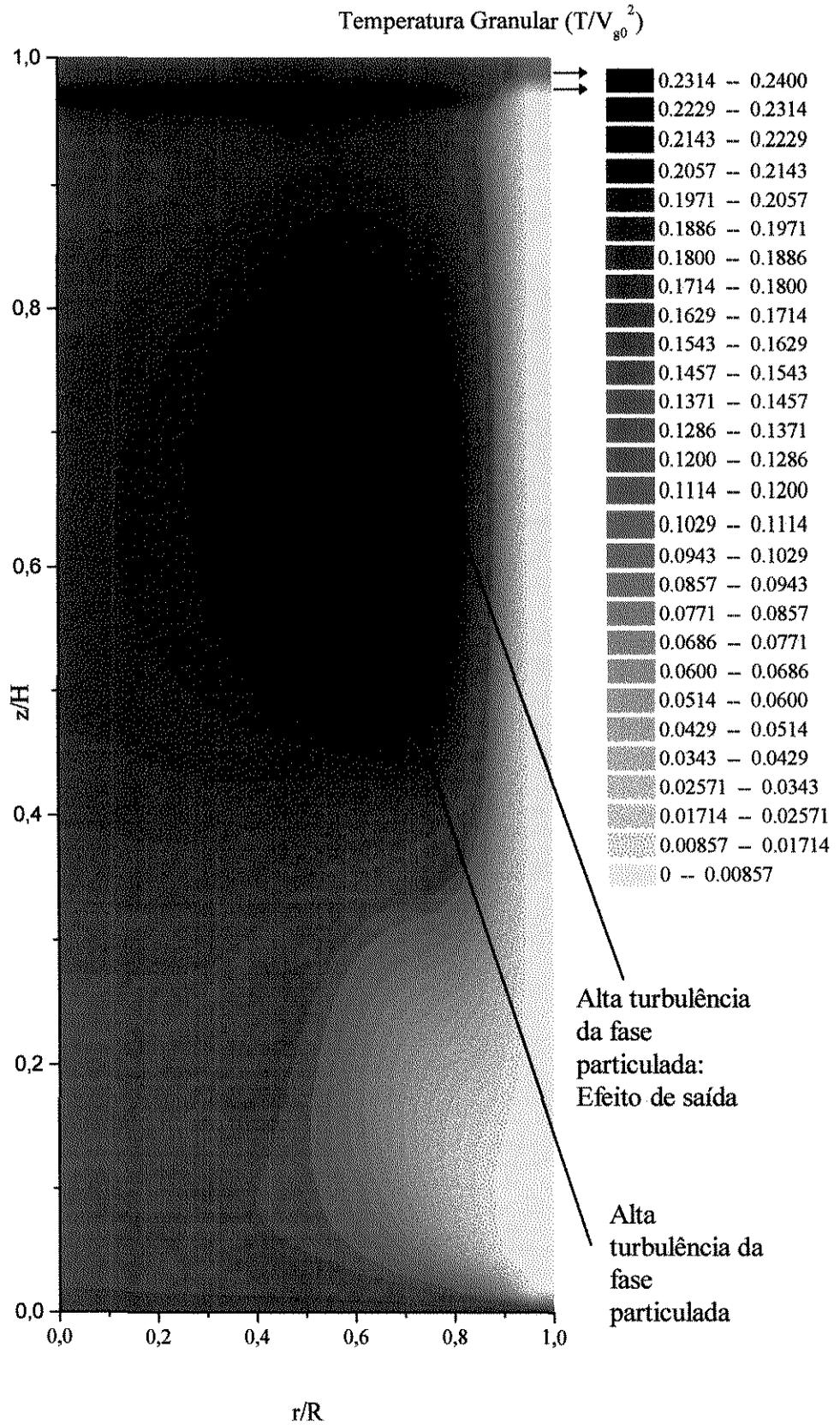


Figura 6.65 - Temperatura granular

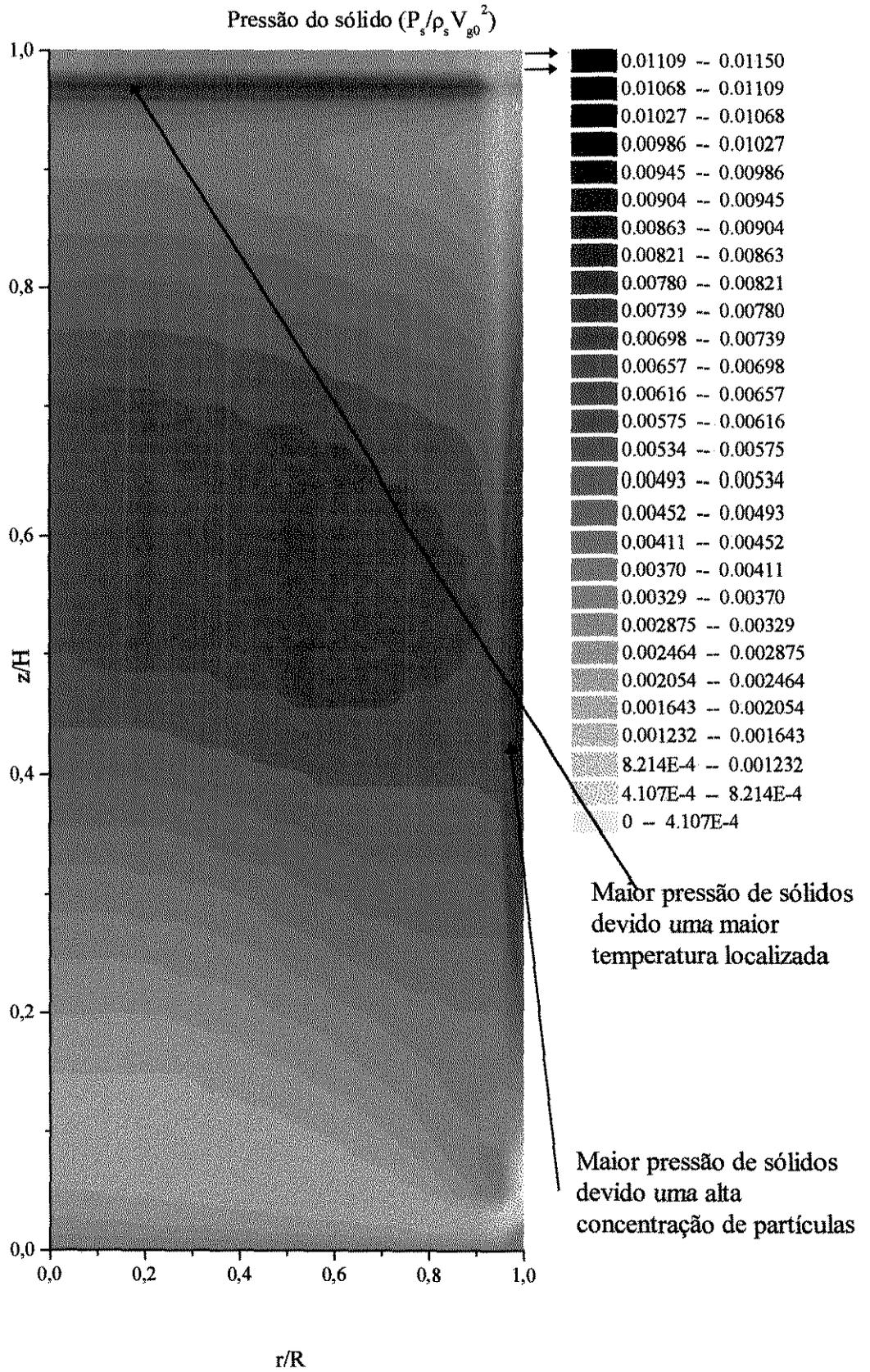


Figura 6.66 - Pressão do sólido

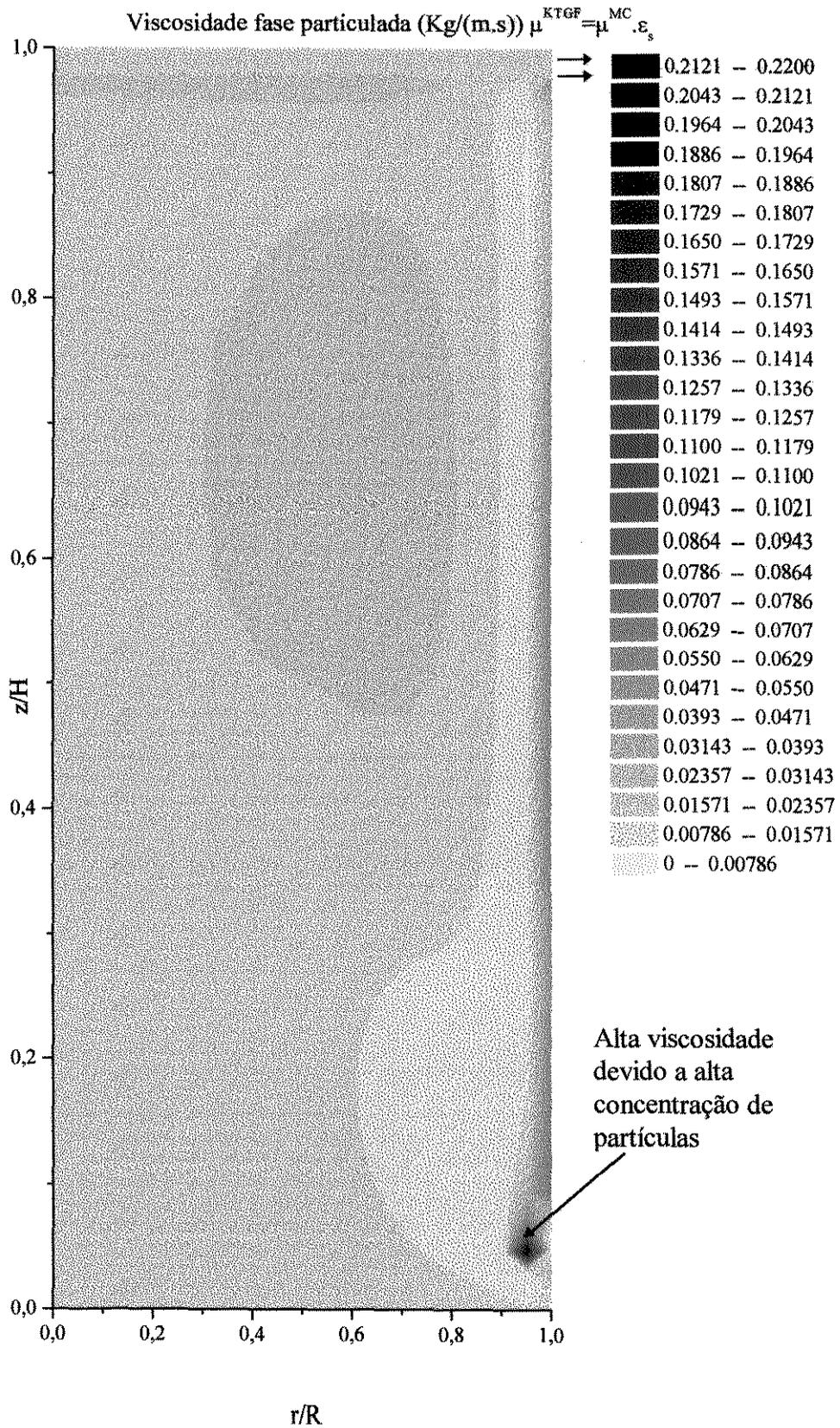


Figura 6.67 - Viscosidade efetiva da fase particulada

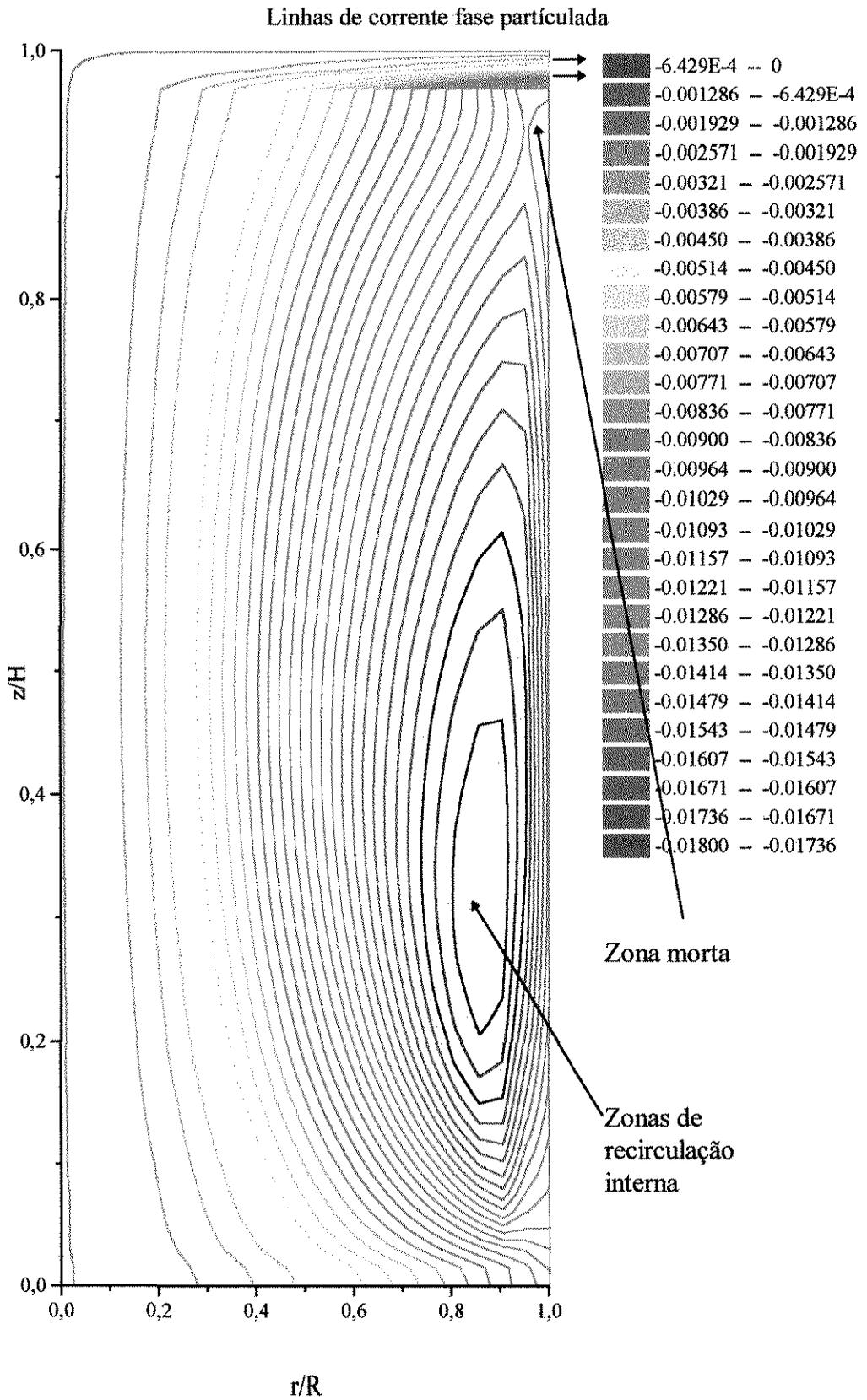


Figura 6.68 - linhas de corrente da fase particulada

6.3 - Caso 3 - Partículas Típicas de Combustores de Leito Fluidizado Circulante

O segundo caso de interesse é aquele que simula as condições típicas em combustores.

Tabela 6.9 - Características do sistema do caso 3

Raio do Tubo (m)	0,0381
Altura (m)	5,50
Velocidade do gás (m/s)	4,979
Densidade do gás (kg/m ³)	1,16
Viscosidade do gás (kg/m.s)	1,85x10 ⁻⁵
Fração volumétrica de sólidos	0,0246
Velocidade do sólido (m/s)	0,386
Densidade do sólido (kg/m ³)	2620
Diâmetro das partículas (m)x10 ⁶	520
Concentração máxima	0,45
Esfericidade	1
Reynolds partícula	149,76
Reynolds tubo	23204,17

Para este caso, vamos fazer as mesmas análises referentes ao modelo de tensões para a fase particulada e do termo de interface. Os parâmetros, assume-se simplesmente os mesmos do caso 2. O objetivo neste caso, é verificar o modelo em sistemas com diferentes características para sustentar melhor as conclusões finais.

6.3.1 -Saída axial: Análise de Sensibilidade Paramétrica para o modelo cinético escoamento de materiais granulares

O caso 3, não apresenta uma sensibilidade tão acentuada quanto o caso 2, aos parâmetros do modelo cinético do escoamento de materiais granulares. Para ilustrar este fato, ao parâmetro mais sensível para o caso 2, o coeficiente de restituição partícula-partícula, aplicamos uma variação que extrapola aquela na qual o sistema 2 não aceitava (não funcionava). Para o caso 2, uma variação entre 0,999 e 1, já mudava completamente o padrão do escoamento, inclusive, invertendo o sentido do escoamento no centro do tubo. Para o caso 3, esta mesma variação no coeficiente de restituição partícula-partícula não traz nenhuma mudança ao padrão do escoamento. Para ilustrar esta pouca sensibilidade do caso 3, as Figuras (6.69) a (6.72), mostram as mudanças nos perfis de algumas variáveis, para os valores do coeficiente de restituição partícula-partícula de 0,9 e 1. Aos outros parâmetros a insensibilidade é quase que total para o caso 3.

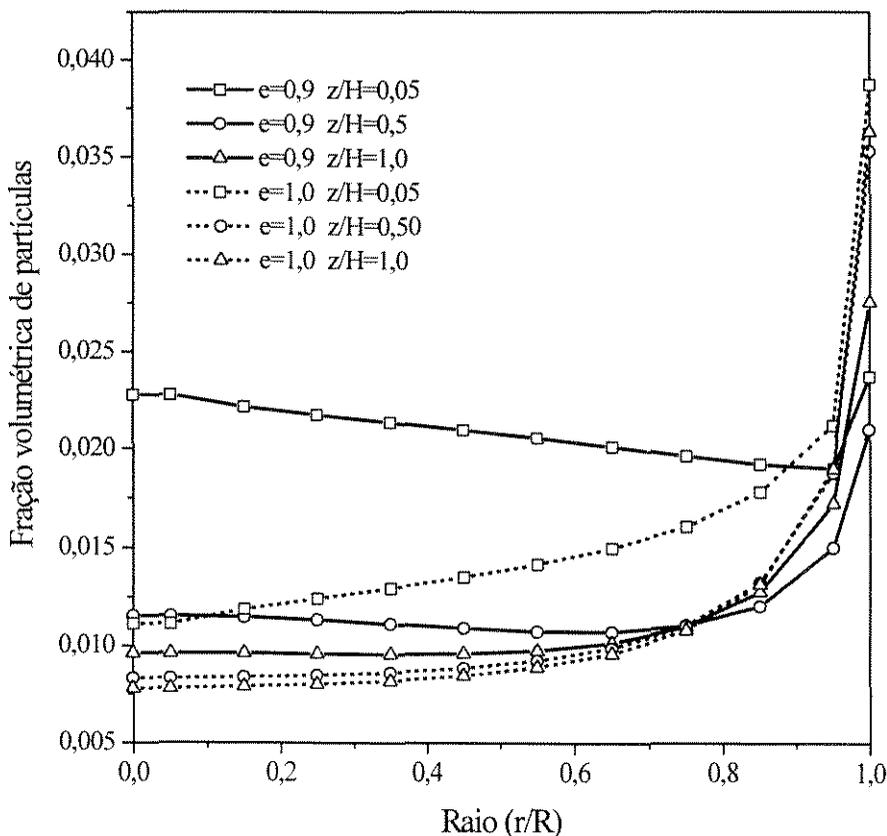


Figura 6.69 - Concentração de partículas

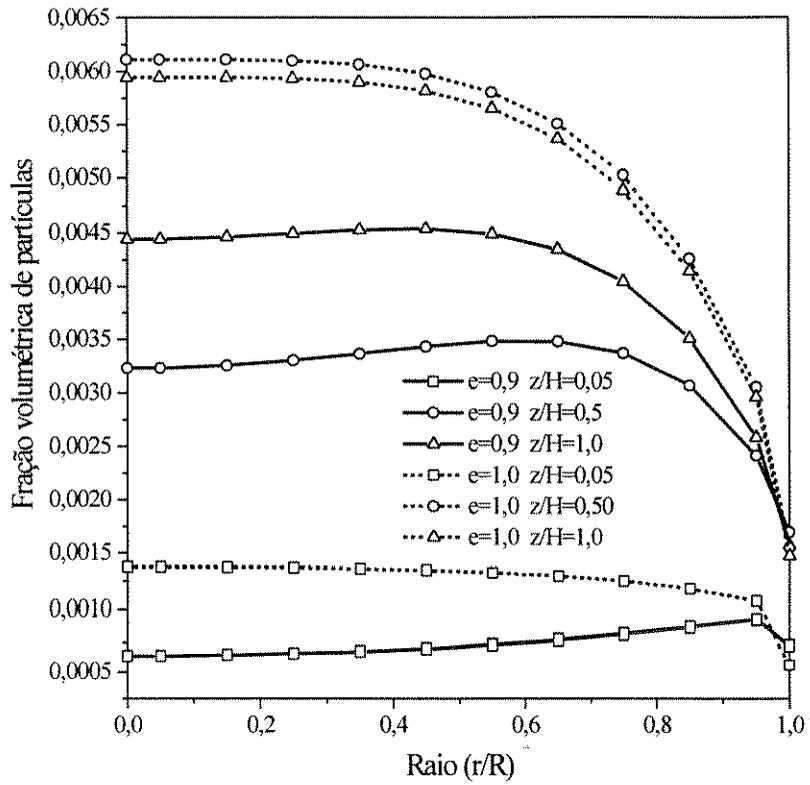


Figura 6.70 - Temperatura granular

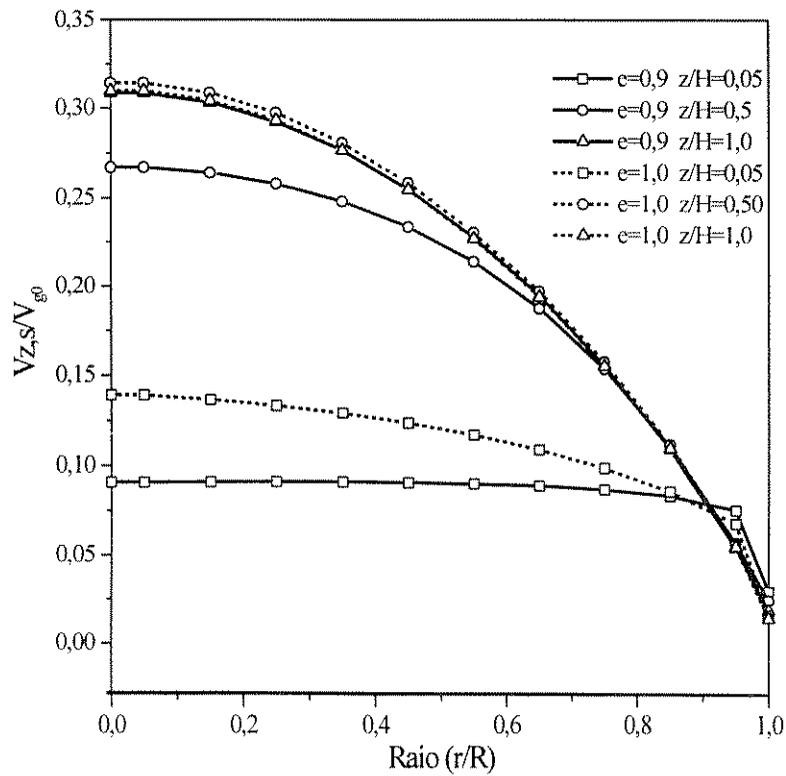


Figura 6.71 - Velocidade axial da fase particulada

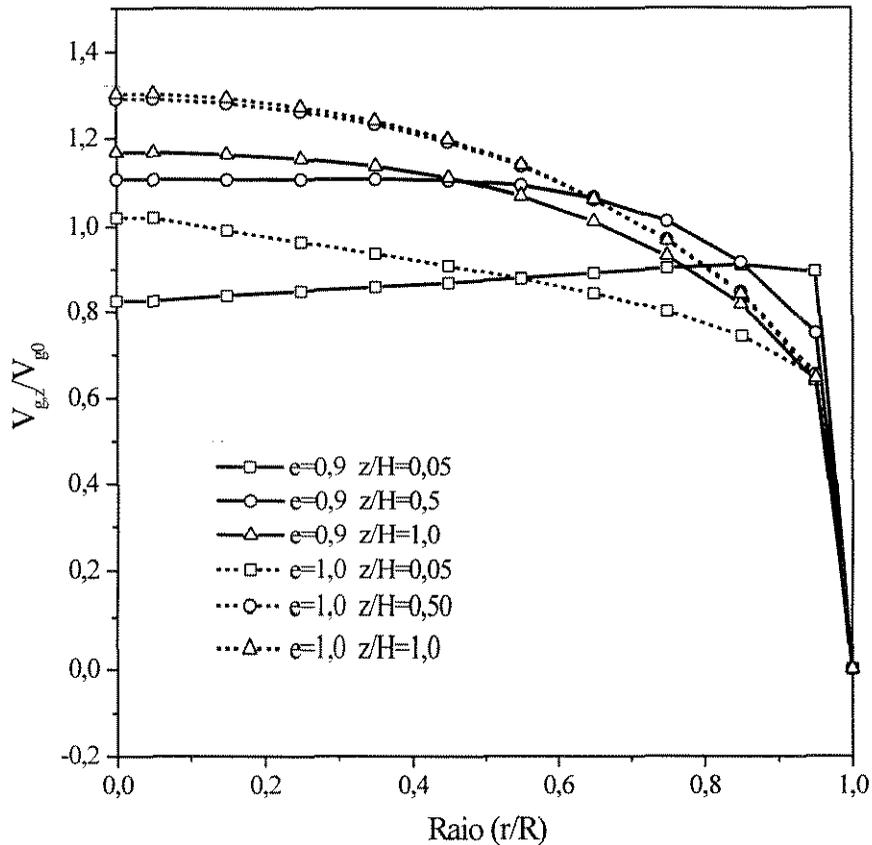


Figura 6.72 - Velocidade axial da fase gás

6.3.2 - Análise qualitativa de oscilação numérica: Efeito da interpolação da velocidade do sólido nas faces.

No arranjo co-localizado, quando faz-se a linearização os fluxos convectivos nas faces que compõem os coeficientes da equação para a variável ϕ não são conhecidos e precisam ser calculados de alguma forma. Para a fase gasosa, armazenam-se os valores obtidos pela interpolação do momentum, no acoplamento pressão-velocidade, e estes são usados como o fluxo conhecido no cálculo da parcela convectiva dos coeficientes. Entretanto, para a fase particulada, como esta não faz parte do acoplamento pressão-velocidade, qualquer outra forma de interpolação pode ser usada. Comparando-se uma interpolação linear, com uma interpolação da equação de conservação do momentum para a fase particulada na sua forma discretizada, observa-se que este último tipo de interpolação elimina problemas de oscilações numéricas,

observadas por MEIER et al (1997). No seu trabalho, os autores avaliaram uma situação bem mais diluída (0,13% em volume de partículas) onde o problema da oscilação é menos acentuado. Para situações mais concentradas, o problema é mais grave e aparece mais acentuadamente na velocidade radial, tendo sido eliminado, como dito anteriormente, pela interpolação do momentum. As Figuras (6.73) e (6.74) mostram o problema da oscilação na concentração e na velocidade radial da fase particulada, respectivamente. Pode-se observar ainda destas figuras que a oscilação não existe com a interpolação do momentum.

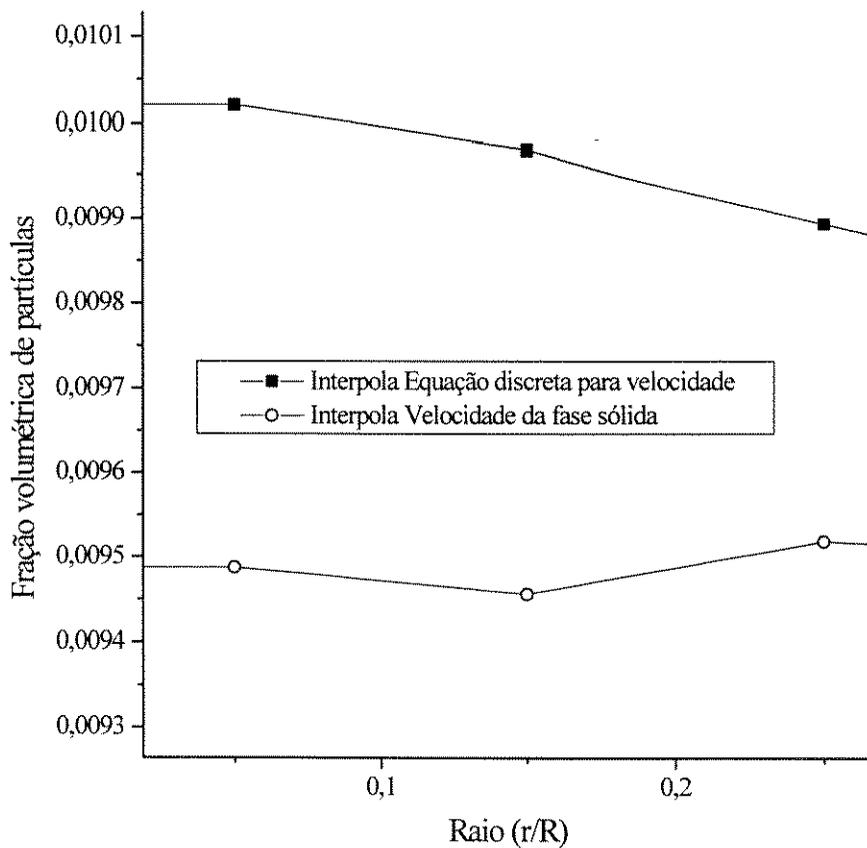


Figura 6.73 - Fração volumétrica de partículas em $z/H=0,9$. Efeito do tipo de interpolação para o cálculo da velocidade da fase particulada sobre qualidade da solução.

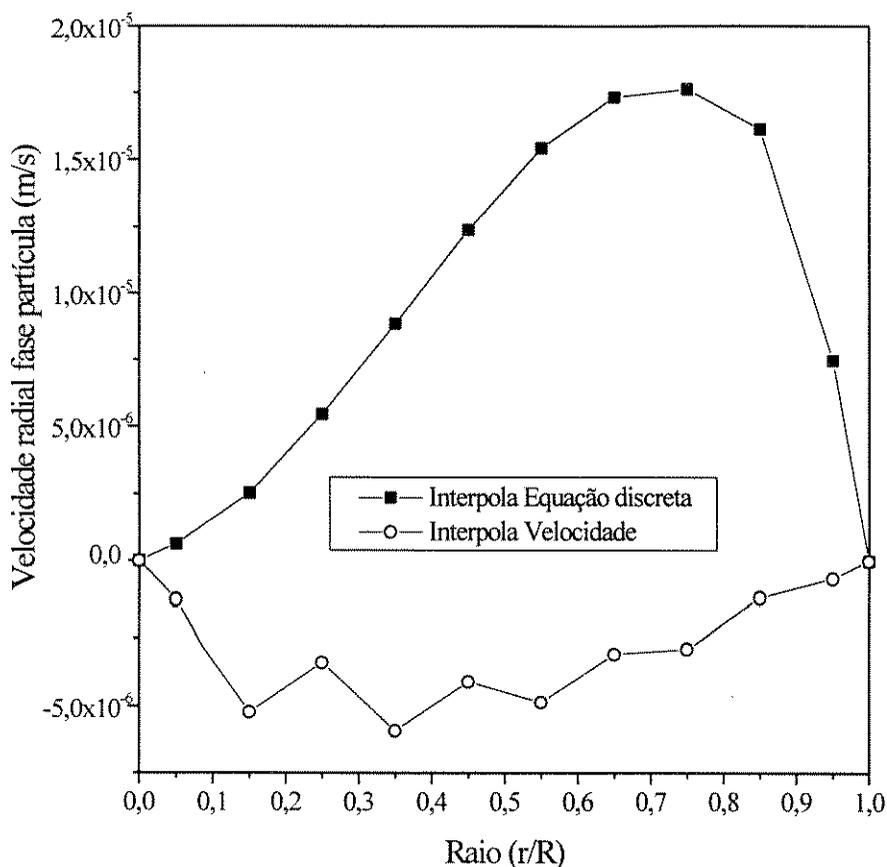


Figura 6.74 - Velocidade radial das partículas em $z/H=0,9$. Efeito do tipo de interpolação para o cálculo da velocidade da fase particulada nas faces sobre a qualidade da solução.

6.3.3 - Modelo de tensões para a fase particulada: Invíscido x Newtoniano x Cinético

Com o mesmo algoritmo, parâmetros do modelo cinético e o esquema de interpolação dados na Tabela 6.10, faz-se, também para o caso 3, agora uma análise dos modelos de tensões para a fase particulada. Para mantermos a consistência com a análise feita no caso 2, o termo de transferência de energia cinética do movimento flutuante também foi omitido nesta análise, mas será avaliado em seguida. Para a fase gasosa, utilizou-se também o modelo $k-\epsilon$ em função da já citada vantagem de permitir a inclusão do termo de transferência da energia cinética do movimento flutuante entre as fases. Os parâmetros do modelo cinético do escoamento de materiais granulares, são os ótimos obtidos do caso 2.

Tabela 6.10 - Parâmetros numéricos: caso 3

Parâmetro numérico	Utilizado
Algoritmo	SIMPLEC
Malha	20 x 10
Esquema	Híbrido
Passo de tempo	1×10^{-3}
Relaxações todas as variáveis	1,0
Fator de redução da pressão	1,0

Nas Figuras (6.75) a (6.77) comparam-se os resultados obtidos com os 3 modelos de tensões, através dos perfis de concentração de partículas, velocidade do gás e das partículas, respectivamente. Como pode-se observar, também neste caso, os resultados obtidos com modelo cinético do escoamento de materiais granulares (KTGF) são os que melhor concordam com os dados experimentais, embora quantitativamente os três modelos deixem a desejar. Então, mesmo o modelo cinético do escoamento de materiais granulares precisa ser melhorado para obter-se melhores resultados quantitativos.

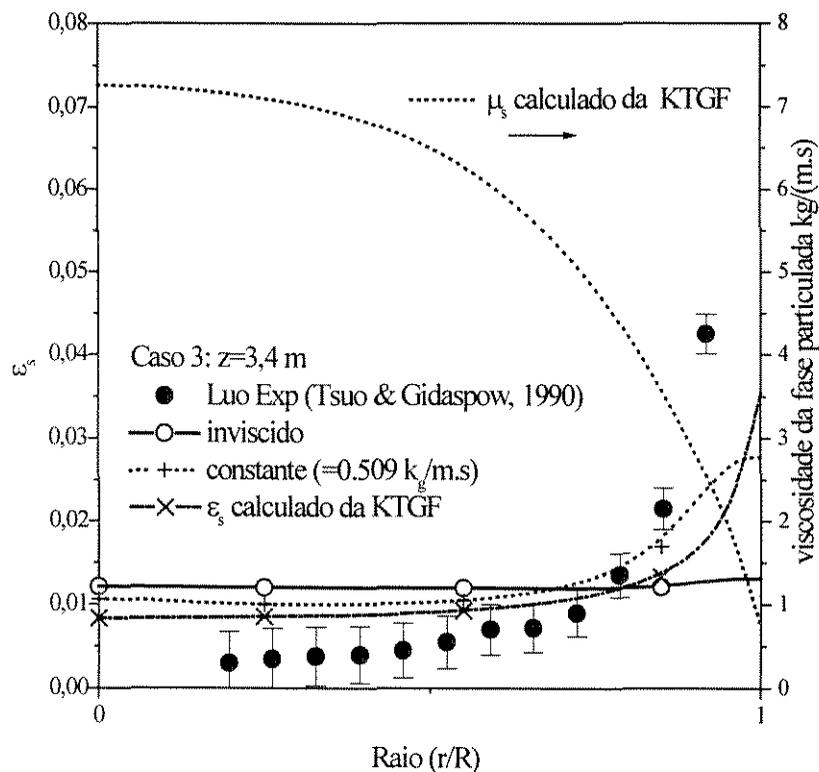


Figura 6.75 - Concentração de partículas para os 3 modelos de tensões

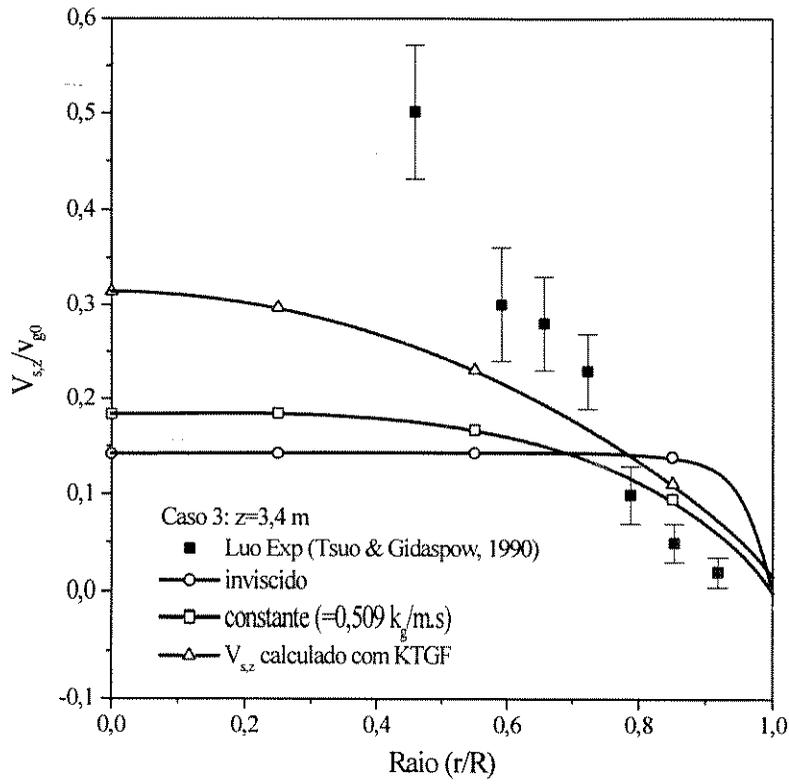
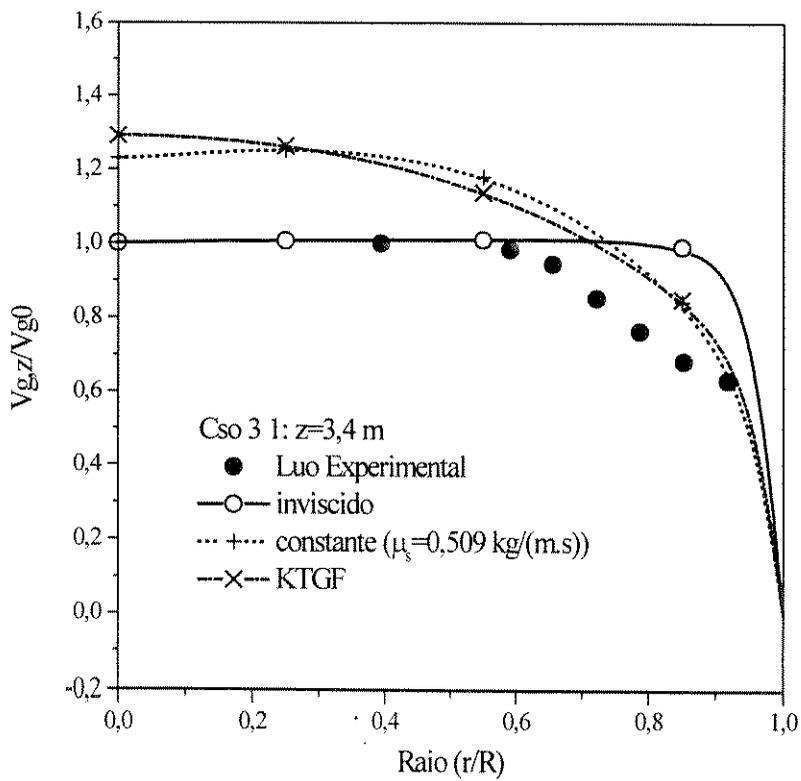


Figura 6.76 - Velocidade axial do sólido para os 3 modelos de tensões



6.77 - Velocidade axial do gás para os 3 modelos de tensão

Comentário: Neste caso, o modelo cinético do escoamento de materiais granulares é o que dá melhores resultados, melhores inclusive do que o modelo de um fluido “newtoniano” para a fase particulada, com ajuste experimental da viscosidade desta fase. Observa-se que este caso não apresenta uma concentração tão alta na parede, quanto no caso 2, e que tanto os dados experimentais, quanto os resultados de simulação, não mostram recirculações internas. Os resultados foram obtidos com uma malha de (20x10) volumes internos (grosseira).

6.3.4 - Saída Lateral: Dependência com a malha

A informação experimental sobre a viscosidade da fase particulada, serve apenas para este sistema e por isto, analisa-se apenas a dependência da solução com a malha para o modelo cinético do escoamento de materiais granulares para obter-se resultados que não levem (lembramos, dentro das limitações de tempo e de máquina), erros de aproximação. A Figura (6.78) mostra a dependência da solução com a malha, acompanhando a queda de pressão total e a velocidade axial do gás no centro da saída do tubo. Neste caso, um tempo de execução excessivo foi observado, mesmo para uma malha de 40x20 ($r \times z$) volumes internos, de maneira que tornou-se inaplicável refinar mais a malha. Os resultados da solução final foram obtidos para esta malha.

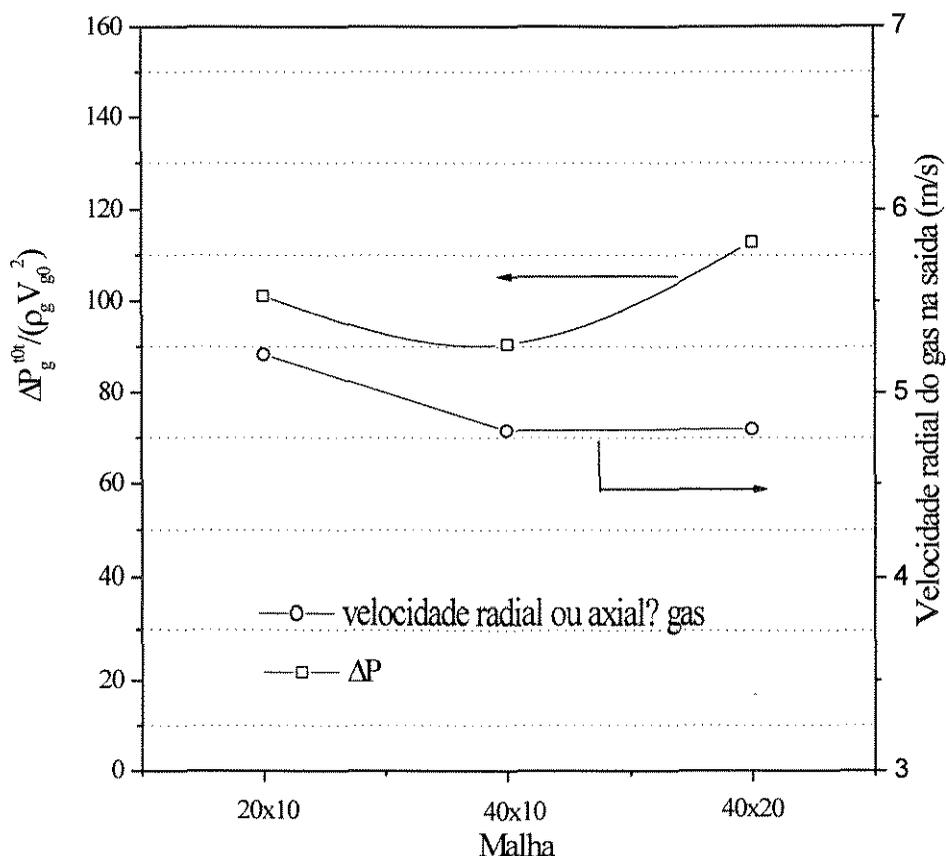


Figura 6.78 - Dependência da solução com a malha: queda de pressão e velocidade axial na saída ($r=0$)

6.3.5 - Resultados de Simulação - Padrão do escoamento para o caso 3 com saída lateral

Para o sistema 3 com saída lateral, incluindo o termo de transferência de energia cinética turbulenta entre fases, as Figuras (6.80) a (6.93) ilustram a fluidodinâmica do Riser. Apresenta-se mais uma vez, os mapas de contorno das variáveis fluidodinâmicas básicas (componentes de velocidade das fases, pressão e concentração) e de outras propriedades do escoamento (energia cinética turbulenta e taxa de dissipação desta). Os resultados foram obtidos com a malha de 40x20, cuja história da convergência é mostrada na Figura (6.79), da qual podemos observar uma baixa taxa de convergência deste caso para os parâmetros utilizados. Uma otimização destes parâmetros poderia ser feito no sentido de acelerar a

convergência, porém, não justifica-se dedicar tempo fazendo esta avaliação, se o resultado não pode ser estendido a outro caso. É preferível aceitar o tempo de execução para uma simulação apenas.

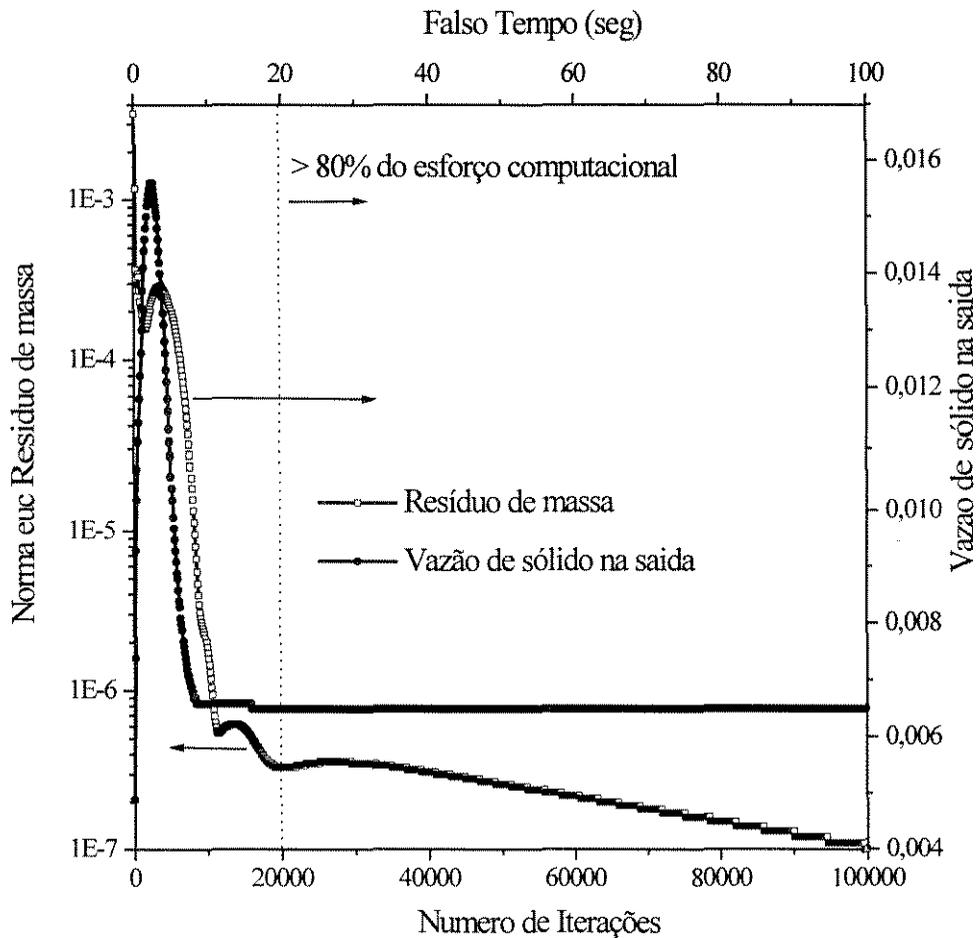


Figura 6.79 - História da convergência para o caso 3, com saída lateral.

Neste caso, observa-se uma baixa taxa de convergência (Figura (6.79)), após aproximadamente 20000 iterações. Até este nível de convergência, a norma euclidiana do resíduo de massa da fase gasosa em relação ao fluxo mássico de entrada baixou para a casa de 10^{-7} e, a partir daí, manteve-se nesta casa, até atingir as 100000 iterações estabelecidas como limite máximo. A norma euclidiana do resíduo de massa do gás em relação ao fluxo mássico de entrada neste instante é de $1,04 \times 10^{-7}$. Como pode-se observar ainda da Figura (6.79), o sistema estabilizou e, portanto, esta solução foi aceitável. Os resultados apresentados em seguida são da solução com a história de convergência da Figura (6.79).

Mais um comportamento surpreendente pode ser observado, se compararmos a história da convergência da solução dos casos 3 e 2. Como o caso 2 é um caso ,mais concentrado, seria teoricamente, mais complicado, principalmente em relação ao tempo de execução. Existem vários motivos para este comportamento, entre os quais o fato de podermos estar usando, para o caso 2, um passo de tempo mais adequado (no sentido de aceleração da convergência) do que para o caso 3 ou talvez devido a algum ponto localizado, provavelmente próximo à saída, no qual algum resíduo de massa é mantido em função do tipo de saída lateral. O tempo de execução para o caso 3, com saída lateral foi de 4998,7 minutos (3,47 dias).

Comparando-se os casos 2 e 3, ambos com saída lateral, observamos que existe uma grande diferença no padrão geral do escoamento. O caso 3, mesmo concentrado não apresentou recirculações internas ao contrário do caso 2. Enquanto o caso 2 apresenta uma região de alta concentração ao longo de toda a parede, o caso 3 apresentou apenas uma pequena região de alta concentração localizada próximo a saída (Figura (6.80)). Neste mesmo ponto existem zonas mortas do gás e das partículas. Aliás, o caso 3 caracterizou-se por apresentar pontos localizados de alta concentração de partículas, alta energia cinética turbulenta do gás, alta taxa de dissipação da energia cinética turbulenta do gás e alta temperatura granular, todos indicados nos respectivos mapas de contorno.

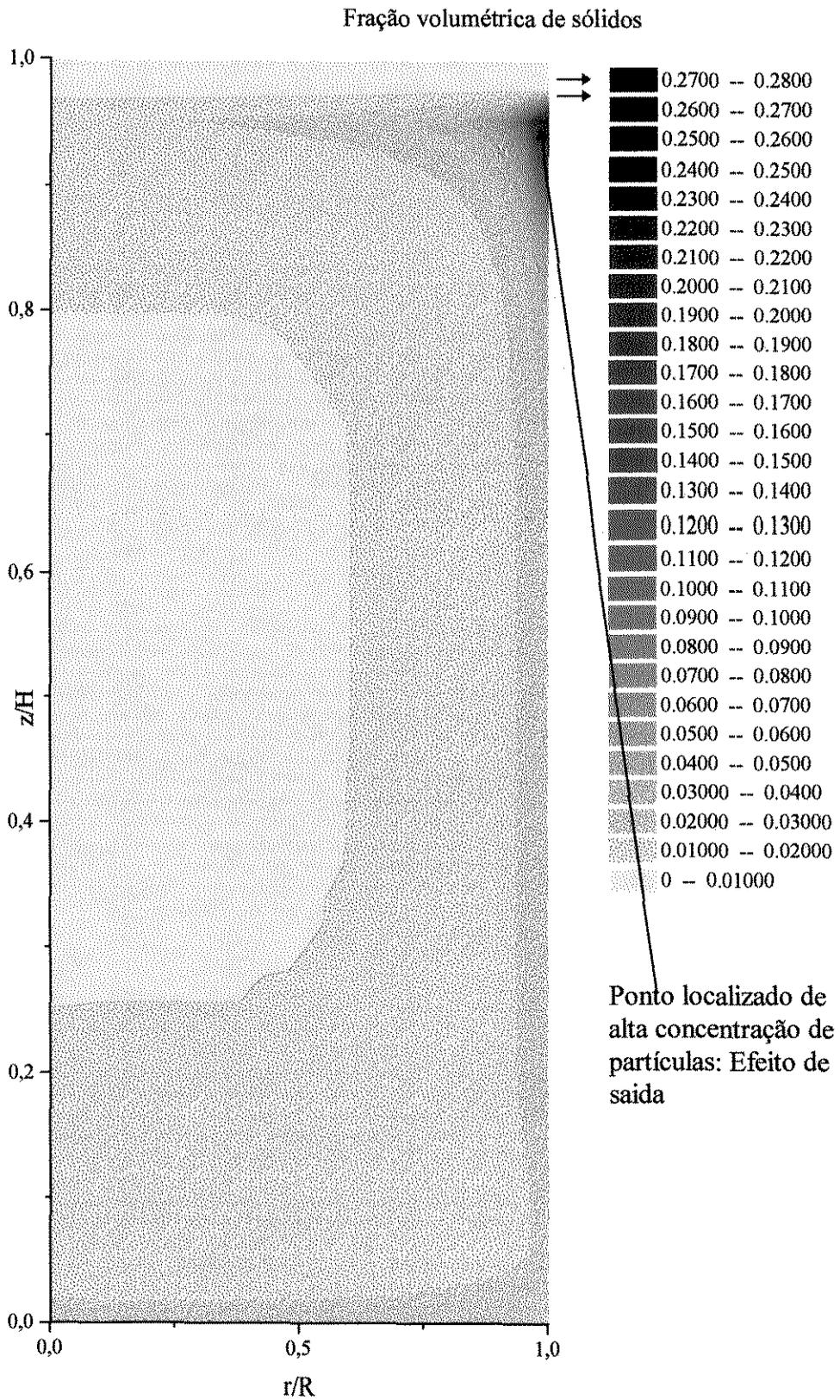


Figura 6.80 - Concentração de partículas

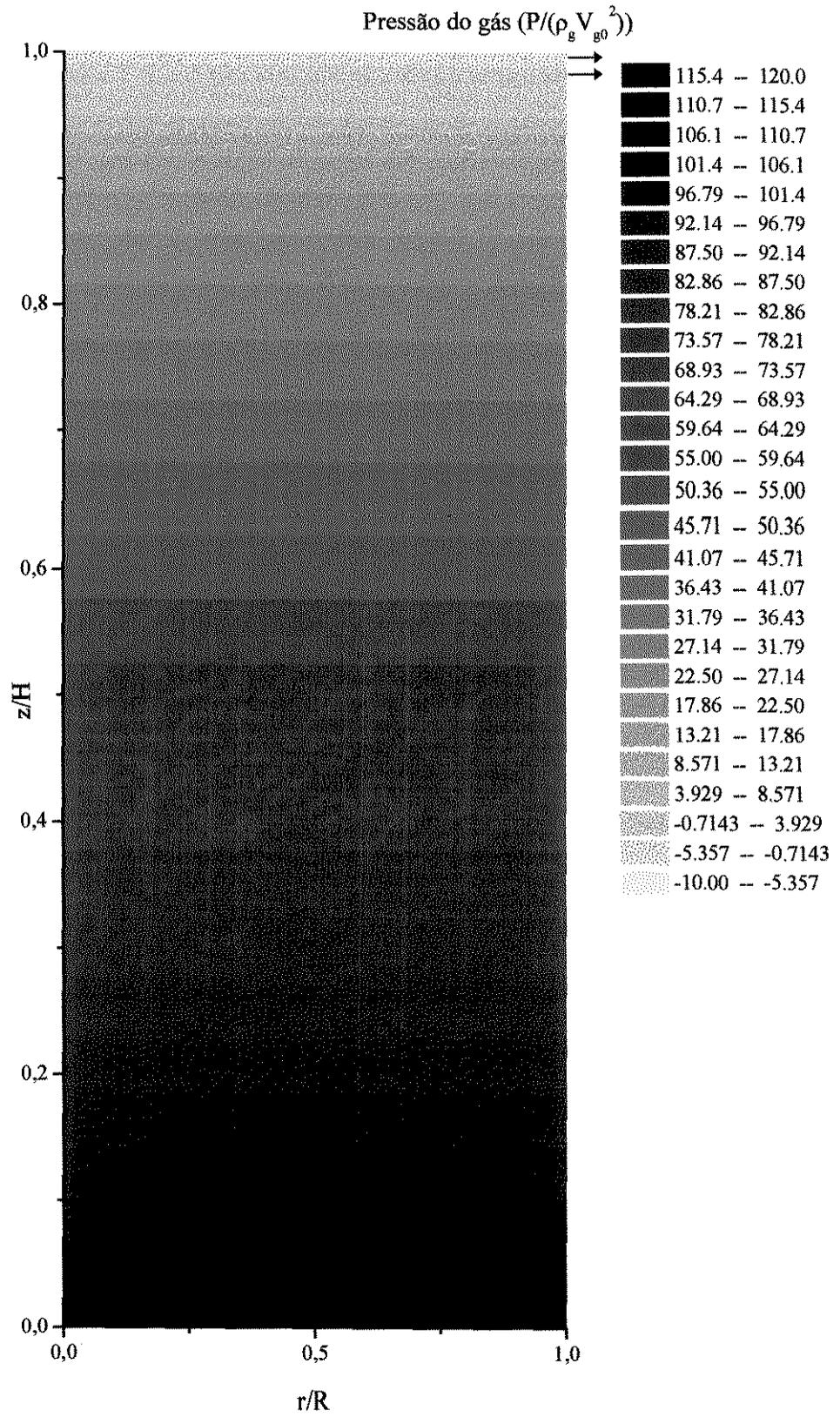


Figura 6.81 - Pressão do gás

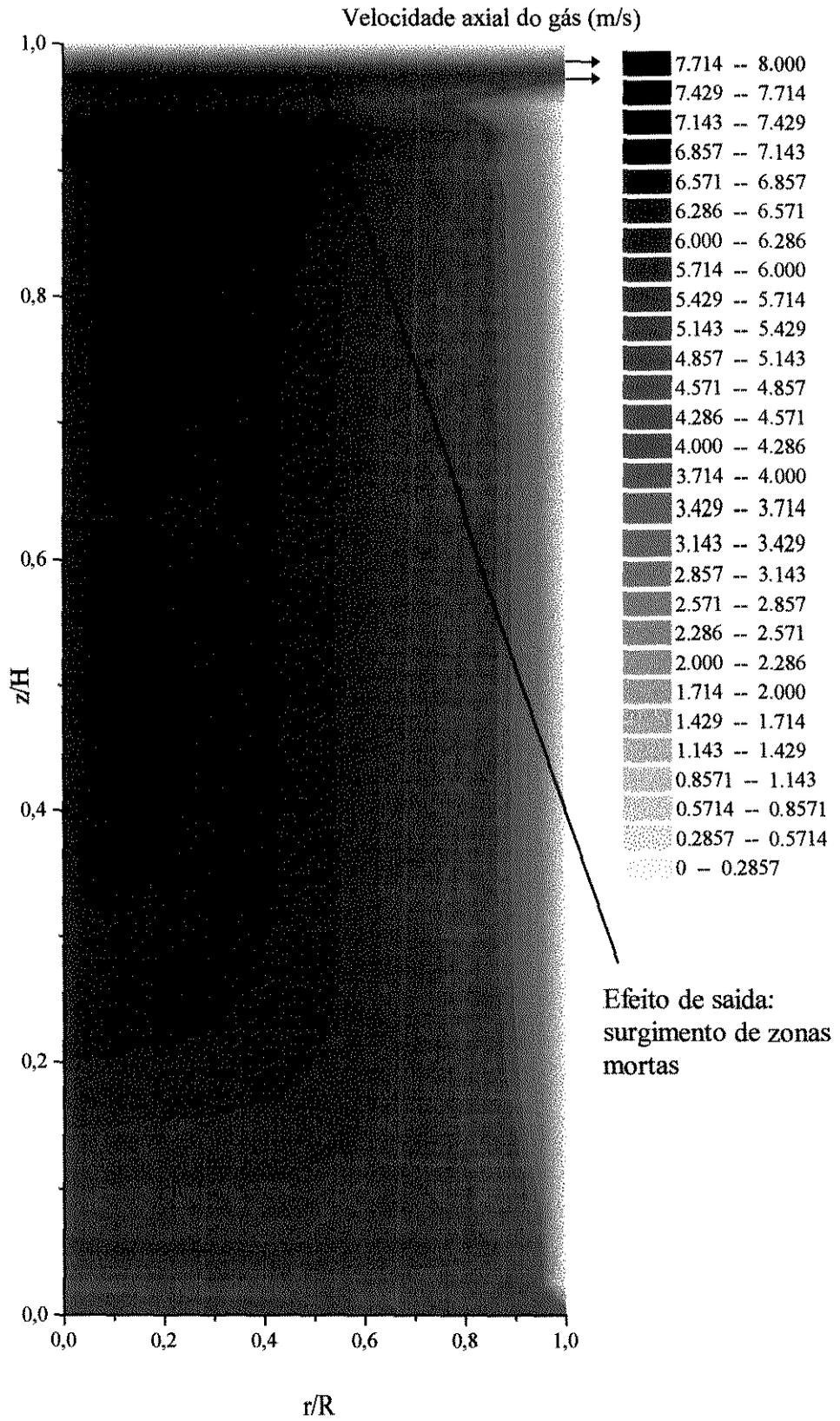


Figura 6.82 - Velocidade axial do gás

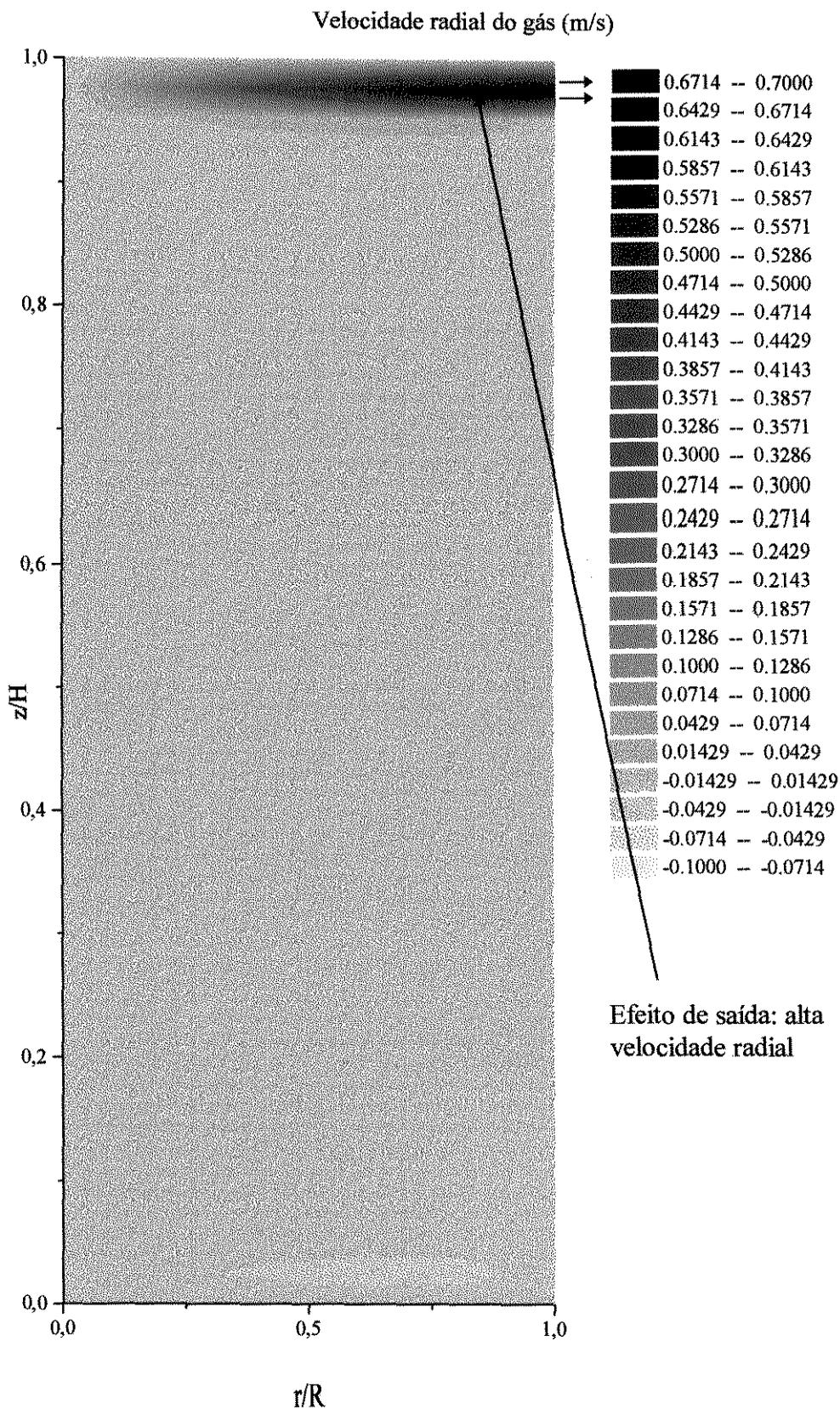


Figura 6.83 - (b) velocidade radial do gás

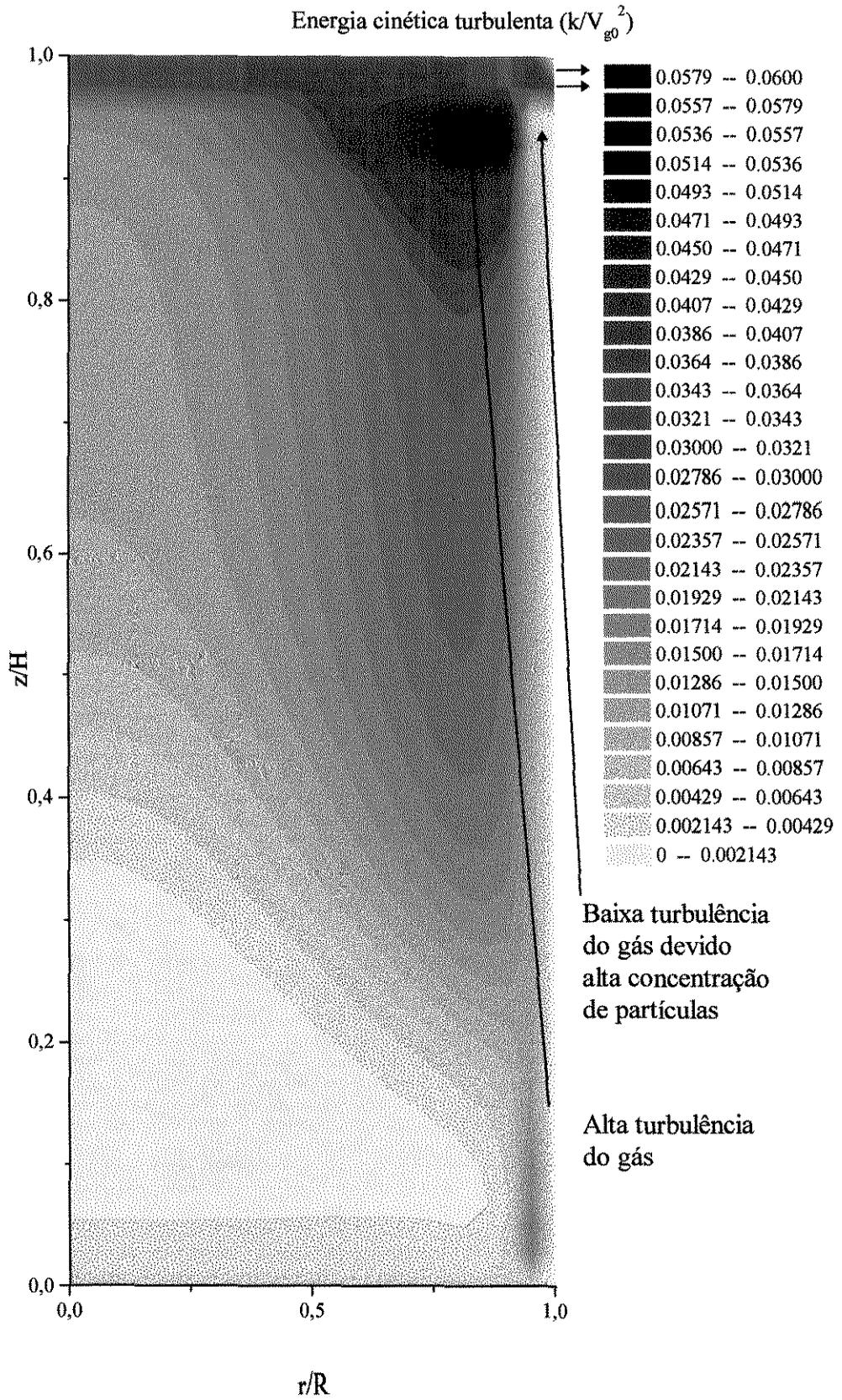


Figura 6.84 - Energia cinética turbulenta

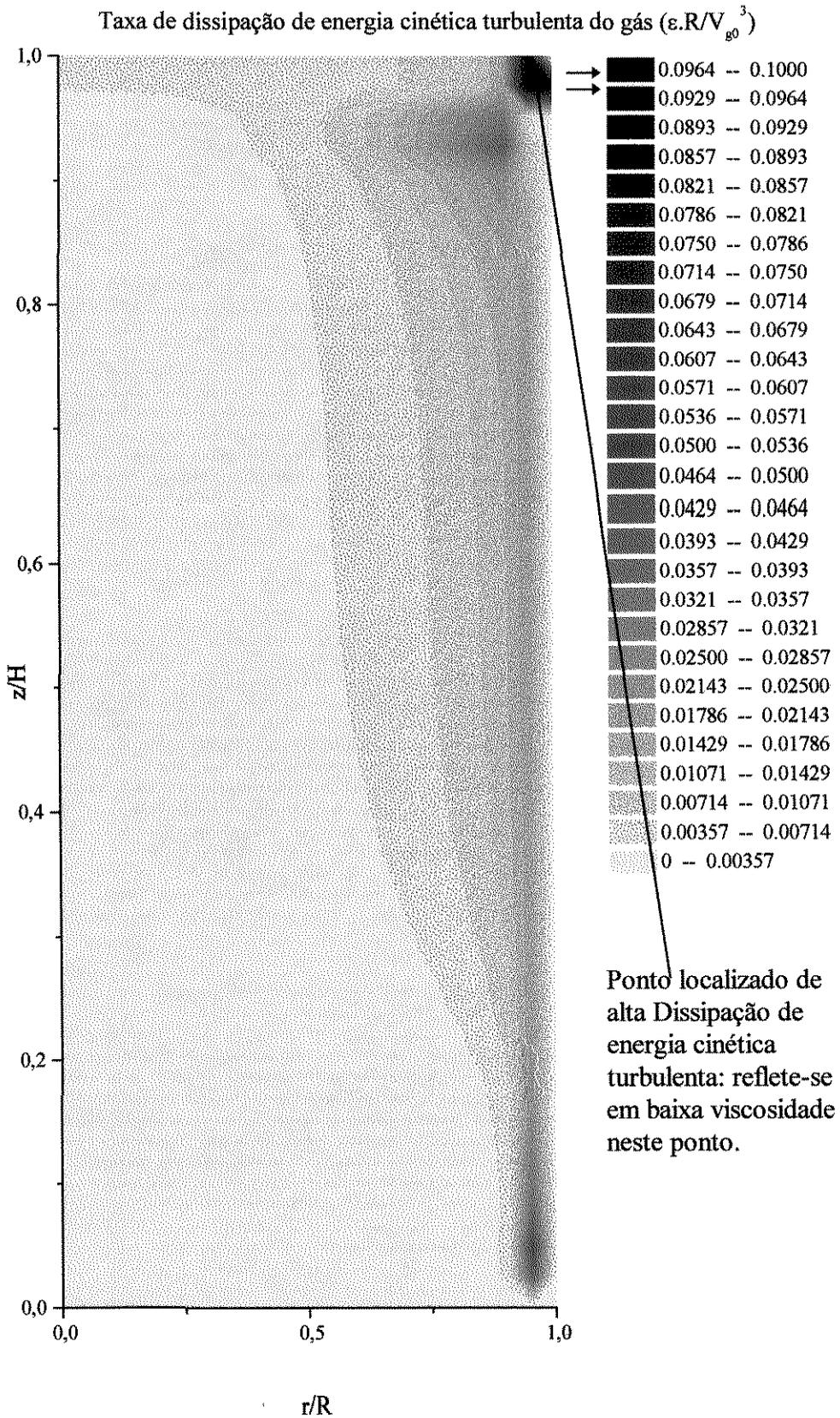


Figura 6.85 - taxa de dissipação de energia cinética turbulenta

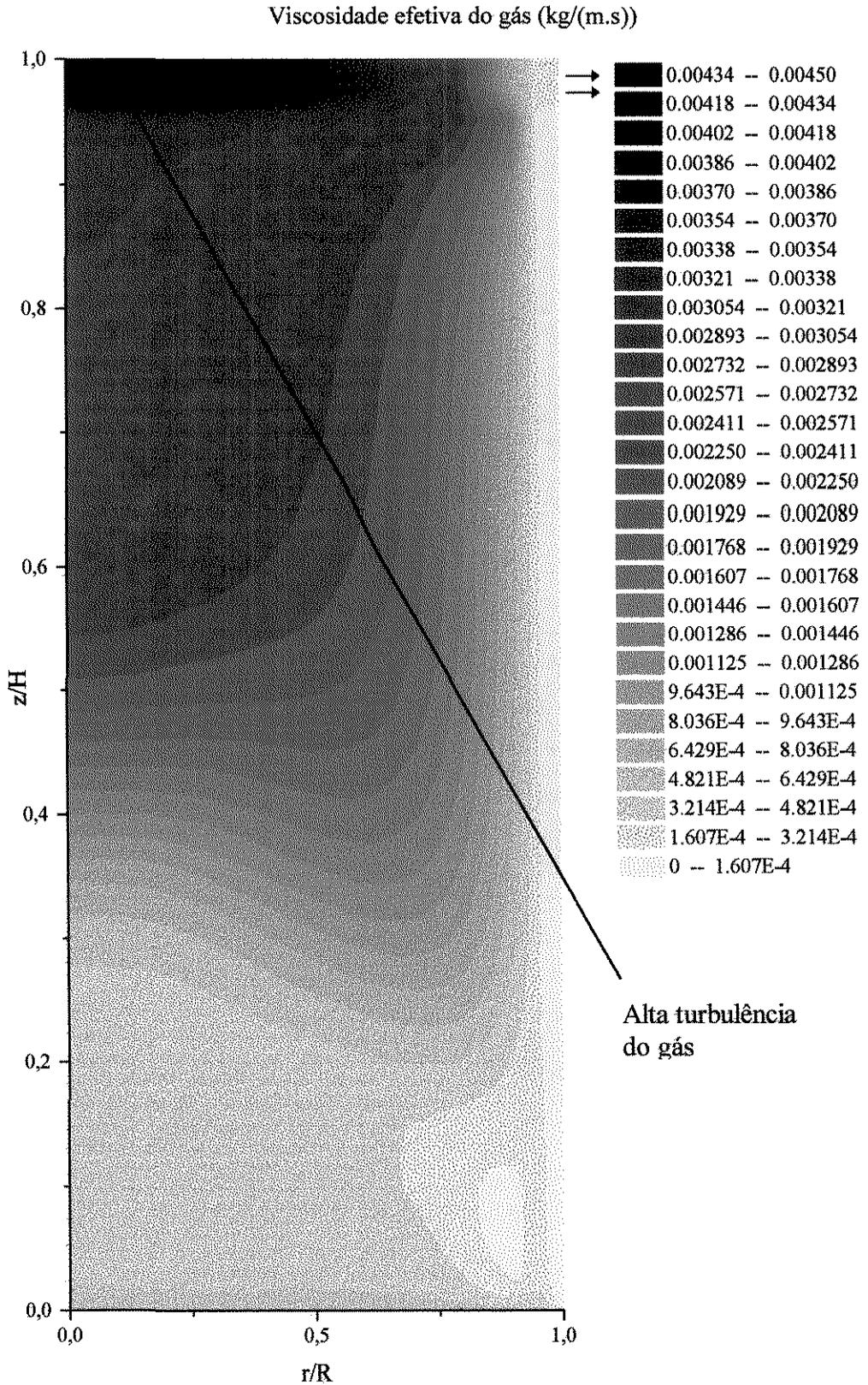


Figura 6.86 - Viscosidade efetiva da fase gasosa

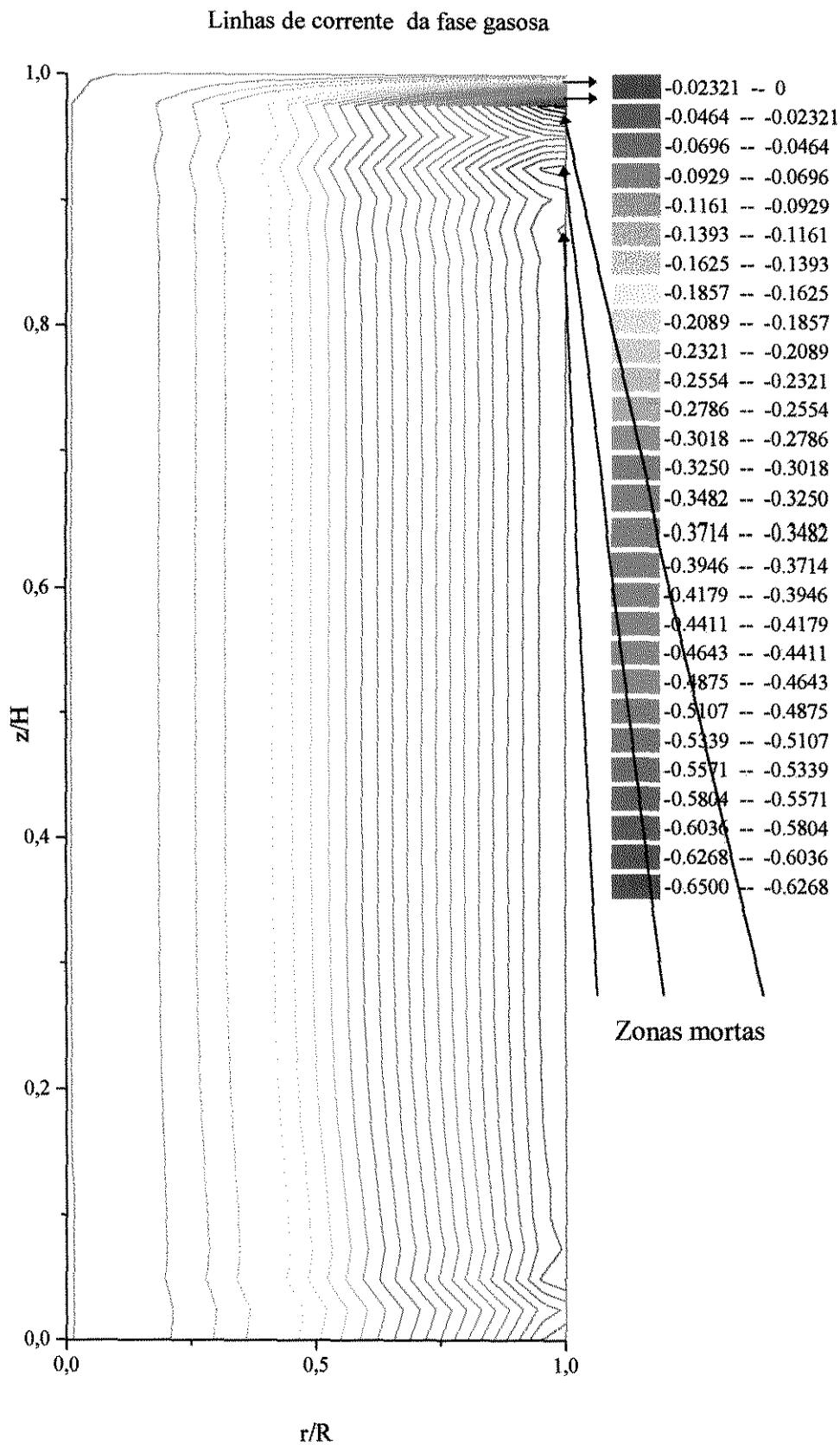


Figura 6.87 - Linhas de corrente do gás

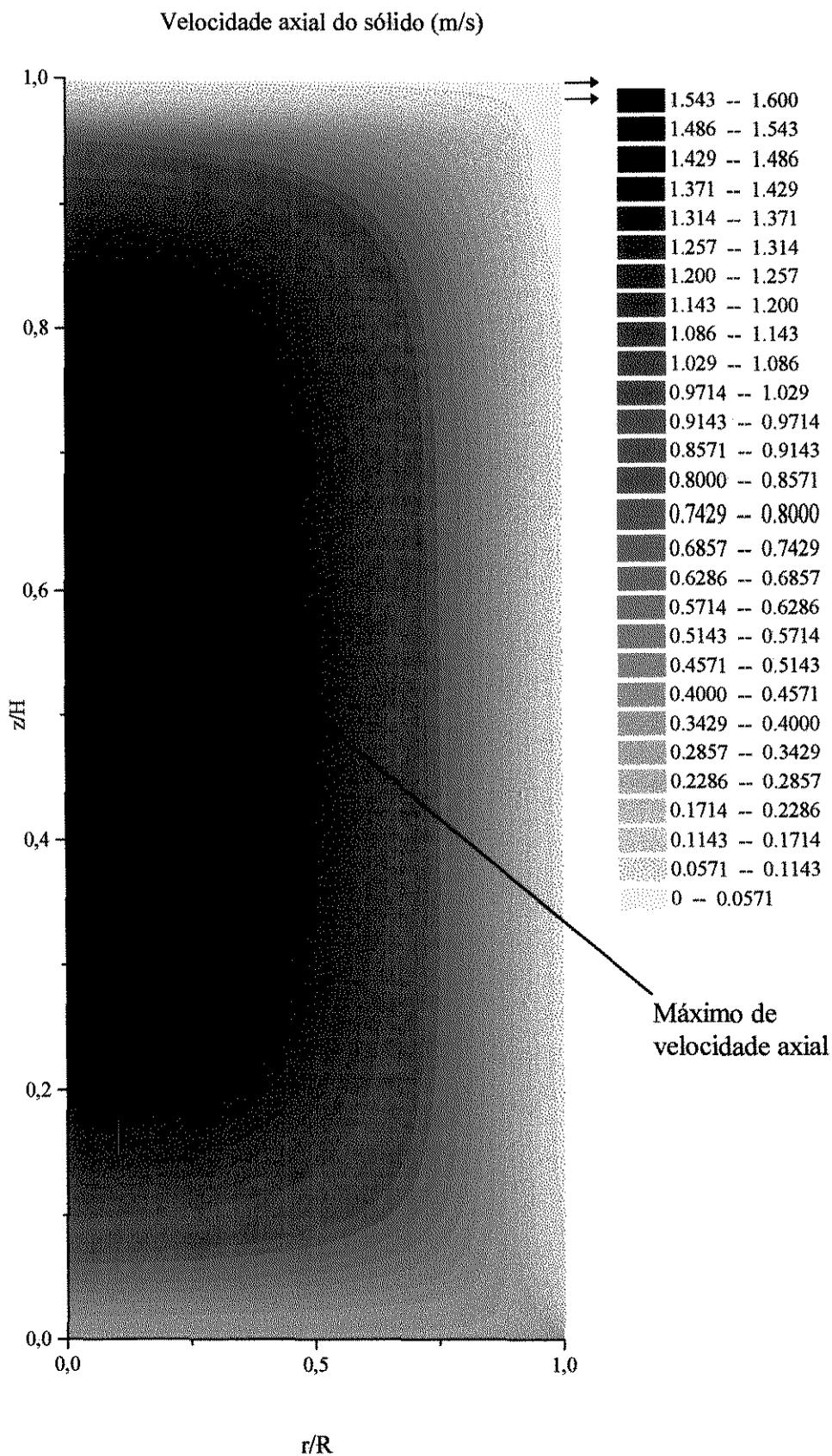


Figura 6.88 - Velocidade axial do sólido

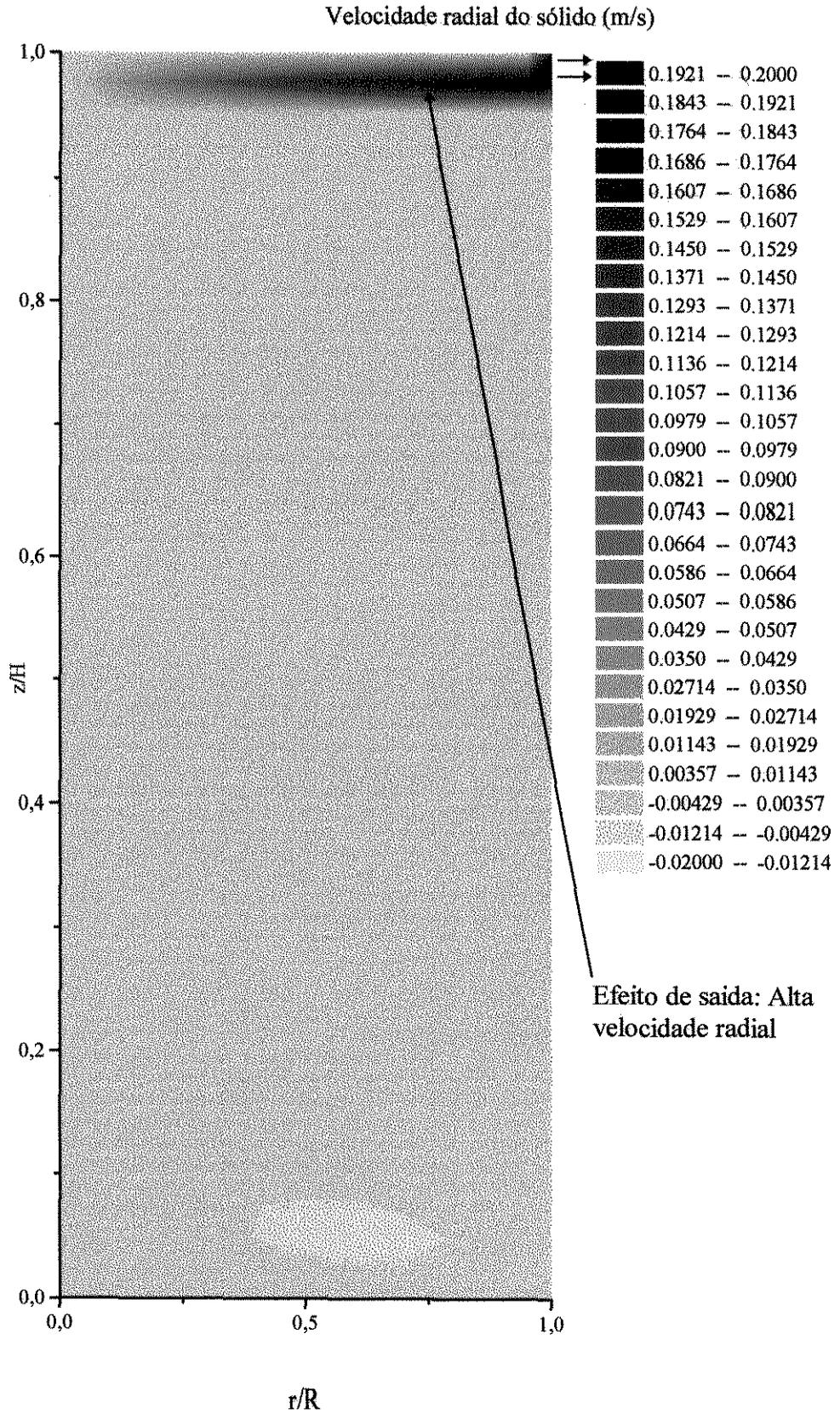


Figura 6.89 - Velocidade radial do sólido

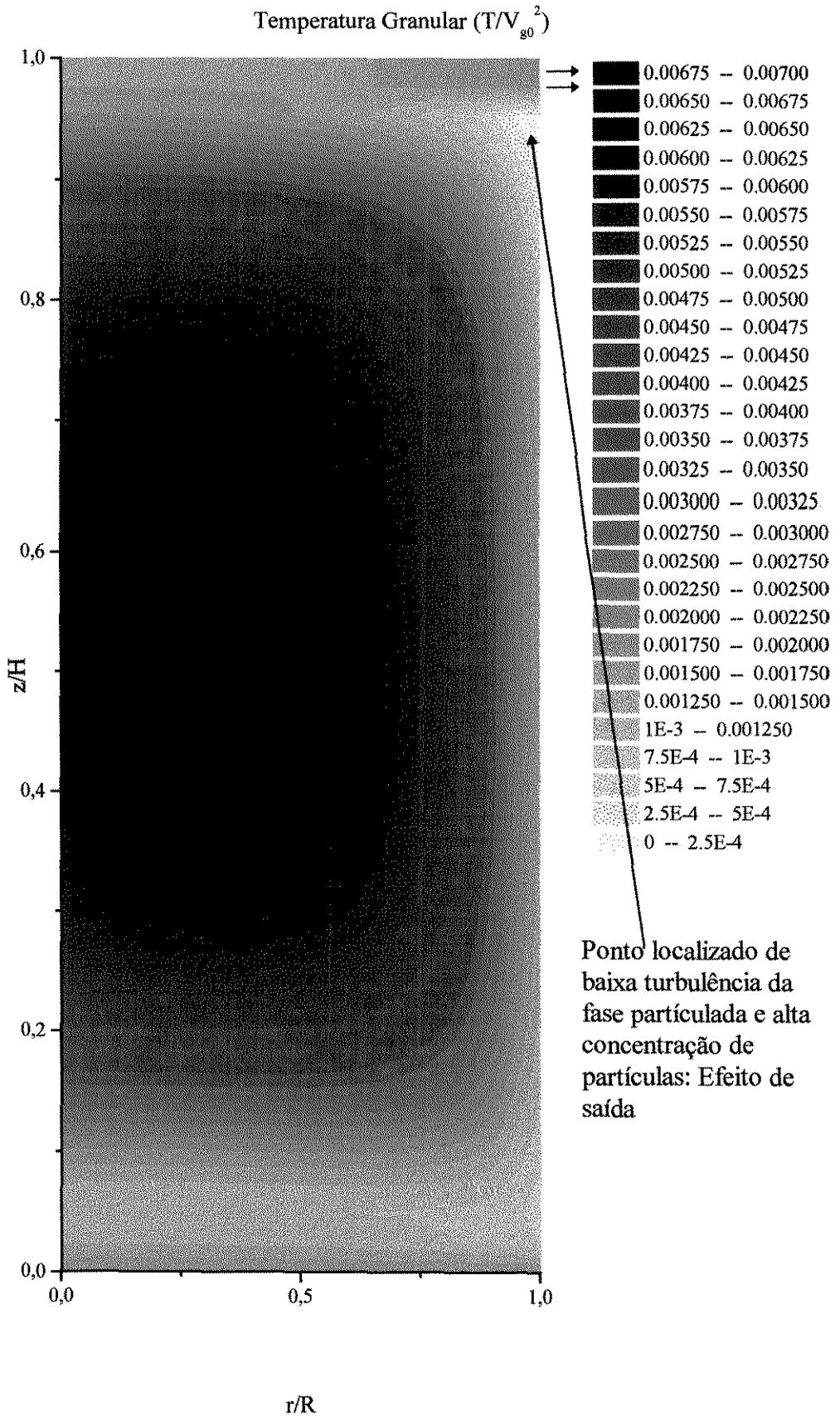


Figura 6.90 - Temperatura granular

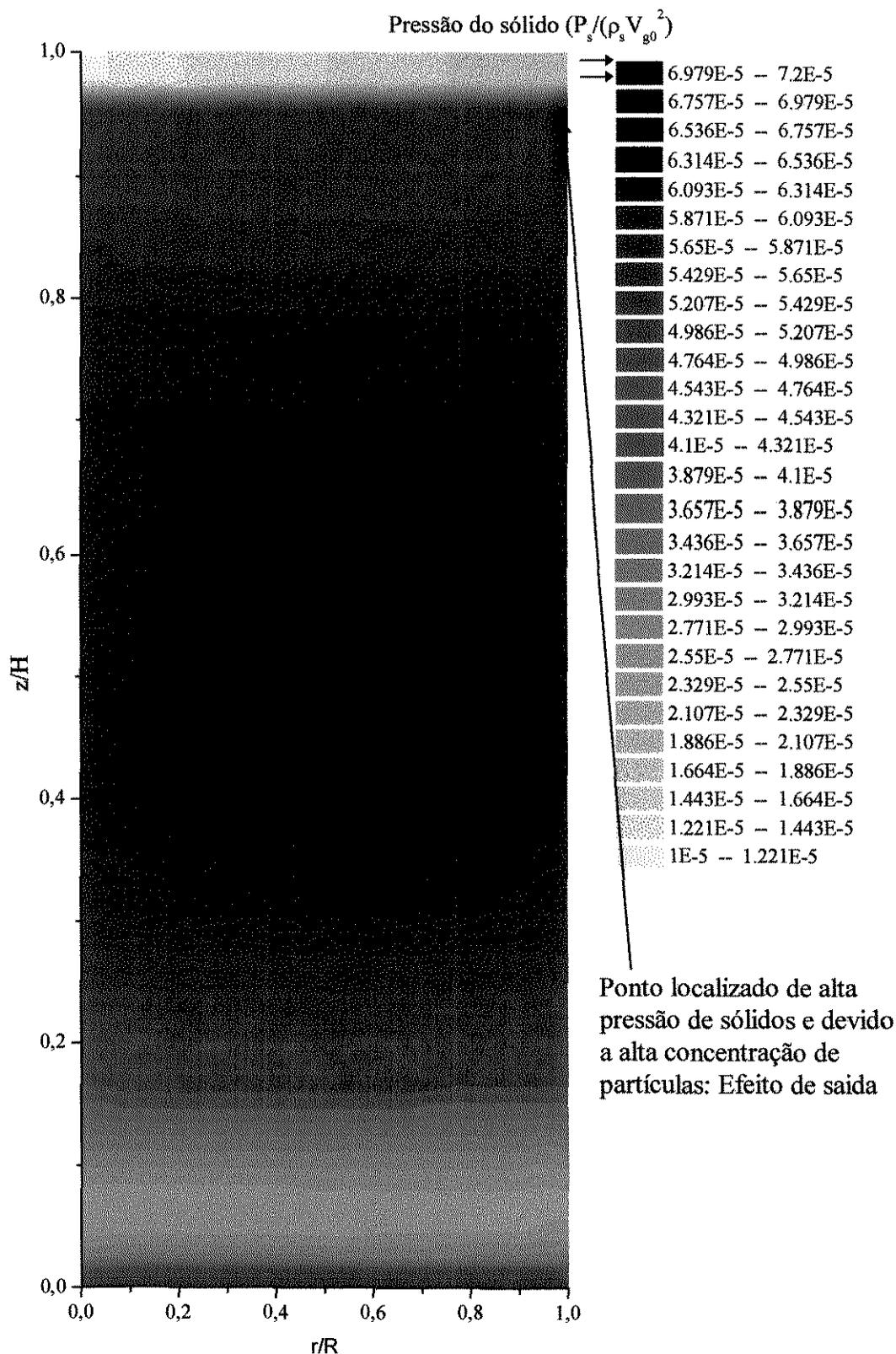


Figura 6.91 - Pressão do sólido

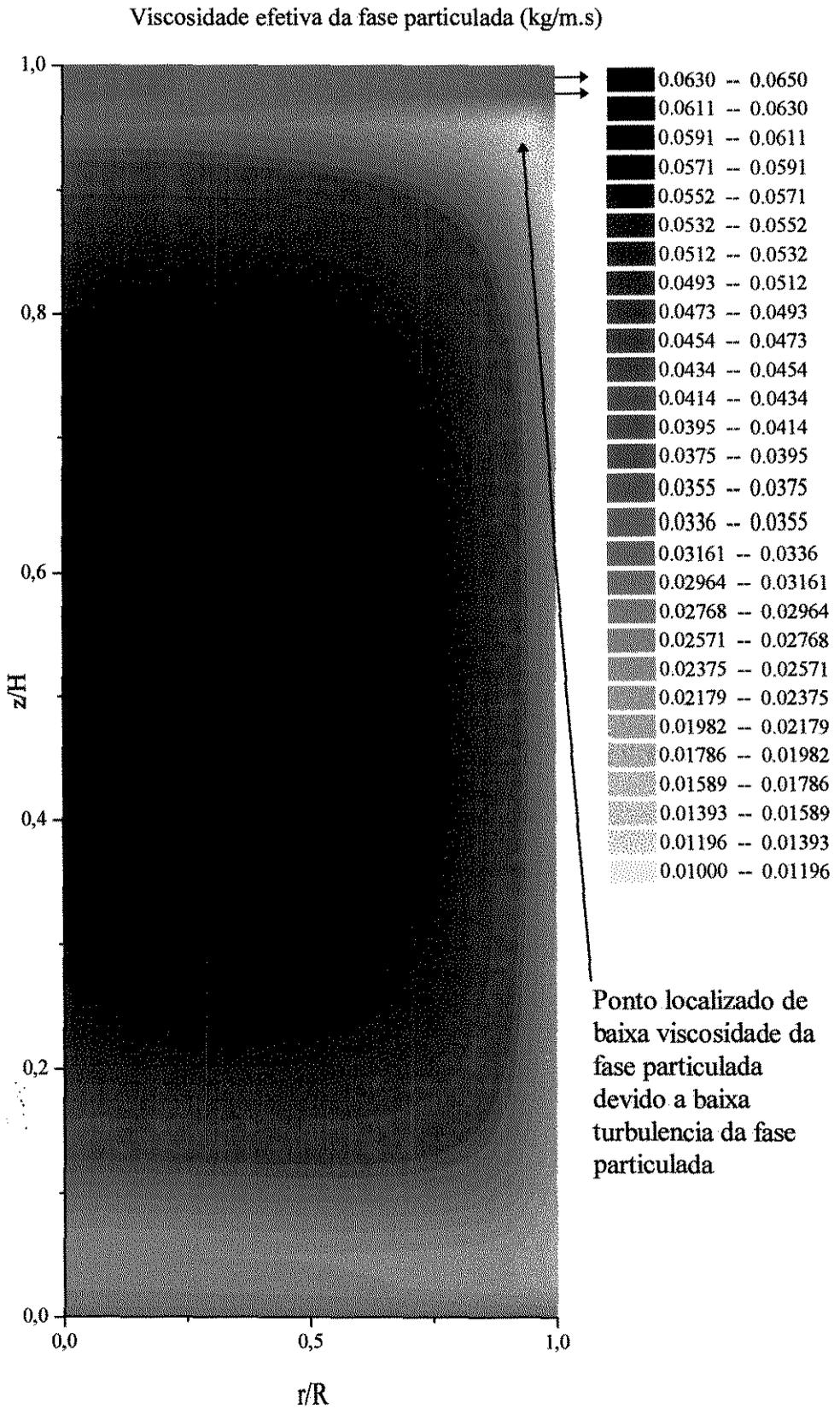


Figura 6.92 - Viscosidade efetiva do fase particulada

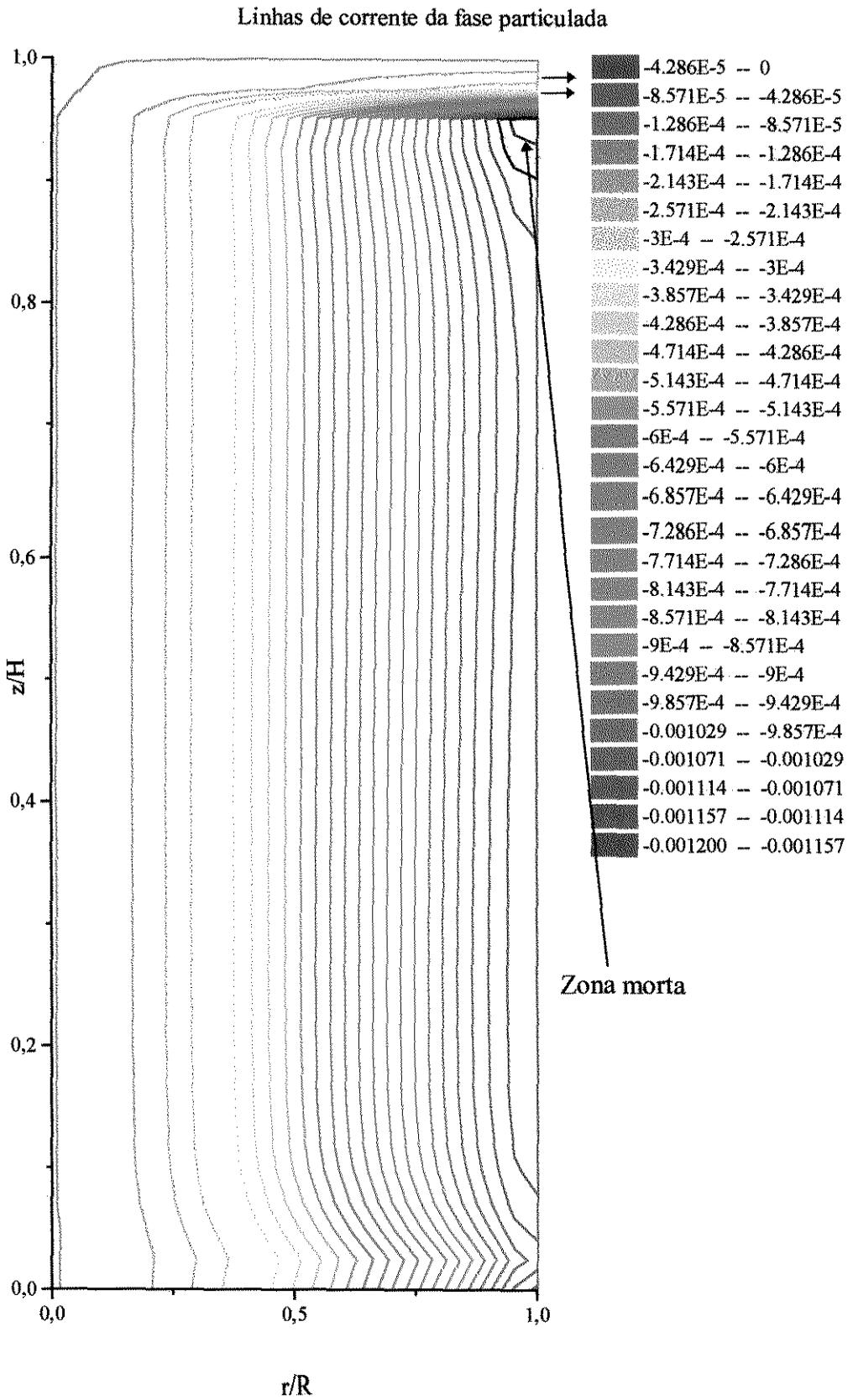


Figura 6.93 - Linhas de corrente da fase particulada

6.4 - Conclusões Preliminares

Os Mapas de contorno utilizados foram “radiografias” dos processos que revelaram os diferentes padrões de escoamento para os reatores analisados.

A caracterização dos padrões em função das características do reator não foi investigado por que cada reator apresenta diferentes caracterizações em função do número de Reynolds para o tubo ou para a partícula e talvez em função disto é que estes reatores apresentam o problema da relação de escala.

7 - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Em resposta ao objetivo geral de simular a fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado circulante utilizando modelos fenomenológicos, restringindo informações empíricas, a conclusão é de que isto é possível. Para isto, todas as interações intra e interfases devem ser consideradas, caso contrário o modelo falha.

Especificamente, com relação ao modelo matemático, comprovou-se que modelos invíscidos para a fase particulada não representam a fluidodinâmica de sistemas com alta concentração de partículas, nos quais as interações partícula-partícula e partícula parede têm um papel importante e devem necessariamente ser consideradas.

Modelos de tensões para a fase particulada com coeficiente constante, além de não poderem ser estendidos a vários sistemas, mostraram-se também incapazes de representar, na condição de estado estacionário, a fluidodinâmica de reatores com alta concentração de partículas, principalmente a alta concentração de partículas próximo à parede.

O modelo cinético do escoamento de materiais granulares foi capaz de prever, pelo menos qualitativamente, o padrão do escoamento que caracteriza os reatores de leito fluidizado circulante, com alta taxa de concentração de partículas próximo à parede do tubo e recirculações internas, confirmando-se que o termo de dispersão na fase particulada é fundamental na representação do fenômeno.

A transferência de energia cinética do movimento flutuante entre o gás e as partículas é importante, em sistemas com recirculações internas, devendo ser considerada nas simulações dos reatores de leito fluidizado circulante.

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

Com relação ao método numérico, foram feitas adaptações do algoritmo SIMPLE, desenvolvido para escoamento monofásico, para o bifásico, e técnicas de aproximação da velocidade da fase dispersa nas faces dos volumes de controle foram apresentadas.

7.1 - Contribuições

Uma ferramenta para simulação de reatores de leito fluidizado circulante, em computadores pessoais, fica disponível.

Utilizou-se uma informação teórica para o cálculo da concentração na parede, de forma que a necessidade de malhas muito refinadas naquela região pode ser eliminada.

Dois parâmetros do modelo cinético dos materiais granulares, dependentes do sistema, os coeficientes de restituição partícula-partícula e partícula-parede foram otimizados através de análise de sensibilidade paramétrica.

Identificou-se uma fonte de oscilação numérica na simulação de escoamentos multifásicos, com malhas co-localizadas, as quais foram eliminadas por um simples método alternativo, o qual usa interpolações similares àquelas para escoamentos monofásicos.

Apresenta-se todo o desenvolvimento da discretização, usando o método dos volumes finitos com malha co-localizada, das equações de conservação para sistemas multifásicos.

7.2 - Sugestões para continuação do trabalho

Continuar o teste do modelo do modelo da teoria cinética do escoamento de materiais granulares em outros casos (algumas referências já estão disponíveis).

Desenvolver correlações para a temperatura granular na entrada, em função das condições de entrada do sistema e das características geométricas do tubo, de forma semelhante ao que se faz para o cálculo das propriedades turbulentas do gás (energia cinética turbulenta e taxa de dissipação desta) na entrada do tubo.

Determinar o coeficiente de restituição partícula-partícula e parede a partir da teoria do impacto de corpos rígidos levando-se em consideração as propriedades viscoelásticas e velocidade das partículas.

Implementar os fenômenos de transferência de massa e energia no programa (simulador) bem como a cinética química dos processos de interesse.

Implementar o modelo da teoria cinética do escoamento de materiais granulares em softwares comerciais (mais completos e eficientes), possibilitando inclusive a solução 3D do problema, para que se faça um melhor aproveitamento dos resultados obtidos.

REFERÊNCIAS

Abdallah, S., Numerical Solutions for the Incompressible Navier-Stokes Equations in Primitive Variables Using a Non-Staggered Grid, II, Journal Computational Physics, Vol. 70, pp.193-202, 1987.

Abdallah, S., Numerical Solutions for the Pressure Poisson Equation with Newmann Boundary Conditions Using a Non-Staggered Grid, I, Journal Computational Physics, Vol. 70, pp.182-192, 1987.

Ahmadi, G. and Shaninpoor, M., Towards a Turbulent Modeling of Rapid Flow of Granular materials, Powder technology, Vol 35, pp. 241-248, 1983

Alves, J.J.N., and Mori M., "Fluid Dynamic Modeling and Simulation of Circulating Fluidized Bed Reactors: Analyses of Particle Phase Stress Models", trabalho aceito para ser apresentado no European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE 98) e para ser publicado em edição especial da "Computers and Chemical Engineering", 1998.

Alves, J.J.N., and Mori, M., Two-Dimensional Hydrodynamic Modelling and Simulation of a Circulating Fluidized Bed, XXIII COBRASP, pp. 43-52, Maringá, 1995.

Alves, J.J.N., and Mori M., Modelagem e Simulação da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante Usando a Teoria Cinética dos Materiais Granulares: Análise de Sensibilidade Paramétrica, XVIII CILANCE, Brasília, outubro, 1997

Alves, J.J.N., and Mori M., Análise do Efeito da Transferência da Energia Cinética Turbulenta entre o Gás e as Partículas na Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante, São Carlos, 1997.

Anderson, T. B., and Jackson, R., "A Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds: Equations of Motion", I & EC Fundamentals, vol 6, No 4, pp. 527-539, November, 1967.

Bennett, C.O. and Myers, Fenômenos de Transporte de Quantidade de Movimento, Calor e Massa, Editora McGrawHill do Brasil, São Paulo, 1978.

Berruti, F., Chaouki, J., Godfroy, L., Pugsley, T. S., and Patience, G. S., Hydrodynamics of Circulating Fluidized Bed Risers: A Review, Canadian Journal Chemical Engineering, Vol. 73, pp. 579-602, October, 1995.

Bolio, J. E., Yasuna, J. A., Siclair, J. L., Dilute Turbulent Gas-Solid Flow in Risers with Particle-Particle Interactions, AIChE Journal, Vol. 41, No. 6, pp. 1375-1388, June, 1995.

Carvalho, C. B., Desenvolvimento de um Código de Cálculo Utilizando o Método dos Volumes Finitos e o Modelo de Turbulencia $k-\varepsilon$ para Solução de Problemas Bidimensionais, Tese de Mestrado, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1993.

Chen, C. P., and Wood, P. E., A Turbulence Closure Model for Dilute Gas-Particle Flows, Canadian Journal Chemical Engineering, Vol. 63, pp. 349-360, June, 1985.

Chen, C. P., and Wood, P. E., Turbulence Closure Modeling of Two-phase Flows, Chem. Eng. Commun, Vol. 29, pp. 291-310, 1984.

Dasgupta, S., Jackson R. and Sundaresan, S., Turbulent Gas-Particle Flow in Vertical Risers, AIChE Journal, Vol. 40, No. 2, pp. 215-227, 1994.

Date, A. W., Complete Pressure Correction Algorithm for Solution of Incompressible Navier-Stokes Equations on Non-Staggered Grid, Numerical Heat Transfer, Part B, Vol. 29, pp. 441-458, 1996.

Date, A. W., Solution of Navier-Stokes Equations on Non-Staggered Grid, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 36, No. 7, pp. 1913-1922, 1993.

Drew, D. A. Continuum Modeling of Two-Phase Flows, Theory of Dispersed Multiphase Flow, Ed Academic Press, pp 173-190, 1983.

Elghobashi, S. E., and Abou-Arab, T. W., Two-Equation Turbulence Model for Two-Phase Flows, Phys. Fluids, Vol 26, No 4, pp 931-938, April 1983.

Gidaspow, D., and Lu Huilin, Collisional Viscosity of FCC Particles in a CFB, AIChE Journal, Vol. 42, No. 9, pp.2503-2510, September, 1996.

Gidaspow, D. Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions, Academic Press, San Diego, U.S.A, 1994.

Grace, J. R, and Berruti, F., Introduction and Overview, Canadian Journal Chemical Engineering, Vol. 73, pp. 577-578, October, 1995.

Gray, W. G., A Derivation of the Equations for Multi-Phase Transport, Chemical Engineering Science, Vol. 30, pp. 229-233, 1975

Ishii, M., Two-Fluid Model for Two-Phase Flow, Multiphase Science and Technology, Vol 3, Chapter 1, Hemisphere Publishing Corporation, USA, 1987.

Jenkins, J. T., and Savage, S. B., A theory for the Rapid Flow of Identical, Smooth, Nearly Elastic, Spherical Particles, J. Fluid. Mech., Vol 130, pp. 187-202, 1983.

Johansen, S. T., The Deposition of Particles on Vertical Walls, Int. J. Multiphase Flow, Vol. 17, No. 3, pp. 355-376, 1991.

Kuwabara, G., and Kono, K., Restitution Coefficient in a Collision between Two Spheres, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 26, No. 8, pp. 1230-1233, August, 1987.

Kwauk, M. and Li, J., Fluidization Regimes, Powder Technology, Vol. 87, 193-202, 1996.

Lilek, Z., and Peric, M., A Fourth-Order Finite Volume Method with Colocated Variable Arrangement, *Computers & Fluids*, Vol. 24, No. 3, pp. 239-252, 1995.

Lixing Z., *Theory and Numerical Modeling of Turbulent Gas-Particle Flows and Combustion*, Science Press, Beijing, China, 1993.

Louge, M. Y., Mastorakos, E., and Jenkis, J. T., The Role of particle collisions in Pneumatic transport, *J. Fluid Mech.*, Vol. 231, pp. 345-359, 1991.

Lun, C. K. K., Savage, S. B., Jeffrey, D. J., and Chepurniy, N., Kinetic Theories for Granular Flows: Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly inelastic Particles in a General Flowfield, *J. Fluid Mech.*, Vol. 140, pp.223-256, 1984.

Majundar, S., Role of Underrelaxation in Momentum Interpolation for Calculation of Flow with Nonstaggered Grids, *Numerical Heat Transfer*, Vol. 13, pp. 125-132, 1988.

Mansour, N. N., Kim, J., and Moin, P., Near-Wall $k-\varepsilon$ Turbulence Modeling, *AIAA Journal*, Vol. 27, No 8, pp.1068-1073, August, 1989.

Maliska, C. R., *Transferência de calor e Mecânica dos Fluidos Computacional: Fundamentos, Coordenadas Generalizadas*, LTC Editora, Brazil, 1995.

Marchi, C. H., Esquemas de Alta Ordem para a Solução de Escoamentos de Fluidos sem Dispersão Numérica, *J. Braz. Soc. Mechanical Sciences*, Vol. XV, No 3, pp. 231-249, 1993.

Martinuzzi, R. and Pollard, A., Comparative Study of Turbulence Models in predicting Turbulent Pipe Flow Part I: Algebraic Stress and $k-\varepsilon$ Models, *AIAA Journal*, Vol. 27, No. 1, pp. 29- 36, January, 1989.

Martinuzzi, R. and Pollard, A., Comparative Study of Turbulence Models in predicting Turbulent Pipe Flow Part 2: Reynolds Stress and $k-\varepsilon$ Models, AIAA Journal, Vol. 27, No. 12, pp. 1714-1721, December, 1989.

Meier, H. F., Modelagem Fenomológica e Simulação Bidimensional de Ciclones por Técnicas da Fluidodinâmica Computacional, Comunicação pessoal, Tese de Doutorado a ser apresentada na Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1998.

Meier, H. F., Alves, J. J. N. and Mori, M. Comparison of Finite Volume Method with Staggered and Colocated Grids for Multiphase Flows, XVIII Congresso Ibero Latino-Americano de Métodos Computacionais para Engenharia, Vol. 1, pp 957-964, Outubro, 1997.

Meier, H. F., Alves, J. J. N. and Mori, M., Staggered and Colocated Grids in the Performance of the Finite Volume Method for Multiphase Flows, AEA - International Users Conference, Chicago, October, 1997

Miller, T. F., and Schmidt, F. W., Use of a Pressure-Weighted Interpolation Method for the Solution of the Incompressible Navier-Stokes Equations on a Nonstaggered Grid System, Numerical Heat Transfer, Vol. 14, pp. 213-233, 1988.

Miltzer, J., Numerical Prediction of the Fully Developed Two-Phase (Air-Solid) Flow in a Pipe, Proceedings First Int. Conference Circulating Fluidized Beds, pp. 173-183, Circulating Fluidized Bed Technology, Edited by P. Basu, Pergamon Press Ed., 1985.

Muniz, L. A. R., Volumes Finitos Aplicado a problemas Bidimensionais de escoamento em Dutos Cilíndricos, Tese de mestrado, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1995

Nieuwland, J.J., van Sint Annaland, M., Kuipers, J.A.M., and van Swaaij, W.P.M., Hydrodynamic Modeling of Gas/Particle Flows in Riser Reactores, AIChE Journal, Vol. 42, No. 6, pp. 1569-1582, 1996.

Patankar, S. V., Elliptic Systems: Finite-Difference Method I, Handbook of Numerical Heat Transfer, Cap. 6, pp. 215 - 240, John Willey & Sons, Inc. Ed., 1988.

Patankar, S., Numerical Heat transfer and Fluid Flow, Ed Hemisphere Publishing Corporation, USA, 1980.

Peric, M., Kessler R., and Scheuerer, G., Comparison of Finite-Volume Numerical Methods with Staggered and Colocated Grids, Computers & Fluids, Vol. 16, No. 4, pp. 389-403, 1988.

Pita, J. P. and Sundaresan, S., Developing Flow of a Gas-Particle Mixture in a Vertical Riser, AIChE Journal, Vol. 39, No. 4, pp. 541-552, 1993.

Pita, J. P. and Sundaresan, S., Gas-Solid Flow Vertical Tubes, AIChE Journal, Vol. 37, No. 7, pp. 1009-1018, 1991.

Raithby, G. D., and Schneider, G. E., Numerical Solution of Problems in Incompressible Fluid Flow: Treatment of the Velocity-Pressure Coupling, Numerical heat Transfer, Vol. 2, pp. 417-440, 1979.

Reggio, M., and Camarero, R., Numerical Solution Procedure for Viscous Incompressible Flows, Numerical Heat Transfer, Vol. 10, pp. 131-146, 1986.

Samuelsberg, A., and Hjertager H., An Experimental and Numerical Study of Flow Patterns in a Circulating Fluidized Bed Reactor, Int. J. Multiphase Flow, Vol. 22, No.3, pp. 575-591, 1996.

Samuelsberg, A., and Hjertager H., Computational Modeling of Gas/Particle Flow in a Riser, AIChE Journal, Vol. 42, No. 6, pp. 1536-1545, 1996.

Shih, T. M., and Ren, A. L., Primitive-Variable Formulations using Nonstaggered Grids, Numerical Heat Transfer, Vol. 7, pp. 413-428, 1984.

Sinclair, J. L. and Jackson R., Gas-Particle Flow in Vertical Pipe with Particle-Particle Interactions, *AIChE Journal*, Vol. 35, No. 9, pp. 1473-11486, 1989.

Soo, S. L., Comparisons of Formulations of Multiphase Flow, *Powder technology*, Vol 66, pp 1-7, 1991.

Soo, S. L., Particulate and Continuum, Chapter 2, pp. 41-82, *Basic Equations*, 1989

Tennekes, H. and Lumley, J. L., "A First Course in Turbulence", The MIT press, The Massachusetts Institute of Technology, 1972.

Thiart, G. D., Finite Diference Scheme for the Numerical Solution of Fluid Flow and Heat Transfer Problems on Nonstaggered Grid System, *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol. 17, pp. 43-62, 1990.

Tsuji, Y., Morikawa, Y., and Shiomi, S., LDV Meadsurements of an Air-Solid Two-Phase Flow in a Vertical Pipe, *J. Fluid Mech.*, Vol 139, pp. 417-434, 1984.

Tsuo, Y. P., and Gidaspow, D. Computation of Flow Patterns in Circulating Fluidized Beds, *AIChE Journal*, Vol. 36, No 6, pp. 885-896, 1990.

Van Doormall, J. P., and Raithby, G. D., Enhacements of the Simple Method for Predicting Incompressible Fluid Flows, *Numerical Heat Transfer*, Vol. 7, pp. 147-163, 1984.

Whitaker, S., The Transport Equations for Multi-Phase Systems, *Chemical Engineering Science*, Vol. 28, pp. 129-147, 1973.

Zhu., J. X, and Bi, H. T., Distinctions Between Low Density and High Density Circulating Fluidized Beds, *Canadian Journal Chemical Engineering*, Vol. 73, pp. 644-649, October, 1995.