



UNICAMP

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
ENGENHARIA DE PROCESSOS**

Simulação Orientada a Objeto do Transporte Pneumático

Samuel Jorge Marques Cartaxo

Dissertação de Tese de Doutorado
apresentada à Faculdade de Engenharia
Química como parte dos requisitos
exigidos para a obtenção do título de
Doutor em Engenharia Química.

Orientador: Prof^a Dr^a. Sandra Cristina dos Santos Rocha

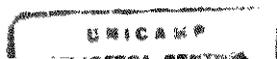
Campinas - São Paulo
Novembro 2000

UNICAMP

BIBLIOTECA CENTRAL

SEÇÃO CIRCULANTE

I



UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	UNICAMP
	C242s
V.	Ex.
TOMBO BC/	43683
PROC.	16-392104
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREC.º	R\$ 14,00
DATA	09/02/07
N.º CPD	

CM-00147247-8

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

C242s Cartaxo, Samuel Jorge Marques
Simulação orientada a objeto do transporte
pneumático / Samuel Jorge Marques Cartaxo.--
Campinas, SP: [s.n.], 2000.

Orientadora: Sandra Cristina dos Santos Rocha.
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Transporte por tubo pneumático. 2. escoamento
bifásico. 3. Dinâmica dos fluidos. 4. Simulação
(Computadores). 5. Dinâmica da partícula. I. Rocha,
Sandra Cristina dos Santos. II. Universidade Estadual de
Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

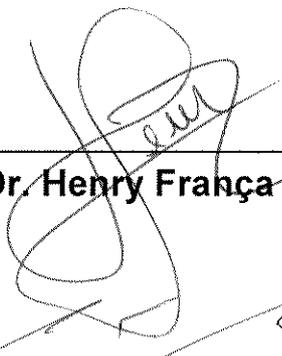
Tese de Doutorado defendida por Samuel Jorge Marques Cartaxo e aprovada em 17 de novembro de 2000 pela Banca Examinadora constituída pelos doutores:



Profª Drª Sandra Cristina dos Santos Rocha - Orientador



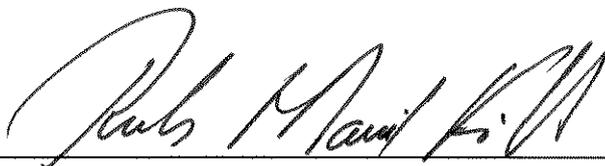
Profª Drª Maria do Carmo Ferreira – Titular



Prof. Dr. Henry França Meier – Titular



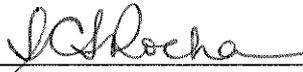
Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli – Titular



Prof. Dr. Rubens Maciel Filho - Titular

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

Este exemplar corresponde à redação final da Tese de Doutorado em Engenharia Química defendida por Samuel Jorge Marques Cartaxo e aprovada pela comissão julgadora em 17 de novembro de 2000.



Prof^a Dr^a Sandra Cristina dos Santos Rocha - Orientador

“A curva descrita por uma simples molécula de ar, ou de vapores, é regida de uma maneira tão certa quanto as órbitas planetárias: não há diferença entre elas, a não ser aquela posta por nossa ignorância.”

“Devemos, portanto, considerar o estado presente do universo como o efeito de seu estado anterior e como a causa do que vai se seguir. Uma inteligência que num dado instante conhecesse todas as forças que animam a natureza e a situação respectiva dos seres que a compõem, e se, além disso, fosse suficientemente ampla para submeter todos estes dados à análise, compreenderia na mesma fórmula os movimentos dos maiores corpos do universo e aqueles do mais leve átomo; nada lhe seria incerto, e o futuro bem como o passado seriam presente a seus olhos.”

PIERRE-SIMON LAPLACE - “Ensaio Filosófico sobre as Probabilidades”¹

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

¹ Extraído da obra original “*Essai Philosophique sur les Probabilités*” traduzida para o português por Pedro Leite Santana, Editora Papel&Virtual, 1999.

Aos meus pais Vianey e Judith, pelo amor incondicional, incentivo e apoio que têm me dado durante toda a minha vida. Nas coisas que Deus me permite realizar, está, também, a assinatura de vocês.

Ao meu irmão, Eduardo, pela sua amizade e por ser essa pessoa tão maravilhosa.

À minha querida Rebeca, pelo seu carinho, compreensão e companheirismo, que tornam a vida mais bela.

Agradecimentos

À Profa. Dra. Sandra Cristina dos Santos Rocha pela orientação, incentivo e amplo apoio, verdadeiramente indispensáveis à realização deste trabalho. Sinceramente, muito obrigado.

Ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho por sua motivação, pelas interessantes discussões sobre o estado da arte da Fluidodinâmica Computacional e pelas valiosas sugestões oferecidas, as quais, sem sombra de dúvida, muito contribuíram para o aprimoramento da qualidade deste trabalho.

À Profa. Dra. Maria do Carmo Ferreira pelas importantes sugestões de cunho prático fornecidas nos seminários, cuja contribuição para o reforço e maior embasamento das questões experimentais foi decisiva.

À Profa. Dra. Meuris Gurgel Carlos da Silva pelas enriquecedoras discussões sobre os fenômenos dinâmicos do transporte pneumático e por estar presente sempre que se fez necessário.

Ao Prof. Dr. Osvaldir Pereira Taranto pelo incentivo e interesse demonstrados por este trabalho.

À Profa. Dra. Kátia Tannous, pela discussão sobre as dificuldades práticas inerentes à quantificação experimental dos efeitos da segregação de partículas em escoamentos bifásicos, a qual permitiu elucidar várias das minhas suspeitas sobre o assunto.

À Srta. Rosa, secretária de pós-graduação, pela sua paciência e cuidado no trato burocrático durante a elaboração deste trabalho.

Ao aluno Everaldo Silvino dos Santos pelas interessantes discussões sobre sistemas particulados, bem como pelo incentivo e amizade prestados.

Ao Prof. Dr. Francisco das Chagas Marques por sua amizade e incentivo, bem como pela valiosa oportunidade de ter me permitido o primeiro contato com a atividade de pesquisa em seu laboratório no Departamento de Física Aplicada/IFGW/Unicamp, imediatamente após o meu ingresso na graduação. Aqui fica registrado o meu agradecimento.

A todos os meus amigos da Engenharia Química/Unicamp que, de alguma forma, contribuíram para a efetivação deste trabalho.

Resumo

O transporte de partículas por uma corrente gasosa, comumente denominado de transporte pneumático, tem sido usado com frequência em uma ampla variedade de processos industriais. Isto se deve não somente à diversidade de materiais que é produzida e manipulada na forma de partículas, como também ao grande número de possíveis aplicações desta operação, as quais incluem desde o simples deslocamento de sólidos até tarefas relativamente mais complexas como a secagem e o craqueamento catalítico. Em decorrência do difundido uso industrial, a tecnologia do transporte pneumático tem sido intensivamente estudada e aprimorada ao longo dos anos, na tentativa de propiciar a sua aplicação de maneira mais racional e otimizada. Este trabalho reporta a investigação de fenômenos dinâmicos presentes no transporte pneumático vertical através do desenvolvimento e implementação de um modelo orientado a objeto, tridimensional, discreto, determinístico e transiente para a fase particulada. A fase fluida é modelada de maneira pseudo-bidimensional, distinta da fase particulada, e o acoplamento entre as fases é realizado por termos de interação bidirecional como a força de arraste do fluido sobre as partículas e a geração de *momentum* na fase fluida. O modelo contempla os efeitos de colisão partícula-partícula e das partículas com as paredes do equipamento. A metodologia da Simulação Orientada a Objeto (SOO) apresentada possibilitou a captura de padrões dinâmicos bastante complexos, a exemplo da recirculação das partículas e o escorregamento de sólidos junto à parede do tubo. Além disso, devido às propriedades da orientação a objeto, o modelo permitiu a simulação de misturas polidispersas, capacitando o estudo dos fenômenos de segregação presentes nos sistemas de transporte pneumático. Os resultados obtidos foram analisados através dos perfis de velocidades do fluido e das partículas, curvas de queda de pressão, curvas de distribuição granulométrica e diagramas policromáticos de visualização, permitindo verificar a consistência física do modelo. Além disso, foram realizadas comparações com dados experimentais globais e locais, os quais exibiram concordância satisfatória, ratificando a confiabilidade desta metodologia.

Abstract

Particle transportation by a gas stream, commonly named as pneumatic conveying, has been frequently used in a large variety of industrial processes. This is due not only to the diversity of materials produced and handled in a granulated form, as also to the great number of possible applications of that operation, which includes since the simple displacement of solids to relatively more complicated tasks such as drying and catalytic cracking. Due to its spread industrial use, the pneumatic conveying technology has been intensively studied and improved along the years, in the attempt of propitiating its application in a more rational and optimized manner. This work reports the investigation of dynamic phenomena of the vertical pneumatic conveying through the development and implementation of an object oriented model, three-dimensional, discrete, deterministic and transient to the particulate phase. The fluid phase is modeled in a pseudo-bidimensional way, separated from the solid phase. The dynamic effects between the two phases are considered by bi-directional terms such as the drag force on the particles and the *momentum* generation in the fluid. The proposed model regards the effects of bi-directional coupling and three-dimensional movement of the particles. The presented Object Oriented Simulation (OOS) methodology enabled the capture of complex dynamic patterns, such as the particles refluxing and the precipitation of solids near the pipe wall. Besides, due to the object oriented properties, the model allowed the simulation of polydispersed mixtures, qualifying it to study the segregation phenomena in pneumatic transport systems. The obtained results were analyzed through the fluid and particles velocity profiles, pressure drop curves, diameters distribution curves and polychromatic visualization diagrams, allowing to verify the physical consistence of the model. In addition, comparisons were accomplished with global and local experimental data, which exhibited satisfactory agreement, ratifying the reliability of this methodology.

Sumário

1. INTRODUÇÃO	1
1.1 VISÃO GERAL DO ESTADO DA ARTE.....	2
1.2 OBJETIVO DA PESQUISA.....	3
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1 SISTEMAS MULTIFÁSICOS.....	5
2.2 TRANSPORTE PNEUMÁTICO.....	6
2.2.1 <i>Abordagem Empírica</i>	7
2.2.2 <i>Abordagem Fluidodinâmica</i>	10
2.2.2.1 Modelos do <i>Continuum</i>	10
2.2.2.2 Modelos de Trajetória.....	16
2.3 ACOPLAMENTO SÓLIDO-FLUIDO.....	24
2.4 INTERAÇÃO PARTÍCULA-PARTÍCULA.....	26
2.4.1 <i>Nos Modelos do Continuum</i>	26
2.4.2 <i>Nos Modelos de Trajetória</i>	29
2.5 TURBULÊNCIA.....	31
2.5.1 <i>Espectro da Turbulência</i>	32
2.5.2 <i>Cascata de Energia</i>	32
2.5.3 <i>Escalas de Kolmogorov</i>	33
2.5.4 <i>A Origem da Turbulência</i>	33
2.5.5 <i>A Turbulência e o Movimento das Partículas</i>	34
3. METODOLOGIA	43
3.1 INTRODUÇÃO.....	43
3.2 CONCEITOS E DEFINIÇÕES FUNDAMENTAIS.....	43
3.2.1 <i>Graus de Nivelamento e Níveis de Aproximação</i>	45
3.2.1.1 Nível de Aproximação.....	45
3.2.1.1.1 Aproximação do Nível de Escala.....	45
3.2.1.1.2 Aproximação do Nível de Transiência.....	47
3.2.1.1.3 Aproximação do Nível de Espaço.....	47
3.2.1.1.4 Aproximação do Nível de Dinâmica.....	47
3.2.2 <i>O Nivelamento das Equações do Continuum</i>	48
3.2.2.1 Nivelamento causado pelas Equações Diferenciais do <i>continuum</i>	48
3.3 DIAGRAMA DA MODELAGEM.....	52
3.4 MOVIMENTAÇÃO DAS PARTÍCULAS.....	53
3.4.1 <i>Método de Resolução da 2ª Lei de Newton</i>	55
3.5 MODELAGEM DO ESCOAMENTO DO FLUIDO.....	56
3.5.1 <i>Considerações Gerais</i>	56
3.5.2 <i>Hipóteses do Modelo</i>	57
3.5.3 <i>Considerações Geométricas</i>	57
3.5.4 <i>Balanco de Forças</i>	58
3.5.4.1 Forças Atuantes Sobre o Volume de Fluido.....	58
3.5.4.2 Avaliação das Tensões.....	59
3.5.4.3 Deslocamento e Atualização da Velocidade.....	60
3.5.4.4 Trabalho Dissipativo.....	60
3.5.4.5 Correção da Pressão.....	60
3.5.5 <i>Discretização do Campo de escoamento do Fluido – Grade do Fluido</i>	60
3.5.5.1 Estrutura da Grade do Fluido.....	61

3.5.5.2	Segmentação Não-Uniforme Convencional	61
3.5.5.3	Segmentação Não-Uniforme Funcional	63
3.5.5.3.1	Função Linear	65
3.5.5.3.2	Função Afim	65
3.5.5.3.2.1	Análise dos Parâmetros	66
3.5.5.3.2.2	Localização de Células em Grade Não-Uniforme – Função Afim	67
3.6	MODELAGEM DA TURBULÊNCIA	68
3.6.1	<i>Modelo κ-ϵ Padrão</i>	69
3.6.1.1	Viscosidade Turbilhonar	70
3.6.1.2	Equação de κ	71
3.6.1.3	Equação de ϵ	71
3.6.1.4	Tensor de Reynolds	72
3.6.1.5	Termo de Produção de Turbulência [$\rho = \tilde{\tau}^R : \nabla \bar{\mathbf{u}}$]	73
3.6.1.5.1	Tensor [$\nabla \bar{\mathbf{u}}$]	73
3.6.1.6	Efeitos de Parede	74
3.6.2	<i>Modelo κ-ϵ de Baixo Reynolds</i>	74
3.6.2.1	Viscosidade Turbilhonar	75
3.6.2.2	Equação de κ	75
3.6.2.3	Equação de ϵ	76
3.6.2.4	Termos de Geração Adicionais	76
3.6.3	<i>Condição de Parede</i>	77
3.6.3.1	Perfil Universal de Velocidades (PUV)	78
3.6.3.2	Perfil Universal de Velocidades Modificado (PUVM)	79
3.6.4	<i>Discretização do Modelo de Turbulência κ-ϵ de Baixo Reynolds</i>	82
3.6.4.1	Taxa Volumétrica de κ	82
3.6.4.2	Termo de Produção de Turbulência	83
3.6.4.3	Taxa Volumétrica de ϵ	83
3.6.4.4	Termo de Geração de ϵ	84
3.6.4.5	Atualização de κ , ϵ e μ_T	84
3.7	INTERAÇÃO PARTÍCULA-PARTÍCULA	85
3.7.1	<i>Crítério de Colisão</i>	85
3.7.1.1	Aproximação de 2ª Ordem - Movimento Uniforme	86
3.7.1.2	Aproximação de 4ª Ordem - Movimento Uniformemente Variado	87
3.7.1.3	Aproximação de 2ª Ordem Modificada - Movimento Uniformemente Variado Simplificado	89
3.7.2	<i>Discretização do Campo de Movimentação das Partículas – Grade das Partículas</i>	91
3.8	MODELO DE COLISÃO	94
3.8.1	<i>Modelo Simplificado de Jenkins & Savage (1983)</i>	95
3.8.2	<i>Modelo Detalhado com Atrito Tangencial</i>	96
3.8.3	<i>Considerações Geométricas</i>	98
3.8.3.1	Vetor Normal ao Plano de Colisão	98
3.8.3.2	Vetor Tangente ao Plano de Colisão	98
3.8.4	<i>Escolha do Modelo de Colisão</i>	99
3.9	TRATAMENTO DE MISTURAS POLIDISPERSAS	100
3.9.1	<i>Dedução da Função de Distribuição de Probabilidade</i>	101
3.9.2	<i>Algoritmo da Geração de Diâmetros</i>	104
4.	DESENVOLVIMENTO DO SIMULADOR	105
4.1	INTRODUÇÃO	105
4.1.1	<i>O Paradigma da Programação Orientada a Objeto</i>	105
4.2	CONSIDERAÇÕES DE PROJETO	108
4.2.1	<i>Concepção</i>	108
4.2.2	<i>Arquitetura do Simulador</i>	109
5.	RESULTADOS E DISCUSSÃO	117

5.1	INTRODUÇÃO	117
5.2	MODELO DE ESCOAMENTO LAMINAR DE FLUIDO PURO	118
5.2.1	<i>Tubo Horizontal (Sem gravidade)</i>	118
5.2.1.1	Parâmetros	119
5.2.1.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	120
5.2.1.3	Comparação	123
5.2.2	<i>Tubo Vertical (Com gravidade)</i>	124
5.2.2.1	Parâmetros	124
5.2.2.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	124
5.2.2.3	Comparação	126
5.3	EFEITO DO REFINAMENTO DA GRADE NO MODELO DE ESCOAMENTO LAMINAR DE FLUIDO PURO (MÍNIMA REALIZAÇÃO)	127
5.3.1	<i>Tubo Horizontal (Sem gravidade) – Discretização Rudimentar</i>	127
5.3.1.1	Parâmetros	127
5.3.1.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	128
5.3.1.3	Comparação	130
5.3.2	<i>Tubo Vertical (Com gravidade) – Discretização Rudimentar</i>	131
5.3.2.1	Parâmetros	131
5.3.2.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	131
5.3.2.3	Comparação	133
5.3.3	<i>Conclusão</i>	134
5.4	MODELO DE ESCOAMENTO TURBULENTO DE FLUIDO PURO	135
5.4.1	<i>Tubo Horizontal (Sem Gravidade)</i>	135
5.4.1.1	Parâmetros	135
5.4.1.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	137
5.4.1.3	Comparação	139
5.4.2	<i>Tubo Vertical (Com Gravidade)</i>	142
5.4.2.1	Parâmetros	142
5.4.2.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	143
5.4.2.3	Comparação	146
5.5	EFEITO DO REFINAMENTO DA GRADE NO MODELO DE ESCOAMENTO TURBULENTO DE FLUIDO PURO 147	147
5.5.1	<i>Tubo Horizontal (Sem Gravidade) – Discretização Refinada</i>	147
5.5.1.1	Parâmetros	147
5.5.1.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	148
5.5.1.3	Comparação	151
5.5.2	<i>Tubo Horizontal (Sem Gravidade) – Discretização Mais Refinada</i>	153
5.5.2.1	Parâmetros	153
5.5.2.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	154
5.5.3	<i>Conclusão</i>	155
5.6	EFEITO DAS CONDIÇÕES INICIAIS DE TURBULÊNCIA NO MODELO DE ESCOAMENTO TURBULENTO DE FLUIDO PURO	155
5.7	MODELO DE ESCOAMENTO LAMINAR BIFÁSICO	158
5.7.1	<i>Escoamento Laminar / Partículas</i>	158
5.7.1.1	Parâmetros	158
5.7.1.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	160
5.7.2	<i>Escoamento Laminar / Partículas / Acoplamento Sólido-Fluido</i>	166
5.7.2.1	Parâmetros	167
5.7.2.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	167
5.7.3	<i>Escoamento Laminar / Partículas / Colisões</i>	172
5.7.3.1	Parâmetros	172
5.7.3.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	172
5.7.4	<i>Escoamento Laminar / Partículas / Colisões / Acoplamento Sólido-Fluido</i>	177
5.7.4.1	Parâmetros	177
5.7.4.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica	178

5.8	MODELO DE ESCOAMENTO TURBULENTO BIFÁSICO.....	183
5.8.1	<i>Escoamento Turbulento / Partículas</i>	183
5.8.1.1	Parâmetros	183
5.8.1.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica.....	186
5.8.2	<i>Escoamento Turbulento / Partículas / Acoplamento Sólido-Fluido</i>	190
5.8.2.1	Parâmetros	190
5.8.2.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica.....	190
5.8.3	<i>Escoamento Turbulento / Partículas / Colisões</i>	195
5.8.3.1	Parâmetros	195
5.8.3.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica.....	195
5.8.4	<i>Escoamento Turbulento / Partículas / Colisões / Acoplamento Sólido-Fluido</i>	199
5.8.4.1	Parâmetros	199
5.8.4.2	Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica.....	199
5.9	ESTUDO DE MISTURAS POLIDISPERSAS.....	203
5.10	VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL	209
5.10.1	<i>Validação com Dados Experimentais Globais</i>	209
5.10.1.1	Comparação de Richardson-Zaki	210
5.10.1.2	Comparação de Queda de Pressão	213
5.10.2	<i>Validação com Dados Experimentais Localizados</i>	217
6.	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	221
6.1	CONCLUSÕES	221
6.2	SUGESTÕES.....	226
7.	REFERÊNCIAS	229
	APÊNDICE A - FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD).....	245

Lista de Figuras

Figura 1: Diagrama de fluxo simplificado do algoritmo do método PSI-Cell.....	17
Figura 2 : Ilustração da dimensão do elemento de fluido nos sistemas gás e sólido-gás.	50
Figura 3: Seqüência de níveis de escala considerados na solução numérica de um problema fluidodinâmico.	51
Figura 4: Diagrama esquemático de modelagem da simulação orientada a objeto do transporte pneumático.	53
Figura 5: Esquema ilustrativo de segmentação espacial para composição de grade não- uniforme.....	62
Figura 6: Região laminar do perfil de velocidades universal modificado. Comparação com alguns pontos experimentais, $R^2 = 1$	81
Figura 7: Região tampão do perfil de velocidades universal modificado. Comparação com alguns pontos experimentais, $R^2 = 0,998$	81
Figura 8: Região turbulenta do perfil de velocidades universal modificado. Comparação com alguns pontos experimentais, $R^2 = 0,99996$	82
Figura 9: Curva de distribuição de fração populacional acumulada típica para uma mistura polidispersa de partículas.....	103
Figura 10: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. escoamento laminar horizontal de fluido puro.	121
Figura 11: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. escoamento laminar horizontal de fluido puro.	122
Figura 12: Perfil radial de velocidade do fluido. escoamento laminar horizontal de fluido puro.....	122
Figura 13: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. escoamento laminar horizontal de fluido puro.	123
Figura 14: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. escoamento laminar vertical de fluido puro.	125
Figura 15: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. escoamento laminar vertical de fluido puro.....	125
Figura 16: Perfil radial de velocidade do fluido. escoamento laminar vertical de fluido puro.....	126
Figura 17: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. escoamento laminar vertical de fluido puro.	126
Figura 18: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. escoamento laminar horizontal de fluido puro com discretização rudimentar.....	128
Figura 19: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. escoamento laminar horizontal de fluido puro com discretização rudimentar.....	129
Figura 20: Perfil radial de velocidade do fluido. escoamento laminar horizontal de fluido puro com discretização rudimentar.	129

Figura 21: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento laminar horizontal de fluido puro com discretização rudimentar.	130
Figura 22: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento laminar vertical de fluido puro com discretização rudimentar.	132
Figura 23: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento laminar vertical de fluido puro com discretização rudimentar.	132
Figura 24: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento laminar vertical de fluido puro com discretização rudimentar.	133
Figura 25: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento laminar vertical de fluido puro com discretização rudimentar.	133
Figura 26: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.	138
Figura 27: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.	138
Figura 28: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.	139
Figura 29: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.	139
Figura 30: Comparação entre o perfil universal de velocidades e o perfil de velocidades adimensionalizado fornecido pela simulação. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.	140
Figura 31: Perfil radial da energia cinética de turbulência (κ). Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.	141
Figura 32: Perfil radial da taxa de dissipação da turbulência (ϵ). Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.	141
Figura 33: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.	144
Figura 34: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.	144
Figura 35: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.	145
Figura 36: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.	145
Figura 37: Comparação entre o perfil universal de velocidades e o perfil de velocidades adimensionalizado fornecido pela simulação. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.	146
Figura 38: Perfil radial da energia cinética de turbulência (κ). Escoamento turbulento vertical de fluido puro.	147
Figura 39: Perfil radial da taxa de dissipação da turbulência (ϵ). Escoamento turbulento vertical de fluido puro.	147
Figura 40: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.	149

Figura 41: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.	150
Figura 42: Perfil radial de velocidade do fluido. escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.	150
Figura 43: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.	151
Figura 44: Comparação entre o perfil universal de velocidades e o perfil de velocidades adimensionalizado fornecido pela simulação. escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.	152
Figura 45: Perfil radial da energia cinética de turbulência (κ). escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.	152
Figura 46: Perfil radial da taxa de dissipação da turbulência (ϵ). escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.	153
Figura 47: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização mais refinada.	154
Figura 48: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização mais refinada.	155
Figura 49: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Efeito das condições iniciais de turbulência.	157
Figura 50: Perfil radial de velocidade do fluido. Efeito das condições iniciais de turbulência.	157
Figura 51: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. escoamento laminar bifásico.	161
Figura 52: Perfil radial de velocidade do fluido. escoamento laminar bifásico.	161
Figura 53: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico.	162
Figura 54: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico.	163
Figura 55: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico.	163
Figura 56: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico.	164
Figura 57: Velocidade axial de uma partícula de traçador inserida do repouso no centro da base do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico.	165
Figura 58: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. escoamento laminar bifásico.	166
Figura 59: Visualização da porosidade local no leito de transporte. escoamento laminar bifásico.	166
Figura 60: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	167
Figura 61: Perfil radial de velocidade do fluido. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	168

Figura 62: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	169
Figura 63: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	169
Figura 64: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	170
Figura 65: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	171
Figura 66: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	172
Figura 67: Visualização da porosidade local no leito de transporte. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	172
Figura 68: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com colisões.	173
Figura 69: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com colisões.	174
Figura 70: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com colisões.	175
Figura 71: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com colisões.	176
Figura 72: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. escoamento laminar bifásico com colisões.	177
Figura 73: Visualização da porosidade local no leito de transporte. escoamento laminar bifásico com colisões.	177
Figura 74: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	178
Figura 75: Perfil radial de velocidade do fluido. escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	179
Figura 76: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	179
Figura 77: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	180
Figura 78: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	181
Figura 79: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	182

Figura 80: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	183
Figura 81: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	183
Figura 82: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento bifásico.	186
Figura 83: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico.	187
Figura 84: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico.	187
Figura 85: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico.	188
Figura 86: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico.	189
Figura 87: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico.	190
Figura 88: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico.	190
Figura 89: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	191
Figura 90: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	191
Figura 91: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido- fluido.	192
Figura 92: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido- fluido.	192
Figura 93: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido- fluido.	193
Figura 94: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	194
Figura 95: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	195
Figura 96: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.	195
Figura 97: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.	196
Figura 98: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.	196
Figura 99: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.	197

Figura 100: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.	198
Figura 101: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.	199
Figura 102: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.	199
Figura 103: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	200
Figura 104: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	200
Figura 105: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	201
Figura 106: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	201
Figura 107: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	202
Figura 108: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	203
Figura 109: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.	203
Figura 110: Curva de distribuição mássica acumulada das misturas de partículas estudadas.	204
Figura 111: Curva de distribuição mássica não-acumulada das misturas de partículas estudadas.	204
Figura 112: Curva de distribuição populacional acumulada das misturas de partículas estudadas.	205
Figura 113: Comparação das curvas de distribuição mássica acumulada para a mistura A.	205
Figura 114: Comparação das curvas de distribuição mássica acumulada para a mistura B.	206
Figura 115: Comparação das curvas de distribuição mássica acumulada para a mistura C.	206
Figura 116: Perfil radial da velocidade axial média das partículas em várias faixas de diâmetro da mistura A.	207
Figura 117: Diagrama de visualização da velocidade axial das partículas para a mistura A (polidispersa).	208
Figura 118: Diagrama de visualização da velocidade axial das partículas para a mistura D (monodispersa).	208

Figura 119: Diagrama de visualização do diâmetro das partículas para a mistura A.....	209
Figura 120: Diagrama de visualização do diâmetro das partículas para a mistura C.....	209
Figura 121: Comparação de dados experimentais obtidos por Capes & Nakamura (1973) para o transporte de partículas de aço com 2,34mm de diâmetro e 7,70g/cm ³ de densidade.	210
Figura 122: Porosidade média do leito de transporte em função do parâmetro de Richardson-Zaki para várias quedas de pressão no tubo.....	211
Figura 123: Velocidade superficial de sólidos em função do parâmetro de Richardson-Zaki para várias quedas de pressão no tubo.....	212
Figura 124: Fração mássica de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte em função do parâmetro de Richardson-Zaki.....	213
Figura 125: Comparação entre dados de queda de pressão de Capes & Nakamura e os resultados simulados para as mesmas condições. A viscosidade e massa específica do ar foram calculadas para a temperatura presumida de 20°C. A fase dispersa é constituída por esferas de vidro de 2,90mm alimentadas a uma taxa de 0,152Kg/s. Os pontos realçados correspondem aos casos onde não ocorreu o transporte de sólidos, representando situações onde se verificou o fenômeno de <i>choking</i>	214
Figura 126: Fluxo mássico de sólidos pelo topo e pela base do tubo para as mesmas simulações mostradas na <i>Figura 125</i> . Os pontos assinalados correspondem a situações onde o transporte não foi apropriadamente realizado, verificando-se o fenômeno de <i>choking</i>	216
Figura 127: Freqüência de colisões por partícula para as mesmas simulações mostradas na <i>Figura 125</i> . Os pontos assinalados correspondem a situações onde o transporte não foi propriamente realizado, verificando-se o fenômeno de <i>choking</i>	216
Figura 128 : Perfil radial adimensional da velocidade do fluido nas principais simulações. Validação com dados experimentais localizados.	218
Figura 129 : Perfil radial adimensional da velocidade do fluido experimental para várias razões de carregamento. Validação com dados experimentais localizados.....	219
Figura 130 : Comparação entre o perfil universal de velocidades e os perfis experimental e simulado. Validação com dados experimentais localizados.	220

Lista de Tabelas

Tabela 1: Valores das constantes do modelo de turbulência $k-\epsilon$ (Hirsch, 1990).	71
Tabela 2: Valores dos parâmetros do modelo de turbulência $k-\epsilon$ modificado para baixos Reynolds	76
Tabela 3: Características da simulação. escoamento laminar horizontal de fluido puro. ..	119
Tabela 4: Características do equipamento. escoamento laminar horizontal de fluido puro.	119
Tabela 5: Características do fluido. escoamento laminar horizontal de fluido puro.	120
Tabela 6: Características da discretização do fluido. escoamento laminar horizontal de fluido puro.....	120
Tabela 7: Comparação entre as soluções analítica e numérica para o escoamento de ar em um tubo de 2m de comprimento e 0,1m de diâmetro submetido a uma diferença de pressão de 1Pa sem gravidade.....	123
Tabela 8: Características do equipamento. escoamento laminar vertical de fluido puro... ..	124
Tabela 9: Comparação entre as soluções analítica e numérica para o escoamento de ar em um tubo vertical de 2m de comprimento e 0,1m de diâmetro submetido a uma diferença de pressão de 21Pa (ou 1,4Pa piezométricos) com gravidade.	127
Tabela 10: Características da discretização do fluido. escoamento laminar horizontal de fluido puro com discretização rudimentar.	128
Tabela 11: Comparação entre as soluções analítica e numérica para o escoamento de ar em um tubo de 2m de comprimento e 0,1m de diâmetro submetido a uma diferença de pressão de 1Pa sem gravidade. Simulação realizada com malha rudimentar.....	130
Tabela 12: Características da discretização do fluido. escoamento laminar vertical de fluido puro com discretização rudimentar.	131
Tabela 13: Comparação entre as soluções analítica e numérica para o escoamento de ar em um tubo vertical de 2m de comprimento e 0,1m de diâmetro submetido a uma diferença de pressão de 21Pa (ou 1,4Pa piezométricos) com gravidade. Simulação realizada com malha rudimentar.	134
Tabela 14: Características da simulação. escoamento turbulento horizontal de fluido puro.	135
Tabela 15: Características do equipamento. escoamento turbulento horizontal de fluido puro.....	136
Tabela 16: Características do fluido. escoamento turbulento horizontal de fluido puro. ..	136
Tabela 17: Parâmetros do modelo de turbulência. escoamento turbulento horizontal de fluido puro.....	136
Tabela 18: Características da discretização do fluido. escoamento turbulento horizontal de fluido puro.....	137
Tabela 19: Características da simulação. escoamento turbulento vertical de fluido puro.	142
Tabela 20: Características do equipamento. escoamento turbulento vertical de fluido puro.	142
Tabela 21: Características do fluido. escoamento turbulento vertical de fluido puro.	143

Tabela 22: Parâmetros do modelo de turbulência. escoamento turbulento vertical de fluido puro.....	143
Tabela 23: Características da discretização do fluido. escoamento turbulento vertical de fluido puro.....	143
Tabela 24: Características da discretização do fluido. escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.	148
Tabela 25: Comparação da velocidade central do fluido entre simulações diferenciadas pelo refinamento da grade de discretização (tempo simulado de aproximadamente 1700s).	149
Tabela 26: Características da discretização do fluido. escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização mais refinada.	154
Tabela 27: Comparação da velocidade central do fluido entre simulações diferenciadas pelo refinamento da grade de discretização.	155
Tabela 28: Parâmetros do modelo de turbulência. Efeito das condições iniciais de turbulência.....	156
Tabela 29: Comparação da velocidade central do fluido entre simulações diferenciadas pelas condições iniciais de turbulência.....	157
Tabela 30: Características da simulação. escoamento laminar bifásico.	159
Tabela 31: Características do equipamento. escoamento laminar bifásico.	159
Tabela 32: Características das partículas. escoamento laminar bifásico.....	159
Tabela 33: Características do fluido. escoamento laminar bifásico.....	160
Tabela 34: Características da discretização das partículas. escoamento laminar bifásico.	160
Tabela 35: Características da discretização do fluido. escoamento laminar bifásico.	160
Tabela 36: Características do equipamento. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.....	167
Tabela 37: Características da simulação. escoamento turbulento bifásico.	184
Tabela 38: Características do equipamento. escoamento turbulento bifásico.....	184
Tabela 39: Características das partículas. escoamento turbulento bifásico.....	184
Tabela 40: Características do fluido. escoamento turbulento bifásico.....	185
Tabela 41: Modelo de turbulência K-Epsilon. escoamento turbulento bifásico.....	185
Tabela 42: Características da discretização das partículas. escoamento turbulento bifásico.	185
Tabela 43: Características da discretização do fluido. escoamento turbulento bifásico.	186
Tabela 44 : Parâmetros gerais das simulações. Validação com dados experimentais localizados.....	217
Tabela 45 : Estimativa da taxa de injeção de partículas para as principais simulações. Validação com dados experimentais localizados.....	218
Tabela 46 : Resumo de resultados da principais simulações. Validação com dados experimentais localizados.	218

Nomenclatura

- *Letras Latinas*

\bar{F}_R : Força resultante sobre a partícula

\bar{F}_D : Força de arraste do fluido sobre a partícula

\bar{F}_C : Combinação da força de empuxo com outras forças de campo sobre a partícula

m_p : Massa de uma partícula

\bar{v} : Vetor velocidade da partícula

\bar{a} : Vetor aceleração da partícula

\bar{u} : Vetor velocidade do fluido

\bar{x} : Vetor posição da partícula

C_D : Coeficiente de arraste para a partícula

d_p : Diâmetro da partícula

\bar{g} : Vetor de força gravitacional

Re_p : Número de Reynolds para uma partícula

\bar{s} : Termo fonte de interação entre a fase fluida e particulada

\bar{u} : Vetor velocidade média do fluido

p : Pressão isotrópica

\tilde{I} : Tensor identidade

t : Tempo

- *Letras Gregas*

ε : Porosidade da mistura

$\tilde{\tau}$: Tensor deformação

$\tilde{\tau}^V$: Tensor deformação viscoso

$\tilde{\tau}^R$: Tensor de Reynolds

$\tilde{\tau}^T$: Tensor deformação turbulento

$\tilde{\sigma}^T$: Tensor tensão turbulento

k : Energia cinética de turbulência
 ϵ : Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
 μ : Viscosidade cinemática
 μ_T : Viscosidade cinemática turbilhonar
 ν : Viscosidade dinâmica
 ν_T : Viscosidade dinâmica turbilhonar
 λ : Viscosidade maciça
 λ_T : Viscosidade maciça turbilhonar
 ρ, ρ_f : Densidade do fluido
 ρ_p : Densidade da partícula

- **Superscritos**
T : Turbulento
- **Subscritos**
T : Turbilhonar
V : Viscoso
R : Reynolds, Resultante
p : Partícula
f : Fluido
D : Arraste (*drag*)
C : Campo
k : Índice de iteração temporal
e, w : Faces leste (*east*) e oeste (*west*) dos volumes de fluido
r : eixo coordenado radial
z : eixo coordenado axial
i, j : Índices de iteração
ef : Efetivo
0 : Inicial
máx : Máximo
- **Abreviaturas**

PSI-Cell: Particle-Source-in-Cell

- *Siglas*

SOO: Simulação Orientada a Objeto

FCC: Fractionating Catalytic Cracking

CFD: Computational Fluid Dynamics

1. INTRODUÇÃO

O transporte de partículas por uma corrente de fluido, mais especificamente um gás, tem sido usado com frequência nas plantas industriais. Isto se deve à grande variedade de materiais que é produzida ou manipulada na forma particulada, a exemplo de grãos agrícolas (trigo, arroz, etc.), produtos alimentícios (açúcar, café, etc.), combustíveis sólidos (carvão, biomassa, etc.) e produtos farmacêuticos. Esta operação de carregamento de sólidos granulados por um gás em movimento é comumente denominada de transporte pneumático. No entanto são encontradas terminologias mais específicas como secador pneumático, reator de transporte pneumático, leito de craqueamento catalítico, leito fluidizado circulante, *vertical risers*, *stand pipes* etc., quando o transporte de sólidos está vinculado a outros processos, a exemplo da secagem, reações catalíticas ou não catalíticas, dentre outros. A despeito desta diversidade de processos associados ao transporte pneumático, existe uma característica comum que é o íntimo contato sólido-fluido promovido por esta operação, a qual favorece o estabelecimento de altas taxas de transferência de calor e massa.

O campo de aplicações do transporte pneumático é bastante vasto, se estendendo por uma ampla variedade de setores industriais, tais como:

- **Petroquímico:** O sistema de transporte pneumático é utilizado na perfuração de poços e craqueamento catalítico do petróleo (Pratt, 1974, Yerushalmi & Cankurt, 1978). O uso no craqueamento catalítico foi introduzido desde a elaboração dos catalisadores zeólitas, quando, então, dedicou-se esforço intensivo no sentido de desenvolver um reator de transporte pneumático vertical (Pratt, 1974). Muitas indústrias de química fina fazem uso do transporte pneumático em alguma etapa do seu processo produtivo.
- **Carvão:** O transporte de carvão a longas distâncias é comumente realizado por via pneumática.
- **Energia:** Nas indústrias de processamento de carvão para produção energética, o minério é gaseificado e queimado em leito de transporte pneumático. O mesmo processo de geração de energia é usado quando a fonte energética é a biomassa (Nack et alii, 1976).
- **Alimentos:** No setor alimentício, as indústrias que utilizam material granulado no processo, aplicam o transporte pneumático para transferir sólidos entre equipamentos ou a partir de algum equipamento para o silo de armazenamento.
- **Agricultura:** No processamento e armazenamento de cereais, o transporte pneumático pode ser usado para secagem do material e posterior transferência para um silo de armazenamento.

Estes são apenas alguns exemplos da aplicação do transporte pneumático. Apesar de não ser cabível uma enumeração completa neste espaço, pode-se ter, desde já, uma idéia da importância deste tipo de operação para as atividades industrial e tecnológica.

1.1 Visão Geral do Estado da Arte

A compreensão dos efeitos dinâmicos presentes nos escoamentos bifásicos particulados, no qual um fluido constitui a fase contínua e um leito de partículas compõe a fase discreta particulada, é um problema clássico da engenharia química. Devido à grande diversidade e complexidade de fenômenos físicos presentes nestes sistemas, a única abordagem viável capaz de fornecer resultados e conclusões úteis tem sido, ao longo de vários anos, de natureza empírica. Entretanto, o rápido aumento do poder computacional dos computadores modernos, juntamente com o desenvolvimento de modelos numéricos eficientes permitiu o estudo de problemas intratáveis anteriormente, sem grandes simplificações.

Enquanto numerosos estudos tem comprovado que as equações de Navier-Stokes governam o escoamento de fluidos puros² – desde que seja válida a aproximação do *continuum* – ainda não está universalmente estabelecido um método de incorporação da fase particulada num escoamento bifásico sólido-fluido.

A metodologia mais freqüente consiste em se considerar a fase discreta como sendo algum tipo de *continuum* através da aplicação de um nivelamento espacial nas equações do movimento, obtendo-se equações diferenciais bastante semelhantes às equações de Navier-Stokes, mas contendo termos adicionais que respondem pelos fluxos e “geração” de energia e momento da fase particulada, cuja modelagem se dá, geralmente, por relações fenomenológicas.

Este tipo de modelagem é equivalente a se considerar as fases contínua e dispersa como dois fluidos escoando na forma de uma mistura binária monofásica e suas equações fundamentais têm sido desenvolvidas e revistas por vários autores como Drew (1971), Ishii (1975), Soo (1976) e mais recentemente Nigmatlin (1979). Dentre estes, Drew (1971) executou uma dedução rigorosa das equações e discorreu sobre as suas limitações no que respeita ao nível de escala que são capazes de modelar, mostrando que deve-se ter cautela no uso de equações diferenciais para descrever as propriedades de uma nuvem de partículas quando o diâmetro destas partículas é comparável ao nível de escala do sistema onde ocorre o escoamento. O tratamento de misturas polidispersas pelo modelo do *continuum* é feito pela anexação de um conjunto de equações diferenciais ao modelo dinâmico para cada faixa de diâmetros das partículas (Arastoopour et alii, 1982), de maneira que a resolução numérica pode se tornar bastante complexa ou até impraticável devido ao aumento excessivo do número de equações, comum de acontecer quando a mistura de partículas é polidispersa.

Outra característica peculiar do modelo do *continuum* é a incorporação de parâmetros para a fase dispersa que são naturalmente inerentes à fase fluida, a exemplo da viscosidade e do coeficiente de difusão para os sólidos. A estimativa de tais parâmetros é bastante difícil, tendo-se que recorrer invariavelmente a medidas experimentais.

² Está disponível, atualmente, uma vasta literatura versando sobre a fluidodinâmica computacional. Como um texto introdutório, vide Shaw (1992). Uma descrição pormenorizada dos vários modos de simplificação e resolução das equações de Navier-Stokes pode ser verificada em Hirsch (1988).

No que concerne à resolução das equações do *continuum*, os modelos numéricos geralmente não contemplam as tensões da fase dispersa, as quais são deliberadamente ignoradas, ou então elaboram-se hipóteses a fim de reduzir a sua importância (Crowe, 1982). Conforme Adewumi & Arastoopour (1986), a maioria dos trabalhos disponíveis na literatura sobre o transporte pneumático corresponde a modelos unidimensionais em regime permanente. Contudo, devido à limitação destes modelos na predição de características importantes do escoamento sólido-fluido, alguns pesquisadores se empenharam na elaboração e resolução de modelos bidimensionais ou pseudo-bidimensionais em regime permanente e até mesmo transiente. Dentre estes, estão Gosman et alii (1969), Shih et alii (1982), Adewumi & Arastoopour (1986), Sinclair & Jackson (1989), Pita & Sundaresan (1991), Louge et alii (1991) e Paixão (1995).

Em paralelo ao modelo do *continuum*, existem os modelos de trajetória, que usam uma abordagem discreta no tratamento da fase particulada. Os modelos de trajetória podem ser baseados numa perspectiva determinística ou estatística. No caso determinístico, tal abordagem foi introduzida pioneiramente por Crowe & Pratt (1972) e posteriormente denominada *PSI-Cell (Particle-Source-in-Cell)* (Crowe et alii, 1977), sendo que a sua fundamentação reside em se tratar a fase particulada como fonte de massa, *momentum* e energia para a fase gasosa. Neste modelo, as trajetórias da partículas são obtidas pela integração da lei do movimento de Newton a cada etapa do processo iterativo, caracterizando, de fato, um técnica determinística. Em contrapartida, os modelos de trajetória que se valem de uma abordagem estatística têm sua fundamentação física e matemática em alguma forma da equação de Boltzmann adaptada para sistemas particulados, cuja dedução segue um procedimento padrão encontrado, por exemplo, em Lifshitz & Pitaevsky (1981). Os métodos de trajetória estatísticos foram usados por vários pesquisadores (Pearson et alii, 1984; Valioulis et alii, 1984; Berlemont et alii, 1990) e permitiram a inspeção de fenômenos complexos do escoamento sólido-fluido, outrora não detectados por modelos do *continuum*, porém muitos destes apresentam concordância apenas qualitativa em comparação com medidas experimentais, como visto em Kitron et alii (1990). Quanto ao nível de escala temporal, os modelos de trajetória determinísticos são, em sua maioria, essencialmente de regime permanente, a exemplo dos métodos baseados no *PSI-Cell*, entretanto alguns modelos estatísticos podem ser transientes.

1.2 Objetivo da Pesquisa

Neste trabalho, tem-se por objetivo a investigação dos fenômenos dinâmicos presentes no transporte pneumático vertical através do desenvolvimento e implementação de um modelo orientado a objeto, discreto, determinístico e transiente para a fase particulada. A fase fluida será modelada de maneira pseudo-bidimensional, distinta da fase particulada, e o acoplamento de efeitos entre as fases será realizado por termos de interação bidirecional como a força de arraste do fluido sobre as partículas e a geração de *momentum* na fase fluida. O modelo contemplará os efeitos de colisão partícula-partícula e das partículas com as paredes do equipamento. Esta característica, juntamente com o movimento tridimensional das partículas, pode permitir a captura de padrões dinâmicos

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

bastante complexos, a exemplo da recirculação e o escorregamento de sólidos na parede. Além disso, devido às propriedades da orientação a objeto, o modelo comportará a simulação de misturas polidispersas, capacitando o estudo dos fenômenos de segregação presentes no transporte pneumático.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Sistemas Multifásicos

A dinâmica de sistemas multifásicos se constitui em objeto de intenso estudo nas áreas de engenharia, física aplicada e até da matemática aplicada. Esta confluência de interesses se deve ao alto teor de multidisciplinaridade do tema envolvido. De fato, não há como descrever, de maneira útil, os fenômenos físicos presentes nestes sistemas sem o uso de matemática apurada associada à percepção prática típica da engenharia. A definição de um sistema multifásico pode ser encontrada de maneira sutilmente distinta em vários textos que versam sobre o assunto (Soo, 1967; Drew, 1971; Soo, 1989).

De acordo com Drew (1971), um sistema bifásico é caracterizado quando o espaço é ocupado por dois materiais que têm propriedades distintas e que, portanto, podem ser diferenciados entre si. Estes materiais são separados interfacialmente por regiões finas de transição nas quais as suas propriedades variam rapidamente, evidenciando, deste modo, gradientes elevados. As regiões de transição se constituem numa espécie de “camada limite” formada na interface entre as fases e tem a sua origem devida às diferenças do comportamento dinâmico de cada uma destas fases.

A definição dada por Drew (1971) se baseia nas diferenças físicas que possam ser observadas entre os materiais presentes no sistema e não nas distinções fenomenológicas ocasionadas por diferenças nas propriedades dinâmicas, tais como velocidade, concentração, energia interna, etc. Nesta ordem, Soo (1989) levantou uma distinção entre fases físicas e dinâmicas da matéria. Quanto às fases físicas, a matéria pode se apresentar nas formas de vapor, líquido e sólido em vários estados cristalinos, ao passo que a identificação das fases dinâmicas está relacionada à similaridade das respostas dinâmicas de cada elemento que constitui um sistema multifásico. Em um escoamento onde estão presentes vários elementos em fases físicas diferentes, cada grupo de elementos que possui resposta dinâmica semelhante, às variações do campo de escoamento, pode ser considerado como uma fase dinâmica. Por conseguinte, de acordo com tal conceito, o escoamento multifásico se originaria justamente da multiplicidade de respostas dinâmicas dos elementos presentes no sistema. Para ilustrar, considere-se o arraste de partículas sólidas de mesmo material por uma corrente gasosa. Neste sistema, os grupos de partículas com tamanhos diferentes compõem fases distintas, uma vez que apresentam respostas fluidodinâmicas diferentes em consequência das variações no escoamento do gás. O tempo de resposta fluidodinâmico é um parâmetro que pode ser usado para distinguir fases dinâmicas, sendo definido como o tempo necessário para que uma partícula em repouso, liberada na corrente de fluido escoante, atinja 63% da sua velocidade terminal (Crowe, 1982). Em vista do conceito de fase dinâmica proposto por Soo (1989) considerar os efeitos dinâmicos em si – e não as complexas interações que os geram – pode-se estendê-lo para outras situações nas quais as partículas sejam diferenciadas por propriedades não geométricas. Portanto, nessa ótica, partículas igualmente magnetizadas, escoando sob a ação de um campo magnético externo, podem ser consideradas como uma fase dinâmica.

Do mesmo modo, partículas eletrizadas com uma mesma carga, escoando sob a influência de um campo elétrico, podem apresentar respostas fluidodinâmicas similares, constituindo-se, então, numa fase dinâmica (Soo, 1965).

A complexidade dinâmica associada ao escoamento multifásico se deve à grande variedade de fenômenos físicos nele presentes em ocorrência simultânea, podendo ser verificadas transferências de *momentum*, massa e energia entre as diversas fases dinâmicas que compõem o sistema. Os efeitos de interação dinâmica ocorrem internamente a cada fase, entre as diversas fases e entre estas fases e a fronteira do sistema. Apesar do elevado grau de dificuldade, a investigação dos sistemas multifásicos é realizada intensivamente em virtude da sua grande importância industrial e tecnológica. Atualmente, existem diversos processos e aplicações que se constituem em sistemas multifásicos, dentre os quais, como exemplo, tem-se: transporte pneumático de carvão, minérios e produtos de química fina; leitos fluidizados; reatores catalíticos heterogêneos; reatores biológicos; atomizadores; secadores; absorvedores; combustores; purificadores de gases; sedimentação; flotação; etc.

2.2 Transporte Pneumático

O transporte pneumático pode ser definido como o arraste de partículas sólidas por uma corrente gasosa através de uma tubulação. Esta operação tem sido usada com sucesso nas indústrias de processos químicos ao longo de vários anos, com o objetivo de transportar diversos materiais como cal, produtos químicos granulados, carvão, soda calcinada e *pellets* de polímeros plásticos (Sadler, 1949). Entretanto, a utilidade do transporte pneumático não é limitada apenas ao transporte de sólidos, sendo usado também como secador de grãos, reator biológico e reator catalítico ou não-catalítico de misturas reacionais heterogêneas. Outro motivador à aplicação do transporte pneumático surgiu a partir da elaboração dos catalisadores zeólitas. Desde então, muito esforço tem sido dedicado à investigação e desenvolvimento de um reator de transporte pneumático visando fazer o craqueamento catalítico do gás-óleo e resíduo de gasolina (Pratt, 1974; Yerushalmi & Cankurt, 1978). Atualmente, grande parte do fracionamento de petróleo é realizada através de unidades de FCC baseadas neste princípio.

Mesmo com o grande interesse industrial envolvido, associado ao esforço de pesquisa, pode-se considerar que o avanço na compreensão dos fenômenos dinâmicos presentes no transporte pneumático é relativamente lento. Uma justificativa plausível para este fato está na demasiada complexidade dos fenômenos inerentes ao transporte pneumático juntamente com o grande número de variáveis fluidodinâmicas requerido para a quantificação completa do sistema. As propriedades fluidodinâmicas pertinentes são, dentre outras, as velocidades do gás e das partículas, velocidade de escorregamento, fração volumétrica das partículas, atrito do gás e partículas com a parede, atrito entre o gás e as partículas, pressão, comprimento de entrada, etc.

Os sistemas de transporte pneumático podem ser classificados, de acordo com a concentração volumétrica de sólidos e outras características do escoamento, como sendo em fase densa ou fase diluída. No escoamento em fase diluída, o movimento das partículas é orientado pelas forças fluidodinâmicas locais, não tendo grande importância os efeitos de

colisão das partículas entre si e com a parede. Entretanto, no transporte em fase densa, as colisões partícula-partícula desempenham papel fundamental, controlando totalmente o movimento das partículas. A distinção entre estas duas classes de transporte não é consenso entre os pesquisadores, havendo desacordo, principalmente, no modo de caracterização e definição do escoamento em fase densa. Várias definições discordantes podem ser encontradas, citando, por exemplo, Leva (1959), Kunii & Levenspiel (1969) e Chen et alii (1979). Por conseqüência, a definição do transporte em fase diluída também não é clara, a não ser que a porosidade do sistema seja bastante próxima da unidade.

Enquanto objeto de estudo, o transporte pneumático em fase diluída é mais simples de ser investigado e modelado, devido ao fato de comportar realisticamente hipóteses simplificadoras, relacionadas às partículas, que seriam de aplicação inviável no transporte em fase densa. Dentre as hipóteses simplificadoras, as mais comumente usadas são a consideração de que (1) as tensões na fase discreta são desprezíveis e o (2) acoplamento unidirecional. A hipótese (1) tem impacto imediato nas equações do movimento, pois evita os problemas da modelagem do tensor de tensão para a fase discreta. Já a hipótese (2) se refere à quantificação exclusiva dos efeitos do fluido sobre as partículas, assumindo, conseqüentemente, que o movimento das partículas não altera significativamente o escoamento do fluido. Não é difícil perceber que ambas as hipóteses supra mencionadas requerem uma baixa concentração de sólidos para serem razoavelmente válidas, sendo, por este motivo, aplicáveis apenas para sistemas em fase diluída.

2.2.1 Abordagem Empírica

Em virtude da dificuldade de realização de um estudo mais fundamental do transporte pneumático, no que se refere às causas e efeitos das interações dinâmicas, a abordagem empírica tem sido predominantemente explorada por vários anos. O resultados das investigações empíricas são comumente expressos na forma de correlações envolvendo parâmetros relevantes para o projeto e operação do equipamento de transporte pneumático. Em conseqüência, pode ser encontrado na literatura um grande número de correlações propostas para a estimativa destes parâmetros importantes, dentre os quais estão a velocidade e porosidade de *choking* e a queda de pressão.

O mérito das correlações empíricas está na prontidão e praticidade de uso, entretanto, como constataram Adewumi & Arastoopour (1986), a maioria das correlações foi desenvolvida utilizando-se de dados experimentais unidimensionais, o que lhes confere maior incerteza quando aplicadas a sistemas de transporte pneumático dotados de variações radiais significativas. Em vista de diversos estudos terem comprovado a não uniformidade radial de propriedades importantes como a velocidade e a concentração de sólidos (Bartholomeu & Casagrande, 1957; Soo, 1962; Doig, 1965; Reddy, 1967; Saxton & Worley, 1970; Yerushalmi et alii, 1978; Youchou & Kwauk, 1980; Weinstein et alii, 1984; Bader et alii, 1988), a restrição unidimensional pode se constituir num grave problema. Adicionalmente, deve-se estar sempre atento ao fato de que a faixa de aplicação segura de uma correlação empírica é restrita à faixa de valores dos dados experimentais nos quais ela

se baseia. Qualquer extrapolação pode causar sérios desvios no valor da grandeza estimada, acarretando em conseqüências que podem ser desastrosas.

Enick & Klinzing (1986) desenvolveram e verificaram uma correlação para estimar o comprimento de aceleração numa linha de transporte pneumático de partículas finas em escoamento ascendente. A correlação se baseou em dados experimentais obtidos de vários trabalhos e relaciona o comprimento de aceleração com o número de Froude, razão de diâmetros partícula/tubo, razão de densidades partícula/fluido, número de Reynolds do gás e o carregamento.

A velocidade e porosidade de *choking* se constituem em importantes parâmetros de projeto e operação do transporte pneumático, visto que os seus valores determinam a vazão de gás mínima necessária à realização do transporte estável dos sólidos. A definição do fenômeno de *choking* não é trivial, por isso, várias tentativas, muitas vezes discordantes, podem ser encontradas na literatura. Os pesquisadores Zenz & Othmer (1960) e Doig & Roper (1963) elaboraram correlações versando sobre a estimativa da velocidade e porosidade de *choking* no transporte pneumático. Em 1971, Leung et alii (1971) apontaram inadequações nas correlações de Zenz & Othmer (1960) e Doig & Roper (1963) e publicaram outras correlações fazendo uso da hipótese de porosidade constante igual a 0,97 no estado de *choking*. Tal hipótese implicaria num grande erro que poderia chegar até a 400% no cálculo da vazão de *choking*, uma vez que vários experimentos (Lewis et alii, 1949; Ormiston, 1966) haviam constatado uma faixa de porosidade de *choking* variando de 0,87 a 0,99 para tubos de pequeno diâmetro. Para tubos de maior diâmetro, Capes & Nakamura (1973) reportaram uma porosidade de *choking* muito superior, sendo da ordem de 0,9994. Neste caso, conforme apontou Yang (1975), o erro no cálculo da vazão de *choking* poderia atingir a marca exorbitante dos 5000%.

Com base nos dados experimentais disponíveis na literatura até então, Yang (1975) definiu o estado de *choking* como sendo o ponto no qual o fator de atrito dos sólidos é 0,01. Em trabalho posterior, Yang (1983) redefiniu graficamente o *choking* se valendo da curva da queda de pressão no leito de transporte em função da velocidade do gás. Na sua investigação, Yang (1983) considerou o *choking* como sendo o ponto no qual um pequeno decréscimo da vazão de gás – mantendo a vazão de sólidos constante – ou um pequeno aumento da vazão de sólidos – mantendo-se a velocidade do gás constante – ocasiona uma elevação exponencial da queda de pressão ao longo do leito.

Chong & Leung (1986) fizeram uma avaliação de várias das correlações para a velocidade de *choking* encontradas na literatura e constataram que nenhuma delas se adequava a todos os tipos de sistemas. Em sua pesquisa, eles recomendaram a correlação de Yousfi & Gau (1974) para os sistemas classificados nos grupos A e B de acordo com Geldart (1973), e a correlação de Yang (1983) para os sistemas incluídos no grupo D.

Outra comparação entre correlações para a velocidade de *choking* foi realizada por Briens & Bergougnou (1986). Para misturas monodispersas, os autores verificaram que a correlação de Yang (1983) forneceu os melhores resultados, enquanto que, para misturas polidispersas, ficou constatado que nenhuma das correlações disponíveis na literatura até aquele momento forneceu resultados satisfatórios. Em seguida, Briens & Bergougnou

(1986), com base nos dados de Capes & Nakamura (1973), elaboraram um modelo físico supondo a formação de um anulo junto à parede, a baixas velocidades de gás, no qual as partículas fluem em movimento descendente. Este modelo permitiu a estimativa da velocidade de *choking* com um erro médio de 21%, representando avanço significativo no campo das misturas polidispersas.

Day et alii (1990) elaboraram uma correlação, baseada num modelo unidimensional, para prever a velocidade de *choking*, assumindo que este fenômeno ocorre na entrada do equipamento quando um parâmetro auxiliar $\gamma(\epsilon)$, que é função da porosidade, se torna nulo. Para determinar a porosidade na entrada, necessária ao cálculo do parâmetro auxiliar, os autores usaram uma correlação para a velocidade de escorregamento. A correlação elaborada se mostrou mais precisa do que a correlação de Yang (1983) na predição de sistemas monodispersos e, também, apresentou uma melhora de precisão significativa em relação ao modelo de Briens & Bergougnou (1986), quando usada para sistemas polidispersos. Uma das causas da melhor performance da correlação de Day et alii (1990) pode ser o não uso da hipótese, muito freqüentemente assumida (Leung et alii 1971; Yang, 1975, 1983; Briens & Bergougnou, 1986), de que a velocidade de escorregamento no estado de *choking* é igual à velocidade terminal de uma partícula isolada. Apesar desta hipótese ser aceitável para partículas sólidas grosseiras, ela não é realística quando o leito contém partículas finas, visto que, como mostrado por Zens (1949) e Lewis et alii (1949), a velocidade de escorregamento nestes casos pode ser muito superior à velocidade terminal da partícula.

No projeto e dimensionamento de um sistema de transporte pneumático, uma das etapas fundamentais consiste na estimativa da queda de pressão total ocasionada pelo escoamento da mistura sólido-gás. Por este motivo, encontra-se disponível uma extensa gama de publicações sobre o desenvolvimento de correlações para estimar a queda de pressão no leito de transporte. A maioria destas correlações é formulada utilizando-se técnicas de análise dimensional, o que tem resultado em estimativas de baixa precisão quando aplicadas em sistemas diferentes dos usados na sua elaboração. Apesar de todo o esforço de pesquisa, não há uma equação geral que possa ser universalmente aplicada no cálculo da queda de pressão do leito de sólidos submetido a uma corrente gasosa.

Vários autores apresentam métodos empíricos de cálculo da queda de pressão que podem ser destacadamente diferentes, tais como Stepanoff (1965), Perry & Green (1984), Raman (1985), Weber (1981, 1991) e Singh (1990). Contudo, existe uma certa convergência na consideração de que a queda de pressão no leito, operando em regime permanente, é a soma da queda de pressão do fluido com um valor excedente atribuído à presença dos sólidos em movimento. Deste modo, uma das abordagens mais utilizadas e bem sucedidas foi primeiramente elaborada por Cramp & Priestly (1924), consistindo em avaliar a queda de pressão como a soma de contribuições geradas por certos fenômenos presentes no leito de transporte, tais como o atrito de parede, atrito das partículas, aceleração das partículas e o termo de sustentação das partículas. Para estimar o termo de queda de pressão devido aos sólidos, muitos autores definiram um fator de atrito para os sólidos, em analogia ao fator de Fanning ou de Darcy associado ao escoamento de fluidos

puros (Hinkle, 1953; Crane & Carleton, 1957; Mehta et alii, 1957; Zenz & Othmer, 1960; Leung & Wiles, 1976; Weber, 1981; Yang et alii, 1987).

Kmiec & Leschonski (1984) compararam previsões de várias correlações de queda de pressão com seus próprios dados experimentais, juntamente com os dados de Shimizu et alii (1978). Dentre as correlações analisadas, Kmiec & Leschonski (1984) elegeram a equação de Kerker (1977) como sendo a mais adequada na estimativa da queda de pressão no transporte pneumático vertical. Raheman & Jindal (1993) fizeram uma revisão e coletânea das correlações para queda de pressão encontradas na literatura. As equações relacionadas neste trabalho tem aplicação tanto para materiais granulados diversos como, também, para grãos agrícolas, principalmente os cereais. Além disso, os autores realizaram experimentos em transporte pneumático vertical e horizontal e desenvolveram correlações capazes de estimar as várias contribuições para a queda de pressão com erro médio de 5 a 12%.

A literatura sobre as correlações e dados experimentais focalizando o transporte pneumático de sólidos é, de fato, bastante extensa. Revisões abrangentes podem ser encontradas em muitas publicações, como, por exemplo, Knowlton (1979), Leung (1980), Bohnet (1982) e Morikawa (1982), as quais apresentam, principalmente, uma análise das correlações e dos dados experimentais disponíveis.

2.2.2 Abordagem Fluidodinâmica

A elaboração de técnicas mais genéricas para a resolução de problemas relacionados ao transporte pneumático requer a realização de estudos mais fundamentais, que contemplem e questionem as causas e os efeitos dos fenômenos físicos existentes no sistema. Desta maneira, uma descrição mais pormenorizada do transporte pneumático deve se firmar sobre os argumentos da mecânica dos fluidos associados aos princípios consolidados pela termodinâmica, tendo-se como resultado final a elaboração de equações matemáticas que relacionem as propriedades relevantes do sistema considerado. Posteriormente, para que seja verdadeiramente útil, o modelo deve ter a sua resolução garantida através de técnicas da matemática analítica – se possível – ou da análise numérica.

2.2.2.1 Modelos do Continuum

A modelagem fluidodinâmica fundamental do transporte pneumático tem sido objeto de investigação de muitos pesquisadores. Esforços pioneiros no desenvolvimento e análise de equações descritivas dos sistemas sólido-fluido foram realizados por Jackson (1963, 1971), Anderson & Jackson (1967), Soo (1967, 1977, 1979), Drew (1971) e Ishii (1975). Em paralelo ao desenvolvimento das equações, outros trabalhos foram realizados com o objetivo de aplicar as equações de sistemas multifásicos e verificar a validade dos resultados por comparação com dados experimentais. Shook & Masliyah (1974) e Arastoopour & Gidaspow (1978) utilizaram as equações multifásicas para modelar o escoamento bifásico num tubo de venturi. Arastoopour & Gidaspow (1979a, 1979b, 1979c)

usaram as equações disponíveis até então e conseguiram, com êxito, descrever os dados experimentais de baixa queda de pressão obtidos por Zenz (1949), assim como os dados de alta queda de pressão coletados por Knowlton & Bachovchin (1976), porém o modelo usado por eles não contemplava os efeitos de distribuição de diâmetros das partículas, sendo prioritariamente adequado para sistemas monodispersos. Para descrever com maior precisão o comportamento dos sólidos e obter informações sobre segregação, cada tamanho de partícula presente na mistura deve ser considerado como uma fase distinta. Assim sendo, um pouco mais tarde, Arastoopour et alii (1980a) realizaram simulações e compararam os resultados conseguidos com os experimentos de segregação e queda de pressão no transporte pneumático de uma mistura binária de sólidos, realizados por Nakamura & Capes (1976). Os cálculos de queda de pressão foram razoavelmente concordantes com os experimentos, enquanto que, em contrapartida, as estimativas da segregação se desviaram significativamente dos valores experimentais. Os erros na simulação da segregação foram atribuídos ao fato do modelo não considerar a força de atrito gerada pelas colisões entre as partículas.

Em 1982, Arastoopour et alii (1982a) aperfeiçoaram o modelo de escoamento multifásico tornando-o capaz de simular misturas com distribuição de diâmetros e levando em conta as interações entre as partículas. Por se tratar de um modelo contínuo, as misturas polidispersas precisam ser divididas em várias faixas de diâmetros para então calcular um valor médio atribuído a cada faixa. Em seguida, as faixas de diâmetros estabelecidas são modeladas como fases distintas, escrevendo-se equações fluidodinâmicas para cada uma delas. As colisões entre as partículas foram calculadas pela avaliação da transferência de *momentum* entre fases através de termos de interação binária baseados no princípio da conservação do *momentum* linear associado à hipótese da velocidade relativa antes e depois das colisões ser relacionada pelo coeficiente de restituição. O atrito das partículas com a parede foi desprezado – em virtude da hipótese de sistema diluído – ao passo que a fricção do gás com as paredes do equipamento foi obtida da forma usual, valendo-se de equação fenomenológica do fator de atrito de Fanning. Apesar do modelo proposto conter a física necessária ao cálculo da interação partícula-partícula, outras limitações o acometiam: (1) o modelo era unidimensional, de maneira que as variações radiais das propriedades não podiam ser capturadas, (2) os efeitos de difusão provocados pela turbulência, muito comuns em escoamentos sólido-fluido velozes, não eram incorporados, (3) vários parâmetros do modelo careciam de ajuste por dados experimentais, (4) as interações partícula-partícula dependiam de parâmetros experimentais para cada material e distribuição de diâmetros, implicando em perda de generalidade. Entretanto, a validade do modelo foi garantida por comparações favoráveis com os dados experimentais de Zenz (1949) e Knowlton & Bachovchin (1976) para baixa e alta queda de pressão, respectivamente. A segregação de partículas prevista pelo modelo apresentou razoável concordância com os dados de Nakamura & Capes (1976).

A maioria dos modelos apresentados nesta seção é unidimensional em regime permanente; exceção feita aos trabalhos de Shih et alii (1982) e Adewumi & Arastoopour (1986), que são bidimensionais em regime permanente. Embora os modelos unidimensionais tenham sido bem sucedidos na estimativa da queda de pressão do leito,

evidências experimentais indicam que a hipótese de não variação radial das propriedades não é verdadeira. Soo (1962), em 1962 já havia apontado para a existência das variações radiais. Posteriormente, medidas de velocidade do gás e das partículas realizadas por Doig (1965) e Reddy (1967) exibiram uma não uniformidade radial relevante. Além disso, vários outros autores (Bartholomeu & Casagrande, 1957; Saxton & Worley, 1970; Yerushalmi et alii, 1978; Youchou & Kwauk, 1980; Weinstein et alii, 1984; Bader et alii, 1988) têm reportado a existência de segregação lateral na distribuição dos sólidos num leito de transporte pneumático. Portanto, fica delineada a tendência de que os modelos multifásicos, para serem mais representativos, devem ser ao menos pseudo-bidimensionais, como realizado por Adewumi & Arastoopour (1985), os quais elaboraram um modelo de tal forma que a componente radial dos vetores velocidade fosse desprezada, considerando-se, porém, a componente axial e a sua a variação radial. O modelo destes autores apresentou concordância bastante razoável com os dados experimentais de Reddy (1967).

Rocha (1988) realizou a modelagem e simulação do seu equipamento de secagem pneumática vertical, constituído por um tubo de ferro galvanizado com 4m de altura e 5,25cm de diâmetro, aplicando os modelos desenvolvidos por Arastoopour & Gidaspow (1979c) e Telles (1974). Tendo executado medidas experimentais do transporte e secagem de partículas de alumina, areia e resina acrílica nos diâmetros de 0,188mm a 0,400mm, comparações com ambos os modelos implementados mostraram resultados semelhantes para os perfis axiais de velocidade do gás e dos sólidos. Entretanto, a autora constatou diferenças sensíveis nos perfis axiais de pressão, as quais são justificadas pelo fato de apenas um dos modelos testados conter um termo correspondente ao atrito gás-parede. Tal verificação reforça a necessidade de incluir, no modelo dinâmico, a contribuição do atrito do fluido com as paredes do tubo para a queda de pressão total do leito.

Nesta parte, será realizada uma revisão mais detalhada do trabalho de Adewumi & Arastoopour (1986), devido a sua importância na modelagem do transporte pneumático. O modelo proposto é bidimensional em regime permanente, composto por equações diferenciais do *continuum* e baseado nas seguintes hipóteses fundamentais: (1) sistema isotérmico sem transferência de massa entre as fases, (2) partículas de tamanho uniforme com mesma massa específica, (3) as partículas de mesmo diâmetro e densidades são consideradas como uma fase contínua, (4) a fase particulada é considerada incompressível enquanto a fase gasosa segue a lei dos gases ideais, (5) o gradiente de pressão existe apenas na fase gasosa, (6) regime permanente. As equações diferenciais componentes do modelo, para cada fase são:

- **Equações da Continuidade**

- **Fase Gasosa**

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho \epsilon u_z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho \epsilon u_r) = 0,$$

(1)

- **Fase Particulada**

$$\frac{\partial}{\partial z} [\rho_s (1-\varepsilon) v_z] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r \rho_s (1-\varepsilon) v_r] = 0. \quad (2)$$

• **Equação do Movimento na Direção Axial**

- **Fase Gasosa**

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho \varepsilon u_z^2) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho \varepsilon u_z u_r) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\mu_g}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) - F_{Dz} - F_{Gg}, \quad (3)$$

- **Fase Particulada**

$$\frac{\partial}{\partial z} [\rho_s (1-\varepsilon) v_z^2] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r \rho_s (1-\varepsilon) v_z v_r] = \frac{\mu_s}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r (1-\varepsilon) \frac{\partial v_z}{\partial r} \right] + F_{Dz} - F_{Gs}. \quad (4)$$

• **Equação do Movimento na Direção Radial**

- **Fase Gasosa**

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho \varepsilon u_z u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho \varepsilon u_r^2) = -\frac{\partial P}{\partial r} - F_{Dr}, \quad (5)$$

- **Fase Particulada**

$$\frac{\partial}{\partial z} [\rho_s (1-\varepsilon) v_z v_r] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r \rho_s (1-\varepsilon) v_r^2] = F_{Dr}, \quad (6)$$

onde u_z e v_z são as componentes axiais dos vetores velocidade das fases gasosa e particulada, nesta ordem; u_r e v_r são as componentes radiais das fases gasosa e particulada; ρ e ρ_s são as massas específicas do gás e partículas; μ_g e μ_s são as viscosidades; F_{Dz} e F_{Dr} são as componentes axial e radial da força de arraste do fluido sobre as partículas; F_{Gg} e F_{Gs} representam a força gravitacional sobre o gás e as partículas.

Para o fechamento do sistema, foram utilizadas as equações constitutivas mostradas a seguir:

- **Equações de Estado**

- **Fase Gasosa**

$$\rho = \frac{M_g}{RT} P,$$

- **Fase Particulada**

$$\rho_s = \rho_{so} = \text{const},$$

sendo M_g a massa molecular do gás; R é a constante universal dos gases perfeitos; T é a temperatura absoluta; P é a pressão do gás e ρ_{so} é a massa específica do sólido.

A ação gravitacional é contabilizada na forma seguinte:

- **Força Gravitacional**

- **Fase Gasosa**

$$F_{Gg} = \rho \varepsilon g, \tag{7}$$

- **Fase Particulada**

$$F_{Gs} = \rho_{so} (1 - \varepsilon) g. \tag{8}$$

Referindo-se à força de arraste, os autores assumiram a hipótese de isotropia, de maneira a usar a mesma correlação de força de arraste nas direções radial e axial.

- **Força de Arraste**

- **Direção Axial**

$$F_{Dz} = \frac{3 C_{Dz} (1 - \varepsilon) \varepsilon^{-2,67} (u_z - v_z) |u_z - v_z| \rho}{4 d_p}, \tag{9}$$

- **Direção Radial**

$$F_{Dr} = \frac{3 C_{Dr} (1 - \varepsilon) \varepsilon^{-2,67} (u_r - v_r) |u_r - v_r| \rho}{4 d_p} \quad (10)$$

Nestas equações, os coeficientes de arraste para cada direção são calculados como:

$$C_{Dz} = \begin{cases} \frac{24}{Re_z} (1,0 + 0,15 Re_z^{0,687}) & ; Re_z < 1000 \\ 0,44 & ; Re_z \geq 1000 \end{cases}, \quad (11)$$

$$C_{Dr} = \begin{cases} \frac{24}{Re_r} (1,0 + 0,15 Re_r^{0,687}) & ; Re_r < 1000 \\ 0,44 & ; Re_r \geq 1000 \end{cases}, \quad (12)$$

sendo o número de Reynolds dado por:

$$Re_z = \frac{\rho |u_z - v_z|}{\mu} \text{ e } Re_r = \frac{\rho |u_r - v_r|}{\mu} \quad (13)$$

Antes de estabelecer as condições de contorno, os autores executaram uma análise e constataram que o sistema de equações obtido compunha um problema de condições iniciais, de maneira que poderia ser usado um método de marcha na direção z do escoamento. Deste modo, as condições de contorno para a coordenada axial são, de fato, condições iniciais, definidas pela especificação de u_z , v_z , ε e P na entrada do tubo. Para a coordenada radial, as condições de contorno foram:

- Em $r=0$ (centro do tubo): A condição de simetria radial permite anular as derivadas radiais, ou seja,

$$\frac{\partial u_z}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial v_z}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = 0$$

- Em $r=R$ (parede do tubo): Neste caso, as condições de contorno são definidas como

$$u_r = 0, \quad v_r = 0$$

$$u_z = 0 \text{ ou um número muito pequeno.}$$

Para resolver o sistema de equações do modelo, Adewumi e Arastoopour (1986) utilizaram o método das linhas, consistindo basicamente em converter o conjunto de equações diferenciais parciais – juntamente com as condições iniciais e de contorno – em um sistema de equações diferenciais ordinárias acopladas. Posteriormente, os autores executaram um estudo paramétrico num sistema de transporte semelhante ao usado por Reddy (1967) em seus experimentos. As simulações foram executadas usando-se partículas de $2,70E-4\text{m}$ de diâmetro e densidade de 2590kg/m^3 . O valor da “viscosidade dos sólidos” utilizado na resolução baseou-se nos dados experimentais de Arastoopour & Cutchin III (1985) e Arastoopour et alii (1982b) para um escoamento relativo de partículas grosseiras numa mistura de gás e partículas finas. Os resultados das simulações executadas para várias condições de operação concordaram com o comportamento dinâmico publicado na literatura. Do mesmo modo, os perfis de velocidade dos sólidos e gás obtidos apresentaram razoável concordância com os dados experimentais.

Seguindo a metodologia do *continuum*, Paixão (1995) realizou a modelagem pseudo-bidimensional do transporte pneumático vertical em fase diluída. Em diversas simulações, obtiveram-se resultados que foram posteriormente comparados com simulações unidimensionais e bidimensionais disponíveis na literatura. O modelo multifásico foi estendido por equações de balanço de massa e energia de modo a possibilitar a simulação de um secador de transporte pneumático vertical. Em seguida, efetuou-se um estudo paramétrico planejado por análise fatorial, visando tanto o estudo dos efeitos das variáveis de processo como das características geométricas do secador na secagem pneumática.

2.2.2.2 Modelos de Trajetória

As equações multifásicas do *continuum* são, indubitavelmente, o método mais popular para a modelagem e simulação dos escoamentos multifásicos sólido-fluido na áreas de engenharia. Todavia esta não é a única alternativa disponível. Uma técnica baseada na trajetória das partículas foi pioneiramente proposta por Crowe & Pratt (1972) em 1972. Posteriormente, Crowe et alii (1977) denominaram a técnica de *PSI-Cell (Particle-Source-in-Cell)*, na qual as partículas de um escoamento multifásico são tratadas como fontes de massa, *momentum* e energia para a fase gasosa. Fundamentalmente, o algoritmo incorporado no método consiste em se calcular sucessivamente o campo de escoamento do fluido, atualizando, a cada iteração, os termos de geração presentes nas equações diferenciais da fase fluida.

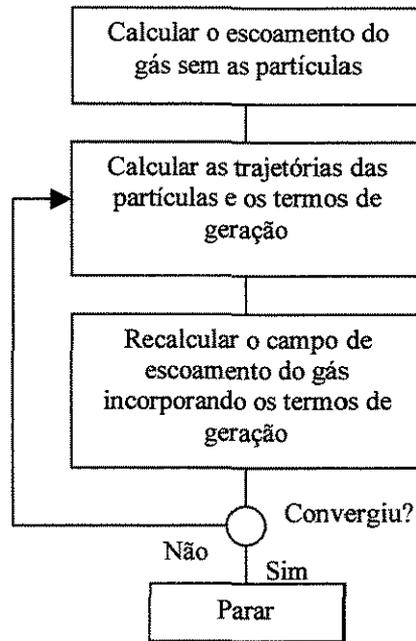


Figura 1: Diagrama de fluxo simplificado do algoritmo do método PSI-Cell.

Devido ao pioneirismo do método *PSI-Cell*, uma revisão mais detalhada do trabalho de Crowe et alii (1977) sobre o escoamento de gotas de líquido em meio a um gás será apresentada na seqüência. A aplicação do método *PSI-Cell* requer a divisão do campo de escoamento em células que são tratadas, no modelo, como volumes de controle. As equações diferenciais do *continuum*, incorporando termos de geração, são discretizadas em cada célula, de acordo com a abordagem euleriana, fornecendo um sistema de equações algébricas em diferenças finitas, cuja função é descrever o comportamento da fase fluida. Para a fase dispersa, usou-se a abordagem lagrangiana, de modo que a trajetória, o tamanho e a temperatura das gotas são obtidos através da integração da equação do movimento juntamente com expressões de taxa para a transferência de massa e calor de cada gota. Deste modo, os termos de geração que representam a influência das partículas sobre o fluido podem ser avaliados calculando-se a variação do momento, massa e temperatura das gotas quando atravessam a fronteira dos volumes de controle. A Figura 1 mostra um diagrama de fluxo bastante simplificado do método *PSI-Cell*, através do qual pode ser verificado que a inicialização do processo de resolução é feita pelo cálculo do campo de escoamento do gás puro, sem a presença das partículas. Com o campo de escoamento obtido, faz-se a injeção de algumas partículas e acompanha-se o caminho percorrido por elas até a saída do equipamento. Durante o percurso, são calculados termos de geração que refletem a interação das partículas com o fluido, os quais, por sua vez, são incorporados no cálculo do campo de escoamento do fluido na iteração seguinte. O processo é executado até que as equações diferenciais do modelo sejam satisfeitas a menos de um desvio previamente definido, quando, então, consegue-se o campo de escoamento do gás e das partículas. O método *PSI-Cell* não é uma técnica transiente que fornece a história dinâmica do sistema simulado. De fato, as iterações sucessivas não são passos de avanço no tempo,

ao invés disso, são tentativas de calcular campos de escoamento do fluido e das partículas que satisfaçam as equações diferenciais de conservação em regime permanente.

• **Fase Fluida**

- **Equação de Conservação da Massa**

A equação de conservação bidimensional da massa na forma discretizada foi escrita para cada célula como:

$$G_N + G_S + G_E + G_W + \Delta\dot{m}_d = 0, \quad (14)$$

onde G é o fluxo de massa que atravessa a face identificada pelos subscritos N, S, E e W, em referência aos pontos cardeais (norte, sul, leste e oeste, escritos no inglês³). Em uma célula arbitrária de índices (I,J), o fluxo mássico pela face oeste (W) é avaliado da seguinte maneira:

$$G_W = u_W A_W \frac{\rho_{I,J} + \rho_{I-1,J}}{2}, \quad (15)$$

sendo u_W a componente x do vetor velocidade e A_W a área de seção reta da célula. Assumiu-se uma variação linear para a densidade entre as células adjacentes. O fluxo mássico pelas outras faces é obtido de modo perfeitamente análogo ao descrito na equação anterior. O termo $\Delta\dot{m}_d$ representa a geração de massa que as gotas provocam na fase gasosa, sendo, portanto um termo de interação entre as duas fases do sistema.

- **Equação de Conservação de *Momentum***

Os volumes de controle utilizados na discretização da equação do *momentum* são deslocados de meia aresta em relação àqueles usados na discretização da equação da continuidade. Este tipo de disposição é denominada de arranjo desencontrado e tornou-se comum por várias décadas nos esquemas numéricos da fluidodinâmica computacional⁴. Uma discussão mais detalhada das vantagens e desvantagens do arranjo desencontrado pode ser vista em Patankar (1980). Prosseguindo, a equação de *momentum* para a fase fluida pode ser escrita, de acordo com os autores, na forma a seguir:

$$-M_W^x + M_E^x - M_S^x + M_N^x + \Delta M_d^x = (P_{I-1,J} - P_{I,J}) A_W, \quad (16)$$

³ Esta é uma notação considerada padrão na metodologia da análise numérica por volumes finitos, conforme descrita em Patankar (1980).

⁴ Embora seja de implementação computacional mais complexa e demande de maior capacidade de armazenamento, o arranjo desencontrado tem a grande vantagem de evitar problemas de instabilidade numérica no cálculo do campo de pressões, a qual geralmente causa a falha de todo o processo iterativo de resolução. Para maiores detalhes, vide Hirsch, (1990, p. 667-669).

onde M_i^x é o fluxo de *momentum* do gás através da face “i” ($i = W, E, S, N$); ΔM_d^x é o termo de geração de *momentum* devido ao movimento das partículas da fase dispersa e P é a pressão. A força gravitacional sobre o gás foi negligenciada no modelo.

O fluxo de *momentum* na direção x através da face “i” é avaliado por

$$M_i^x = G_i u - \mu A_i \left(\frac{\partial u}{\partial x_j} \right), \quad (17)$$

sendo que A_i é a área da face “i” e x_j é a coordenada espacial na direção j , normal à área A_i . Assumindo a constância de G_i e μ no interior de um volume de controle, Crowe et alii (1977) integraram (17) ao longo da direção x para obter

$$M_i^x = G_i [f_i u_i + (1 - f_i) u], \quad (18)$$

onde u é a componente da velocidade dentro da célula e u_i é a componente x da velocidade externamente à face “i”. A função f_i é apresentada como

$$f_i = \frac{\exp(\text{Re}_i)}{[\exp(\text{Re}_i) - 1]}, \quad (19)$$

onde Re_i é o chamado número de Reynolds local calculado na face “i” com base na distância até o centro da célula adjacente.

A solução das equações do modelo para a fase gasosa é realizada assumindo-se um perfil inicial de pressão, velocidade e temperatura e aplicando-se a equação do *momentum* para obter um novo perfil de velocidades. Com este novo campo de velocidades, avaliam-se os fluxos e calcula-se um novo perfil de pressão valendo-se da equação da continuidade. Este ciclo é repetido recalculando-se novo campo de velocidades a cada iteração, sendo que a solução completa é admitida quando as equações discretizadas ficam satisfeitas dentro de um desvio predefinido.

• Fase Dispersa

A equação da fase dispersa fornece o subsídio necessário à avaliação dos termos de geração incorporados nas equações da fase fluida, com o objetivo de representar a interação entre as duas fases. Para calcular os termos de geração, o método *PSI-Cell* faz uso da abordagem lagrangiana na qual as trajetórias da partículas são calculadas, assim como a seqüência de tamanhos e temperaturas ao longo da trajetória.

A equação do movimento para uma gota foi escrita como:

$$m_d \frac{d\bar{v}}{dt} = C_D \rho (\bar{U} - \bar{v}) |\bar{U} - \bar{v}| \frac{A_d}{2} + m_d \bar{g}, \quad (20)$$

sendo que C_D é o coeficiente de arraste, \bar{v} é a velocidade da partícula, \bar{U} é a velocidade do gás, m_d é a massa da gota, A_d é a área da gota e \bar{g} é a aceleração gravitacional. Outros efeitos que contribuem para a força fluidodinâmica sobre as partículas, tais como o gradiente de pressão, a massa virtual e o termo de história de Basset, foram desprezados sob o argumento de serem da mesma ordem de grandeza da razão de densidades gás/partícula. As forças de Saffman e de Magnus também foram desconsideradas, pois assume-se que as gotas não estariam em regiões de grandes tensões tangenciais.

As equações constitutivas utilizadas no cálculo da força de arraste foram:

- $Re = \rho \frac{|\bar{U} - \bar{v}| d}{\mu}$, para o número de Reynolds da partícula;
- $C_{D0} = \left(\frac{24}{Re} \right) (1 + 0,15 Re^{0,687})$, para o coeficiente de arraste sem efeito de evaporação ($Re < 1000$).

Posteriormente, o efeito de redução do arraste causado pela evaporação na superfície da gota era levado em conta através de uma correlação devida a Bailey et alii (1970).

• Avaliação dos Termos de Geração

Como fora mostrado, o preceito básico por trás do método *PSI-Cell* consiste em se considerar a fase dispersa como fonte de massa, *momentum* e energia para a fase contínua. Desse modo, conhecendo as trajetórias das gotas e a sua história de tamanho e temperatura ao longo da trajetória, pode-se calcular os termos de geração previamente inseridos nas equações de conservação escritas para a fase fluida.

Para avaliar os termos de geração, os autores definiram que a entrada das gotas no sistema se daria por meio de um número finito de portas. Então, a massa de gotas com diâmetro d_i que entra pela porta j por unidade de tempo é:

$$\dot{m}_{pj}(d_i) = \dot{m}_p X_j Y_i, \quad (21)$$

onde \dot{m}_p é o fluxo mássico total de gotas, X_j é a fração mássica de gotas que entram pela porta j e Y_i é a fração mássica de gotas que têm diâmetro d_i . Consequentemente, a taxa numérica de gotas, presumidamente esféricas, com diâmetro inicial d_i que percorrem certa trajetória pode ser calculada por:

$$\dot{\eta}_j(d_i) = \frac{6\dot{m}_p X_j Y_i}{\pi \rho_d d_i^3}, \quad (22)$$

onde ρ_d é a massa específica das gotas.

Visto que o termo de geração de massa incluído na equação da continuidade corresponde ao fluxo mássico líquido ocasionado pelas gotas que atravessam cada célula computacional, calcula-se o fluxo líquido gerado pela trajetória “i” como:

$$\Delta\dot{m}_{d,i} = \pi \rho_d \dot{\eta}_i \frac{d_{i,sai}^3 - d_{i,ent}^3}{6}. \quad (23)$$

Portanto, a partir de (23), pode-se calcular o fluxo líquido total devido a todas as trajetórias que passam por uma célula qualquer através do somatório:

$$\Delta\dot{m}_d = \sum_i \Delta\dot{m}_{d,i}. \quad (24)$$

O termo de geração de *momentum* é obtido de modo análogo à geração de massa. Por conseguinte, para cada trajetória, o fluxo líquido de *momentum* é

$$\Delta M_{d,i} = \pi \rho_d \dot{\eta}_i \frac{v_{i,sai} d_{i,sai}^3 - v_{i,ent} d_{i,ent}^3}{6}, \quad (25)$$

e o fluxo total causado por todas as trajetórias interceptoras de dada célula é

$$\Delta M_d = \sum_i \Delta M_{d,i}.$$

Segundo Crowe (1982), a técnica embutida no método *PSI-Cell* incorpora o esquema computacional mais natural para cada fase presente no sistema, ou seja, um método de relaxação para a fase fluida (gás) e um método de marcha para a fase dispersa (partículas).

Tendo obtido sucesso apreciável na modelagem de diversos sistemas sólido-fluido, devido à sua robustez e sentido físico, o *PSI-Cell* adquiriu lugar de destaque na simulação dos sistemas multifásicos. Contudo, na forma em que foi proposto, está sujeito às mesmas limitações dos modelos do *continuum* no que se refere à capacidade de simular apenas os sistemas diluídos e de não contemplar as interações partícula-partícula.

A física estatística é o alicerce no qual se firmam outros métodos de trajetória probabilísticos, comumente denominados de Simulações de Monte Carlo. Uma analogia entre as colisões de partículas em uma suspensão e as colisões moleculares na teoria cinética dos gases permite a aplicação da equação de Boltzmann para partículas sólidas se deslocando em meio a um fluido. De acordo com esta abordagem, Culick (1964) aplicou a

equação de Boltzmann na modelagem do escoamento lento de um fluido viscoso contendo partículas sólidas esféricas de dois tamanhos. Por ter considerado o movimento relativo como causador das colisões entre partículas, o autor modelou apenas as colisões entre partículas de tamanhos distintos. Além disso, foram realizadas outras simplificações, tais como as aproximações que desprezaram as colisões envolvendo partículas pequenas e a transferência de *momentum* entre partículas pequenas e grandes. Terminadas as simplificações e feita a resolução da equação de Boltzmann, obtém-se a solução na forma de uma função de distribuição de probabilidade que intenta descrever o campo de escoamento e as posições das partículas neste campo. Apesar do autor ter obtido resultados ilustrativos, sem aplicação prática direta e sem validação experimental, o trabalho desenvolvido mostrou uma maneira alternativa de modelagem de escoamentos multifásicos, sendo, de fato, uma das publicações pioneiras nesse campo, seguida, anos mais tarde, por Pai (1974).

Ao longo do tempo, o uso do método de Monte Carlo foi se aprimorando e adquirindo maior sofisticação. Vários autores como Husar (1971), Gartrell & Friendlander (1975), Nowakowski & Sitariski (1981) tem se valido do método de Monte Carlo para simular a coagulação de partículas em sistema bifásicos. Em 1984, Pearson et alii (1984) realizaram a simulação do fenômeno de coagulação (ou aglomeração) de partículas suspensas numa corrente de fluido. A água foi o fluido adotado em todo o trabalho e a fase discreta era constituída de partículas sólidas, no entanto, segundo os autores, a técnica aplicada é mais geral, podendo ser estendida para partículas líquidas suspensas numa corrente gasosa. O modelo considerava o movimento browniano das partículas associado ao escoamento do fluido em regime laminar ou com turbulência isotrópica. A aglomeração das partículas é ocasionada pelas colisões, de maneira que foi assumido, no modelo, que duas partículas esféricas em colisão originariam uma única partícula, ainda esférica, e com volume correspondente ao volume total das partículas originais. Foram adotadas condições de contorno periódicas para cada volume de controle resultante da discretização espacial, de modo que as partículas que deixam o volume são substituídas por outras em posições simetricamente opostas⁵. Em outra publicação, Valioulis et alii (1984) aprimoraram o modelo de Pearson et alii (1984), aumentando o seu realismo através da implementação de uma taxa de coagulação que pode variar de acordo com as forças de van der Waals, eletrostáticas e fluidodinâmicas atuantes entre pares de partículas.

Kitron et alii (1990) fizeram a simulação de Monte Carlo do escoamento de uma suspensão gás-sólido em um reator de contra-fluxo⁶. Eles apresentaram um modelo estocástico baseado na equação de transporte de Boltzmann derivada segundo um procedimento padrão que pode ser encontrado, por exemplo, em Lifshitz & Pitaevsky (1981). No modelo, a mistura de sólidos é dividida em classes de partículas. Em seguida, aplica-se a equação de Boltzmann para cada categoria de partículas, obtendo-se um sistema

⁵ Este tipo de condição de contorno é comum em simulações com o método de Monte Carlo. Para maiores detalhes, pode-se consultar Alder & Wainwright (1969).

⁶ A denominação original do inglês é "*Impinging Streams Reactor*".

de equações integro-diferenciais, cuja resolução é efetuada pelo método de Monte Carlo. Dentre as hipóteses simplificadoras presentes no desenvolvimento estão:

1. A fase sólida é constituída de partículas sólidas esféricas, irrotacionais de diferentes tamanhos;
2. A mistura é suficientemente diluída de modo que a trajetória das partículas possa ser descrita por trechos guiados por forças da fase gasosa e interrompidos pelas colisões entre partículas;
3. Apenas colisões binárias são consideradas;
4. O tempo de duração de uma colisão é desprezível em comparação com o tempo entre colisões.

Atenção especial deve ser dada à hipótese (4), pois o seu uso permite desprezar os efeitos fluidodinâmicos existentes durante uma colisão, sendo que a sua validade é assegurada quando a razão de densidades partícula/fluido é muito maior do que a unidade (Marble, 1964). Sem esta hipótese, a aplicação do modelo ficaria inviável em virtude da grande dificuldade encontrada ao se tentar descrever as forças originadas da interação entre as camadas limite de duas partículas em aproximação. Estas forças são de curto alcance mas, em certa medida, causam desvio de trajetória nas partículas, reduzindo a taxa de colisões.

No mesmo trabalho, Kitron et alii (1990) fazem uma discussão minuciosa dos movimentos de migração das partículas em um escoamento bifásico, levantando questões e argumentos sobre fenômenos como a maior concentração de partículas no centro e na parede do tubo. Nesse sentido, eles mostraram que, partindo de uma distribuição de probabilidade radial uniforme como condição inicial da simulação – desprezando as forças de gravidade e de Saffman (1965) – foi observada uma elevação da concentração de partículas junto à parede e, também, em menor escala, no centro do tubo.

Enquanto que forças de carregamento como as de Magnus e Saffman responderiam pela migração de partículas para o centro do tubo, não há muitas propostas de explicação para a migração de partículas para a parede. Notando isto, os autores propuseram um mecanismo alternativo, segundo o qual as partículas que colidem na região central do tubo podem ser defletidas para próximo da parede, onde elas são freadas pelo gás que está em menor velocidade nesta região. Deste modo, com menor velocidade, as partículas colidiriam menos, tendo menor chance de serem defletidas de volta para o centro do tubo. Além disso, as partículas periféricas podem, também, perder velocidade em colisões com a parede, num fenômeno semelhante à deposição de “calor granular”, conforme descrito por Haff (1983). Somando-se aos efeitos mencionados, há outro coadjuvante na migração de sólidos para a parede. Nas condições normais de transporte, a velocidade do gás supera a velocidade das partículas, de maneira que a força de Saffman tende a empurrar as partículas para o centro do tubo, entretanto, quando uma partícula veloz é arremessada para a região próxima à parede, a velocidade axial desta partícula pode, ocasionalmente, ser superior à velocidade do fluido. Nestas condições a força de Saffman se inverte e empurra a partícula na direção da parede.

Para justificar o efeito de segregação de partículas na região central do tubo, sem a ação das forças de Magnus e Saffman, Kitron et alii (1990) argumentaram que o menor gradiente da velocidade do gás no centro do tubo induziria uma menor velocidade relativa entre as partículas, ocasionando uma menor taxa de colisões.

Os resultados obtidos por Kitron et alii (1990) conseguiram concordância apenas qualitativa com dados experimentais reportados por Elperin (1972). A justificativa para isso, de acordo com os autores, seria o fato do modelo não considerar a força da gravidade nem as forças de carregamento. Entretanto, os resultados das simulações permitem a formulação de questões muito importantes sobre quais fenômenos dinâmicos precisam, de fato, ser incluídos num modelo para que seja satisfatoriamente realístico. Por exemplo, pesquisadores como Berker & Tulig (1986) consideraram que a não uniformidade radial das partículas no escoamento gás-sólido poderia ser causada pela interação entre as partículas e os turbilhões encontrados no escoamento turbulento. Todavia, à luz dos resultados de Kitron et alii (1990), fica aberta a possibilidade de que apenas a modelagem das interações partícula-partícula seja suficiente para a incorporação dos efeitos de segregação lateral num modelo multifásico. De maneira diferente, porém análoga, Sinclair & Jackson (1989) se defrontaram com esta mesma questão, quando elaboraram um modelo laminar do *continuum* contendo termos de interação da fase sólida e verificaram que este seria capaz de prever a segregação radial das partículas.

2.3 Acoplamento Sólido-Fluido

O escoamento gás-sólido pode, sob certo ponto de vista, ser considerado como uma classe especial de escoamento bifásico no qual partículas sólidas são carregadas por um gás. No caso da quantidade de partículas ser bastante pequena, ocorre do campo de escoamento do gás não ser significativamente perturbado pela sua presença, enquanto que as trajetórias das partículas são guiadas exclusivamente pelo movimento do gás de arraste. Este tipo de interação entre as duas fases no qual as partículas percebem a presença do fluido, sem, no entanto, causar-lhe qualquer efeito dinâmico, é comumente referido com acoplamento unidirecional fluido→sólido. Antagonicamente, quando o número de partículas é suficientemente grande, a fase dispersa pode alterar sensivelmente o campo de escoamento do fluido, sendo, por vezes, necessário considerar a fração volumétrica das partículas no modelo dinâmico do sistema. Nesta situação, tem-se o acoplamento bidirecional sólido↔fluido, significando que as duas fases componentes do sistema são mutuamente influenciáveis quanto às interações dinâmicas. Tal interdependência entre as duas fases tem implicações claras na modelagem matemática do sistema, sendo que a mais evidente delas é o acoplamento inevitável entre as equações diferenciais do modelo, seja este baseado na abordagem do *continuum* ou nos métodos de trajetória.

A técnica mais comum de implementação do acoplamento bidirecional consiste na inclusão de termos adicionais de geração nas equações de conservação de massa, *momentum* e energia de cada fase. Migdal & Agosta (1967) foram os primeiros a sugerir esta idéia quando elaboraram um modelo do *continuum* para um sistema reacional heterogêneo gás-partícula. Neste trabalho, os autores desenvolveram as equações fazendo

balanços integrais em volumes de controle resultantes da discretização espacial do sistema. Os termos de geração apareceram naturalmente ao longo do processo dedutivo, no entanto, para obter a solução das equações, seria necessário representar estes termos por expressões fenomenológicas baseadas em dados experimentais. Para tanto, Migdal & Agosta (1967) propuseram modificar a lei de força de arraste de Stokes para uma esfera em escoamento lento, a fim de adaptá-la para uso num modelo do *continuum*.

Na dedução das suas equações multifásicas, Drew (1971) também obteve naturalmente termos de interação entre as duas fases, os quais aparecem como forças de campo nas equações de *momentum*, e como termos de geração volumétrica nas equações de conservação da massa e energia. Contudo, Drew (1971) se limitou a propor uma forma funcional genérica para os termos de interação.

Seguindo Migdal & Agosta (1967), Di Giacinto et alii (1982), no seu modelo contínuo para sistema gás-sólido diluído, adotaram o termo de intercâmbio de momento entre as fases como sendo o somatório das forças de arraste sobre cada partícula de acordo com a lei de Stokes modificada, tal qual proposto em Piva et alii (1978). Diferentemente, Arastoopour et alii (1982a) e Adewumi & Arastoopour (1986) modelaram o termo de geração na equação do *momentum* valendo-se da correlação de Richardson & Zaki (1954) associada à correlação de coeficiente de arraste devida a Rowe (1961). Esta última abordagem tem se mostrado a mais difundida, sendo posteriormente adotada por diversos elaboradores e usuários de modelos do *continuum*, a exemplo de Sinclair & Jackson (1989), Pita & Sundaresan (1991) e Dasgupta et alii (1994).

O modelo de trajetória *PSI-Cell* permite o acoplamento sólido-fluido desde a sua proposta original (Crowe & Pratt, 1972; Crowe et alii, 1977). Neste caso, o acoplamento entre as fases sólida e fluída é feito um tanto distintamente dos modelos do *continuum*. A semelhança está na inserção do termo de acoplamento nas equações da fase fluída, a qual é feita da mesma maneira que nos modelos do *continuum*. Entretanto, como nos modelos de trajetória são escritas equações de movimento para cada partícula, ocorre que o termo de interação nestas equações é representado através da força de arraste exercida pelo fluido sobre cada partícula individualmente. O mesmo não é verificado com os métodos estatísticos, baseados na equação de Boltzmann. De fato, o modelo proposto por Culick (1964) contemplava os efeitos do movimento do fluido sobre as partículas, mas a recíproca não era verdadeira. Em 1983, Jenkins & Savage (1983) desenvolveram uma teoria cinética simplificada, baseada na equação de Boltzmann, para descrever o escoamento de partículas idênticas e parcialmente elásticas, tendo obtido concordância quantitativa com dados experimentais disponíveis. Todavia, o modelo proposto não resolvia as dificuldades de incorporação dos efeitos dinâmicos decorrentes das interações das partículas com a fase gasosa. Outras publicações como Pearson et alii (1984) e Valioulis et alii (1984) também não endereçaram o problema do acoplamento bidirecional. Num trabalho mais recente, Kriton et alii (1990) apresentaram um modelo estocástico capaz de considerar os efeitos de interação do fluido sobre as partículas assim como efeitos decorrentes de colisões partícula-partícula, o que representou sensível avanço para os modelos probabilísticos, entretanto a

consideração da influência das partículas no campo de escoamento ficou novamente excluída.

2.4 Interação Partícula-Partícula

As interações partícula-partícula têm sido a maior lacuna nos modelos de escoamento sólido-fluido. Estas interações podem se apresentar em diversas formas, seja como forças de longo alcance ou como forças de contato de curta ou longa duração, no entanto estas últimas são as mais comuns.

Para exemplificar as interações de longo alcance, considere um leito de partículas carregadas eletrostaticamente. Neste caso, todas as partículas presentes no sistema contribuem, em alguma parcela, para a composição de um campo eletrostático, o qual, por sua vez, determina o módulo e direção da força eletrostática exercida sobre cada uma destas partículas. Os efeitos eletrostáticos podem ser de grande relevância em alguns equipamentos de transporte⁷ em fase diluída operados continuamente. Isto foi evidenciado por Clark et alii (1952) ao transportar partículas de areia e granito, com diâmetros da ordem de 1mm. Eles constataram que, se o transporte de um dado material é realizado por longo período, a queda de pressão no leito sofre um aumento progressivo, podendo chegar a ser dez vezes maior do que o valor inicial. Em alguns casos, quando as partículas têm diâmetro entre 10-100 μ m, o efeito eletrostático pode proporcionar uma diminuição da queda de pressão no leito de transporte pneumático (Owen, 1969).

Embora as forças de natureza elétrica possam ser relevantes em alguns sistemas sólido-fluido, o maior mecanismo de interação entre as partículas dá fase dispersa é a colisão, durante a qual atuam as forças de contato geradas por fenômenos complexos como o atrito, a deformação elástica ou parcialmente elástica e a fragmentação das partículas. Além dessas forças de contato, existem outras de origem fluidodinâmica ocasionadas pela interferência entre as camadas limite que envolvem partículas em aproximação. Nesse caso, mesmo sem haver o contato efetivo entre as partículas, a força fluidodinâmica atua gerando uma tendência de afastamento, a qual é traduzida numa redução da taxa de colisões entre as partículas (Langmuir & Blodget, 1948; Michael & Norey, 1969).

2.4.1 Nos Modelos do Continuum

A importância das colisões entre partículas tem sido reconhecida em vários trabalhos relativos ao escoamento sólido-fluido. Nakamura & Capes (1973) e, posteriormente, Lin (1980) estão entre os primeiros a desenvolver expressões teóricas para representar as interações partícula-partícula. Arastoopour et alii (1980a) realizaram simulações do transporte de sólidos e compararam os resultados com dados de Nakamura & Capes (1976). As predições de segregação foram discordantes dos valores experimentais, sendo este desacordo atribuído ao fato do modelo não ter contemplado as forças de atrito devido às colisões entre partículas. Num outro trabalho, Arastoopour et alii (1980b) usaram

⁷ Os efeitos eletrostáticos no transporte de suspensões estão extensivamente discutidos e revisados em Boothroyd (1971) e Soo (1971).

expressões teóricas para mostrar a importância das interações partícula-partícula no cálculo de parâmetros de projeto de linhas de transporte pneumático. Assumida a relevância das colisões, diversos trabalhos experimentais foram realizados na tentativa de estabelecer expressões mais precisas para representar o termo das interações entre partículas nas equações do *continuum*. Arastoopour et alii (1982b) desenvolveram um aparato experimental e obtiveram uma correlação empírica para estimar a interação entre partículas em escoamento contracorrente em um sistema de transporte pneumático. Tal correlação se baseou em dados com a velocidade relativa entre partículas variando de 7 a 16 m/s. Esta faixa de velocidade relativa para as partículas é demasiadamente alta, não sendo verificada com frequência nos equipamentos de transporte. Observando isto, Arastoopour & Cutchin III (1985) modificaram o trabalho inicial de Arastoopour et alii (1982b) para estudar o escoamento concorrente de partículas, no qual a velocidade relativa entre as partículas seria relativamente menor, variando de 0,3 a 4,6m/s. Neste segundo sistema (baixa velocidade relativa), a força de interação entre partículas é o resultado da combinação das colisões com o arraste dos sólidos, entretanto, no experimento original (alta velocidade relativa), a interação observada foi muito similar à força de arraste simplesmente. No mesmo ano de 1985, Srinivasan & Doss (1985) derivaram uma expressão para a interação partícula-partícula que levava em conta colisões oblíquas, representando uma adição ao trabalho de Arastoopour et alii (1982a), onde também derivou-se uma expressão para a transferência de *momentum* entre partículas, mas esta, por sua vez, respondia apenas pelas colisões frontais.

Pelo lado da abordagem fluidodinâmica mais fundamentalista, dentre os vários modelos de escoamento sólido-fluido do *continuum*, alguns pesquisadores incluíram um termo de interação partícula-partícula na equação do movimento de cada fase dinâmica sólida considerada, podendo-se mencionar Soo (1983b), Arastoopour et alii (1982a) & Doss (1985). Note-se, contudo, que somente a modelagem da interação entre partículas que compõem fases dinâmicas distintas não representa, de fato, a realidade física, uma vez que ficam desprezados os efeitos dinâmicos que envolvem partículas de uma mesma fase⁸. Soo (1983b) investigou a quantidade de *momentum* transferida para uma partícula em colisão com uma nuvem de partículas, assumindo reflexão especular ao modelar a troca de *momentum* durante as colisões. Em sua pesquisa, Doss (1985) modelou as interações partícula-partícula num escoamento gás-sólido através de um duto de seção reta variável. Foram feitas comparações entre medidas experimentais e as previsões do modelo com e sem o termo de interação entre partículas, ficando patente que era realmente necessário incluir estes termos de colisão para melhorar a qualidade das previsões do modelo. Mais recentemente, outros autores focalizaram as interações partícula-partícula em seus modelos dinâmicos, tais como Sinclair & Jackson (1989), Pita & Sundaresan (1991) e Dasgupta et alii (1994).

⁸ Para desprezar completamente as interações entre partículas de uma mesma fase dinâmica, é requerido que a probabilidade de colisão entre partículas semelhantes seja nula, ou muito pequena quando comparada à chance de colisão entre partículas distintas. Todavia, esta situação é difícil de ser realisticamente alcançada, principalmente nos escoamentos turbulentos onde existem flutuações e a segregação tende a aproximar partículas semelhantes.

Destaque especial deve ser dado ao trabalho de Sinclair & Jackson (1989), o qual mostrou indubitavelmente a relevância das interações entre partículas na dinâmica do escoamento multifásico em um tubo vertical. Em virtude do princípio da aderência, a fase gasosa não escoava livremente junto a parede, de maneira que é formado um perfil de velocidades com valor máximo no centro do tubo. Em consequência, a força de arraste exercida pelo gás sobre as partículas induz, por sua vez, o perfil de velocidade da fase sólida. Como resultado deste cisalhamento, as partículas colidem mutuamente, originando uma componente randômica no seu movimento. Através de uma analogia entre a energia cinética deste movimento aleatório e o movimento térmico das moléculas de um gás, os autores caracterizaram uma espécie de “temperatura da partícula” ou “temperatura granular”, que seria proporcional à média quadrática do componente randômico da velocidade local da fase sólida. A analogia com a teoria cinética também implica no aparecimento de uma pressão efetiva na fase particulada, juntamente com uma viscosidade efetiva que eleva a resistência ao cisalhamento. Os efeitos mecânicos causados pelas flutuações da velocidade da fase gasosa foram completamente desprezados, objetivando-se verificar se os efeitos coletivos das interações entre partículas eram capazes de, sozinhos, representar ao menos qualitativamente o complexo comportamento do sistema sólido-fluido. Como resultado, os pesquisadores constataram que apenas a consideração dos efeitos de interação das partículas permitia a captação dos fenômenos de segregação e múltiplos estados estacionários comumente observados na prática, mas não constatados anteriormente por modelos que assumem distribuição uniforme da concentração de partículas. Devido à inexistência de dados experimentais completos e compreensíveis sobre escoamentos bifásicos contracorrente e concorrente, contendo perfis da concentração de sólidos e de velocidades das duas fases, não foi possível efetuar uma comparação quantitativa para validar com segurança os resultados do modelo. Sinclair & Jackson (1989) admitiram ser prematura uma exigência quantitativa do modelo, visto que este ignorava completamente os efeitos da turbulência – suposto ser de grande importância no perfil de concentração das partículas.

Contrariando as expectativas, em publicação ulterior, Louge et alii (1990) expandiram o modelo de Sinclair & Jackson (1989) para contemplar os efeitos da turbulência, todavia, ficou aparente que as interações da fase particulada são, de fato, o elemento fundamental requerido para produzir a segregação lateral de sólidos.

Em virtude de Sinclair & Jackson (1989) terem realizado simulações com um único diâmetro de tubo (3cm) e apenas um diâmetro de partículas (150 μm), Pita & Sundaresan (1991) estenderam os seus cálculos para tubos de maior diâmetro e para outros tamanhos de partículas, reforçando as constatações levantadas anteriormente por Sinclair & Jackson (1989). Adicionalmente, Pita & Sundaresan (1991) fizeram alguma validação do modelo, comparando com dados experimentais disponíveis. O uso de um coeficiente de restituição unitário para as partículas, caracterizando colisões perfeitamente elásticas, proporcionou concordância bastante favorável com os dados experimentais, contudo uma pequena redução do coeficiente de restituição causou desvio considerável, denotando a grande sensibilidade do modelo a esta propriedade das partículas. A insatisfatória e excessiva

influência da inelasticidade das partículas foi considerada pelos autores como um dos problemas do modelo.

2.4.2 Nos Modelos de Trajetória

Os modelos de trajetória foram propostos inicialmente sem a capacidade de considerar as interações entre partículas. Nesta condição, estão o método *PSI-Cell* (Crowe et alii, 1977) e o modelo estocástico, baseado na equação de Boltzmann, proposto pioneiramente por Culick (1964). Como de praxe, a desconsideração dos termos de interação é viabilizada pela hipótese de sistema diluído, a qual limita sensivelmente o modelo dinâmico, mas, não obstante, tem sido utilizada com grande frequência.

Enquanto os modelos determinísticos assemelhados ao *PSI-Cell* não foram acrescidos em trabalhos subsequentes, a abordagem probabilística baseada na simulação de Monte Carlo sofreu avanços notáveis ao longo dos anos, dentre os quais está a modelagem das interações partícula-partícula. Diversas pesquisas relativas ao assunto foram publicadas, tais como Jenkins & Savage (1983), Valioulis et alii (1984), Pearson et alii (1984) e Kriton et alii (1990).

Em sua teoria cinética simplificada, Jenkins e Savage (1983) implementaram as interações entre partículas adotando um modelo detalhado para colisões binárias, no qual considera-se o contato entre partículas lisas, esféricas e idênticas de massa m e diâmetro σ . Para maior esclarecimento sobre os métodos de interação partícula-partícula nos modelos estocásticos, será feita um breve exposição da técnica usada por Jenkins e Savage (1983).

Aplicando o princípio da conservação do *momentum* linear, os vetores velocidade das partículas depois da colisão \bar{v}'_1 e \bar{v}'_2 devem estar relacionados aos vetores velocidade \bar{v}_1 e \bar{v}_2 antes da colisão através das equações:

$$\begin{aligned} m\bar{v}'_1 &= m\bar{v}_1 - \bar{J}, \\ m\bar{v}'_2 &= m\bar{v}_2 + \bar{J}, \end{aligned} \tag{26}$$

onde \bar{J} é o impulso exercido pela partícula 1 sobre a partícula 2 durante a colisão.

Os vetores velocidade relativa entre as partículas antes e depois da colisão podem ser definidos na forma:

$$\begin{aligned} \bar{v}_{12} &= \bar{v}_1 - \bar{v}_2, \\ \bar{v}'_{12} &= \bar{v}'_1 - \bar{v}'_2, \end{aligned} \tag{27}$$

de modo que, valendo-se do conceito de coeficiente de restituição, as velocidades relativas antes e depois do choque podem ser relacionadas como:

$$(\bar{k} \cdot \bar{v}'_{12}) = -\varepsilon(\bar{k} \cdot \bar{v}_{12}), \quad (28)$$

sendo \bar{k} o vetor unitário normal ao plano de contato, o qual interliga os centros das duas partículas. A depender da natureza do material que constitui as partículas, o coeficiente de restituição ε pode variar de 0 a 1, correspondendo às colisões inelástica e elástica, respectivamente. Note-se que um coeficiente de restituição unitário tem o efeito de, após o choque, reverter a projeção da velocidade relativa sobre o vetor \bar{k} , sem promover dissipação de energia cinética. No caso do coeficiente de restituição ser inferior a 1, caracteriza-se um choque parcialmente elástico, que é acompanhado pela perda irreversível da energia cinética das partículas.

Utilizando as equações (26) e (28), pode-se expressar o vetor impulso \bar{J} em termos da velocidade relativa de aproximação como

$$\bar{J} = \frac{1}{2} m(1 + \varepsilon)(\bar{k} \cdot \bar{v}_{12})\bar{k}, \quad (29)$$

de maneira que, substituindo-se (29) em (26), obtém-se as velocidades de cada partícula após a colisão como segue:

$$\begin{aligned} \bar{v}'_1 &= \bar{v}_1 - \frac{1}{2}(1 + \varepsilon)(\bar{k} \cdot \bar{v}_{12})\bar{k}, \\ \bar{v}'_2 &= \bar{v}_2 + \frac{1}{2}(1 + \varepsilon)(\bar{k} \cdot \bar{v}_{12})\bar{k}. \end{aligned} \quad (30)$$

Deve-se salientar que, não obstante a sua coerência física indiscutível, o modelo de colisão proposto por Jenkins e Savage (1983) não faz qualquer referência ao atrito tangencial existente entre as partículas no ponto de contato, o qual pode ser responsável por uma parcela razoável da energia cinética dissipada durante a colisão.

No seu estudo sobre o processo de coagulação de partículas sólidas em meio a um fluido, Pearson et alii (1984) argumentaram que são necessários dois processos para que haja a coagulação de partículas, sejam estes (a) um mecanismo capaz de gerar o movimento relativo entre as partículas e (b) a existência de alguma força interfacial de curto alcance capaz de unir as partículas. Nesta ordem, os autores levantaram quatro causas que isoladamente, ou em conjunto, poderiam fazer as partículas moverem-se umas em relação às outras:

1. Movimento térmico ou browniano;
2. Cisalhamento laminar ou turbulento do fluido;
3. Inércia das partículas associadas ao escoamento turbulento;
4. Sedimentação diferenciada de partículas de tamanhos distintos.

Não é difícil perceber que os mecanismos supra citados são requisitos fundamentais para que haja a interação partícula-partícula em qualquer sistema sólido-fluido, entretanto, no referido estudo, o modelo foi elaborado de maneira que duas partículas em contato se fundissem para formar uma outra partícula de igual volume, perfazendo, portanto, uma coalizão e não uma colisão propriamente dita.

Kriton et alii (1990), na sua simulação de Monte Carlo do reator de contra-fluxo, também introduziram as interações partícula-partícula através de um modelo de colisão devido a Soo (1983a). Este modelo respeita tanto os efeitos representados pelo coeficiente de restituição como também pelo coeficiente de fricção, o qual responde pela dissipação de energia mecânica causada pelo atrito tangencial entre as partículas durante o contato. Por conseguinte, o modelo de Soo (1983a) mostrou-se mais completo e abrangente do que o anteriormente proposto por Jenkins e Savage (1983).

2.5 Turbulência⁹

Apesar da possibilidade e relativa facilidade de modelar e obter soluções analíticas ou numéricas para escoamentos laminares, os fenômenos naturais que envolvem fluidos em movimento são essencialmente turbulentos. Este capricho da natureza torna imprescindível que a ciência se depare com a complexidade da turbulência, a fim de desenvolver modelos capazes de predizê-la com satisfatória exatidão. De fato, a grande maioria dos escoamentos naturais e de interesse tecnológico são caracterizados pelas instabilidades e irregularidades próprias da turbulência. Existe um propósito para isso, pois ocorre que, em muitos casos, a turbulência é realmente útil no processo tecnológico envolvido. Por exemplo, muitos processos de combustão se valem da turbulência para elevar as taxas de transferência de massa e calor, a turbulência é também usada para acelerar a homogeneização de misturas com objetivo de propiciar maiores taxas de reação química em líquidos ou gases, etc.

Um escoamento turbulento se caracteriza pela presença de porções de fluido em movimento turbilhonar ou de rotação. Estas porções de fluido são denominadas de turbilhões e suas principais propriedades são a dimensão e a frequência de rotação. Portanto, como os turbilhões são giratórios, pode-se concluir que o movimento de rotação local de fluido é essencial para a turbulência. Os turbilhões possuem uma grande variedade de tamanhos, os maiores tem o seu tamanho determinado pelas dimensões físicas do sistema onde se dá o escoamento e uma frequência mais baixa, ao passo que o tamanho do turbilhões menores, e de maior frequência de rotação, é definido pelas forças viscosas atuantes no fluido.

A presença da turbulência provoca variações aleatórias, ou randômicas, nas propriedades do escoamento, sendo estas variações denominadas de flutuações. Tais flutuações são diretamente associadas ao tamanho, ou à frequência, dos turbilhões, ou seja, os turbilhões maiores causariam as flutuações da baixa frequência, enquanto que os

⁹ Nesta seção, será realizada uma elucidação bastante sucinta sobre a natureza da turbulência e suas características. Informações mais detalhadas e fundamentais podem ser encontradas em Tennekes & Lumley (1972).

turbilhões menores causariam as flutuações de alta frequência. Este teor de aleatoriedade faz com que uma abordagem determinística para a modelagem destes escoamentos seja dificultosa ou virtualmente impossível. Ao invés de um ponto de vista determinístico, comumente utilizam-se de ferramentas estatísticas para descrever a turbulência. Estas flutuações próprias da turbulência aceleram os processos de mistura, favorecendo a transferência de quantidades físicas como massa, *momentum* e energia. Esta característica é denominada de difusividade da turbulência, a qual desempenha papel fundamental nos escoamentos turbulentos.

A turbulência provoca dissipação energética no fluido em movimento. As tensões viscosas cisalhantes realizam um trabalho sobre o fluido que transforma parte da energia cinética do escoamento em energia interna do fluido. Por isso, a turbulência requer um suprimento contínuo de energia, sem o qual ela decai rapidamente e o escoamento se torna laminar. A necessidade de fornecimento constante de energia faz com que a turbulência só apareça em números de Reynolds elevados, sendo esta realmente uma condição *sine qua non*, pois à medida que o Reynolds de um escoamento laminar é acrescido, a turbulência é favorecida e o seu surgimento é determinado por instabilidades na massa fluida laminar. Se o número de Reynolds é suficientemente alto, as instabilidades crescem, originando as estruturas de movimento randômico típicas da turbulência. Se o número de Reynolds não é alto o suficiente, as instabilidades são amortecidas e o escoamento permanece laminar.

2.5.1 Espectro da Turbulência

Provavelmente a propriedade mais efetiva para a caracterização da turbulência seja a existência de várias escalas, as quais são relacionadas com as dimensões e a frequência do movimento dos turbilhões. Ao contrário do escoamento laminar cuja escala característica é definida pelas dimensões do sistema escoante, na turbulência, vários comprimentos de escala podem ser encontrados e cada qual desempenha papel importante no aparecimento e/ou manutenção da turbulência. A grande variedade de tamanhos de turbilhões pode ser considerada como um espectro de comprimentos de escala, sendo que a definição dos limites superior e inferior deste espectro é de fundamental importância para estabelecer um padrão da turbulência. A amplitude do espectro de turbulência é propriamente a diferença de tamanho entre o maior e o menor turbilhão, a qual está intimamente relacionada ao número de Reynolds do escoamento, pois o aumento do número de Reynolds faz com que os turbilhões do limite inferior do espectro se tornem cada vez menores, de modo que a amplitude espectral é aumentada.

2.5.2 Cascata de Energia

A maior escala da turbulência é a principal responsável pela transferência de momento, ao passo que o principal papel da menor escala é a dissipação energética no escoamento, ou seja, são os pequenos turbilhões que convertem energia cinética do escoamento médio em energia interna. Entretanto, a física do movimento mostra que a transferência de *momentum* é máxima entre corpos com mesma massa. Por este motivo, a transferência de energia mecânica só ocorre efetivamente entre turbilhões de tamanho

semelhante. Esta verificação torna necessária a suposição de um mecanismo capaz de transferir a energia retirada do escoamento médio, que tem a mesma escala dos maiores turbilhões, para a escala dos menores turbilhões. Este processo de transferência se dá de maneira tal que os maiores turbilhões interagem com o escoamento médio – por terem mesma ordem de grandeza – retirando parte da sua energia. Esta energia é transmitida para os turbilhões de tamanho imediatamente inferior no espectro e este processo de transferência se dá até que a energia chegue aos menores turbilhões, nos quais as forças viscosas são dominantes e realizam a conversão da energia mecânica em calor. Todo este processo dissipativo que envolve todas as escalas da turbulência é denominado de Cascata de Energia.

2.5.3 Escalas de Kolmogorov

Ao estudar os mecanismos de transferência através da cascata de energia, Kolmogorov sugeriu que, à medida que a energia era deslocada entre os níveis de escala da turbulência, alguns detalhes sobre os meios de produção desta energia poderiam ser perdidos incrementalmente. Segundo a sua visão, a cada nível traspassado pela energia turbulenta em direção aos menores níveis da cascata de energia, ocorreria maior perda de informação sobre a fonte geradora – o cisalhamento no escoamento médio. Eventualmente, se o número de níveis da cascata de energia for suficientemente elevado, toda a informação direcional sobre o escoamento médio poderia ser perdida, de maneira que os turbilhões na base da cascata de energia saberiam apenas a quantidade de energia que estariam recebendo e que, portanto, deveriam dissipar.

Se acertado, o mecanismo de perda de informação ditado por Kolmogorov confere isotropia às menores escalas da cascata de energia, entretanto, para que isso ocorra, o número de níveis da cascata de energia teria que ser infinito. Consequentemente, este estado de isotropia é virtualmente impossível de ser atingido por ser compatível apenas com um número de Reynolds infinitamente grande. Em outras palavras, a qualquer número de Reynolds finito, deve ser esperado que as escalas menores da turbulência sejam menos anisotrópicas do que as escalas maiores, mas ainda assim a base da cascata de energia seria algo anisotrópica¹⁰.

Apesar da isotropia completa não poder ser realmente alcançada, o mecanismo proposto por Kolmogorov permite a aplicação mais aceitável da hipótese de *isotropia local* na obtenção de modelos de turbulência assintóticos para escoamento a números de Reynolds elevados. Um destes casos é o modelo de turbulência $k-\epsilon$, o qual será apresentado em detalhes na seção 3.6.1.

2.5.4 A Origem da Turbulência

A turbulência aparece nos escoamentos laminares a partir de instabilidades verificadas em números de Reynolds suficientemente elevados. Para escoamentos em

¹⁰ Esta constatação acarreta implicações de suma importância na elaboração de modelos de turbulência de primeira e segunda ordem, como será discutido posteriormente.

tubos, em condições normais, o escoamento passa de laminar a turbulento em número de Reynolds de aproximadamente 2500, a menos que um enorme cuidado seja tomado para não gerar instabilidades. Dentre estes cuidados, pode-se considerar o uso de amortecedores capazes de amenizar os efeitos das vibrações do ambiente sobre o tubo, além de utilizar um tubo extremamente polido na sua face interna. Estas perturbações causadas pelo ambiente e pela rugosidade da superfície interna do tubo são determinantes para a transição entre escoamento laminar e turbulento.

A turbulência não é auto-sustentável, de modo que não pode manter a si mesma, necessitando obter energia do ambiente. A fonte mais comum de energia para a turbulência é o cisalhamento no escoamento médio, que pode ser representado pelo gradiente de velocidade média do escoamento. Entretanto, existem outras fontes de energia de turbulência, tais como o empuxo devido a variações de densidade e as diferenças de densidade em um campo centrífugo de escoamento. Portanto, se a turbulência aparece em um sistema onde não há cisalhamento ou outro mecanismo mantenedor, o escoamento rapidamente se torna laminar.

O primeiro indício do aparecimento da turbulência ocorre na fase de transição entre o comportamento laminar e turbulento. Em termos matemáticos, os detalhes desta transição de fase são muito pouco compreendidos. Uma abordagem comum é a aplicação de teorias de instabilidades em escoamentos laminares, em vistas a verificar o seu comportamento frente a perturbações. Contudo, estas teorias são aplicadas após uma linearização, a qual viabiliza o seu uso apenas para perturbações muito pequenas, não podendo tratar os altos níveis de flutuação dos escoamentos turbulentos. Seguindo pelo lado oposto, as teorias para escoamento turbulentos são assintóticas em quase sua totalidade, sendo muito precisas em números de Reynolds elevados e imprecisas ou incompletas para números de Reynolds intermediários.

O mecanismo preciso de aparecimento da turbulência não está perfeitamente esclarecido, mas as características gerais do processo podem ser apontadas. Informações experimentais mostram que as instabilidades iniciais que causam a turbulência são causadas por mecanismos rudimentares, que podem ser até bidimensionais nos casos mais simples. As instabilidades iniciais produzem movimentos secundários em cadeia que são geralmente tridimensionais e instáveis. Este efeito de reação em cadeia gera perturbações locais tridimensionais que aparecem em períodos de tempo aleatórios, os quais são os primeiros turbilhões do escoamento turbulento. Estes primeiros turbilhões rapidamente se fundem entre si e formam as estruturas maiores que compõem o escoamento turbulento.

2.5.5 A Turbulência e o Movimento das Partículas

Se, em verdade, a turbulência em escoamentos de fluidos puros está longe de se esgotar como campo de investigação científica, tal afirmação pode ser feita com maior ênfase em referência ao escoamento multifásico envolvendo um fluido e partículas. De fato, a compreensão dos mecanismos fundamentais da turbulência se constitui num desafio para os pesquisadores da área da fluidodinâmica, assim como para investigadores da área dos sistemas particulados. O grande problema do escoamento bifásico turbulento reside no não

conhecimento preciso dos efeitos da presença das partículas sobre a estrutura do escoamento do fluido. O fato de que a presença de partículas sólidas ou gotas modifica o campo de escoamento do fluido no qual estão suspensas é de aceitação irrefragável e foi constatado em diversos trabalhos (Sproull, 1961; Laats, 1966; Hetsroni & Sokolov, 1971; Popper et alii, 1974). Sproull (1961) observou uma significativa redução da tensão cisalhante, causada pela dispersão de partículas num escoamento turbulento em um tubo. Laats (1966), Hetsroni & Sokolov (1971) e Popper et alii (1974) repararam uma apreciável atenuação dos níveis de turbulência proporcionado por gotas de líquido ou partículas injetadas em um jato de fluido. Questões relativas à física destes fenômenos permanecem indeferidas pois, conforme constatado por vários autores, as interações entre a fase dispersa e o fluido são notavelmente complexas e pouco compreendidas mesmo na atualidade.

Não obstante as dificuldades, têm havido várias tentativas de predição do comportamento dos escoamentos sólido-fluido turbulentos, contudo a maioria dos estudos (por exemplo: Saffman, 1962; Owen, 1969; Abramovich, 1970) publicados se referem a escoamentos unidimensionais em situações limite nas quais o tempo de relaxação das partículas é grande ou pequeno em comparação com a escala de tempo dos turbilhões. Abramovich (1971) usou uma teoria do comprimento de mistura aproximada e verificou que partículas pequenas causam maior redução da energia cinética de turbulência do que partículas grosseiras. Esta constatação é compatível com os resultados computacionais de Sharma & Crowe (1978), obtidos com um modelo unidimensional no qual afirmava-se que a queda de pressão num tubo de venturi era principalmente gerada pelas partículas finas suspensas no escoamento.

Owen (1969) estimou que a taxa de dissipação de energia cinética de turbulência em um fluido contendo partículas é maior do que em um fluido puro numa razão de $(1 + \bar{\rho}_p / \rho)$, onde $\bar{\rho}_p$ é a densidade maciça (*bulk density*) das partículas. No mesmo trabalho, sob a hipótese de que a energia de turbulência era produzida apenas pela fase fluída, Owen (1969) propôs que a existência da fase dispersa diminui a intensidade de turbulência na razão de $(1 + \bar{\rho}_p / \rho_f)^{-1/2}$. Estes efeitos na taxa de dissipação e na intensidade da turbulência provocam redução da viscosidade turbulenta efetiva do fluido, cuja causa primária, segundo Owen (1969), seria a dissipação da energia de turbulência existente na interface entre as partículas e o fluido. Esta observação encontra apoio quando averigua-se que, de fato, há uma camada limite envolvendo cada partícula sólida escoando em meio a um fluido, na qual as forças de dissipação viscosa têm papel predominante sobre as forças inerciais. Por conseguinte, fica evidente que as camadas limites das partículas funcionam como sumidouros de energia de turbulência, resultando daí um acréscimo na taxa de dissipação desta energia no escoamento médio do fluido.

Fazendo uso da teoria de Owen (1969), Melville & Bray (1979), perfizeram a análise do escoamento turbulento de um jato gás-sólido circular, tratando as partículas como, em hipótese, uma fase contínua misturada ao gás de arraste, que seria o fluido propriamente dito. Tal modelo do *continuum* proporcionou resultados que compararam razoavelmente com os dados experimentais de Laats & Frishman (1970).

Em 1983, Choi & Chung (1983) estenderam a teoria do comprimento de mistura com o objetivo de modelar o escoamento fechado bifásico turbulento. Dentre as hipóteses assumidas no modelo, as mais importantes são: (a) sistema diluído, (b) o tamanho das partículas é suficientemente pequeno para que estejam completamente suspensas na fase fluida e (c) o tempo de relaxação das partículas é pequeno quando comparado com a escala de tempo dos turbilhões, de maneira que as partículas reajam totalmente às flutuações do campo turbulento. Os autores utilizaram o mesmo modelo matemático – composto por equações do *continuum* com nivelamento de Reynolds – apresentado por Melville (1974), adotando-se, entretanto, a simplificação adicional de considerar a concentração dos sólidos como sendo uniforme em cada seção reta do tubo. Embora em discordância com a verificação experimental de Boothroyd (1967), na qual constatou-se que o movimento flutuante das partículas contribui significativamente para a produção de turbulência, Choi & Chung (1983) também assumiram, para fechar o modelo de turbulência, que a produção da energia cinética de turbulência ocorria apenas na fase contínua.

A fim de examinar a aplicabilidade do seu modelo de comprimento de mistura, Choi & Chung (1983) fizeram a validação dos resultados obtidos confrontando-os com os experimentos de queda de pressão devidos a Boothroyd (1966), que mediu o fator de atrito em escoamentos de ar contendo partículas de pó de zinco em suspensão no interior de tubos de 0,0254m; 0,0508m e 0,0762m de diâmetro. Os diâmetros de partículas testados variaram na faixa de 0 a 40 μm , com valor médio de 15 μm . As razões de carregamento variaram de 0 a 10 e o número de Reynolds baseado no diâmetro do tubo e velocidade média do ar foi fixado em 53000 para todos os casos. Quanto à confiabilidade estatística, estimou-se um nível de incerteza de cerca de 10% para os valores do fator de atrito obtidos no referido sistema experimental.

Para melhor equivalência de resultados, Choi & Chung (1983) realizaram simulações usando um diâmetro de partícula uniforme (mistura monodispersa) igual a 15 μm . Feito isso, os resultados computacionais conseguidos foram satisfatoriamente concordantes com as medidas experimentais. Corroborando a qualidade do modelo proposto, realizaram-se simulações com o modelo anteriormente apresentado por Melville & Bray (1979), o qual, por sua vez, se mostrou menos adequado aos dados experimentais de Boothroyd (1966).

Em simulações subseqüentes, Choi & Chung (1983) notaram que, para o menor diâmetro de tubo (0,0254m), a curva do fator de atrito inicialmente decrescia e depois se tornava crescente com o aumento do carregamento (razão $\bar{\rho}_p / \rho_f$), contrariando o comportamento monotônico crescente do fator de atrito nos tubos maiores. Este comportamento aparentemente anômalo também ficou constatado nos dados de Boothroyd (1966). As curvas do fator de atrito em função do diâmetro relativo das partículas¹¹ indicaram que, para um dado número de Reynolds e carregamento de sólidos, a maior parte do atrito com a parede é devida à presença de partículas menores. Como o mesmo efeito foi

¹¹ O diâmetro relativo das partículas foi usado no artigo (Choi & Chung, 1983) como a razão entre o diâmetro das partículas e o diâmetro do tubo.

verificado quando aumenta-se o diâmetro do tubo, mantendo-se constante o diâmetro das partículas, sugeriu-se que a razão de diâmetros partícula/tubo é mais adequada, para descrever a variação do fator de atrito, do que apenas o diâmetro do tubo.

Levando em conta que as flutuações turbulentas podem induzir o movimento radial das partículas sólidas, Kriton et alii (1990) consideraram o escoamento turbulento da mistura gás-partículas em um tubo na sua simulação de Monte Carlo do reator de contra-fluxo. Ao invés de aplicarem equações diferenciais do movimento para calcular o campo de velocidades do gás, os autores se valeram de uma aproximação do perfil de velocidades de um escoamento turbulento, escrito na forma

$$U_z = 1,25\bar{U}\left(1 - \frac{2r}{D}\right)^{1/7} + u'_z, \quad (31)$$

para a velocidade axial, e

$$U_r = u'_r, \quad (32)$$

para a velocidade radial, sendo que \bar{U} é a velocidade axial média, r é a posição radial, D é o diâmetro do tubo, u'_z e u'_r são as flutuações das componentes axial e radial da velocidade, respectivamente.

As flutuações u'_z e u'_r são tomadas como zero quando $2r/D > 0,8$. Contudo, para $2r/D \leq 0,8$, assumiu-se que estas variáveis seguem uma distribuição normal aleatória com média nula e desvio padrão dado por:

$$\begin{aligned} \frac{\left(\overline{u_r'^2}\right)^{0,5}}{\left[\bar{U}\left(\frac{f_F}{2}\right)^{0,5}\right]} &= -18,29\left(1 - \frac{2r}{D}\right)^4 + 43,51\left(1 - \frac{2r}{D}\right)^3 - 33,43\left(1 - \frac{2r}{D}\right)^2 + \\ &+ 9,17\left(1 - \frac{2r}{D}\right) + 0,35 \\ \frac{\left(\overline{u_z'^2}\right)^{0,5}}{\left[\bar{U}\left(\frac{f_F}{2}\right)^{0,5}\right]} &= -3,05\left(1 - \frac{2r}{D}\right)^4 + 5,18\left(1 - \frac{2r}{D}\right)^3 - 1,54\left(1 - \frac{2r}{D}\right)^2 + \\ &+ 1,98\left(1 - \frac{2r}{D}\right) + 2,11 \end{aligned} \quad (33)$$

onde f_F é o fator de atrito de Fanning para um gás escoando em um tubo. As expressões (33) foram desenvolvidas por Yoshida & Masuda (1980), aplicando o método dos mínimos quadrados para correlacionar os dados experimentais de Laufer (1954).

Embora, conforme comentado pelos autores, esta seja uma abordagem um tanto grosseira, ela pôde ser justificada com base na hipótese de sistema diluído – implicando que as partículas não modificariam significativamente o campo de escoamento do gás – e também por terem usado partículas de diâmetro da ordem de 2mm nas simulações, as quais não reagem completamente às flutuações, garantido, com alguma segurança, a suposição de turbulência isotrópica.

Louge et alii (1991) perfizeram uma análise detalhada do escoamento gás-sólido vertical em fase diluída e regime permanente. Eles usaram partículas relativamente grandes, de modo a assumir que as flutuações da fase gasosa não alterariam o seu movimento. A fase particulada foi tratada como um material granular em escoamento rápido, no qual as transferências de *momentum* e energia ocorrem por meio de colisões entre as partículas. O modelo teórico proposto consistiu numa modificação das equações originais de Jenkins & Savage (1983) a fim de incluir o termo de arraste do gás sobre as partículas. Além disso, os autores consideraram a turbulência na fase gasosa valendo-se de um modelo de uma única equação. Os resultados numéricos obtidos por Louge et alii (1991) foram comparados com perfis experimentais de velocidade da fase gasosa e das partículas reportados por Tsuji et alii (1984). A concordância das simulações com os dados experimentais sugere fortemente que as colisões entre partículas desempenham papel de igual ou maior relevância do que a própria turbulência quando utilizam-se partículas relativamente grandes, mesmo em sistemas diluídos.

Nos sistemas particulados densos, como os leitos fluidizados, as instabilidades que levam a fenômenos de borbulhamento ou *slugging* podem ser imputadas à inércia da fase particulada. Esta assertiva foi reforçada por integrações transientes de equações do *continuum*, para um sistema contendo partículas uniformes, sem os termos inerciais da fase gasosa, nas quais verificou-se a ocorrência de comportamento semelhante à formação de bolhas (Hernandez & Jimenez, 1991). Nestes tipos de escoamento, conforme Dasgupta et alii (1994), o movimento das partículas pode ser dividido em três componentes, a saber: (a) a velocidade média local; (b) a flutuação da velocidade associada ao movimento organizado de grupos de partículas e (c) as flutuações no nível individual das partículas. A implicação imediata desta consideração é a existência de turbulência em ambas as fases sólida e gasosa, como consequência de interações internas a cada fase. Os trabalhos de Mello et alii (1991) e Savage (1992) ratificaram a produção intrínseca de turbulência na fase particulada¹² quando mostraram que a instabilidade inercial surge naturalmente num escoamento cisalhante de um material granular, mesmo na ausência de gás intersticial, dando origem ao movimento organizado de grupos de partículas. Deste modo, ficaria

¹² Consonante com Dasgupta et alii (1994), a expressão “turbulência na fase particulada” foi aqui aplicada em referência ao movimento ordenado de grupos de partículas na forma de flutuações persistentes. Contudo, não é intentado que o fenômeno de turbulência da fase particulada apresente rigorosamente todas as propriedades da turbulência dos fluidos reais.

comprovado que a presença do fluido em meio às partículas não é requisito imprescindível para a geração de instabilidades no escoamento, podendo o próprio cisalhamento da fase particulada contribuir para a promoção e propagação de perturbações na mistura sólido-fluido.

Enfatizando a importância das perturbações próprias da fase particulada, Dasgupta et alii (1994) elaboraram um modelo do *continuum* para descrever um sistema sólido-fluido constituído por partículas pequenas em concentração relativamente alta, semelhantemente às condições encontradas em reatores de craqueamento catalítico (FCC).

A estrutura matemática do modelo de Dasgupta et alii (1994) consistiu numa simplificação das equações derivadas por Anderson & Jackson (1967) através de um procedimento de média espacial. Para complementação, as equações do modelo serão apresentadas sumariamente a seguir:

- **Fase Contínua**

$$\frac{\partial \phi_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_g \underline{u}_g) = 0, \quad (34)$$

$$\rho_g \frac{\partial}{\partial t} (\phi_g \underline{u}_g) + \rho_g \nabla \cdot (\phi_g \underline{u}_g \underline{u}_g) = \phi_g \nabla \cdot \tilde{\mathbf{E}}_g + \rho_g \phi_g \underline{g} + \beta_1 (\underline{u}_s - \underline{u}_g). \quad (35)$$

- **Fase Dispersa**

$$\frac{\partial \phi_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_s \underline{u}_s) = 0, \quad (36)$$

$$\rho_s \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \underline{u}_s) + \rho_s \nabla \cdot (\phi_s \underline{u}_s \underline{u}_s) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{E}}_s + \phi_s \nabla \cdot \tilde{\mathbf{E}}_g + \rho_s \phi_s \underline{g} - \beta_1 (\underline{u}_s - \underline{u}_g). \quad (37)$$

- **Restrição de Concentração**

$$\phi_s + \phi_g = 1. \quad (38)$$

- **Equação Constitutiva**

$$\beta_1 = \frac{(\rho_s - \rho_g) \phi_s \underline{g}}{V_t \phi_g^{n-1}}, \quad (39)$$

onde ϕ_s , ϕ_g , \underline{u}_s , \underline{u}_g , ρ_s e ρ_g são as frações volumétricas, velocidades e densidades das duas fases, respectivamente; $\tilde{\mathbf{E}}_s$ e $\tilde{\mathbf{E}}_g$ são os tensores tensão destas fases; β_1 é o coeficiente

de arraste; g é a aceleração da gravidade; v_t é a velocidade terminal de uma partícula e n é um parâmetro dependente do número de Reynolds. Note-se que as variáveis sublinhadas se referem a médias espaciais.

É pertinente ressaltar algumas conseqüências decorrentes do processo de nivelamento espacial. Para isso, importa notar e identificar as diferentes escalas espaciais envolvidas em um sistema sólido-fluido. Nominalmente, desconsiderando-se os efeitos físicos em escala inferior ao diâmetro das partículas, têm-se três comprimentos de escala num sistema particulado:

1. Diâmetro das partículas: é o menor comprimento de escala considerado. Em porosidades baixas, tais quais as adotadas por Dasgupta et alii (1994), ocorre que a distância entre partículas adjacentes assim como as variações do escoamento decorrentes da passagem do fluido por entre as partículas pertencem a este mesmo comprimento de escala. Todo e qualquer fenômeno físico contido neste comprimento de escala é apagado pelo processo de nivelamento espacial.
2. Volumes de controle: o processo de nivelamento local gera um segundo comprimento de escala sensivelmente superior ao diâmetro das partículas. As equações mediais são capazes de descrever o sistema físico até este comprimento de escala.
3. Flutuações: é neste terceiro comprimento de escala onde ocorrem as flutuações na velocidade de ambas as fases (sólida e fluída). Estas flutuações estão associadas aos fenômenos de borbulhamento, *slugging* e a referida turbulência da fase particulada. As flutuações correspondem ao movimento de turbilhões cujos tamanhos podem variar desde o diâmetro do tubo até uma escala característica análoga ao comprimento de escala dissipativo do escoamento turbulento de um fluido puro.

Embutida nestas idéias, está a hipótese de que os três comprimentos de escala identificados são bem distinguíveis entre si e que o efeito dos detalhes do escoamento nos fenômenos de larga escala são incorporados completamente pelos modelos usados na representação das escalas mais inferiores.

Para estabelecer uma idéia sobre qual o menor comprimento de escala passível de ser descrito pelas equações mediais de Dasgupta et alii (1994), pode-se considerar os estudos de propagação de onda em leitos fluidizados realizados por Anderson & Jackson (1967), no qual foi constatado que o seu modelo podia capturar corretamente os fenômenos num comprimento de escala de cerca de 50 diâmetros de partícula. Posteriormente, os trabalhos mais recentes de Mello et alii (1991) e Savage (1992) sugeriram que até os fenômenos num comprimento de escala da ordem de 10 diâmetros de partículas poderiam ser capturados qualitativamente.

Valendo-se de uma simplificação das equações (34) a (37) para sistemas diluídos, aliada a uma breve argumentação, Dasgupta et alii (1994) concluíram que a origem física

da segregação das partículas na direção da parede reside na necessidade de se manter o balanço de forças na direção radial, independentemente da intensidade das flutuações na velocidade. De acordo com este ponto de vista, se a concentração fosse uniforme, haveria uma variação radial acentuada do tensor de Reynolds, implicando que o balanço das forças seria impossibilitado. Não obstante o embasamento físico aplicado nesta conclusão, é imprescindível notar que foram completamente desprezadas as forças de carregamento passíveis de, eventualmente, atuar sobre as partículas, a exemplo da força de Saffman e dos termos de Basset.

Os autores focalizaram os sistemas particulados com porosidade relativamente baixa e carregados com partículas pequenas o suficiente para serem totalmente responsivas às flutuações da velocidade do fluido. Desta maneira, as interações entre as partículas, por meio de colisões, seriam capazes de dotar a fase dispersa de um comportamento coletivo. Em tais condições, referindo-se aos escoamentos granulares de Mello et alii (1991) e Savage (1992), não se pode precisar se as flutuações da velocidade e concentração surgem devido a instabilidades da fase gasosa ou da fase dispersa ou a uma combinação de ambas as fases, entretanto é intuitivo que, em baixas porosidades, as partículas desempenham o papel principal nos efeitos inerciais do escoamento bifásico. Por conseguinte, sob a luz destes argumentos, Dasgupta et alii (1994) desprezaram os termos inerciais da fase gasosa nas equações do modelo.

A desconsideração dos termos inerciais da fase gasosa tem como consequência imediata o fato de que as flutuações ocasionadas pela turbulência seriam governadas prioritariamente pelo movimento coletivo das partículas, ao invés de sê-lo pelo escoamento do gás. Portanto, neste cenário, a velocidade de escorregamento entre o gás e as partículas seria relativamente pequena, podendo-se até considerar que toda a mistura escoar em conjunto, compondo um grande bloco de partículas entremeadas pelo gás.

Com os efeitos da turbulência sendo imputados exclusivamente à fase particulada, ficou claro que a modelagem da turbulência se realizaria pelo lado da fase particulada, e não da fase fluida, como é tradicional. Neste sentido, os autores assumiram a hipótese de turbulência isotrópica e utilizaram um modelo de turbulência do tipo $k-\epsilon$. As equações do modelo $k-\epsilon$ para fluidos incompressíveis são substancialmente mais simples do que quando a densidade do material é variável, como é o caso dos escoamentos particulados sólido-fluido (Cebeci & Smith, 1974). Entretanto, como primeira tentativa, os autores fizeram uso do modelo $k-\epsilon$ padrão para escoamentos de densidade constante (Speziale, 1991).

Os resultados permitidos pelo modelo de Dasgupta et alii (1994) mostraram uma acentuada segregação radial dos sólidos na direção da parede. O perfil de velocidades da mistura exibiu formato parabólico bastante semelhante ao perfil laminar de um fluido homogêneo. Este formato parabólico seria causado pela distribuição radial dos sólidos, refletindo o fato de que a resistência fluidodinâmica dos sólidos é maior na parede e menor no centro do tubo, onde a concentração das partículas é menos elevada. Foi constatado que o termo de dispersão radial incluído no modelo causa achatamento no perfil de velocidades dos sólidos, entretanto este efeito é verdadeiramente mínimo, podendo-se concluir que a

dispersão turbulenta desempenha um papel secundário na determinação do perfil de concentração das partículas, a qual é principalmente delineada pelo tensor de Reynolds.

3. METODOLOGIA

3.1 Introdução

Nesta seção, serão apresentadas as técnicas e modelos utilizados para a implementação da simulação do transporte pneumático. Estes modelos são concernentes aos tópicos de:

- **Movimentação das partículas:** considera a 2ª lei do movimento de Newton, a equação de trajetória e a técnica usada na resolução deste sistema de equações diferenciais.
- **Campo de Velocidades do Fluido:** contempla a metodologia aplicada na obtenção do perfil de velocidades da fase contínua, além de considerar os aspectos da interação entre a fase fluida e a fase dispersa.
- **Modelagem da Turbulência:** apresenta a técnica usada para modelar a turbulência no escoamento.
- **Interação partícula-partícula:** descreve a técnica usada para modelar as interações entre as partículas, as quais são causadas fundamentalmente pelas colisões.
- **Tratamento de Misturas Polidispersas:** trata do suporte a misturas polidispersas implementado na modelagem da dinâmica das partículas.

Antes de abordar estes temas, contudo, serão discutidos alguns conceitos e definições fundamentais que balizam e servem de ponto de partida para a estratégia de modelagem adotada neste trabalho.

3.2 Conceitos e Definições Fundamentais

A utilização dos computadores nos campos da ciência e tecnologia permitiu um grande avanço no conceito de *aproximação*. O conceito genérico de aproximação abrange, atualmente, duas situações:

1. A teoria da resolução numérica de equações diferenciais pela aproximação de sua solução através de um conjunto de números.
2. A aproximação introduzida na modelagem por simplificações no modelo do sistema físico considerado.

Para muitos sistemas físicos reais, foram desenvolvidas teoricamente as equações diferenciais fundamentais que descrevem o seu comportamento, contudo não há, em vários casos, uma solução analítica para estas equações diferenciais que compõem o modelo. Isto se deve a várias razões, dentre as quais se tem:

- A grande complexidade do sistema físico e dos fenômenos relacionados gera modelos com numerosas e complexas equações diferenciais.

- Limitação das técnicas matemáticas sistemáticas para a resolução de equações diferenciais, principalmente as não-lineares.

A abordagem numérica para a solução de problemas do mundo real é justificável quando não é possível desenvolver uma solução analítica para o modelo proposto para o sistema físico. Como a grande maioria de sistemas físicos reais é dotada de complexidade suficiente para impedir a solução analítica, as técnicas numéricas tornam-se uma ferramenta de utilidade incomparável no estudo destes sistemas. Apesar do poder computacional disponível na atualidade, em muitas situações, até mesmo a solução numérica só é possível às custas de simplificações realizadas sobre o modelo, as quais determinam que o comportamento do sistema real não pode ser predito ou descrito em toda a sua complexidade. Em outras palavras, é necessário um compromisso entre o detalhamento e precisão do modelo e a possibilidade de resolução, implicando que não é de grande valia construir um modelo altamente complicado e rigoroso se não há recursos disponíveis para resolvê-lo. Neste sentido, é muito mais valioso um modelo com hipóteses simplificadoras razoáveis que permitam a sua resolução, sem comprometer a sua fidedignidade em relação ao fenômeno físico real. Portanto, como regra geral, é preciso desenvolver modelos matemáticos que reduzam a complexidade da situação real, embora o grau de redução necessário dependa dos recursos computacionais disponíveis, e dos parâmetros físico-químicos utilizados.

O modelo matemático para a descrição de um sistema físico somente pode ser definido após a análise e escolha do *nível de aproximação* necessário à obtenção de resultados com exatidão aceitável para um conjunto limitado de variáveis inerentes ao sistema em estudo. As variáveis dependentes e independentes necessárias à completa caracterização do sistema são denominadas de *variáveis básicas do sistema*.

Os conceitos e terminologias considerados acima são válidos de maneira geral para a modelagem de sistemas físicos e, em especial, para os sistemas fluidodinâmicos.

Interações de Grupo

Os sistemas fluidodinâmicos podem ser caracterizados, de modo abrangente, por serem constituídos de um grande número de partículas que interagem mutuamente, de forma que estas *interações de grupo* afetam e controlam, pelo menos parcialmente, o comportamento dinâmico de cada partícula no sistema. Neste ponto, o comportamento do sistema passa a ser determinado pelo seu todo e não mais pela condição individual de cada partícula. Por conseguinte, a fluidodinâmica pode ser conceituada como o estudo do movimento e do comportamento interativo de um grande número de elementos individuais, ou seja, como o estudo do movimento de elementos individuais sujeitos às interações de grupo.

Na ausência das *interações de grupo*, cada elemento ou partícula do sistema comporta-se de modo independente das demais, implicando que uma ação específica de uma partícula não altera as características dinâmicas das partículas vizinhas. O limite entre a existência e a inexistência das interações de grupo é determinado pela densidade de

partículas ou elementos no sistema físico. Desta maneira, os sistemas pouco densos, a exemplo dos gases rarefeitos, podem possuir interações de grupo insignificantes de modo que o tratamento adequado a tais sistemas difere da técnica usualmente aplicada na fluidodinâmica. Como regra, adota-se que as interações de grupo são significantes quando o caminho-livre-médio dos elementos é menor do que a ordem de grandeza do comprimento de escala do sistema. Portanto, para comprimentos de caminho-livre-médio superiores ao comprimento de escala do sistema, as partículas comportam-se como elementos individuais.

3.2.1 Graus de Nivelamento e Níveis de Aproximação

3.2.1.1 Nível de Aproximação

O *nível de aproximação* de um modelo é determinado, de fato, pela definição de vários tipos de aproximação, os quais são:

1. Nível de Escala;
2. Nível de Transiência;
3. Nível de Espaço;
4. Nível de Dinâmica.

3.2.1.1.1 Aproximação do Nível de Escala

O nível de escala refere-se à ordem de grandeza da escala utilizada para definir as dimensões do sistema. O nível de escala pode variar da escala subatômica até a escala astronômica, e é escolhido, para fins da fluidodinâmica, de forma que o caminho-livre-médio dos elementos ou partículas em estudo seja inferior à ordem de grandeza do nível de escala do sistema. Ou melhor, o nível de escala adotado deve ser tal que a densidade de elementos seja alta o suficiente para permitir a hipótese do *continuum*, a qual considera que a proximidade entre os elementos ou partículas é grande o suficiente para que as interações mútuas predominem sobre os movimentos individuais sem suprimi-los completamente. Pode-se dizer que o movimento individual das partículas é sobreposto e mascarado pelo movimento coletivo decorrente da coexistência de um número muito grande de partículas no mesmo domínio físico.

Constituinte Essencial

O nível de escala do sistema físico está diretamente relacionado ao conceito de *constituinte essencial* deste sistema, o qual se refere à entidade física componente do sistema cuja dimensão é imediatamente inferior ao nível de escala do sistema. Por exemplo, a nível molecular, os constituintes essenciais da matéria são as moléculas, enquanto que, a nível astronômico, os constituintes essenciais podem ser planetas, sistemas solares ou até mesmo galáxias. Em conseqüência, se o sistema físico for modelado no mesmo nível de

escala dos constituintes essenciais, ele torna-se discreto, acarretando que a hipótese do *continuum* fica inválida e que a abordagem fluidodinâmica não é adequada.

Elemento de Fluido

A definição conveniente do nível de escala do sistema e do tamanho dos elementos ou partículas permite o uso das técnicas fluidodinâmicas para uma ampla variedade de sistemas. Como os sistemas físicos reais tornam-se discretos à medida que o nível de escala é diminuído – por exemplo, a matéria é contínua a nível macroscópico, mas é discreta a nível molecular – o tamanho do elemento ou partícula, também chamado de *elemento de fluido* ou *partícula de fluido*, é definido de maneira que contenha um grande número de *constituintes essenciais* do sistema. Assim, o tamanho do elemento de fluido deve ser pequeno o suficiente para que o seu caminho-livre-médio seja menor que o nível de escala do sistema – o que garante a existência das interações de grupo entre os elementos de fluido – e grande o suficiente para conter um número de *constituintes essenciais* capaz de determinar as propriedades do elemento de fluido como sendo uma média inequívoca das propriedades dos *constituintes essenciais* em seu interior – o que garante a caracterização do elemento de fluido como uma entidade no sistema físico.

Ponto Fluidodinâmico

O tamanho dos elementos de fluido também se relaciona às coordenadas espaciais do sistema modelado. O conceito de *ponto*, pela abordagem fluidodinâmica, é tão intimamente ligado ao tamanho do elemento de fluido que as dimensões de um ponto num modelo fluidodinâmico são as mesmas dimensões adotadas para o elemento de fluido. Sob outra ótica, pode-se dizer que o elemento de fluido tem o tamanho de um ponto espacial no modelo fluidodinâmico. Pode-se perceber que compreensão do conceito de ponto na fluidodinâmica requer um tanto de abstração, porque, embora as coordenadas espaciais que localizam o ponto sejam dadas por números reais contínuos – indicando que a distância entre pontos vizinhos é infinitesimal – fica evidente que o *ponto fluidodinâmico* não tem dimensão nula, o que não acontece com a definição axiomática do ponto geométrico.

Como as propriedades dos elementos de fluido são médias das propriedades dos *constituintes essenciais* que estes contém, pode-se concluir que a modelagem do sistema no nível de escala dos elementos de fluido constitui, em si mesmo, um nivelamento, ou seja, uma simplificação de modelo. Esta simplificação é perfeitamente justificável, uma vez que o comportamento dos *constituintes essenciais* dos sistemas reais são, geralmente, estocásticos e imprevisíveis por meios determinísticos. Visto que a solução de modelos fluidodinâmicos culmina com a obtenção de uma relação funcional unívoca entre variáveis independentes e dependentes, conclui-se que a cada coordenada (espacial e temporal) do sistema físico deve estar associado apenas um valor bem definido de cada propriedade do sistema. Esta conclusão fica evidente quando considera-se o exemplo de um fluido escoante, pois é claro que, em dado momento, apenas um valor de velocidade, temperatura, pressão, etc. está associado a cada coordenada ou ponto do campo de escoamento.

Em suma, a modelagem do sistema no nível de escala dos elementos de fluido objetiva, basicamente, garantir que as propriedades de interesse do sistema sejam funções contínuas das coordenadas de espaço e tempo. Isso implica que um deslocamento entre pontos fluidodinâmicos vizinhos provoca variações finitas nas propriedades do sistema. Em contraste, a modelagem feita a nível dos constituintes essenciais do sistema geraria “pontos de vácuo” nos quais as propriedades não podem ser definidas como médias, pois a matéria é rarefeita ou simplesmente não está presente nestes pontos. Por conseguinte, o deslocamento entre pontos adjacentes a nível dos constituintes essenciais não corresponde a variações quantificáveis nas propriedades do sistema, já que estas propriedades podem até mesmo não estar definidas no novo ponto.

3.2.1.1.2 Aproximação do Nível de Transiência

O *nível de transiência* se relaciona diretamente aos valores de *constante de tempo* associados a cada fenômeno presente no sistema fluidodinâmico. Portanto, a determinação do nível de transiência consiste na escolha da menor constante de tempo que será contemplada pelo modelo. A definição de uma constante de tempo mínima faz com que os fenômenos mais rápidos, cuja constante de tempo é menor do que a mínima adotada, sejam desprezados, tomando-se uma média temporal para representá-los.

3.2.1.1.3 Aproximação do Nível de Espaço

A escolha do *nível de espaço* determina o número de variáveis espaciais ou de coordenadas que será usado no modelo. A eliminação de coordenadas no modelo deve ser feita após o levantamento de certas hipóteses sobre o comportamento do sistema físico estudado. Deve ser notado que a eliminação de alguma coordenada espacial causa a perda de informação sobre a variação das propriedades do sistema na sua direção, ou no seu eixo, visto que o valor das propriedades para esta coordenada é considerado constante e igual ao valor médio na faixa de domínio abrangida.

3.2.1.1.4 Aproximação do Nível de Dinâmica

A especificação do *nível de dinâmica* consiste na escolha das forças que serão consideradas no modelo. A definição do nível de dinâmica causa, necessariamente, a desconsideração de algumas forças presentes no sistema físico real. A determinação de quais forças podem ser desprezadas precisa ser feita por um estudo da influência relativa de cada força no comportamento geral do sistema. Nesta linha, as forças de pouca influência no comportamento do sistema podem ser desconsideradas no modelo, o que permite um maior grau de simplificação e maior facilidade de resolução.

3.2.2 O Nivelamento das Equações do Continuum

3.2.2.1 Nivelamento causado pelas Equações Diferenciais do *continuum*

A modelagem por equações diferenciais do *continuum* constitui-se numa ferramenta matemática de grande poder e precisão para o estudo fenomenológico da dinâmica dos sistemas físicos. Isto se deve, simplificada, ao fato de que a história dos sistemas dinâmicos pode ser descrita em termos de variações nas propriedades básicas que o caracterizam. Aliás, a própria característica dinâmica de um sistema impõe a ausência de estaticidade, ou seja, a existência de variações das propriedades no espaço e no tempo.

As equações diferenciais representam, implicitamente, relações funcionais entre variáveis dependentes e independentes no sistema físico real. Deste modo, a solução analítica das equações diferenciais do *continuum* resulta na obtenção de *funções contínuas e diferenciáveis* relacionando as variáveis do sistema. Como, via de regra, as variáveis independentes são coordenadas de espaço e tempo, então as funções obtidas determinam valores únicos para as variáveis dependentes ligadas a cada ponto do domínio espaço-tempo. Por isso, conclui-se que as coordenadas de espaço envolvidas nas equações diferenciais do *continuum* definem um espaço contínuo no qual os pontos têm dimensões superiores ao tamanho infinitesimal de um ponto geométrico. A consequência imediata disto é que as características associadas ao ponto espacial destas equações diferenciais é, em verdade, uma média dos valores destas propriedades nos pontos geométricos em seu interior.

Em resumo, o uso de equações diferenciais na modelagem fluidodinâmica acarreta, como consequência direta, a definição de um *espaço contínuo* ou *continuum* no qual valores únicos e bem definidos das propriedades básicas estão associados a cada ponto. Embora os sistemas materiais sejam discretos a nível microscópico, as propriedades dos *constituintes essenciais* são niveladas numa escala superior, originando propriedades macroscópicas mais palpáveis e mais facilmente mensuráveis. Então, como a determinação do *continuum* leva à obtenção de propriedades macroscópicas para cada elemento de fluido, a aplicação das equações diferenciais mostra-se bastante conveniente.

Dimensão Física do Elemento de Fluido e Conseqüências

É intuitivo que um *elemento de fluido* tem uma certa dimensão finita, implicando que ele ocupa um certo volume no espaço material. O tamanho do elemento de fluido é delimitado automaticamente pelas equações diferenciais do sistema, de tal forma que a média das propriedades dos *constituintes essenciais* dentro do volume do *elemento de fluido* seja um valor médio bem definido e não ambíguo, em outras palavras, o tamanho do elemento de fluido é ajustado pelas equações diferenciais como sendo grande o suficiente apenas para conter um número de constituintes essenciais capaz de gerar um valor médio e bem definido de suas propriedades para o *elemento de fluido*. Este valor médio não deve ser

influenciado pela entrada e saída aleatórias de constituintes essenciais no elemento de fluido.

Pelo considerado acima, percebe-se que as dimensões físicas do elemento de fluido estão diretamente relacionadas ao tamanho dos constituintes essenciais do sistema. Pode-se ilustrar esta conclusão, imaginando-se dois sistemas distintos que possuem constituintes essenciais de tamanhos diferentes, como, por exemplo, um sistema gasoso, onde os constituintes essenciais são moléculas, e um sistema particulado sólido-gás, no qual os constituintes essenciais são as partículas de sólido. Assumindo que o número de constituintes essenciais requeridos dentro do elemento de fluido para gerar médias bem definidas é semelhante nos dois casos, ocorre que o elemento de fluido terá que ser maior no sistema cujo constituinte essencial é de tamanho maior, como está ilustrado na Figura 2, a qual permite notar intuitivamente as diferenças entre as três situações:

- as propriedades médias não são alteradas significativamente pela entrada e saída de moléculas de gás nos casos A e C, pois os elementos de fluido contém muitos constituintes essenciais;
- no caso C, até mesmo a movimentação de partículas sólidas não deve alterar as médias das propriedades, porque, devido ao tamanho maior, este elemento de fluido contém muitas destas partículas;
- já no caso B, a entrada ou saída de apenas uma partícula sólida pode alterar sensivelmente o valor médio das propriedades no interior deste elemento de fluido, de modo que as suas dimensões são inadequadas. Note-se que este mesmo tamanho de elemento de fluido se mostrava apropriado para um sistema contendo somente moléculas de gás.

Por conseguinte, o elemento de fluido definido pelas equações diferenciais do sistema particulado é maior do que o do sistema gasoso, visto que ele terá que ser grande o suficiente para nivelar pela média até mesmo as propriedades da fase particulada sólida, tais como velocidade, porosidade, temperatura, etc.

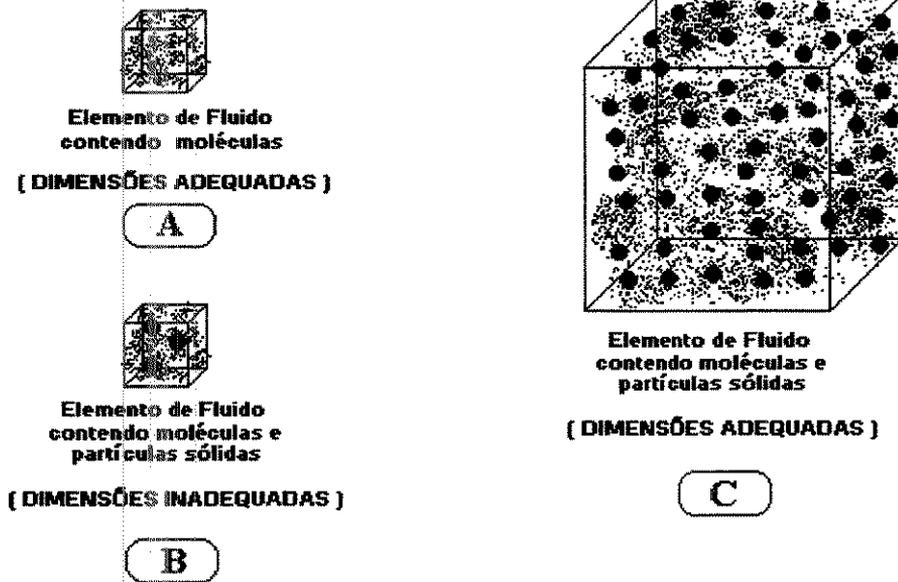


Figura 2 : Ilustração da dimensão do elemento de fluido nos sistemas gás e sólido-gás.

Os detalhes dos fenômenos físicos reais que acontecem num nível de escala inferior às dimensões do elemento de fluido são fatalmente ignorados pelas equações diferenciais do *continuum*, o que causa perda de informação no sistema, haja visto que, como mencionado anteriormente, estes fenômenos num nível de escala inferior são tomados como médias apenas. Nesta situação, pode-se inferir que elementos de fluido com dimensões maiores causam maior perda da informação fenomenológica do sistema, pois os efeitos internos ao volume do elemento de fluido deixam de ser contemplados. Esta característica chega a ser uma grande limitação, pois impõe que a compreensão microscópica e macroscópica de um sistema físico real não pode ser fornecida por um modelo único¹³.

Usando o exemplo dos sistemas gasoso e sólido-gás, mencionados *a priori*, tem-se que os fenômenos presentes em um nível de escala relativamente pequeno podem ser mais facilmente captados na modelagem diferencial do sistema gasoso, porque o elemento de fluido deste modelo tem dimensões menores, mais próximas do tamanho das moléculas de gás do que as dimensões do elemento de fluido do sistema sólido-gás.

Um exemplo de fenômeno de nível de escala pequeno é a turbulência de fluidos em movimento, o qual será discutido em breve, mas, de antemão, pode-se considerar o seguinte: a manifestação física da turbulência é a geração de turbilhões de dimensões microscópicas no fluido escoante. O nível de escala dos turbilhões é baixo o suficiente para não ser captado quando a modelagem do sistema é feita em um nível de escala superior,

¹³ Provavelmente, os físicos foram os primeiros a se deparar com este problema; justamente quando foram impelidos, por limitação desta mesma natureza, a elaborar as elegantes teorias da Relatividade Geral e Quântica para responder pelas escalas astronômica e atômica, respectivamente. Além disso, até hoje, não se tem notícia de uma teoria unificada que seja capaz de modelar as duas escalas simultaneamente.

acarretando que os modelos fluidodinâmicos em níveis de escala elevados tornam-se intrinsecamente laminares. Note-se que, quando o modelo é resolvido numericamente, o nível de escala da solução não é determinado unicamente pelo nível de escala contemplado pelo modelo; de fato o resultado final pode depender do nível de escala usado na sua discretização. Em geral, uma grade de pontos usada na discretização de um sistema físico real deve conter uma quantidade de pontos numerosa o bastante para garantir a estabilidade e convergência da solução, bem como uma boa qualidade de aproximação numérica nos resultados finais.

As etapas de aproximação do nível de escala durante o processo de modelagem e solução para um sistema fluidodinâmico podem ser sumariadas como:

1. Nível de escala dos constituintes essenciais;
2. Nível de escala dos elementos de fluido;
3. Nível de escala da discretização numérica.

A seqüência de nivelamento é esquematizada na Figura 3 a seguir:

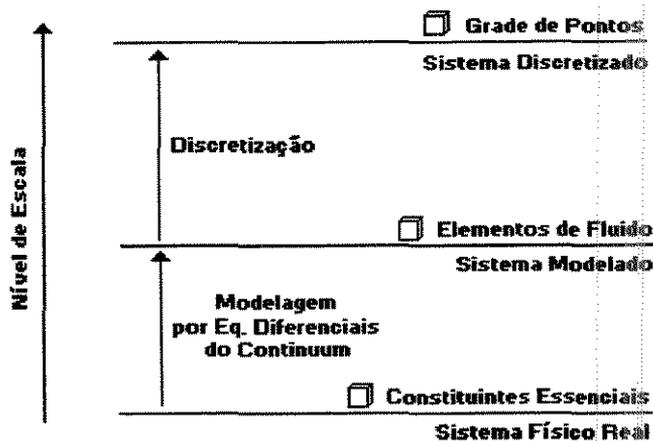


Figura 3: Seqüência de níveis de escala considerados na solução numérica de um problema fluidodinâmico.

O nível de escala mais baixo considerado é associado aos *constituintes essenciais* do sistema físico real, os quais podem ser átomos, moléculas, partículas sólidas, grãos, aglomerados de partículas sólidas, etc., dependendo do sistema modelado. A modelagem por equações diferenciais do *continuum* eleva o nível de escala do problema para os *elementos de fluido*, que passam a ser as entidades elementares do sistema físico após o nivelamento do discreto para o *continuum*. Por último, o problema sofre ainda o nivelamento da discretização numérica, o qual é inevitável na resolução numérica de equações diferenciais.

O nível de escala da discretização numérica pode ser evolutivamente melhorado, ou seja, diminuído, à medida que os recursos computacionais disponíveis são ampliados. A

redução do nível de escala da discretização numérica, com recursos computacionais ilimitados, poderia prosseguir indefinidamente até que a grade de pontos usada na discretização do sistema físico fosse composta por um número infinito de pontos. Esta grade hipotética de infinitos pontos forneceria uma solução dotada de toda precisão e realismo que o modelo matemático do sistema pode oferecer, entretanto, as informações perdidas na passagem do *nível de escala dos constituintes essenciais* para o *nível de escala dos elementos de fluido* não podem ser, de modo algum, resgatadas, por mais fina que seja a grade de pontos usada na resolução.

Desta maneira, pode-se notar que há um certo controle sobre as informações que são perdidas no nivelamento da discretização, no sentido de que mais informações podem ser captadas através da resolução do modelo com uma grade de pontos mais fina. Entretanto, o mesmo não ocorre com o nivelamento da modelagem, visto que os fenômenos físicos ignorados nesta etapa não poderão mais ser percebidos na solução posterior do problema. Isso implica que, caso se deseje recuperar informações da realidade perdidas durante a elaboração de um dado modelo, deve-se, forçosamente, abandonar o modelo antigo e elaborar um novo modelo, mais realístico, que contenha intrinsecamente as informações desejadas sobre o sistema físico.

3.3 Diagrama da Modelagem

Uma das importantes e convenientes características inerentes à abordagem da Simulação Orientada a Objeto (SOO) é a modularidade. Neste sentido, ocorre que o modelo da simulação orientada a objeto do transporte pneumático, como um todo, é composto por sub-modelos, os quais, por sua vez podem conter sub-modelos internos.

A propriedade de modularidade associada à interdependência restrita e planejada entre os diversos sub-modelos internos permite a modificação, otimização ou até a substituição isolada de um modelo específico, sem incorrer no risco de danificar ou alterar indevidamente a performance do demais.

Como pode ser visto na Figura 4, o modelo do transporte pneumático é primariamente ramificado na modelagem da movimentação das partículas e no modelo de escoamento do fluido. Estes, por sua vez, são constituídos por outros sub-modelos encarregados de fenômenos físicos e dinâmicos específicos, como, por exemplo, as interações partícula-partícula, o acoplamento bidirecional sólido-fluido e a turbulência.

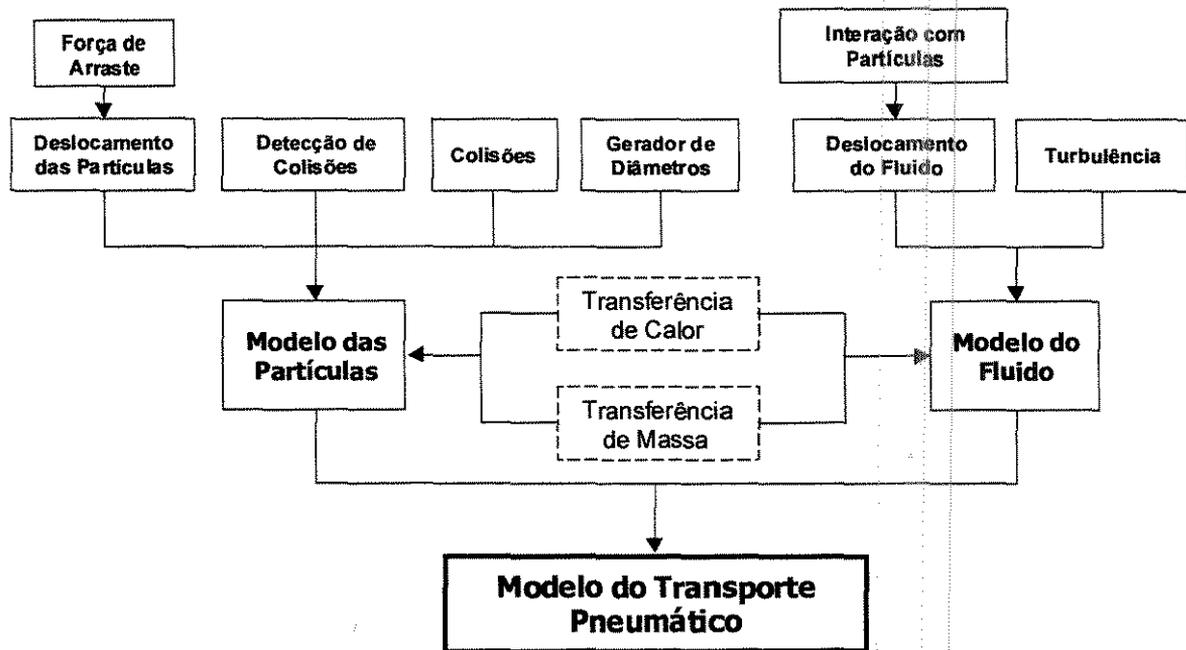


Figura 4: Diagrama esquemático de modelagem da simulação orientada a objeto do transporte pneumático.

Os blocos correspondentes aos modelos de transferência de calor e massa estão identificados de maneira diferenciada, pois, embora não estejam atualmente desenvolvidos, se constituem em uma extensão natural para incorporação subsequente ao modelo.

3.4 Movimentação das Partículas

A base física utilizada para movimentar as partículas é a 2ª lei de Newton, tal qual foi proposta pelo seu elaborador, ou seja sem qualquer simplificação. Por este motivo, o movimento de translação das partículas no fluido é severamente realístico, tendo características tridimensionais e atuação de força centrífuga em relação a qualquer eixo de referência. A equação que rege o movimento de cada partícula individualmente é:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\vec{F}_R}{m_p} \quad (40)$$

e o seu deslocamento é descrito por

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v}, \quad (41)$$

onde \vec{F}_R é a força resultante sobre a partícula a cada instante de tempo. Esta força resultante é a combinação da força de arraste do fluido com o empuxo e outras forças de campo e de superfície que possam atuar sobre a partícula.

Considerando que a equação (40) é completamente geral, sendo válida para qualquer sistema dinâmico – excetuando-se argumentos relativísticos – é surpreendente a sua simplicidade. Note-se que uma implicação direta de (40) é que o movimento de uma partícula não depende de $d^2\vec{v}/dt^2$ ou de derivadas superiores da velocidade. A possibilidade de explicar o movimento com uma relação de tamanha simplicidade é uma propriedade da natureza, e não da matemática em si.

Na ausência de efeitos de campos magnéticos e elétricos, a única força de campo a considerar é a força peso devido à aceleração da gravidade. Portanto, podemos escrever \vec{F}_R como segue:

$$\vec{F}_R = \vec{F}_D + \vec{F}_C. \quad (42)$$

Note que não há necessidade de se tentar modelar a força centrífuga, nem tampouco a força de coriolis, de maneira explícita nesta equação, pois a 2ª lei de Newton tal qual escrita na forma geral da equação (40) já incorpora os efeitos de força centrífuga e da força de coriolis. Isto pode ser facilmente verificado através do aparecimento dos termos de aceleração correspondentes a estas duas forças quando escreve-se a 2ª lei de Newton em um sistema de coordenadas curvilíneas.

A contribuição do empuxo e das forças de campo é dada por:

$$\vec{F}_C = \frac{m_p(\rho_p - \rho_f)}{\rho_p} \vec{g}, \quad (43)$$

e a força de arraste gerada pelo fluido é calculada pela equação vetorial a seguir:

$$\vec{F}_D = C_D \frac{\pi d_p^2 \rho_f}{8} |\vec{u} - \vec{v}| (\vec{u} - \vec{v}). \quad (44)$$

Segundo Adewumi & Arastoopour (1986), podemos obter o coeficiente de arraste em duas faixas a partir da correlação:

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + \frac{Re_p^{\frac{2}{3}}}{6} \right); \quad Re_p < 1000,$$

$$C_D = 0,44; \quad Re_p \geq 1000,$$

onde Re_p é o número de Reynolds para uma partícula, definido pela equação:

$$Re_p = \frac{\rho_p |\vec{u} - \vec{v}| d_p}{\mu}. \quad (45)$$

É pertinente salientar que não é imperativo o uso de uma correlação para o cálculo do coeficiente de arraste sobre a partícula. Na verdade, o modelo proposto neste trabalho é aberto, no sentido de que qualquer técnica viável para calcular a força do fluido sobre a partícula pode ser utilizada. Atualmente, já estão disponíveis na literatura de fluidodinâmica computacional modelos numéricos capazes de calcular a força exercida por um fluido escoando em torno de um objeto, tais como uma asa de jato ou, mais simplesmente, cilindros ou esferas. Não há dúvida de que estes esquemas numéricos podem ser mais exatos/precisos do que uma correlação empírica, no entanto o tempo computacional requerido para calcular a força de arraste para cada partícula e em cada passo de tempo seria proibitivo. Pode-se notar, portanto, que o uso de técnicas mais refinadas no cálculo de parâmetros do modelo proposto é limitada pelo poder computacional disponível. Isto indica que acréscimos ao presente modelo podem ser feitos em paralelo com a evolução dos computadores.

3.4.1 Método de Resolução da 2ª Lei de Newton

A descrição do movimento das partículas requer a resolução simultânea de um sistema de duas equações diferenciais de 1ª ordem composto por (40) e (41). A resolução deste sistema de equações fornece a posição e a velocidade da partícula como funções do tempo.

A resolução numérica da equação da 2ª lei de Newton pode ser conseguida por vários algoritmos que a discretizam usando um passo de tempo finito Δt . Apesar das diferenças de precisão e estabilidade, todos estes métodos de discretização se reduzem à equação diferencial no limite $\Delta t \rightarrow 0$. Uma discussão sobre métodos computacionais envolvendo as leis do movimento de Newton pode ser encontrada em Eubank et. alii (1989).

O algoritmo de resolução mais simples é o método de Euler, que fornece uma aproximação de primeira ordem para a posição e velocidade. Apesar do pouco esforço computacional demandado por este procedimento, a geração de soluções de baixa precisão ou até instáveis tornam o seu uso não recomendado em muitas aplicações. Por este motivo, a opção, neste trabalho, será feita por um método de ordem superior. Aplicando uma discretização por diferença central explícita, obtém-se as equações:

$$\bar{x}_{k+1} = \bar{x}_k + \bar{v}_k \Delta t + \frac{1}{2} \bar{a}_k \Delta t^2, \quad (46)$$

$$\bar{v}_{k+1} = \bar{v}_k + \frac{1}{2} (\bar{a}_{k+1} + \bar{a}_k) \Delta t. \quad (47)$$

Pode-se notar que estas equações fornecem precisão de segunda ordem na posição e primeira ordem na velocidade. Este esquema numérico é denominado explícito, pois o cálculo da posição e velocidade da partícula no nível de tempo $k+1$ requer apenas o

conhecimento destes valores no nível de tempo anterior. Isto implica que a resolução das equações diferenciais segue um processo de marcha que avança progressivamente no tempo. Com base no que fora exposto, portanto, todo o processo de deslocamento das partículas é realizado de modo iterativo no tempo seguindo uma formulação explícita de marcha. Tendo-se calculado a velocidade da partícula no nível de tempo k , pode-se obter a sua nova posição em $k+1$ a partir da equação da trajetória (46).

Como pode ser verificado, o cálculo da trajetória das partículas requer o conhecimento da velocidade do fluido a cada passo de tempo. Este fato precipita que é necessário calcular o campo de velocidades transiente da fase gasosa antes que sejam determinadas a posição e velocidade de cada partícula no novo nível de tempo.

Esta abordagem pode ser considerada como uma extensão do típico conceito lagrangiano para a simulação de sistemas dispersos, o qual tem sido atestado em diversos trabalhos publicados na literatura como Crowe & Pratt (1972), Kitron et. alii (1990), Crowe et. alii (1977). Alguns autores (Durst et. alii, 1984) consideram que os precursores da abordagem lagrangiana foram Migdal e Agosta em 1967 (Migdal & Agosta, 1967).

3.5 Modelagem do escoamento do fluido

A modelagem do transporte pneumático é um problema multifacetado que deve ser atacado cautelosamente por dois flancos. De um lado, é preciso modelar a fase particulada, com todas as características típicas da sua natureza discreta, cuja representação pela matemática do *continuum* resulta em equações diferenciais parabólicas. De outro, deve-se descrever o comportamento da fase gasosa, que, por sua vez, possui natureza contínua e equações diferenciais elípticas, devido à pequena dimensão dos seus constituintes essenciais que são as moléculas do gás.

3.5.1 Considerações Gerais

O nível de aproximação de espaço usado na modelagem do fluido será pseudo-bidimensional, contemplando a velocidade na direção axial e a sua variação na direção radial. Esta abordagem representa com relativa fidelidade a física do escoamento do fluido num equipamento de transporte pneumático, o qual, de fato, tem características matemáticas parabólicas na direção axial e velocidade radial desprezível. Deve-se constatar que o modelo pseudo-bidimensional proíbe a recirculação do fluido, no entanto, esta não é uma restrição importante para o transporte pneumático, onde a recirculação das partículas desempenha papel mais fundamental.

No modelo de fluido apresentado a seguir, considera-se que o fluido escoando no interior do tubo de transporte pneumático é dividido em cubóides dotados da capacidade de se mover na direção axial. Estes cubóides de fluido são, de fato, volumes ou elementos¹⁴ de fluido móveis. Tal abordagem na modelagem do fluido é, de certo modo, análoga à

¹⁴ Os termos "volumes" ou "elementos" de fluido são usados alternativamente ao longo do texto quando conveniente.

modelagem das partículas, visto que os volumes de fluido também são tratados como objetos na abstração do modelo, sendo dotados de propriedades e mecanismos capazes de alterar seu estado dinâmico. Visto que as interações e a movimentação dos volumes de fluido seguem uma marcha progressiva no tempo, fica evidente, também, que trata-se de um modelo dinâmico transiente. Contudo, deve-se notar que a dinâmica dos volumes de fluido móveis é sensivelmente mais simplificada e restrita do que a dinâmica das partículas, a qual tem sua abrangência garantida pela aplicação da forma geral da lei do movimento de Newton.

Semelhantemente ao modelo da fase dispersa, o movimento dos volumes de fluido é realizado com base na aplicação direta da 2ª lei de Newton na direção axial. Portanto, é necessário calcular, a cada iteração, a força resultante sobre cada volume de fluido, de maneira a determinar a sua aceleração. De posse da aceleração, calcula-se o deslocamento e o trabalho dissipativo realizado sobre o volume de fluido. O conhecimento do trabalho dissipativo permite a correção da pressão dos volumes de fluido, sendo esta atualização da pressão que produz o perfil axial de pressão ao longo do tubo de transporte, como mostrado em seção posterior.

3.5.2 Hipóteses do Modelo

A aplicação dos volumes de fluido móveis no escoamento causa automaticamente a verificação da conservação da massa, uma vez que o número de volumes de fluido não é alterado ao longo do tempo no interior do equipamento. Assumindo-se a hipótese de escoamento incompressível, que é plenamente plausível em escoamentos subsônicos, ocorre que o volume e a massa dos elementos de fluido são mantidos constantes.

Portanto as hipóteses básicas assumidas neste modelo são:

- 1) Escoamento pseudo-bidimensional;
- 2) Escoamento incompressível;
- 3) Escoamento isotérmico sem transferência de massa entre as fases discreta e contínua.

3.5.3 Considerações Geométricas

A relativa simplicidade da geometria cilíndrica, permite o reconhecimento de pilhas ou colunas de volumes de fluido, as quais são compostas pelos volumes de fluido consecutivos na direção axial. Esta verificação é relevante, devido ao fato de que, como não há gradiente de velocidade na direção axial, todos os volumes de fluido constituintes de uma dada coluna têm, a todo instante, a mesma aceleração e velocidade. A consequência disto é que os volumes de fluido pertencentes a uma mesma coluna sofrem o mesmo deslocamento a cada iteração no tempo. A geometria cilíndrica sem variação da seção reta do escoamento é de importância fundamental neste modelo, uma vez que a abstração dos volumes de fluido móveis aqui proposta desenvolve apenas trajetórias retilíneas, característica coerente para um modelo pseudo-bidimensional. A aplicação da metodologia

aqui exposta para o caso bidimensional requer que seja elaborada uma extensão do modelo, o que não é o objetivo imediato, ficando como proposta de trabalhos posteriores.

3.5.4 Balanço de Forças

3.5.4.1 Forças Atuantes Sobre o Volume de Fluido

Em cada elemento de fluido, atuam forças tangenciais na direção axial, geradas pelas tensões cisalhantes provocadas por elementos de fluido adjacentes, a força peso e as forças normais geradas pelo gradiente de pressão. Além disso, se houver partículas sendo arrastadas pelo fluido, origina-se uma força adicional correspondente à reação da própria força de arraste exercida pelo fluido, tal qual previsto pela 3ª lei de Newton. Deste modo, assim como cada partícula sofre um impulso que lhe é fornecido pelo elemento de fluido que a contém, tal elemento de fluido também sofre uma força simétrica ao somatório de todas as forças de arraste por ele exercidas. Esta reação da força de arraste corresponde justamente ao termo de interação sólido-fluido, de maneira que a sua incorporação ao modelo proporciona o mecanismo fundamental necessário à simulação dos efeitos que o movimento das partículas causam no perfil de escoamento do fluido. Consequentemente, serão contempladas as seguintes forças relacionadas ao fluido:

- Forças Tangenciais

$$\sigma_{rz(e)}A_{(e)} + \sigma_{rz(w)}A_{(w)};$$

- Força Peso

$$-\rho V g_z;$$

- Força de Interação Sólido-Fluido

$$-F_{p_z}.$$

Neste ponto, cabem alguns comentários sobre a força de interação sólido-fluido representada por F_{p_z} . Este termo é obtido pela soma das forças de arraste sobre cada uma das partículas no interior do elemento de fluido. Assim sendo, cada elemento de fluido deve ter o seu termo de interação avaliado a cada passo de tempo durante a resolução do modelo.

Conforme mencionado por Durst et. alii (1984), alguns autores como Sharma (1977) e Crowe et alii (1977) definem o termo de interação como sendo o somatório da variação líquida do *momentum* das partículas ao atravessarem uma determinada célula. Em virtude da transferência de *momentum* sólido-fluido ocorrer fundamentalmente através da força de arraste, tal definição pode levar a uma resolução errônea das equações do escoamento. De fato, pode-se facilmente perceber isto considerando que uma partícula que tenha atingido a sua velocidade terminal no escoamento terá uma variação líquida de *momentum* nula, entretanto, ainda assim, haveria uma transferência de energia mecânica do campo gravitacional para as partículas e das partículas para o fluido através da força de arraste exercida pelo fluido.

Portanto a força exercida sobre o elemento de fluido de índices (i,j) , considerando-se o efeito da presença de partículas, é dada por:

$$F_{z(i,j)} = \sigma_{rz(e)} A_{(i,j)(e)} + \sigma_{rz(w)} A_{(i,j)(w)} - \rho V_{(i,j)} g_z - F_{p_z} \quad (48)$$

A força resultante sobre uma coluna de elementos de fluido j , considerando as forças de pressão, é escrita como:

$$R_{z(j)} = A_{(s)} \Delta P + \sum_{i=1}^I F_{z(i,j)}, \quad (49)$$

então a aceleração sobre a coluna de fluido é avaliada pela seguinte equação:

$$a_{z(j)} = \frac{R_{z(j)}}{\rho \sum_{i=1}^I V_{(i,j)}} \quad (50)$$

A inspeção imediata das equações (48) a (50) deixa claro que quanto mais partículas estiverem contidas no elemento de fluido, maior será a inércia ao movimento, tornando a coluna de fluido mais “pesada” e, conseqüentemente, mais lenta quando tem-se um movimento ascendente.

3.5.4.2 Avaliação das Tensões

O cálculo das tensões cisalhantes atuantes sobre as faces dos cubóides de fluido é realizado pelas equações discretizadas mostradas a seguir:

$$\sigma_{rz(i,j)(e)} = \mu_{ef} \frac{u_{z(i,j)} - u_{z(i,j-1)}}{r_{(i,j)} - r_{(i,j-1)}}, \quad (51)$$

$$\sigma_{rz(i,j)(w)} = \mu_{ef} \frac{u_{z(i,j+1)} - u_{z(i,j)}}{r_{(i,j+1)} - r_{(i,j)}}, \quad (52)$$

onde μ_{ef} é a viscosidade efetiva obtida na seguinte forma:

$$\mu_{ef} = \mu + \mu_T \quad (53)$$

3.5.4.3 Deslocamento e Atualização da Velocidade

A movimentação e a variação da velocidade dos elementos de fluido são realizados pelo mesmo esquema numérico aplicado na dinâmica das partículas, com a diferença de que, neste caso, considera-se apenas a direção axial. Por conseguinte, a posição e a velocidade dos elementos de fluido são atualizados a cada iteração pela equações:

$$z_{k+1} = z_k + u_{z,k} \Delta t + \frac{1}{2} a_{z,k} \Delta t^2, \quad (54)$$

$$u_{z,k+1} = u_{z,k} + \frac{1}{2} (a_{z,k+1} + a_{z,k}) \Delta t. \quad (55)$$

3.5.4.4 Trabalho Dissipativo

O trabalho dissipativo sobre cada elemento de fluido é fornecido na forma seguinte:

$$W_{(i,j)} = F_{z(i,j)} \Delta Z. \quad (56)$$

3.5.4.5 Correção da Pressão

A equação de correção da pressão é obtida diretamente da 1ª lei da termodinâmica escrita para um escoamento isotérmico, na forma:

$$P_{k+1} = P_k + \frac{W_{(i,j)}}{V_{(i,j)}}. \quad (57)$$

3.5.5 Discretização do Campo de Escoamento do Fluido – Grade do Fluido

A utilização de elementos discretos para representar o fluido implica necessariamente na discretização do campo de escoamento. Neste sentido, o equipamento por onde passa o fluido deve ser subdividido em células espaciais de tamanho e dimensões definidos. São justamente estas células de fluido as responsáveis pela mobilidade dos elementos de fluido, os quais escoam pelo seu interior passando de célula em célula desde a entrada até a saída do equipamento de transporte.

Na abstração computacional do modelo, a representação das colunas de fluido, mencionadas anteriormente, é a própria coluna de células de fluido. Uma coluna de células de fluido é análoga a um duto virtual com a função de conduzir os elementos de fluido na sua trajetória retilínea e realizar as interações dinâmicas entre elementos de fluido adjacentes. No que se refere ao algoritmo de resolução do modelo, as células de fluido têm

a função de permitir o acesso rápido aos elementos de fluido por meio da sua estrutura matricial.

A experiência mostra que a resolução acurada dos modelos da fluidodinâmica computacional está intimamente ligada à estrutura da grade ou malha de discretização. Via de regra, uma grade mais refinada fornece resultados mais precisos/exatos e favorecem a estabilidade¹⁵ do algoritmo de resolução. O fator determinante para o refinamento da grade é o gradiente de alguma propriedade dinâmica relevante. Na modelagem de escoamentos, o gradiente da velocidade é o principal parâmetro de refinamento, de modo que, tratando-se de uma grade regular (ou uniforme), toda a estrutura precisa ser fina o suficiente para comportar os maiores valores do gradiente de velocidades. Contudo, ao invés de refinar toda a grade, sobrecarregando a solução computacional, tem-se uma segunda alternativa de refiná-la localmente nas regiões de maior gradiente, compondo uma grade irregular (ou não-uniforme).

3.5.5.1 Estrutura da Grade do Fluido

Com a finalidade de permitir maiores possibilidades quanto à qualidade da solução, optou-se, no presente modelo, pela construção de uma grade não-uniforme. Tal característica permite a regulagem do espaçamento da grade, de maneira a estreitá-la nas zonas onde o gradiente de velocidade for mais elevado. Tipicamente, nos modelos de escoamento viscosos, o princípio da aderência – adotado como condição de contorno na parede – faz com que a maior variação da velocidade ocorra nas zonas laminar e tampão do escoamento, correspondendo justamente à regiões mais próximas da fronteira sólida.

Devido ao fato deste ser um modelo de escoamento pseudo-bidimensional, é pertinente considerar apenas a variação da velocidade axial em relação à coordenada radial. Assim sendo, uma grade não-uniforme compatível com esta configuração teria as características de ser bidimensional, segmentada uniformemente na direção axial e não-uniformemente na direção radial. A segmentação axial tem a função prioritária de permitir a determinação do perfil de propriedades que variam axialmente, como é o caso da pressão.

3.5.5.2 Segmentação Não-Uniforme Convencional

A técnica tradicionalmente aplicada na obtenção de uma grade não-uniforme consiste na segmentação de um comprimento finito em algum eixo coordenado por meio de um esquema recursivo baseado em um fator de progressão. Segundo este método, para subdividir um comprimento, definem-se dois parâmetros de entrada, os quais são o comprimento do primeiro intervalo ΔL_0 e o fator de progressão f . Conhecendo-se estes valores, os intervalos subsequentes são obtidos do produto do intervalo anterior pelo fator de progressão, ou seja:

¹⁵ Em alguns sistemas, o refinamento excessivo da grade pode reduzir a estabilidade, levando à divergência do processo de resolução.

$$\Delta L_{j+1} = \Delta L_j f. \quad (58)$$

A Figura 5 mostra esquematicamente a segmentação espacial de uma distância arbitrária na obtenção de uma grade não-uniforme.

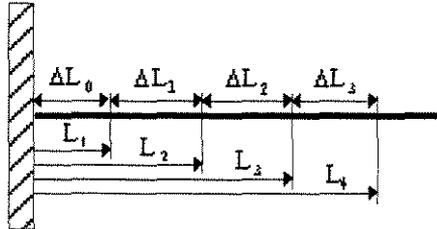


Figura 5: Esquema ilustrativo de segmentação espacial para composição de grade não-uniforme.

Observando a Figura 5, juntamente com a equação (58), pode-se demonstrar que a seqüência de intervalos ΔL_j é dada na forma

$$\Delta L_j = \Delta L_0 f^j, \quad (59)$$

de modo que a seqüência de posições L_i pode ser calculada pela equação seguinte:

$$L_i = \Delta L_0 \sum_{j=0}^{i-1} f^j. \quad (60)$$

Uma propriedade relevante deste método de segmentação é que, em geral, o último ponto da malha não coincide exatamente com o extremo do domínio discretizado. Em outras palavras, se a distância total discretizada L for dividida em um número I de intervalos, nem sempre a condição de fechamento da malha será verificada, a qual é representada pela equação seguinte:

$$L = L_I. \quad (61)$$

Para que a condição de fechamento seja verificada, pode-se ajustar os parâmetros f e/ou ΔL_0 ou até o número de intervalos I , os quais conferem três graus de liberdade à criação da grade. Deste modo, substituindo (60) na condição de fechamento (61) e fazendo $i = I$, consegue-se:

$$\frac{L}{\Delta L_0} = \sum_{j=0}^{I-1} f^j. \quad (62)$$

Portanto, a fim de que se obtenha uma grade fechada, pode-se arbitrar convenientemente dois dos parâmetros (f , ΔL_0 , I) e resolver a equação (62) para o parâmetro livre¹⁶.

A equação (60) é bastante adequada para modelos de escoamento de fluidos puros e tem sido utilizada intensivamente. Todavia, para a conjuntura do presente modelo de transporte, é proposto considerar não apenas o escoamento do fluido, mas também o movimento das partículas, assim como as interações dinâmicas entre estas duas fases. O *modus operandi* da interação entre as fases dispersa e contínua será discutido em mais detalhes posteriormente, entretanto pode-se adiantar que, em certa etapa do algoritmo, é preciso obter os índices da célula de fluido onde cada partícula se encontra. Uma maneira pouco eficiente de fazer isto é varrer célula por célula de fluido e verificar se as coordenadas espaciais da cada partícula representam um ponto no interior da célula; em caso afirmativo os índices da célula de fluido são recuperados. Esta abordagem pode ser implementada sem muitas dificuldades, e teria funcionalidade garantida, porém não se pode dizer o mesmo quanto à sua eficiência. Em verdade, é desejável que se possa calcular os índices da célula onde se encontra uma partícula de modo mais direto, sem necessitar varrer toda a matriz de células de fluido.

Uma possível solução para o problema seria seguir o caminho reverso da geração da grade, ou seja, utilizar a equação de segmentação para fornecer o índice do intervalo conhecendo-se a posição. Nesta perspectiva, deve-se resolver a equação (60) para obter o valor de “ i ” a partir das demais variáveis. Visto que “ i ” é o limite superior do somatório, recai-se em um processo iterativo de solução. Devido às mesmas questões de otimização no uso do tempo computacional, refuta-se esta alternativa, propondo-se uma metodologia mais direta na obtenção dos índices das células de fluido.

3.5.5.3 Segmentação Não-Uniforme Funcional

A segmentação funcional é uma tentativa de resolução do problema da obtenção direta dos índices da célula de fluido onde se localiza uma partícula. Para isso, propõe-se a criação de uma fórmula de segmentação espacial, capaz de ser facilmente invertida para fornecer o índice a partir da posição conhecida.

Considere que uma equação geral de segmentação pode ser escrita na forma:

$$L_i = L(i) = iP \quad i = 0, \dots, I; \quad (63)$$

onde I é o número de intervalos e P é o passo da discretização – o comprimento de cada intervalo – e pode ser considerado como uma função do índice i , $P = P(i)$.

Em uma malha uniforme, o valor de P é constante, de modo que o comprimento total a ser discretizado L fica subdividido em I intervalos iguais, como pode ser verificado pela equação (63). Conseqüentemente, esta constatação denota que a grade regular é apenas

¹⁶ Note-se que, decorrente do fato do número de intervalos I ser necessariamente inteiro, o seu ajuste como parâmetro livre fica limitado, requerendo uma reavaliação iterativa de f ou ΔL_0 .

um caso especial quando P é função constante. Em contrapartida, numa grade irregular, tem-se que o passo de discretização P não é constante. Logo, a criação de uma malha não-uniforme consiste simplesmente na escolha de uma forma funcional para $P = P(i)$.

A priori, a única restrição a $P(i)$ é que seja uma função sempre positiva. Entretanto, a sua escolha deve ser tal que a função de segmentação decorrente $L(i)$ tenha um comportamento monotonicamente crescente com o índice i – a fim de evitar o entrelaçamento de pontos da malha. Em termos matemáticos, isto significa exigir que a derivada de $L(i)$ seja sempre positiva, ou seja:

$$\frac{\partial L(i)}{\partial i} > 0. \quad (64)$$

Por outro lado, a taxa de diminuição (malha decrescente) ou crescimento (malha crescente¹⁷) do tamanho dos intervalos discretos com o índice i é determinada pela segunda derivada da função de segmentação. Uma segunda derivada negativa produz uma malha decrescente, ao passo que quando a segunda derivada é positiva, a malha é necessariamente crescente. Portanto, pode-se escrever:

$$- \text{ grade decrescente: } \frac{\partial^2 L(i)}{\partial i^2} < 0; \quad (65)$$

$$- \text{ grade crescente: } \frac{\partial^2 L(i)}{\partial i^2} > 0. \quad (66)$$

Quanto à condição de fechamento da malha, na segmentação funcional, esta é verificada quando a posição correspondente ao último intervalo coincide com o extremo do comprimento discretizado, ou seja:

$$L = IP(I). \quad (67)$$

Com base no que fora exposto, nota-se que a liberdade para a escolha da função de discretização $P = P(i)$ é praticamente total, de maneira a ajustar convenientemente a forma e o refinamento da grade. Neste trabalho, foram estudados dois tipos especiais de discretização funcional, os quais serão discutidos adiante.

¹⁷ Em uma grade crescente, os segmentos discretizados consecutivos aumentam de comprimento progressivamente, ao passo que, numa grade decrescente, o tamanho dos segmentos diminui.

3.5.5.3.1 Função Linear

A função de discretização linear é representada por $P(i) = \alpha i$, de modo que, substituindo-se em (63), consegue-se a seguinte equação de segmentação:

$$L_i = L(i) = \alpha i^2. \quad (68)$$

A equação (68) é uma função quadrática contendo apenas o termo de segunda ordem, indicando que a adoção de uma função linear para $P(i)$ conduz a uma grade de progressão quadrática. O parâmetro α deve ser ajustado, a fim de que a condição de fechamento da malha seja atendida. Assim, aplicando-se a equação (67) e rearranjando, vem que:

$$\alpha = \frac{L}{I^2}. \quad (69)$$

A equação (69) mostra que, uma vez atribuídos o comprimento a ser discretizado L e o número de pontos I , não há mais qualquer grau de liberdade para ajustar o parâmetro α , o qual já fica automaticamente definido.

Por conseguinte, em razão dos resultados anteriores, conclui-se que uma grade fechada para a função de discretização linear é fornecida pela seguinte equação:

$$L_i = \frac{L}{I^2} i^2. \quad (70)$$

3.5.5.3.2 Função Afim

A função de discretização afim é representada por $P(i) = \alpha i + \beta$, de modo que, substituindo-se em (63), consegue-se a seguinte equação de segmentação:

$$L_i = L(i) = \alpha i^2 + \beta i. \quad (71)$$

Como da vez anterior, a escolha de uma função de discretização de primeira ordem, propicia uma função de segmentação de segunda ordem, entretanto, neste caso, são dois os parâmetros que podem ser ajustados para atender a condição de fechamento da malha. Aplicando o critério de fechamento (67) na equação (71) e resolvendo para α vem que:

$$\alpha = \frac{L - \beta I}{I^2}. \quad (72)$$

Pela equação (72), percebe-se que, uma vez determinados L e I , resta o parâmetro β , o qual representa um grau de liberdade que pode ser ajustado para calcular o valor de α .

3.5.5.3.2.1 Análise dos Parâmetros

Como visto, a escolha da função de discretização $P = P(i)$ é livre desde que a função de segmentação decorrente $L(i)$ atenda ao critério definido pela equação (64). Assim sendo, partindo de (71) podemos escrever que:

$$\frac{\partial L(i)}{\partial i} = 2\alpha i + \beta > 0 \quad \therefore \beta > -2\alpha i. \quad (73)$$

O critério (73) deve ser verificado para todo $i = 0, \dots, I$, de modo que é suficiente atender às seguintes condições:

- $\beta > 0$, se $\alpha > 0$;
- $\beta > -2\alpha I$, se $\alpha < 0$.

(74)

A estrutura da malha é definida pela segunda derivada da função de segmentação, de acordo com as equações (65) e (66). Deste modo, faz-se

$$\frac{\partial^2 L(i)}{\partial i^2} = 2\alpha, \quad (75)$$

donde pode-se extrair as seguintes conclusões quanto à estrutura da malha:

- $\alpha < 0 \Rightarrow$ malha decrescente;
- $\alpha = 0 \Rightarrow$ malha uniforme;
- $\alpha > 0 \Rightarrow$ malha crescente.

Uma análise mais detalhada da equação de segmentação (71) mostra que β influencia o passo inicial da discretização, ou seja: $\beta \equiv \Delta L_0$. Por sua vez, o parâmetro α controla o espaçamento da malha, determinando se a grade terá uma estrutura crescente ou decrescente, como fora mencionado. Por esta análise, consegue-se que a dependência da estrutura da malha com os parâmetros α e β pode ser sintetizada como abaixo:

- malha decrescente: $\alpha < 0 \Rightarrow \beta > \frac{L}{I}$;
- malha regular: $\alpha = 0 \Rightarrow \beta = \frac{L}{I}$;
- malha crescente: $\alpha > 0 \Rightarrow \beta < \frac{L}{I}$.

3.5.5.3.2.2 Localização de Células em Grade Não-Uniforme – Função Afim

Contrastando com o método convencional, na segmentação funcional, pode-se determinar sem grandes dificuldades em que célula se localiza um ponto qualquer. Isso é feito a partir da função de segmentação $L(i)$ resolvida para o índice i . Embora, em primeira instância, a resolução de $L(i)$ sempre possa ser realizada – ainda que por meio de processos iterativos – deve-se tentar construir uma função de segmentação que permita a solução direta na variável i .

No caso da função de discretização afim, mencionada na seção anterior, a função de segmentação (71) pode ser rescrita como:

$$X = \alpha i^2 + \beta i, \quad (76)$$

onde X é a coordenada conhecida. Resolvendo (76) para o índice i , consegue-se que:

$$i = \frac{-\beta \pm \sqrt{\beta^2 + 4\alpha X}}{2\alpha}. \quad (77)$$

Portanto, o índice i da célula correspondente ao ponto X é obtido como sendo a parte inteira da menor raiz positiva da equação (77).

Conforme apresentado, a obtenção do índice da célula torna-se uma simples questão de calcular as duas raízes de (77) e compará-las, posteriormente, para aferir qual delas é a menor. Entretanto, com vistas à otimização, algum tempo computacional pode ser poupado por meio da racionalização na solução da equação (77). Por conseguinte, avaliando os parâmetros α e β – levando em conta que $\beta > 0$ e $X \geq 0$ – verifica-se que:

- Se $\alpha < 0$, então $|\beta| > \sqrt{\beta^2 + 4\alpha X}$, de maneira que prevalecerá o sinal de $-\beta$ e o menor numerador é conseguido com o termo $+\sqrt{\beta^2 + 4\alpha X}$; assim a menor raiz positiva é calculada diretamente de $i = \frac{-\beta + \sqrt{\beta^2 + 4\alpha X}}{2\alpha}$;
- Se $\alpha = 0$, a estrutura regular da grade permite obter o índice diretamente de $i = \frac{X}{\beta}$;
- Se $\alpha > 0$, então $|\beta| < \sqrt{\beta^2 + 4\alpha X}$, de maneira que prevalecerá o sinal de $\sqrt{\beta^2 + 4\alpha X}$ e o menor numerador é conseguido, também, com o termo

$$+ \sqrt{\beta^2 + 4\alpha X}; \text{ assim a menor raiz positiva é calculada da mesma forma por}$$

$$i = \frac{-\beta + \sqrt{\beta^2 + 4\alpha X}}{2\alpha}.$$

Portanto, através de uma análise preliminar dos parâmetros, conclui-se que não é preciso, de fato, calcular as duas raízes.

3.6 Modelagem da Turbulência

Devido à grande importância prática dos escoamentos turbulentos, grande esforço tem sido despendido para aumentar a compreensão e a capacidade de previsão deste fenômeno. Os métodos computacionais utilizados na resolução de equações diferenciais da fluidodinâmica estão em estado avançado, sendo possível atualmente resolver escoamentos tridimensionais e transientes em supercomputadores, ou escoamentos mais simplificados em máquinas menores, como um computador pessoal.

A necessidade de se modelar a turbulência surge com a utilização das equações de Navier-Stokes na forma do nivelamento de Reynolds. Como as formas nivelada e não nivelada das equações de Navier-Stokes podem ser inter-convertidas entre si, conclui-se que as duas formas são completamente equivalentes. Contudo, as equações do movimento niveladas não podem ser usadas sem o auxílio de informação adicional. Este requerimento de informação extra para resolver o escoamento é o chamado *problema de fechamento* da turbulência, o qual advém do aparecimento de um termo adicional à equação do movimento, que é o tensor de Reynolds. Para resolver o problema de fechamento, é preciso relacionar o tensor de Reynolds com as variáveis médias do escoamento, e tal laço é realizado pelo uso de um modelo de turbulência.

Uma grande quantidade de modelos de turbulência foi proposta, variando desde modelos algébricos – os mais simples – até modelos de segunda ordem, capazes de representar cada componente do tensor de Reynolds. Os modelos de turbulência são comumente classificados pelo número de equações diferenciais de transporte utilizadas para as quantidades turbulentas. Nesta classificação, os modelos algébricos são também denominados de a zero-equação, enquanto que os modelos de primeira ordem podem ser a uma-equação ou a duas-equações.

O modelo algébrico mais correntemente usado é fundamentado no modelo de duas camadas desenvolvido por Cebeci & Smith (1974) para aplicações de camada limite. Baldwin & Lomax (1978) modificaram este modelo e o estenderam para simulações usando as próprias equações de Navier-Stokes.

Dentre os vários modelos propostos, os mais populares por sua eficácia e relativa simplicidade são os modelos a duas-equações, a exemplo dos modelos $k-\epsilon$, $k-k\epsilon$ e $k-\omega$, sendo que o $k-\epsilon$ mostra-se de mais ampla aplicação e é o mais recomendado por Launder & Spalding (1974), os quais fizeram uma análise de suas aplicações. Os modelos de turbulência têm sido revistos e testados em aplicações práticas com regularidade por

vários autores e uma vasta literatura está disponível, dentre os quais: Frost & Molden (1977), Rodi (1982), Patel et alii (1985).

Os modelos de turbulência parecem realmente ser a escolha mais viável na atualidade para prever os escoamentos turbulentos. Entretanto estes modelos não são a única alternativa. Conforme ressaltado anteriormente, a equação do movimento tridimensional transiente contém toda a física necessária à descrição de qualquer escoamento. O problema é: como resolvê-la? Apesar de todo o avanço de hardware e software, a resolução numérica de escoamentos turbulentos usando apenas as equações de Navier-Stokes é tarefa árdua e quase impossível na maioria dos casos, mesmo nos dias atuais. A simulação da turbulência pelo uso direto da equação do movimento tridimensional e transiente é denominada de *Simulação Numérica Direta* (DNS), sendo que a DNS só é passível de aplicação prática em escoamentos com baixo número de Reynolds. O custo envolvido na aplicação das técnicas de DNS para Reynolds elevados torna geralmente o seu uso proibitivo. A despeito da dificuldade apresentada, pesquisadores têm dedicado grande esforço na tentativa de viabilizar a resolução direta das equações, e, de fato, progressos animadores foram alcançados. Talvez, uma das primeiras realizações neste sentido tenha sido a décadas atrás quando Oszag & Patterson (1972) implementaram a simulação direta da turbulência homogênea isotrópica numa grade tridimensional de $32^3=32.768$ pontos. A partir desta época, muitos outros trabalhos foram desenvolvidos em várias frentes de pesquisa. Visto que computadores mais modernos com velocidade e capacidade de memória superiores estão se tornando disponíveis a cada ciclo da indústria da informática, as perspectivas de desenvolvimento desta área de conhecimento são animadoras, como pode ser reconhecido na literatura recente. Desde 1994, a simulação direta de turbulência homogênea em grade de $256^3=16.777.216$ pontos em supercomputadores pode ser encontrada com relativa facilidade. Além disso, o uso de supercomputadores de processamento paralelo já possibilitou a simulação da turbulência numa grade de $512^3=134.217.728$ pontos (She et alii, 1993; Jimenez et alii, 1993). Tudo isso confere uma perspectiva promissora para a DNS.

Sob a luz dos argumentos apresentados anteriormente, e ponderando sobre o compromisso entre exatidão e tempo computacional, será adotada, neste trabalho, a simulação da turbulência por meio de um modelo a duas-equações. Dos vários modelos a duas-equações disponíveis na literatura, a opção será a favor do modelo $k-\epsilon$, visto que, dentre os demais, este foi o mais intensivamente testado e atestado, apresentando robustez suficiente para uso seguro numa grande variedade de aplicações.

3.6.1 Modelo $k-\epsilon$ Padrão

Existe uma crença generalizada de que os modelos de turbulência baseados na representação do tensor de Reynolds são artificialmente elaborados, não havendo, portanto, qualquer justificativa física consolidada, ou mesmo uma mera conexão, com a resolução das equações de Navier-Stokes na forma geral para escoamentos turbulentos. Embora esta afirmação seja válida para os modelos de viscosidade turbilhonar mais primitivos, não é o caso quando estão em questão os sofisticados modelos de turbulência de segunda ordem ou

até mesmo os modelos a duas-equações como o $k-\epsilon$. Estes modelos podem ser deduzidos sistematicamente¹⁸ a partir das equações de Navier-Stokes aplicando-se fundamentalmente as únicas hipóteses de que a turbulência é localmente homogênea¹⁹ e está em equilíbrio²⁰.

A energia cinética de turbulência é definida matematicamente como uma analogia da energia cinética convencional, sendo porém baseada na média temporal do produto das flutuações de velocidade do fluido. A sua formulação matemática é dada por:

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}). \quad (78)$$

Na obtenção formal das equações do modelo $k-\epsilon$, torna-se necessário assumir em várias etapas a condição de turbulência isotrópica. O conceito de turbulência isotrópica implica, sumariamente, que as flutuações da velocidade do fluido são de igual intensidade em todas as direções. Esta característica torna válida a seguinte equação

$$\overline{u'^2} = \overline{v'^2} = \overline{w'^2}, \quad (79)$$

a qual, aplicada à equação (78) fornece que

$$\overline{u'^2} = \frac{2}{3} k. \quad (80)$$

A equação (80) tem importância basilar na formulação da equação diferencial de transporte para a energia cinética de turbulência, tendo sido conseguida, como visto, diretamente da hipótese de turbulência isotrópica.

3.6.1.1 Viscosidade Turbilhonar

A viscosidade turbilhonar se constitui em um parâmetro adicional introduzido com a finalidade de representar o trabalho dissipativo provocado pela turbulência. Deste modo, a viscosidade total do escoamento torna-se o somatório das viscosidades molecular (inerente ao fluido) e turbilhonar (inerente ao escoamento). A viscosidade turbilhonar no modelo $k-\epsilon$ é definida como segue:

¹⁸ O procedimento detalhado para dedução dos modelos de segunda ordem e $k-\epsilon$ partindo-se das equações de Navier-Stokes pode ser encontrado em Gatski et alii (1996), pp. 187-204.

¹⁹ A turbulência homogênea é definida como sendo o estado no qual as médias temporais das quantidades envolvendo as flutuações do escoamento turbulento não variam com a posição, precipitando que todas as derivadas espaciais de tais propriedades são nulas nesta situação.

²⁰ A turbulência atinge o equilíbrio dinâmico quando não há acúmulo energético em qualquer nível da cascata de energia, implicando que o fluxo da dissipação energética ocorre continuamente, a uma mesma taxa, partindo dos maiores turbilhões e passando aos turbilhões cada vez menores até que a energia mecânica seja totalmente convertida em energia térmica na menor escala da turbulência.

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} = \frac{\mu_T}{\rho} \quad \therefore \quad \mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (81)$$

3.6.1.2 Equação de κ

Os vários termos da equação da energia cinética de turbulência podem ser modelados (Launder & Spalding, 1972) na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla \cdot (\rho k \bar{\mathbf{u}}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + \rho - \rho \epsilon, \quad (82)$$

onde

$$\rho = \tilde{\tau}^R : \nabla \bar{\mathbf{u}} \quad (83)$$

é o termo de produção de turbulência conseqüente do trabalho do escoamento médio sobre o tensor de Reynolds.

3.6.1.3 Equação de ϵ

De maneira similar a equação da dissipação da energia cinética turbulenta pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \nabla \cdot (\rho \epsilon \bar{\mathbf{u}}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + S_\epsilon, \quad (84)$$

onde

$$S_\epsilon = C_{e1} \rho \frac{\epsilon}{k} f_1 - C_{e2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} f_2. \quad (85)$$

As constantes das equações do modelo são ajustadas empiricamente, sendo que os valores mais comumente usados são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1: Valores das constantes do modelo de turbulência $k-\epsilon$ (Hirsch, 1990).

C_μ	C_{e1}	C_{e2}	f_1	f_2	σ_k	σ_ϵ
0,09	1,45-1,55	1,92-2,00	1	1	1	1,3

3.6.1.4 Tensor de Reynolds

Os efeitos da turbulência são representados pelo chamado **tensor de Reynolds** $\tilde{\tau}^R$, o qual é definido a partir da decomposição de Reynolds e do conceito de média temporal como:

$$\tilde{\tau}^R = -\overline{\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}'}. \quad (86)$$

Existem, na literatura, um sem número de modelos propostos para representar o tensor de Reynolds. Nos modelos de primeira ordem, a exemplo do $k-\epsilon$, o tensor de Reynolds é expresso através do conceito de viscosidade turbilhonar, seguindo a hipótese original de Boussinesq (1877), de modo que escreve-se o tensor de Reynolds em notação vetorial como

$$\tilde{\tau}^R = \mu_T (\nabla \bar{\mathbf{u}} + \nabla \bar{\mathbf{u}}^T) + \lambda_T (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}) \tilde{\mathbf{I}} - \frac{2}{3} \rho k \tilde{\mathbf{I}}, \quad (87)$$

onde o termo $\frac{2}{3} \rho k \tilde{\mathbf{I}}$ é adicionado artificialmente para garantir consistência nas componentes normais de $\tilde{\tau}^R$, cujo traço deve ser o dobro da energia cinética de turbulência k , ou seja $\text{tr}(\tilde{\tau}^R) = 2\rho k$. A viscosidade maciça turbulenta é definida por analogia com a relação de Stokes como

$$\lambda_T = -\frac{2}{3} \mu_T. \quad (88)$$

Portanto, pode-se rescrever o tensor de Reynolds na forma

$$\tilde{\tau}^R = \mu_T \left[(\nabla \bar{\mathbf{u}} + \nabla \bar{\mathbf{u}}^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}) \tilde{\mathbf{I}} \right] - \frac{2}{3} \rho k \tilde{\mathbf{I}}, \quad (89)$$

cujas componentes são:

- Tensões Normais

$$\tau_{rr}^R = \mu_T \left[2 \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial r} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} \right] - \frac{2}{3} \rho k,$$

$$\tau_{\theta\theta}^R = \mu_T \left[2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}_\theta}{\partial \theta} + \frac{\bar{u}_r}{r} \right) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} \right] - \frac{2}{3} \rho k,$$

$$\tau_{zz}^R = \mu_T \left[2 \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} \right] - \frac{2}{3} \rho k.$$

• Tensões Tangenciais

$$\tau_{r\theta}^R = \tau_{\theta r}^R = \mu_T \left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\bar{u}_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial \theta} \right),$$

$$\tau_{\theta z}^R = \tau_{z\theta}^R = \mu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial \theta} \right),$$

$$\tau_{rz}^R = \tau_{zr}^R = \mu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial r} + \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial z} \right).$$

O divergente da velocidade em coordenadas cilíndricas é dado como

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{u}_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z}. \quad (90)$$

3.6.1.5 Termo de Produção de Turbulência [$\rho = \tilde{\tau}^R : \nabla \bar{\mathbf{u}}$]

3.6.1.5.1 Tensor [$\nabla \bar{\mathbf{u}}$]

O tensor gradiente da velocidade média temporal é dado em coordenadas cilíndricas como:

$$\begin{aligned} [\nabla \bar{\mathbf{u}}]_{rr} &= \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial r} & [\nabla \bar{\mathbf{u}}]_{r\theta} &= \frac{\partial \bar{u}_\theta}{\partial r} & [\nabla \bar{\mathbf{u}}]_{rz} &= \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial r} \\ [\nabla \bar{\mathbf{u}}]_{\theta r} &= \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial \theta} - \frac{\bar{u}_\theta}{r} & [\nabla \bar{\mathbf{u}}]_{\theta\theta} &= \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}_\theta}{\partial \theta} + \frac{\bar{u}_r}{r} & [\nabla \bar{\mathbf{u}}]_{\theta z} &= \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial \theta} \\ [\nabla \bar{\mathbf{u}}]_{zr} &= \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial z} & [\nabla \bar{\mathbf{u}}]_{z\theta} &= \frac{\partial \bar{u}_\theta}{\partial z} & [\nabla \bar{\mathbf{u}}]_{zz} &= \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z} \end{aligned}$$

Fazendo o produto escalar – também denominado, quando aplicado a tensores, de produto duplamente contraído (Bird et alii, 1960) – do tensor de Reynolds pelo gradiente de velocidade, obtém-se o termo de produção de turbulência²¹:

$$\begin{aligned} \rho = \tilde{\tau}^R : \nabla \bar{\mathbf{u}} &= \tilde{\tau}^R_{rr} \left(\frac{\partial \bar{u}_r}{\partial r} \right) + \tilde{\tau}^R_{\theta\theta} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}_\theta}{\partial \theta} + \frac{\bar{u}_r}{r} \right) + \tilde{\tau}^R_{zz} \left(\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z} \right) + \tilde{\tau}^R_{r\theta} \left(\frac{\partial \bar{u}_\theta}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial \theta} - \frac{\bar{u}_\theta}{r} \right) + \\ &+ \tilde{\tau}^R_{\theta z} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial \theta} + \frac{\partial \bar{u}_\theta}{\partial z} \right) + \tilde{\tau}^R_{rz} \left(\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial r} + \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (91)$$

²¹ Alguns termos cruzados do tensor de Reynolds foram suprimidos, devido ao fato deste ser um tensor simétrico.

3.6.1.6 Efeitos de Parede

A modelagem de escoamentos que possam ser considerados como aproximadamente invíscidos possibilita a adoção de uma velocidade não nula para o fluido junto à fronteira sólida do sistema. Todavia, para escoamentos nos quais os efeitos viscosos não podem ser ignorados, deve ser verificado o princípio da aderência, de maneira que atribui-se uma velocidade nula para a primeira camada de fluido paralela à fronteira sólida. Neste caso, a dinâmica das camadas de fluido sem contato direto com as paredes do sistema é governada diretamente pela física intrínseca às equações da fluidodinâmica. O fenômeno de propagação de efeitos viscosos iniciados nas fronteiras sólidas de um sistema fluidodinâmico é o que pode ser comumente denominado de efeito de parede.

A utilização do princípio da aderência como condição de contorno acarreta que o escoamento do fluido apresentará um perfil de velocidade variável e gradual, com velocidade máxima em algum ponto interno do escoamento e velocidade nula junto à fronteira sólida. Portanto, mesmo que o escoamento possua uma velocidade média bastante elevada – ou seja, alto número de Reynolds – existirá, invariavelmente, uma região de baixas velocidades nas proximidades das paredes que limitam o escoamento. Esta constatação é de suma relevância para a escolha ou adaptação de um modelo de turbulência capaz de fornecer resultados com margem de segurança e confiabilidade aceitáveis.

Conforme discutido na seção 3.6.1, o processo de elaboração do modelo $k-\epsilon$ requer a situação de turbulência isotrópica. Visto que o apoio físico admissível para esta condição reside na *hipótese de isotropia local de Kolmogorov*, decorre que o modelo de turbulência $k-\epsilon$ originalmente proposto adequa-se apenas aos escoamentos totalmente turbulentos, não sendo portanto seguramente aplicável aos escoamentos com efeitos viscosos pronunciados, especialmente os dotados de efeitos de parede. De fato, a região do escoamento adjacente às paredes dos sistema – onde o número de Reynolds local é baixo – representa o maior entrave do modelo $k-\epsilon$ tradicional, impedindo o fornecimento de resultados de boa qualidade ou até mesmo realísticos.

3.6.2 Modelo $k-\epsilon$ de Baixo Reynolds

Ao longo dos anos, foram propostas algumas alternativas a fim de minorar ou até contornar a limitação do modelo $k-\epsilon$ no que respeita à sua adequação apenas aos escoamentos totalmente turbulentos.

Uma das abordagens consiste na extensão do modelo $k-\epsilon$ para baixos números de Reynolds, elaborada por Jones & Launder (1972, 1973). Estes autores, propuseram a adição de termos extras às equações de transporte de κ e ϵ , os quais seriam capazes de levar em conta os efeitos viscosos da regiões laminar e tampão existentes nos escoamentos reais.

A versão do modelo $k-\epsilon$ para baixos números de Reynolds tem se mostrado eficaz em diversas aplicações, no entanto os termos adicionais implicam necessariamente numa ampliação da carga computacional requerida na resolução do modelo. Além disso, considerações diferenciadas devem ser feitas com respeito à estabilidade das equações de transporte das quantidades turbulentas após a adição dos novos termos.

Não obstante a maior carga computacional requerida, o modelo $k-\epsilon$ modificado para baixos Reynolds tem sido aplicado intensivamente na modelagem e simulação de escoamentos do mundo real. Assim sendo, a formulação e as equações utilizadas no modelo $k-\epsilon$ de baixo Reynolds são apresentados a seguir.

3.6.2.1 Viscosidade Turbilhonar

A viscosidade turbilhonar no modelo $k-\epsilon$ de baixo Reynolds é definida acrescentando-se um novo parâmetro f_μ , como segue:

$$\nu_T = C_\mu f_\mu \frac{k^2}{\epsilon} = \frac{\mu_T}{\rho} \quad \therefore \quad \mu_T = \rho C_\mu f_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (92)$$

O parâmetro f_μ é conseguido em termos da equação

$$f_\mu = \exp\left(\frac{-2,5}{1 + \frac{R_t}{50}}\right), \quad (93)$$

onde R_t é dependente das grandezas turbulentas e de propriedades físicas do fluido, tendo o seu valor determinado como

$$R_t = \frac{\rho k^2}{\mu \epsilon} \quad (94)$$

3.6.2.2 Equação de κ

A equação da energia cinética de turbulência modificada para responder por escoamentos a baixos Reynolds difere do modelo $k-\epsilon$ padrão apenas pela inclusão de um termo de geração volumétrica representado por Q_k . Os vários termos da equação da energia cinética de turbulência podem ser modelados na seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla \cdot (\rho k \bar{\mathbf{u}}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + \rho - \rho \epsilon + Q_k, \quad (95)$$

onde, como no modelo $k-\epsilon$ padrão,

$$\rho = \tilde{\tau}^R : \nabla \bar{\mathbf{u}} \quad (96)$$

é o termo de produção de turbulência conseqüente do trabalho do escoamento médio sobre o tensor de Reynolds.

3.6.2.3 Equação de ϵ

De maneira similar a equação da dissipação da energia cinética turbulenta também sofre a adição de um termo de geração volumétrica Q_ϵ , podendo ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\epsilon) + \nabla \cdot (\rho\epsilon\bar{\mathbf{u}}) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + S_\epsilon + Q_\epsilon, \quad (97)$$

onde

$$S_\epsilon = C_{\epsilon 1} \rho \frac{\epsilon}{k} f_1 - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} f_2. \quad (98)$$

Distintamente do modelo $k-\epsilon$ padrão, o parâmetro f_2 da equação (98) é variável e tem o seu valor, dependente de R_t , sendo obtido da equação seguinte:

$$f_2 = 1,0 - 0,3 \exp(-R_t^2). \quad (99)$$

Como mencionado anteriormente, as constantes das equações do modelo são ajustadas empiricamente num processo denominado de calibração, sendo que os valores mais comumente usados são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2: Valores dos parâmetros do modelo de turbulência $k-\epsilon$ modificado para baixos Reynolds

C_μ	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	f_1	σ_k	σ_ϵ
0,09	1,45-1,55	1,92-2,00	1	1	1,3

3.6.2.4 Termos de Geração Adicionais

Os termos Q_k e Q_ϵ respondem pela geração volumétrica supra mencionada, os quais podem ser escritos para um sistema pseudo-bidimensional cilíndrico na forma:

$$Q_k = -2\mu \left(\frac{\partial \sqrt{k}}{\partial r} \right)^2, \quad (100)$$

$$Q_\epsilon = \frac{2}{\rho} \mu \mu_t \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial r^2} \right)^2. \quad (101)$$

3.6.3 Condição de Parede

Uma outra técnica amplamente utilizada para contemplar os efeitos viscosos do escoamento consiste na aplicação de uma condição de parede. O princípio básico deste método reside na fixação dos valores das propriedades κ e ϵ para o primeiro ponto da malha com base no perfil universal de velocidades, firmemente estabelecido por meio de medidas experimentais.

Conforme Launder & Spalding (1974), os valores das grandezas turbulentas são obtidas como funções da velocidade de atrito por meio das equações:

$$k_p = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}}, \quad (102)$$

$$\epsilon_p = \frac{u_\tau^3}{Ky_p}, \quad (103)$$

onde k_p e ϵ_p são as quantidades turbulentas no ponto situado à distância y_p da parede; u_τ é a velocidade de atrito e K é a constante de Von Karman.

O velocidade de atrito pode ser calculada por meio da lei logarítmica para o perfil de velocidades turbulento, dada na forma:

$$K \frac{u_p}{u_\tau} = \ln \left(\rho E \frac{y_p u_\tau}{\mu} \right), \quad (104)$$

onde E é um parâmetro de rugosidade (para tubos lisos, um valor típico é $E = 9$).

Para que a equação (104) possa ser utilizada, o primeiro ponto da malha deve estar localizado na região de escoamento totalmente turbulento. Esta condição torna-se problemática em modelos transientes, pois um ponto localizado a uma distância fixa da parede pode pertencer a diferentes camadas ao longo do tempo, à medida que a velocidade do fluido é acrescida ou diminuída. Deste modo, em modelos transientes, não há como fixar um ponto na zona turbulenta a menos que este primeiro ponto da malha seja posicionado a uma distância muito grande da parede, o que acarretaria em problemas de qualidade dos resultados.

3.6.3.1 Perfil Universal de Velocidades (PUV)

Uma possível solução para esta questão é a segmentação do campo de escoamento nas camadas laminar, tampão e turbulenta, escrevendo-se, para cada uma, a equação do perfil de velocidades. Estas relações estão disponíveis nos textos clássicos da fluidodinâmica, a exemplo de Bird et alii (1960).

Os perfis de velocidade para as três camadas do escoamento são usualmente representados em termos das variáveis adimensionais y^+ e u^+ , as quais são definidas como:

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau}, \quad (105)$$

$$y^+ = \frac{u_\tau y \rho}{\mu}, \quad (106)$$

deste modo, para cada uma das regiões do escoamento, são comumente aceitas as equações seguintes:

- Zona Laminar

$$u^+ = y^+ \quad 0 \leq y^+ < 5, \quad (107)$$

- Zona Tampão

$$u^+ = \int \frac{dy^+}{1 + n^2 u^+ y^+ (1 - \exp(-n^2 u^+ y^+))} \quad 5 \leq y^+ < 26, \quad (108)$$

- Zona Turbulenta

$$u^+ = \frac{1}{K} \ln y^+ + 3,8 \quad y^+ \geq 26, \quad (109)$$

onde n é um parâmetro obtido empiricamente, cujo valor é $n = 0,124$ para tubos lisos e longos.

Note-se que, para calcular o valor das propriedades de turbulência através das equações (102) e (103), é necessário conhecer antecipadamente o valor da velocidade de atrito u_τ . Para que isso possa ser feito, é necessário realizar um processo iterativo envolvendo as equações de (105) a (109), o qual poderia ser composto pelas seguintes etapas:

1. Estimar um valor inicial para a velocidade de atrito u_τ ;

2. Calcular y^+ a partir de u_τ , y e μ conhecidos;
3. Determinar a que camada y^+ pertence e escolher o perfil correspondente dentre as equações (107) a (109);
4. Calcular o novo valor da velocidade de atrito u_τ a partir da equação selecionada no passo (3);
5. Repetir os passos (2) até (4) até a convergência da velocidade de atrito.

É fácil verificar que o processo iterativo envolvido no cálculo da velocidade de atrito é demasiadamente longo, o que representa, em termos práticos, um grande consumo de tempo computacional. De fato, tal algoritmo poderia ser implementado com relativa facilidade, no entanto a sua ineficiência e os problemas de convergência seriam impeditivos, visto que esta rotina de cálculo deve ser executada para cada célula de fluido da fronteira e em cada passo de tempo. A limitação deste método de cálculo da velocidade de atrito fica mais evidente ao notar-se que, de fato, existem duas linhas de iteração: (a) a primeira delas consiste no *loop* externo que faz as aproximações sucessivas de u_τ e (b) o segundo consiste no *loop* interno que resolve a equação do perfil de velocidades, caso o valor de y^+ esteja na zona tampão – equação (108) – ou na zona turbulenta – equação (109). O problema torna-se ainda mais crítico quando y^+ cai na zona tampão, pois deve-se resolver iterativamente a integral (108).

3.6.3.2 Perfil Universal de Velocidades Modificado (PUVM)

Mediante as dificuldades práticas da utilização do perfil universal de velocidades na determinação da velocidade de atrito para o cálculo das propriedades turbulentas na fronteira, optou-se, neste trabalho, pelo desenvolvimento de uma técnica alternativa capaz de atender aos requisitos de estabilidade, precisão e eficiência no uso do tempo computacional.

A idéia fundamental do método reside na transformação das coordenadas u^+ vs. y^+ , de maneira a eliminar a dependência recursiva da velocidade de atrito. Isto pode ser realizado inspecionando-se as definições de u^+ e y^+ e observando-se que o produto u^+y^+ resulta em um grupo adimensional independente da velocidade de atrito, dado na forma

$$u^+y^+ = \frac{y u \rho}{\mu} \tag{110}$$

A maior vantagem decorrente da utilização do grupo u^+y^+ está no fato deste ser função apenas de quantidades conhecidas. Dispondo-se da relação funcional $u^+ = f(u^+y^+)$, esta característica pode ser aproveitada de modo que, tendo-se o valor de u^+y^+ , pode-se

calcular a velocidade u^+ , donde, por meio da equação (105), consegue-se diretamente a velocidade de atrito u_τ .

A determinação da relação funcional $u^+ = f(u^+ y^+)$ pode ser implementada com base em dados experimentais de u^+ vs. y^+ encontrados na literatura²². Neste sentido, transformando os dados de u^+ vs. y^+ e correlacionando-os, pode-se obter as seguintes equações para as camadas do perfil de velocidade universal modificado:

- Zona Laminar

$$u^+ = \sqrt{u^+ y^+} \quad 0 \leq u^+ y^+ < 25, \quad (111)$$

- Zona Tampão

$$u^+ = 3,01625 \ln(u^+ y^+) - 4,88683 \quad 25 \leq u^+ y^+ < 332, \quad (112)$$

- Zona Turbulenta

$$u^+ = 2,43613 \ln(u^+ y^+) - 1,39404 \quad u^+ y^+ \geq 332. \quad (113)$$

Para uma visualização do ajuste proporcionado pelas equações (111) a (113), alguns pontos experimentais estão plotados, juntamente com as respectivas curvas, na Figura 6, Figura 7 e Figura 8.

²² Bird et alii (1960), pp. 164, apresenta uma coletânea de pontos experimentais relacionados ao escoamento isotérmico turbulento.

**Perfil Universal de Velocidades Modificado
(Região Laminar)**

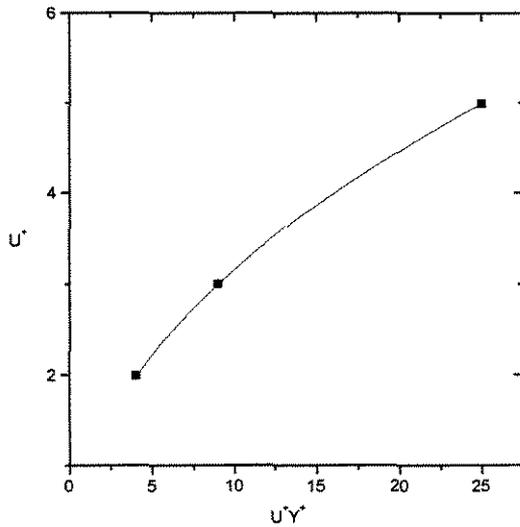


Figura 6: Região laminar do perfil de velocidades universal modificado. Comparação com alguns pontos experimentais, $R^2 = 1$.

**Perfil Universal de Velocidades Modificado
(Região Tampão)**

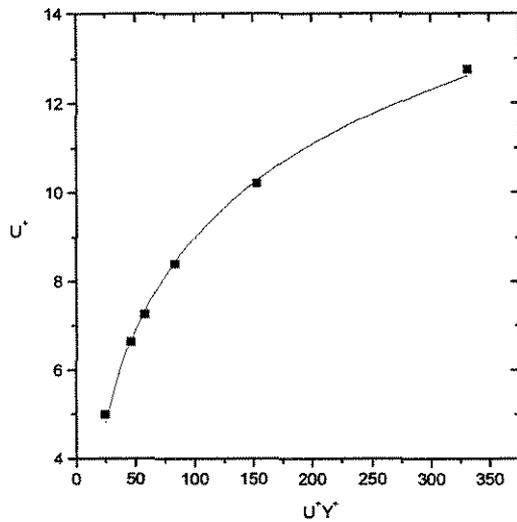


Figura 7: Região tampão do perfil de velocidades universal modificado. Comparação com alguns pontos experimentais, $R^2 = 0,998$.

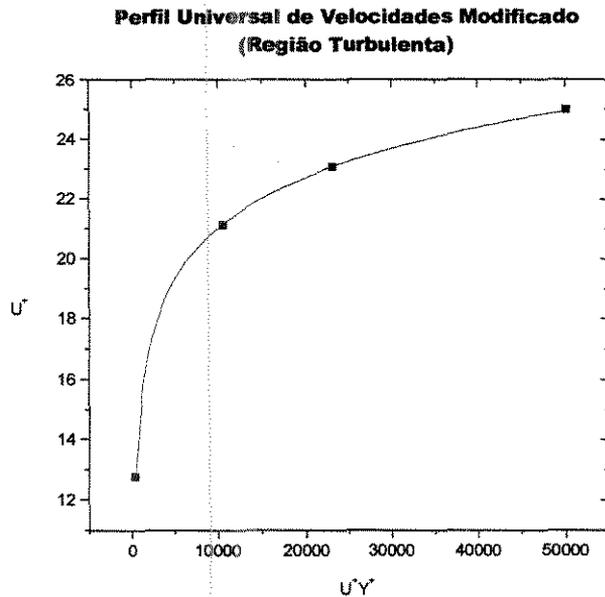


Figura 8: Região turbulenta do perfil de velocidades universal modificado. Comparação com alguns pontos experimentais, $R^2 = 0,99996$.

Aplicando as correlações (111) a (113), o algoritmo de cálculo da velocidade de atrito pode ser delineado nas seguintes etapas:

1. Calcular o valor do grupo $u^+ y^+$ a partir de y e u ;
2. Determinar u^+ de acordo com a zona de escoamento correspondente ao valor de $u^+ y^+$;
3. Calcular a velocidade de atrito diretamente a partir da equação (105).

A comparação dos algoritmos PUV e PUVM evidencia imediatamente a maior eficiência deste último. Tal superioridade não se deve somente ao menor número de etapas, mas também à eliminação das etapas iterativas envolvidas no cálculo da velocidade de atrito. De fato, baseado no número de etapas iterativas do método PUV, pode-se estimar que o ganho de tempo computacional com a utilização do algoritmo PUVM alcance algumas ordens de magnitude.

3.6.4 Discretização do Modelo de Turbulência κ - ϵ de Baixo Reynolds

3.6.4.1 Taxa Volumétrica de κ

Uma vez que os cubóides de fluido são tomados como impenetráveis nesta abstração do modelo do fluido, então pode-se desprezar o termo convectivo no balanço da energia cinética de turbulência dado pela equação (95). Denominando a derivada temporal

em um volume de fluido (i, j) como $R_{k(i,j)}$ e discretizando os demais termos da equação, consegue-se a representação algébrica para a taxa de variação da grandeza κ no cubóide de fluido (i, j) como sendo dada por:

$$R_{k(i,j)} = -\left(\mu + \frac{\mu_{T(w)}}{\sigma_k}\right) \left(\frac{k_{(i,j)} - k_{(i-1,j)}}{r_{(i,j)} - r_{(i-1,j)}}\right) A_{(w)} + \left(\mu + \frac{\mu_{T(e)}}{\sigma_k}\right) \left(\frac{k_{(i+1,j)} - k_{(i,j)}}{r_{(i+1,j)} - r_{(i,j)}}\right) A_{(e)} + \\ + (\rho_{(i,j)} - \rho_{\in(i,j)} + Q_{k(i,j)}) V_{(i,j)} \quad (114)$$

O termo de geração volumétrica Q_k é discretizado por um esquema de diferença central explícita, resultando na equação exibida abaixo:

$$Q_{k(i,j)} = -2\mu \left(\frac{\sqrt{k_{(i+1,j)}} - \sqrt{k_{(i-1,j)}}}{r_{(i+1,j)} - r_{(i-1,j)}}\right)^2 \quad (115)$$

3.6.4.2 Termo de Produção de Turbulência

Para um elemento de fluido (i, j) , o termo de produção de turbulência é avaliado por uma diferença central como:

$$\rho_{(i,j)} = \mu_T \left(\frac{u_{z(i+1,j)} - u_{z(i-1,j)}}{r_{(i+1,j)} - r_{(i-1,j)}}\right)^2 \quad (116)$$

3.6.4.3 Taxa Volumétrica de ϵ

Procedendo de modo perfeitamente análogo à derivação da taxa volumétrica da energia cinética de turbulência, e sob os mesmos argumentos, despreza-se o termo convectivo na equação (97). Denominando a derivada temporal em (97) de $R_{\epsilon(i,j)}$, para um volume de fluido (i, j) , e discretizando os demais termos consegue-se a equação algébrica descritiva da taxa de variação temporal da grandeza ϵ :

$$R_{\epsilon(i,j)} = -\left(\mu + \frac{\mu_{T(w)}}{\sigma_k}\right) \left(\frac{\epsilon_{(i,j)} - \epsilon_{(i-1,j)}}{r_{(i,j)} - r_{(i-1,j)}}\right) A_{(w)} + \left(\mu + \frac{\mu_{T(e)}}{\sigma_k}\right) \left(\frac{\epsilon_{(i+1,j)} - \epsilon_{(i,j)}}{r_{(i+1,j)} - r_{(i,j)}}\right) A_{(e)} + \\ + (S_{\epsilon(i,j)} + Q_{\epsilon(i,j)}) V_{(i,j)} \quad (117)$$

O termo adicional de geração volumétrica Q_ϵ é discretizado por um esquema de diferença central explícita, resultando na equação exibida abaixo:

$$Q_{\epsilon(i,j)} = \frac{2}{\rho} \mu_{T1} \left(\frac{u_{z(i+1,j)}(r_{(i,j)} - r_{(i-1,j)}) + u_{z(i-1,j)}(r_{(i+1,j)} - r_{(i,j)}) - u_{z(i,j)}(r_{(i+1,j)} - r_{(i-1,j)})}{\frac{1}{2}(r_{(i+1,j)} - r_{(i-1,j)})(r_{(i+1,j)} - r_{(i,j)})(r_{(i,j)} - r_{(i-1,j)})} \right)^2 \quad (118)$$

3.6.4.4 Termo de Geração de ϵ

A discretização do termo de geração da dissipação de energia cinética ϵ , é realizada para fornecer de imediato a equação:

$$S_{\epsilon(i,j)} = C_{\epsilon 1} P_{(i,j)} \frac{\epsilon_{(i,j)}}{\kappa_{(i,j)}} f_1 - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon_{(i,j)}^2}{\kappa_{(i,j)}} f_2, \quad (119)$$

onde o parâmetro f_2 é calculado, para um certo nível de tempo, aplicando-se os valores correntes de κ e ϵ na equação (94) para obter R_t , o qual, por sua vez é substituído em (99), que fornece f_2 .

3.6.4.5 Atualização de κ , ϵ e μ_T

As equações de atualização das grandezas turbulentas são obtidas por discretização em avanço no tempo, como mostrado em seguida:

$$\kappa_{(i,j)(k+1)} = \kappa_{(i,j)(k)} + \frac{1}{\rho} R_{\kappa(i,j)} \Delta t, \quad (120)$$

$$\epsilon_{(i,j)(k+1)} = \epsilon_{(i,j)(k)} + \frac{1}{\rho} R_{\epsilon(i,j)} \Delta t. \quad (121)$$

O novo valor da viscosidade turbulenta é obtido a partir dos valores atuais das grandezas turbulentas através da equação

$$\mu_{T(i,j)} = \rho C_{\mu} f_{\mu} \frac{\kappa_{(i,j)}^2}{\epsilon_{(i,j)}}. \quad (122)$$

onde f_{μ} é fornecido diretamente pelas equações (94) e (93), em seqüência.

3.7 Interação Partícula-Partícula

A interação dinâmica entre partículas se dá fundamentalmente pelas colisões. Além da transferência de momento que ocorre durante a colisão, existe, também, um efeito de interação fluidodinâmica originado pela sobreposição das camadas limites no entorno de cada partícula envolvida na colisão. Esta interação fluidodinâmica é de natureza bastante complexa, cujo efeito somente poderia ser prontamente contemplado por uma abordagem empírica, através de uma relação fenomenológica baseada em dados experimentais. Afortunadamente, os efeitos fluidodinâmicos durante a colisão podem ser seguramente desprezados quando a razão da densidade das partículas para com a densidade do fluido é muito maior do que a unidade, ou seja $\rho_p / \rho \gg 1$ (Marble, 1964).

3.7.1 Critério de Colisão

O processo iterativo envolvido no modelo computacional apresentado neste trabalho realiza a movimentação das partículas segundo intervalos finitos de tempo. Esta discretização do tempo causa a necessidade de se adotar um tratamento especial para determinar a ocorrência de colisões a cada iteração. Deve-se notar que um método de detecção de colisões seria desnecessário se fosse empregado um passo de tempo muito pequeno (aproximando um diferencial), visto que bastaria verificar a distância entre as partículas a cada iteração para constatar uma colisão. Entretanto, o esforço computacional requerido nestas condições seria proibitivo. Quando o passo de tempo não é suficientemente pequeno, a verificação do afastamento entre as partículas depois de cada deslocamento não é bastante como critério de colisão, pois as trajetórias das partículas em rota de colisão poderiam se cruzar e se afastar dentro do mesmo passo de tempo, dando a impressão errônea de não ter havido colisão. Portanto um critério de colisão entre partículas mais rigoroso é desenvolvido a seguir.

Se um par de partículas colide num tempo t_c , então neste tempo o módulo do vetor de afastamento (ou vetor posição relativa) entre as partículas será igual à soma dos seus raios médios. Tal sentença pode ser expressada matematicamente pela equação:

$$|\bar{x}_{1c} - \bar{x}_{2c}| = \alpha, \quad (123)$$

onde $\alpha = r_1 + r_2$ é a soma dos raios das partículas e \bar{x}_{1c} , \bar{x}_{2c} são os vetores posição das duas partículas no momento de colisão.

A equação (123) é a base dos três critérios de colisão apresentados a seguir, distinguidos entre si pelo tipo de movimento assumido para a partícula durante o seu deslocamento dentro do intervalo de tempo. A escolha de qual destes critérios deve ser utilizado baseia-se num compromisso entre o poder computacional demandado nos cálculos e a precisão requerida na solução das interações das partículas. Uma discussão sobre a escolha do critério será realizada *a posteriori*.

Para que (123) possa ser usada para cálculo do tempo de colisão, é necessário convertê-la da forma vetorial para uma forma escalar, de modo a ser manipulada pelas regras da álgebra. Se escrevermos o vetor posição relativa como

$$\bar{x}_{12c} = \bar{x}_{1c} - \bar{x}_{2c}, \quad (124)$$

consegue-se reescrever (123) na forma

$$|\bar{x}_{12c}| = \alpha. \quad (125)$$

Aplicando o quadrado em ambos os lados da equação anterior, tem-se que

$$|\bar{x}_{12c}|^2 = \bar{x}_{12c} \cdot \bar{x}_{12c} = x_{12c}^2 = \alpha^2, \text{ donde resulta:}$$

$$x_{12c}^2 = \alpha^2, \quad (126)$$

que é a forma escalar da equação (123), própria para ser usada como critério de colisão.

3.7.1.1 Aproximação de 2ª Ordem - Movimento Uniforme

Este é o critério de colisão que demanda menos esforço computacional, justamente por considerar que as partículas possuem velocidade constante no intervalo de tempo de colisão t_c . A hipótese de velocidade constante implica que as partículas descrevem uma trajetória retilínea durante este intervalo de tempo. Portanto, as posições das partículas no tempo t_c são dadas por:

$$\bar{x}_{1c} = \bar{x}_1 + \bar{v}_1 t_c, \quad (127)$$

$$\bar{x}_{2c} = \bar{x}_2 + \bar{v}_2 t_c, \quad (128)$$

onde \bar{x}_1 , \bar{x}_2 e \bar{v}_1 , \bar{v}_2 são os vetores posição e velocidade iniciais das partículas. Substituindo estas duas equações em (123) e aplicando o quadrado na equação resultante, obtém-se que:

$$(\bar{x}_{12} + \bar{v}_{12} t_c)^2 = \alpha^2, \quad (129)$$

onde $\bar{x}_{12} = \bar{x}_1 - \bar{x}_2$ e $\bar{v}_{12} = \bar{v}_1 - \bar{v}_2$.

Operando o quadrado em (129) e rearranjando, consegue-se

$$v_{12}^2 t_c^2 + 2(\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12}) t_c + (x_{12}^2 - \alpha^2) = 0. \quad (130)$$

Resolvendo a equação vetorial anterior para o tempo t_c , tem-se:

$$t_c = \frac{-\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12} \pm \sqrt{(\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12})^2 - v_{12}^2 (x_{12}^2 - \alpha^2)}}{v_{12}^2}, \quad (131)$$

a qual é a equação que fornece o tempo de colisão para as duas partículas consideradas. A avaliação dos termos desta equação permite uma utilização mais eficiente na verificação das colisões. Como as partículas estão inicialmente afastadas e são impenetráveis mecanicamente, então sempre é válido que $(x_{12}^2 - \alpha^2) \geq 0$, implicando que o termo da raiz quadrada sempre é menor do que o produto escalar $\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12}$. Visto que t_c deve ser positivo, conclui-se que, para haver colisão, deve ser atendida a condição:

$$\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12} < 0.$$

Se este produto escalar é positivo, as duas partículas estão se afastando e (131) terá duas raízes negativas. Se o produto escalar é nulo, a equação (131) fornece duas raízes complexas, indicando mais uma vez que não há colisão. Outra observação pertinente se refere à velocidade relativa entre as partículas, que na condição limite de $|\bar{v}_{12}| \rightarrow 0$, correspondente a vetores velocidade paralelos, resulta um tempo de colisão infinito ($t_c \rightarrow \pm\infty$), como é esperado.

O produto escalar $\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12}$ negativo não é condição suficiente para a colisão, também deve-se ter um discriminante não negativo, ou seja:

$$(\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12})^2 - v_{12}^2 (x_{12}^2 - \alpha^2) \geq 0.$$

Se o discriminante é nulo, (131) terá duas raízes positivas e iguais, enquanto que um discriminante positivo fornece duas raízes positivas distintas. No caso de raízes distintas, o tempo de colisão t_c corresponde à raiz de menor valor.

3.7.1.2 Aproximação de 4ª Ordem - Movimento Uniformemente Variado

Neste critério de colisão, assume-se que as partículas desenvolvem um movimento de aceleração constante desde o tempo inicial até o tempo de colisão t_c . Esta é uma hipótese mais genérica, pois permite que as trajetórias das partículas no intervalo de tempo considerado sejam curvilíneas, e a sua consequência imediata é a capacidade de previsão de colisões entre partículas que não estejam em rota de choque no início do intervalo de tempo. No presente caso, as posições das duas partículas no momento do impacto podem ser prescritas por:

$$\bar{x}_{1c} = \bar{x}_1 + \bar{v}_1 t_c + \frac{\bar{a}_1}{2} t_c^2, \quad (132)$$

$$\bar{x}_{2c} = \bar{x}_2 + \bar{v}_2 t_c + \frac{\bar{a}_2}{2} t_c^2, \quad (133)$$

onde \bar{x}_1 , \bar{x}_2 , \bar{v}_1 , \bar{v}_2 , \bar{a}_1 e \bar{a}_2 são os vetores posição, velocidade e aceleração iniciais das partículas. De forma análoga ao procedimento da seção anterior, substituindo estas duas equações em (123) e aplicando o quadrado na equação resultante, obtém-se que:

$$\left(\bar{x}_{12} + \bar{v}_{12} t_c + \frac{\bar{a}_{12}}{2} t_c^2 \right)^2 = \sigma^2, \quad (134)$$

onde

$$\bar{x}_{12} = \bar{x}_1 - \bar{x}_2,$$

$$\bar{v}_{12} = \bar{v}_1 - \bar{v}_2,$$

$$\bar{a}_{12} = \bar{a}_1 - \bar{a}_2.$$

Aplicando o quadrado em (134), agrupando os termos comuns e rearranjando, consegue-se:

$$\frac{\bar{a}_{12}^2}{4} t_c^4 + (\bar{v}_{12} \cdot \bar{a}_{12}) t_c^3 + \left(v_{12}^2 + \bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12} \right) t_c^2 + 2(\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12}) t_c + \left(x_{12}^2 - \alpha^2 \right) = 0. \quad (135)$$

Pode-se perceber que a solução da equação (135) para t_c fornece o tempo de colisão com precisão de quarta ordem. Como esta equação tem quatro raízes, o valor adotado como tempo de colisão deve ser a menor raiz positiva. Caso todas as raízes sejam negativas e/ou complexas, fica caracterizado que não ocorrerá colisão entre as partículas.

Apesar das vantagens de precisão e generalidade de (135), a implementação mais eficiente da busca das raízes corresponde a um algoritmo de resolução de polinômios, o qual, por mais otimizado que seja, gera uma carga computacional adicional no modelo. Como este critério de colisão deve ser aplicado para cada par de partículas no interior de certo domínio espacial a cada passo de tempo, uma pequena economia de tempo de cálculo na determinação das colisões pode significar um grande ganho de eficiência computacional para a simulação como um todo. Devido a estas considerações, é apresentado a seguir um critério de colisão um pouco mais simplificado, que permite obter os tempos de colisão com uma aproximação de ordem superior, a qual deve ser suficiente para satisfazer os requerimentos de precisão da simulação.

3.7.1.3 Aproximação de 2ª Ordem Modificada - Movimento Uniformemente Variado Simplificado

Para obter uma aproximação de ordem superior no tempo que permita avaliar a ocorrência de colisões através de um cálculo não iterativo, realiza-se uma análise dos termos da equação (135). Note que, nesta equação, os efeitos da aceleração estão localizados preponderantemente nos termos de 3ª e 4ª ordem. Se o passo de tempo usado no modelo for relativamente pequeno, então o tempo de colisão t_c também será necessariamente pequeno, uma vez que o passo de tempo é o limite superior para t_c a cada iteração no tempo. Por conseqüência, quando t_c é pequeno, os termos de 3ª e 4ª ordem tornam-se mais desprezáveis em relação aos demais termos de ordem inferior. Fazendo uso desta constatação, podemos desconsiderar os termos de ordem elevada, de modo a converter (135) na forma:

$$\left(v_{12}^2 + \bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12}\right)t_c^2 + 2(\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12})t_c + \left(x_{12}^2 - \alpha^2\right) = 0. \quad (136)$$

A inspeção desta equação mostra que parte dos efeitos da aceleração está retida no termo de segunda ordem, fato que lhe confere maior generalidade do que a aproximação de segunda ordem obtida em (130). Resolvendo (136) para o tempo de colisão, consegue-se:

$$t_c = \frac{-\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12} \pm \sqrt{(\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12})^2 - \left(v_{12}^2 + \bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12}\right)\left(x_{12}^2 - \alpha^2\right)}}{v_{12}^2 + \bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12}}. \quad (137)$$

Esta equação permite o cálculo do tempo de colisão considerando os efeitos de segunda ordem da aceleração constante sobre as partículas. Comparando-se (137) com (131), nota-se que a diferença chave é a substituição do quadrado da velocidade relativa v_{12}^2 no radicando e denominador pelo termo $\left(v_{12}^2 + \bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12}\right)$, o qual confere características bem distintas à equação (137).

O produto escalar $\left(\bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12}\right)$ representa a projeção da aceleração relativa na direção do vetor posição relativa, ou seja, na direção do eixo que liga o centro das duas partículas. Este termo garante a possibilidade de colisão mesmo que os vetores velocidades iniciais das partículas sejam paralelos ou estejam afastando-as. Tal verificação pode ser feita facilmente considerando a condição de velocidades paralelas $v_{12}^2 = 0$ em (137), de modo a obter a equação

$$t_c = \frac{\pm \sqrt{-(\bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12})\left(x_{12}^2 - \alpha^2\right)}}{\bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12}},$$

a qual fornece um tempo de colisão positivo desde que o produto escalar $(\bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12})$ seja negativo, visto que $(x_{12}^2 - \alpha^2) \geq 0$. Portanto, (137) tem capacidade de prever colisões entre partículas que tenham velocidade relativa desfavorável.

A utilização de (137) pode ser feita, grosseiramente, pela avaliação de todos os seus termos e obtenção da menor raiz positiva, se houver alguma. Entretanto, um uso mais eficiente pode ser realizado através da análise dos termos mais importantes que determinam o comportamento da equação. Deste modo, pode-se poupar um significativo tempo computacional. Neste sentido, deve-se notar que, devido à presença do produto $(\bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12})$ no discriminante, não há mais garantia de não ocorrer colisão quando $\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12} \geq 0$. Agora, o sinal do termo $(v_{12}^2 + \bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12})$ torna-se determinante no cálculo das raízes, como mostra-se a seguir:

Seja $\Delta = (\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12})^2 - (v_{12}^2 + \bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12})(x_{12}^2 - \alpha^2)$ o discriminante em (137), então:

- Se $\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12} \geq 0$ e $\bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12} \geq 0$, então não ocorre colisão. Em termos físicos, esta é a situação na qual tanto a velocidade quanto a aceleração relativas estão desfavoráveis, contribuindo para o distanciamento das partículas.
- Se $(v_{12}^2 + \bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12}) \geq 0$, então $|\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12}| \geq |\sqrt{\Delta}|$, donde tem-se que $\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12}$ deve ser sempre negativo para que haja colisão pois o sinal do produto escalar prevalece sobre o sinal da raiz quadrada, ou seja

$$\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12} < 0 \Rightarrow \text{pode haver colisão}$$

$$\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12} \geq 0 \Rightarrow \text{não há colisão}$$

- Se $(v_{12}^2 + \bar{x}_{12} \cdot \bar{a}_{12}) < 0$, então $|\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12}| < |\sqrt{\Delta}|$, donde tem-se que a colisão é possível independentemente do sinal do produto escalar $\bar{x}_{12} \cdot \bar{v}_{12}$. Fisicamente, esta situação corresponde à de duas partículas que têm aceleração relativa altamente favorável à colisão, de modo que mesmo com velocidade relativa desfavorável, o efeito da aceleração se sobrepõe e aproxima as partículas.

Por conseguinte, um teste seqüencial das condições listadas acima permite a interrupção dos cálculos do critério de colisão logo que a inexistência de colisão é constatada, evitando cálculos subsequentes desnecessários.

Avaliando as características dos critérios de colisão acima expostos, adotar-se-á a aproximação de segunda ordem modificada como critério de detecção das colisões entre partículas. Contudo, ressalta-se que o critério de quarta ordem, mais preciso, pode eventualmente ser usado quando a sobrecarga computacional ocasionada puder ser compensada pelo uso de computadores mais potentes. Note-se que, de antemão, não é possível afirmar se o acréscimo de precisão permitido pelo uso do critério de quarta ordem em relação ao de segunda ordem modificado justificaria o esforço computacional necessário à sua resolução, visto que, como o passo de tempo usado na simulação é

geralmente pequeno, os resultados dos dois critérios podem ser bem similares, observação esta que reforça a escolha da aproximação de segunda ordem modificada como critério de colisão.

3.7.2 Discretização do Campo de Movimentação das Partículas – Grade das Partículas

A discretização espacial do domínio de deslocamento das partículas não é uma necessidade decorrente do movimento das partículas em si. Ao invés disto, ela advém da possibilidade de iteração partícula-partícula implementada neste modelo por meio das colisões.

Todo o modelo de deslocamento e colisão das partículas poderia ser executado sem a subdivisão do tubo de transporte em células espaciais menores. Entretanto, tal configuração resultaria em um enorme consumo de tempo computacional ocasionado pela aplicação do critério de colisão entre pares de partículas distantes, as quais teriam uma probabilidade de colisão muito baixa.

Para resolver o modelo, a cada passo de tempo, o teste de colisão é executado entre cada par de partículas no interior do equipamento de maneira a determinar se há colisão e – se houver – qual destes pares colide primeiro. Acontece que, quanto menor é o passo de tempo usado no modelo, menor é o deslocamento das partículas a cada iteração, de maneira que a possibilidade de duas partículas suficientemente afastadas – entenda-se: fora dos seus raios de alcance – se chocarem é eventualmente nula. Deste modo, testar o critério de colisão para estes pares de partículas fora do raio de alcance é mero desperdício de tempo computacional.

Apesar de se ter enfocado, até o momento, apenas o problema do teste de colisões entre pares de partículas fora de alcance, de fato, em termos práticos, qualquer referência ou manipulação desnecessária de partículas implica obrigatoriamente no gasto de tempo computacional não somente para efetuar os cálculos, mas também para acessar a região da memória do computador onde cada partícula se encontra armazenada²³. Esta constatação tem forte impacto na resolução de um modelo físico por meio de simulação computacional, de maneira que deve-se levá-la em consideração no momento da própria elaboração do modelo e não só na hora da sua resolução. Pode-se considerar que este é o principal motivador da discretização espacial do campo de deslocamento das partículas.

O processo de detecção de colisões pretende que o critério de colisão seja aplicado para cada par de partículas no interior do equipamento de transporte. É de fácil demonstração que o número de pares de partículas (N_{pares}) cresce quadraticamente com o

²³ Cada partícula, sendo modelada como um objeto na abstração computacional, fica armazenada em alguma área da memória RAM (*Random Access Memory*) do computador. Visto que a localização e recuperação de qualquer segmento de informação armazenado na RAM consome uma quantidade finita de tempo, pode-se concluir que o acesso e/ou manipulação das propriedades das partículas deve ser reduzido a um número mínimo para que o modelo possa ser resolvido mais eficientemente.

número total de partículas (N_T) consideradas como passíveis de colisão, podendo ser calculado por:

$$N_{\text{pares}} = \frac{N_T(N_T - 1)}{2}. \quad (138)$$

A não-linearidade da equação (138) é de grande relevância, pois evidencia que uma pequena diminuição do número de partículas analisadas pode representar uma redução significativa no número de operações executadas para testar as colisões.

Ao considerar os argumentos sobre o raio de alcance das partículas mencionados *a priori*, pode-se assumir que apenas as partículas mais próximas estão propensas a efetuar colisões entre si, de maneira que a subdivisão do equipamento em células espaciais é naturalmente justificada. Com a discretização, cada célula terá um conjunto de partículas em seu interior, sobre o qual será aplicado o critério de colisão. Assim, o número de pares de partículas que podem ser formados para um tubo de transporte dividido em C células espaciais é obtido de:

$$N_{\text{pares}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^C N_i(N_i - 1), \quad (139)$$

onde N_i é o número de partículas contidas na célula i . Na condição particular de se ter células de igual volume (grade regular) e uma distribuição homogênea de partículas (concentração uniforme), ocorre que o número de partículas em cada célula seria constante. Neste caso, a equação (139) pode ser rescrita como segue:

$$N_{\text{pares}} = \frac{C}{2} N_{\text{cel}}(N_{\text{cel}} - 1), \quad (140)$$

onde N_{cel} é o número de partículas residentes em cada célula.

Notando-se que, para esta referida condição, o número de partículas em cada célula é o número total de partículas no equipamento (N_T) dividido pelo número de células (C), pode-se escrever:

$$N_{\text{cel}} = \frac{N_T}{C}, \quad (141)$$

donde, substituindo (141) em (140) consegue-se que:

$$N_{\text{pares}} = \frac{N_T}{2} \left(\frac{N_T}{C} - 1 \right). \quad (142)$$

A equação (142) relaciona o número de pares de partículas sujeitas a colisão com o número total de partículas no equipamento e com o número de células, para a situação especial de concentração uniforme de partículas e grade de discretização regular. Mesmo sendo obtida de um cenário particular, esta equação pode ser de grande valia na análise da discretização espacial do equipamento, principalmente no que se refere à definição das dimensões das células de modo otimizado.

Em uma dada simulação, o número total de partículas N_T é uma propriedade de saída, a qual será determinada pelos fenômenos físicos no interior do equipamento de transporte, no entanto o número de células C pode ser controlado, objetivando-se a minimização do número de pares N_{pares} . A derivada parcial de (142) resulta em

$$\frac{\partial N_{\text{pares}}}{\partial C} = -\frac{N_T^2}{2C^2}, \quad (143)$$

donde, advém que não existe ponto de mínimo para N_{pares} em relação a C . Em outras palavras, N_{pares} decresce assintoticamente com o incremento do número de células. Esta averiguação pode, em primeira instância, sugerir uma completa liberdade para a regulação do número de células, entretanto deve-se recordar que o número de células está diretamente relacionado às dimensões destas células, de modo que quanto maior o número de células, menor será o seu volume. Neste ponto é que dá-se conta do fator limitante: o tamanho e o raio de alcance das partículas.

Por conseguinte, se as partículas estiverem com velocidade nula, as dimensões das células devem ser tais que possam conter inteiramente ao menos uma partícula, ou seja, o volume mínimo, neste caso, seria o volume da maior partícula. O cenário se torna mais complexo quando tem-se partículas em movimento. Nesta condição, é necessário estabelecer um critério aceitável para regulação do tamanho das células.

Em seu modelo estatístico do reator de contra-fluxo, Kriton et alii (1990), propuseram que a dimensão da célula espacial em cada direção deve ser algumas ordens de magnitude superior ao diâmetro das partículas, de maneira que seja permitido considerar que as partículas realizam colisões apenas dentro das células. Embora esta proposição seja bastante coerente, não foi realizada qualquer tentativa no sentido de quantificar o quão maiores do que as partículas devem ser as dimensões das células. Além disso, para amarrar o tamanho das células apenas ao diâmetro das partículas, Kriton et alii (1990) tiveram que superdimensionar o seu volume, o que pode significar, em vários casos, um tempo de simulação desnecessariamente elevado.

No presente estudo, a tentativa é feita no sentido de estabelecer um critério de dimensionamento das células que seja dependente tanto do diâmetro das partículas como da sua velocidade. Para isso, tome-se com ponto de partida a seguinte sentença: o tamanho mínimo da célula deve ser tal que uma partícula em movimento, situada no seu centro, não possa sair após o deslocamento de uma iteração no tempo, qualquer que seja a direção da

sua velocidade. Deste modo, as dimensões mínimas das células poderiam ser definidas como:

$$\bar{L} = 2\bar{v}_{\text{máx}} \Delta t + \bar{I}d_p, \quad (144)$$

onde \bar{L} é o vetor de dimensões das células; Δt é o passo de tempo; d_p é o maior diâmetro das partículas, $\bar{v}_{\text{máx}}$ é o vetor velocidade máxima das partículas e \bar{I} é o vetor unitário correspondente.

Note-se que as componentes de $\bar{v}_{\text{máx}}$ correspondem ao maior valor alcançado dentre todas as partículas em cada direção. Para valores típicos de $\Delta t = 0,00125\text{s}$, $\bar{v}_{\text{máx}} = (0,098\text{m/s}; 18,24\text{rad/s}; 3,425\text{m/s})$ e $d_p = 0,002\text{m}$, as dimensões mínimas das células seriam $\bar{L} = (0,00225\text{m}; 0,0476\text{rad}; 0,01056\text{m})$.

É preciso ressaltar que o vetor de dimensões das células \bar{L} , dado pela equação (144), é um valor de referência que serve de balizamento para a escolha do tamanho das células em uma dada simulação, a qual deve se basear num compromisso entre a precisão na detecção de colisões e o tempo computacional. Quanto maior a célula, melhores são as previsões de colisão, acrescentando mais realismo às interações partícula-partícula, no entanto o poder computacional despendido no teste desnecessário da colisão entre partículas afastadas também se eleva, prejudicando a eficiência global da simulação.

Outro aspecto que deve ser considerado na discretização espacial para as partículas é a estrutura da grade. Como, neste modelo, a fase sólida não está submetida às condições de contorno na fronteira sólida, a exemplo do princípio da aderência, conclui-se que, pelo menos em primeira instância, uma grade de estrutura regular – ou seja, células de mesmo tamanho – é suficiente para resolver satisfatoriamente o modelo.

3.8 Modelo de Colisão

Em virtude do papel fundamental reconhecidamente atribuído às interações partícula-partícula na dinâmica do escoamento sólido-fluido (Berker & Tulig, 1986; Sinclair & Jackson, 1989 e Kitron et alii, 1990, dentre vários outros), fica patente a necessidade de elaboração de um modelo eficaz, e satisfatoriamente preciso, para prever o estado dinâmico das partículas após cada abalroamento.

Neste sentido, tendo-se anteriormente desenvolvido um mecanismo de detecção da ocorrência de colisão entre partículas, resta, neste ponto, implementar um modelo físico-matemático capaz de descrever as alterações dinâmicas ocasionadas pelo choque destas partículas. A função primordial do modelo de colisão é prover um meio de predição das velocidades das partículas após o instante do embate. Para isso, é preciso conhecer as posições e velocidades destas partículas antes do choque, assim como algumas propriedades físicas e mecânicas tais quais as massas e os coeficientes de restituição e de atrito tangencial.

A dinâmica das interações partícula-partícula tem sido considerada em profundidade por diversos autores como Jenkins & Savage (1983), Ogawa (1983) e Soo (1983a).

3.8.1 Modelo Simplificado de Jenkins & Savage (1983)

O modelo proposto por Jenkins & Savage (1983) contempla as interações entre partículas lisas, esféricas e idênticas de massa m e diâmetro σ , por meio do tratamento de colisões binárias. A hipótese de colisão binária é plenamente aceitável, pois, não obstante as colisões de ordem superior sejam estatisticamente possíveis, a sua probabilidade de ocorrência é desprezível se comparada à das colisões binárias.

As equações componentes do modelo de Jenkins & Savage (1983) foram deduzidas com base nos princípios físicos fundamentais da conservação do *momentum* linear e da energia mecânica. Deste modo, aplicando o princípio da conservação do *momentum* linear, os vetores velocidade das partículas depois da colisão \vec{v}'_1 e \vec{v}'_2 devem estar relacionados aos vetores velocidade \vec{v}_1 e \vec{v}_2 antes da colisão através das equações:

$$\begin{aligned} m\vec{v}'_1 &= m\vec{v}_1 - \vec{J}, \\ m\vec{v}'_2 &= m\vec{v}_2 + \vec{J}, \end{aligned} \tag{145}$$

onde \vec{J} é o impulso exercido pela partícula 1 sobre a partícula 2 durante a colisão.

Os vetores velocidade relativa entre as partículas antes e depois da colisão podem ser definidos na forma:

$$\begin{aligned} \vec{v}_{12} &= \vec{v}_1 - \vec{v}_2, \\ \vec{v}'_{12} &= \vec{v}'_1 - \vec{v}'_2, \end{aligned} \tag{146}$$

de modo que, valendo-se do conceito de coeficiente de restituição, as velocidades relativas antes e depois do choque podem ser relacionadas como:

$$\left(\vec{k} \cdot \vec{v}'_{12} \right) = -\varepsilon \left(\vec{k} \cdot \vec{v}_{12} \right), \tag{147}$$

sendo \vec{k} o vetor unitário normal ao plano de contato, o qual interliga os centros das duas partículas. À depender da natureza do material que constitui as partículas, o coeficiente de restituição ε pode variar de 0 a 1, correspondendo às colisões inelástica e elástica, respectivamente. Note-se que um coeficiente de restituição unitário tem o efeito de, após o choque, reverter a projeção da velocidade relativa sobre o vetor \vec{k} , sem promover dissipação de energia cinética. No caso do coeficiente de restituição ser inferior a 1, caracteriza-se um choque parcialmente elástico, que é acompanhado pela perda irreversível da energia cinética das partículas.

Utilizando as equações (145) e (146), pode-se expressar o vetor impulso \bar{J} em termos da velocidade relativa de aproximação como

$$\bar{J} = \frac{1}{2} m(1 + \varepsilon)(\bar{k} \cdot \bar{v}_{12})\bar{k}, \quad (148)$$

de maneira que, substituindo-se (148) em (145), obtém-se as velocidades de cada partícula após a colisão como segue:

$$\begin{aligned} \bar{v}'_1 &= \bar{v}_1 - \frac{1}{2}(1 + \varepsilon)(\bar{k} \cdot \bar{v}_{12})\bar{k}, \\ \bar{v}'_2 &= \bar{v}_2 + \frac{1}{2}(1 + \varepsilon)(\bar{k} \cdot \bar{v}_{12})\bar{k}. \end{aligned} \quad (149)$$

Deve-se salientar que, não obstante a sua coerência física indiscutível, o modelo de colisão proposto por Jenkins e Savage (1983) não faz qualquer referência ao atrito tangencial existente entre as partículas no ponto de contato, o qual pode ser responsável por uma parcela razoável da energia cinética dissipada durante a colisão.

3.8.2 Modelo Detalhado com Atrito Tangencial

Em seu trabalho sobre o reator de contra-fluxo, Kitron et alii (1990) utilizaram um modelo de colisão relativamente abrangente na derivação da equação de Boltzmann para a função de distribuição da mistura de partículas. Em virtude deste modelo de colisão ser capaz de responder por colisões frontais e oblíquas, levando em conta, também, a dissipação energética ocasionada pelo atrito tangencial entre as partículas, será realizada uma apresentação detalhada nesta seção.

Denominando de \bar{n} o vetor unitário normal ao plano de colisão entre duas partículas e considerando que este vetor permanece constante durante o curto tempo de contato, pode-se relacionar as velocidades das partículas normais a este plano de colisão através da definição do coeficiente de restituição, conforme a equação a seguir:

$$(\bar{v}'_1 - \bar{v}'_2) \cdot \bar{n} = -\varepsilon(\bar{v}_1 - \bar{v}_2) \cdot \bar{n}, \quad (150)$$

onde \bar{v}_1 , \bar{v}_2 , \bar{v}'_1 e \bar{v}'_2 são as velocidades das duas partículas antes e depois do choque, respectivamente. O parâmetro ε é o coeficiente de restituição cuja faixa de variação vai de zero à unidade.

Um coeficiente de restituição unitário ($\varepsilon=1$) modela colisões elásticas entre as partículas, nas quais nenhuma energia mecânica é perdida durante o choque. Embora a hipótese de colisão elástica seja factível para alguns poucos materiais, como regra geral, a elasticidade parcial das partículas associada à possibilidade de fragmentação impõe a adoção de coeficiente de restituição inferior à unidade.

Quando duas partículas realizam uma colisão não frontal, ocorre que a componente da velocidade relativa tangencial ao plano de contato será não nula. Nesta situação, é gerado um atrito tangencial, cuja conseqüência imediata é a dissipação de alguma fração da energia mecânica carregada pelas partículas antes do embate. Para levar em conta a redução da velocidade relativa determinada por este tipo de atrito tangencial, aplica-se a seguinte equação:

$$(\bar{v}_1 - \bar{v}_2) \cdot \bar{\tau} - (\bar{v}'_1 - \bar{v}'_2) \cdot \bar{\tau} = -\eta(1 + \varepsilon)(\bar{v}_1 - \bar{v}_2) \cdot \bar{n}, \quad (151)$$

onde η é o coeficiente de atrito tangencial e $\bar{\tau}$ é o vetor unitário paralelo ao plano de colisão, ou seja, normal ao vetor \bar{n} .

De acordo com as hipóteses anteriormente relacionadas, pode-se resolver o sistema de equações composto por (150) e (151), a fim de obter as velocidades de duas partículas de massas m_1 e m_2 após uma colisão. Deste modo, resolvendo para as velocidades finais \bar{v}'_1 e \bar{v}'_2 consegue-se a equação:

$$\bar{v}'_\alpha = \bar{v}_\alpha + (-1)^\alpha \left(\frac{m_R}{m_\alpha} \right) \{ (1 + \varepsilon) [(\bar{v}_1 - \bar{v}_2) \cdot \bar{n}] \bar{n} + (1 - R) [(\bar{v}_1 - \bar{v}_2) \cdot \bar{\tau}] \bar{\tau} \}, \quad (152)$$

na qual o índice α (igual a 1 ou 2) referencia cada partícula, m_R é a massa reduzida calculada como

$$m_R = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)} \quad (153)$$

e o parâmetro R , uma função do ângulo de aproximação θ , é dado por

$$R(\theta) = \begin{cases} 1 - \eta(1 + \varepsilon) \cot \theta & ; \quad \theta^* \leq \theta \leq \pi/2 \\ 1 & ; \quad 0 \leq \theta < \theta^* \end{cases} \quad (154)$$

O ângulo de aproximação, por sua vez, é obtido de

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{\bar{n} \cdot (\bar{v}_1 - \bar{v}_2)}{|\bar{v}_1 - \bar{v}_2|} \right), \quad (155)$$

enquanto que o ângulo de corte que determina a descontinuidade em R é avaliado por

$$\theta^* = \tan^{-1} \eta(1 + \varepsilon).$$

A descontinuidade do parâmetro $R(\theta)$, evidenciada na equação (154), é uma determinação da condição física de que a força de atrito tangencial não pode inverter a velocidade relativa entre as partículas.

3.8.3 Considerações Geométricas

A aplicação de qualquer um dos modelos de colisão apresentados anteriormente requer, além do conhecimento de propriedades físicas e mecânicas das partículas, a determinação de algumas entidades geométricas, tais como os vetores normal e tangencial ao plano de colisão. Em vista de o modelo de movimentação das partículas ser tridimensional (vide seção 3.3), o cálculo destes vetores só pode ser realizado com base nos argumentos da geometria espacial, de modo que os procedimentos empregados na sua obtenção serão demonstrados em seguida.

3.8.3.1 Vetor Normal ao Plano de Colisão

O vetor normal ao plano de colisão (\vec{n}) pode ser obtido de modo direto assumindo-se que as duas partículas envolvidas no choque são razoavelmente esféricas. Portanto, sob esta hipótese, o vetor \vec{n} tem a mesma direção da reta que passa pelo centro de massa das partículas.

Para formular uma equação para o vetor normal ao plano de contato, considere que as duas partículas têm os seus centros de massa localizados pelos vetores posição \vec{r}_1 e \vec{r}_2 . Desse modo, calculando o vetor deslocamento dado pela diferença entre \vec{r}_1 e o vetor \vec{r}_2 e dividindo-se pelo seu módulo, consegue-se o vetor unitário normal ao plano de contato como:

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (156)$$

3.8.3.2 Vetor Tangente ao Plano de Colisão

Tendo-se calculado o vetor normal ao plano de colisão (\vec{n}), pode-se conseguir o vetor tangencial ($\vec{\tau}$) a este plano através de algumas operações da álgebra vetorial em três dimensões. De fato, o problema real que se apresenta consiste em determinar as componentes de um vetor que seja ortogonal ao vetor normal \vec{n} .

O vetor $\vec{\tau}$ pode ser calculado alternativamente de vários modos, no entanto, para efeito de eficiência computacional, interessa utilizar a formulação que seja a mais otimizada possível em termos de economia de tempo de processamento.

Como ponto de partida, considere-se que se dois vetores são ortogonais, é condição *sine qua non* que o produto escalar destes vetores seja nulo. Por conseguinte, deve ser verificada a equação

$$\vec{n} \cdot \vec{\tau} = (n_x, n_y, n_z) \cdot (\tau_x, \tau_y, \tau_z) = 0. \quad (157)$$

Na sua apresentação do método de volumes finitos em duas dimensões, Hirsch (1988) propõe que o vetor ortogonal a $\vec{n} = (n_x, n_y)$ deve ser dado na forma $\vec{\tau} = (n_y, -n_x)$. De fato, é imediatamente visível que o produto escalar destes vetores é nulo, ratificando a ortogonalidade.

Em virtude do movimento das partículas estar sendo modelado tridimensionalmente neste trabalho, é necessário estender a proposição inicial de Hirsch (1988). Deve ser ressaltado que há potencialmente diversos modos de cálculo do vetor tangencial ao plano de colisão, os quais se diferenciam pelas funções aplicadas na determinação de cada componente do vetor. Todavia, a melhor opção é aquela que se vale de funções matemáticas mais simples, de preferência não trigonométricas, possibilitando maior eficiência no uso do tempo computacional.

Ocultando os detalhes desnecessários, pode-se sugerir, por inspeção visual, que o vetor $\vec{\tau}$ tridimensionalmente ortogonal a \vec{n} tem a forma:

$$\vec{\tau} = ((n_y + n_z), -(n_x + n_z), \tau_z),$$

sendo τ_z a componente que deve ser obtida a fim de verificar o produto escalar nulo entre os dois vetores \vec{n} e $\vec{\tau}$. Desta maneira, resolvendo a equação (157) para a incógnita τ_z , consegue-se como resultando:

$$\tau_z = (n_y - n_x).$$

Portanto, o vetor ortogonal $\vec{\tau}$ tem as suas componentes dadas por

$$\vec{\tau} = ((n_y + n_z), -(n_x + n_z), (n_y - n_x)), \quad (158)$$

onde n_x , n_y e n_z são as componentes do vetor \vec{n} .

As vantagens da equação (158) são notórias, uma vez que esta contém apenas operações matemáticas primárias de soma e subtração, as quais são executadas com máxima eficiência nos processadores dos computadores modernos.

3.8.4 Escolha do Modelo de Colisão

A decisão de qual dos modelos de colisão supra citados é a melhor opção para ser incluída no modelo de simulação do transporte pneumático deve ser embasada em alguns critérios chave, a saber:

1. Dificuldade de implementação;
2. Tempo de execução requerido;
3. Análise de precisão e exatidão.

Quanto ao critério (1), tem-se que, não obstante o modelo detalhado demande a utilização de algumas equações adicionais, a diferença entre ambos os modelos, com respeito ao algoritmo computacional, não é substancial.

O critério (2) se refere à carga computacional requerida para a execução do algoritmo desenvolvido a partir do modelo de colisão. Esta carga computacional é função do número de operações determinado pelo modelo, o qual, por sua vez, é função direta da quantidade e complexidade das funções matemáticas nele contidas. Tendo-se em vista o fato de que, em geral, os modelos mais robustos e precisos são, também, mais complexos, pode-se notar que não seria fidedigna uma análise individual dos critérios (2) e (3), devendo estes ser avaliados em conjunto, a fim de se escolher o modelo de colisão com base num compromisso final de custo-benefício entre a precisão/exatidão oferecida pelo modelo e a sua carga computacional.

A capacidade de contemplar a variação da velocidade relativa devido ao atrito tangencial confere manifesta superioridade física ao modelo detalhado. Ponderando este fato e considerando a grande importância das interações partícula-partícula na dinâmica do escoamento sólido-fluido, conclui-se que o ônus decorrente da maior carga computacional do modelo de colisão detalhado é plenamente justificado pelo realismo físico que ele acrescenta à simulação.

3.9 Tratamento de Misturas Polidispersas

O modelo orientado a objeto implementado no simulador pode incorporar de maneira direta o suporte a misturas polidispersas de partículas. De fato, a orientação a objeto garante a flexibilidade suficiente para que sejam simuladas quaisquer diferenças de propriedades entre as partículas. Isso implica que, tratando-se cada partícula como objeto individual, pode-se atribuir características como diâmetro, densidade, esfericidade, coeficiente de restituição, etc. distintos para cada uma das partículas. Depois de atribuídos os valores das propriedades, as partículas se comportam de acordo com as interações que realizam entre si, com o fluido e com as paredes do equipamento, de modo análogo às partículas de um sistema físico real.

Mesmo que tamanha variação de propriedades da fase particulada não seja necessária, e de fato não o é, convém ressaltar que o modelo apresentado tem potencial para tal intento. Na grande maioria dos casos, é suficiente que seja introduzida uma distribuição de diâmetros na fase particulada, o que permite a análise de características relevantes na dinâmica das fases dispersa e contínua do transporte pneumático, a exemplo dos fenômenos de segregação – provavelmente o efeito de maior importância nos casos de misturas polidispersas.

Em muitos trabalhos encontrados na literatura especializada, utiliza-se um diâmetro médio para representar a fase dispersa (Soo, 1976; Sharma, 1977; Ogawa, 1983; Adewumi & Arastoopour, 1986). Entretanto, alguns autores têm desenvolvido modelos multifásicos na tentativa de simular sistemas polidispersos. Alguns destes adotam uma abordagem euleriana e consideram cada classe de partículas com características dinâmicas semelhantes

como sendo uma fase distinta (Arastoopour et. alii, 1982a). Como alternativa, há quem utilize a técnica lagrangiana, que procura rastrear a trajetória de várias partículas (Kitron et. alii, 1990).

Conforme mencionado anteriormente, o modelo aqui proposto tem abertura para a atribuição de uma distribuição de qualquer propriedade física ou característica geométrica das partículas. Para isso, é suficiente que seja estabelecida uma lei que defina o valor da propriedade variante no momento da criação da partícula, logo antes dela ser inserida no equipamento. Como cada partícula é um objeto neste modelo computacional, o valor da propriedade permanece armazenado num dos campos do objeto, sendo utilizado nas equações que estabelecem as interações da partícula com o ambiente ao seu redor. Seguindo esta idéia, foi implementado um algoritmo capaz de atribuir valores de diâmetros para cada partícula injetada no equipamento, de maneira que a distribuição granulométrica da mistura final obedeça a um modelo preestabelecido.

Quando realiza-se a análise granulométrica de uma amostra de partículas, é comumente obtida uma curva de fração mássica acumulada em função do diâmetro de partícula. Uma informação típica que pode ser obtida desta curva é a fração mássica de partículas da amostra que possui diâmetro maior do que um valor d_1 e menor do que um valor d_2 . Esta informação é muito útil em termos gerais, mas não tem qualquer serventia quando deseja-se estabelecer um algoritmo gerador de diâmetros que sigam uma dada distribuição granulométrica. Neste caso, ao invés de conhecer a curva de fração mássica da mistura, é requerido um conhecimento sobre a fração da população das partículas contidas numa certa faixa de diâmetros. Esta curva de fração populacional tem significado análogo a uma função de distribuição de probabilidade ou distribuição de frequência. Como a função de distribuição de probabilidade tem a propriedade de definir a chance de um elemento da população escolhido aleatoriamente pertencer a certa faixa (Box et. alii, 1978), devemos deduzir uma função de distribuição de probabilidade que se baseie no diâmetro das partículas da mistura.

3.9.1 Dedução da Função de Distribuição de Probabilidade

Considere um modelo de distribuição granulométrica descrito pela função $\chi = f(D)$. Esta função fornece o percentual de massa da amostra de partículas que possui diâmetro inferior ao valor D . Estamos interessados em determinar uma equação que calcule a fração da população de partículas que possui diâmetro inferior a D , cuja forma geral será $\eta = g(D)$.

Note que um diferencial de fração mássica $d\chi$ corresponde sempre a um diferencial de massa dm , através da relação

$$dm = m_T d\chi, \quad (159)$$

onde m_T é a massa total da mistura de partículas.

Para cada diferencial dm , existe um valor de diâmetro D associado, o qual corresponde a uma partícula de massa m_p . Portanto, o número de partículas dn pode ser obtido pela equação

$$dn = \frac{dm}{m_p} . \quad (160)$$

Isolando dm nesta equação, substituindo na equação diferencial (159) e rearranjando, consegue-se:

$$dn = \frac{m_T}{m_p} d\chi . \quad (161)$$

Como pode-se escrever $d\chi$ na forma:

$$d\chi = f'(D)dD ,$$

então, substituindo $d\chi$ na equação (161), vem que

$$dn = \frac{m_T}{m_p} f'(D)dD . \quad (162)$$

Considerando que a geometria da partícula não seja tão irregular de modo a permitir a definição de um diâmetro médio para ela, então a sua massa m_p seria dada por:

$$m_p = \frac{\rho_p \pi D^3}{6} .$$

Então, substituindo m_p na equação (162), consegue-se:

$$dn = \frac{6 m_T}{\rho_p \pi} \frac{f'(D)}{D^3} dD . \quad (163)$$

Se supusermos que a amostra de partículas possui um diâmetro mínimo D_{\min} e um diâmetro máximo D_{\max} para as partículas, esta equação pode ser integrada para fornecer o número total de partículas n_T na amostra, como segue:

$$n_T = \frac{6 m_T}{\rho_p \pi} \int_{D_{\min}}^{D_{\max}} \frac{f'(D)}{D^3} dD . \quad (164)$$

De maneira análoga, o número de partículas n com diâmetro superior a D_{\min} e inferior a um valor arbitrário D pode ser calculado como:

$$n = \frac{6 m_T}{\rho_p \pi} \int_{D_{\min}}^{\rho} \frac{f'(D)}{D^3} dD. \quad (165)$$

Por conseguinte, a fração da população de partículas com diâmetros na faixa (D_{\min}, D) é dada pela razão

$$\eta = \frac{n}{n_T}, \quad (166)$$

a qual, cancelando os termos comuns no numerador e denominador, pode ser rescrita na forma seguinte:

$$\eta(D) = \frac{\int_{D_{\min}}^{\rho} \frac{f'(D)}{D^3} dD}{\int_{D_{\min}}^{\rho_{\max}} \frac{f'(D)}{D^3} dD}. \quad (167)$$

Esta equação é justamente a função de distribuição de probabilidade acumulada, ou, mais simplesmente, *distribuição de fração populacional*, que procurávamos deduzir. Ela fornece, para cada diâmetro D , a fração da população de partículas que possui diâmetro menor do que este valor. Portanto, a fração de partículas com diâmetro numa faixa qualquer (D_1, D_2) é obtida calculando-se o valor $\eta(D_2) - \eta(D_1)$.

A equação (167) permite a construção do diagrama de distribuição de probabilidade acumulada que descreve o perfil de diâmetros para uma amostra de partículas. Para exemplificar, uma curva de distribuição populacional típica para uma amostra polidispersa de partículas é mostrada a seguir:

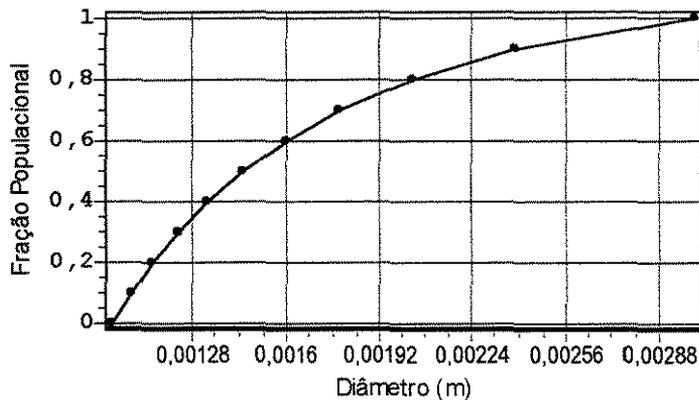


Figura 9: Curva de distribuição de fração populacional acumulada típica para uma mistura polidispersa de partículas.

Deve-se notar que o uso da função de distribuição de fração populacional deduzida requer a definição de um valor mínimo de diâmetro, pois, como pode-se observar, o integrando diverge para diâmetro nulo, causando, por conseqüência, a divergência da integral. Também são passíveis de ocorrer problemas de convergência causados por erros de arredondamento quando o limite inferior da integral é muito pequeno. A despeito destes detalhes de convergência, tomando-se as devidas precauções, não é difícil obter curvas de fração populacional como a da Figura 9.

3.9.2 Algoritmo da Geração de Diâmetros

De posse da função de distribuição de probabilidade acumulada para a população de partículas na forma da equação (167), pode-se dividir a faixa de diâmetros em intervalos de igual fração populacional, ou seja de igual probabilidade. Feito isso, durante o processo iterativo da simulação, estes intervalos de probabilidade são alternados consecutivamente de modo que cada nova partícula inserida tenha o seu diâmetro definido randomicamente na faixa de diâmetros do intervalo de probabilidade corrente.

Por exemplo, referindo-se à Figura 9, note que a ordenada foi dividida em cinco intervalos de 20% cada, ou seja, intervalos de igual probabilidade. Cada intervalo de probabilidade da ordenada está associado a uma faixa de diâmetros na abcissa. A implicação imediata destes intervalos de probabilidade é que um número igual de partículas está contido em cada uma das cinco faixas de diâmetro. Portanto, a distribuição granulométrica de uma mistura de partículas seguirá o modelo que gerou esta curva de distribuição de fração populacional se forem adicionados um mesmo número de partículas em cada uma das faixas de diâmetros. Em outras palavras: se uma mistura terá 5 partículas, deve-se escolher para a primeira partícula um diâmetro aleatório contido na primeira faixa; para a segunda partícula, escolhe-se um diâmetro na segunda faixa e assim sucessivamente. Isso garantirá que, ao final do processo, a mistura possua uma distribuição granulométrica tal qual a que deu origem à distribuição de fração populacional utilizada durante a introdução das partículas.

Em termos computacionais, as cinco faixas de diâmetro da Figura 9 são alternadas ciclicamente, a fim de que a todo momento da simulação, a mistura de partículas simulada tenha o perfil granulométrico desejado.

4. DESENVOLVIMENTO DO SIMULADOR

4.1 Introdução

O desenvolvimento de um simulador de transporte pneumático fundamentado nos conceitos da **Simulação Orientada a Objeto (SOO)** pode ser mais efetivamente realizado através dos preceitos contidos no paradigma da orientação a objeto, próprio das linguagens de programação mais modernas, tais como Smalltalk, LISP, C++, Pascal Objeto dentre muitas outras. O tema da orientação a objeto tem sido tratado abrangentemente em várias obras da literatura de engenharia de software, como, por exemplo: Stroustrup (1988), Booch (1989) e Meng (1990). Isto não significa que não seria possível implementar tal sistema numa linguagem convencional, no entanto a aplicação dos conceitos e definições propostos seria muito dificultosa numa linguagem de programação que não contenha a extensões que suportem o modelo de orientação a objeto. Deste modo, é conveniente uma breve explanação sobre o significado da orientação a objeto, a sua importância na programação e sobre a proposta feita neste trabalho para a sua aplicação no desenvolvimento de algoritmos de simulação, e não apenas para elaborar interfaces amigáveis para programas de computador, como é de costume.

4.1.1 O Paradigma da Programação Orientada a Objeto

A orientação a objeto na programação consiste em um conjunto de conceitos e elementos fundamentais baseados na idéia da abstração. De modo geral, pode-se dizer que a abstração proporcionada pelas linguagens de programação pode ser dividida em duas categorias, as quais se referem à *representação de dados* e às *estruturas de controle* (Pressman, 1982).

A abstração sobre a representação de dados resulta no conceito fundamental de *tipo de dado*, ou simplesmente *tipo*. Historicamente, a primeira geração das linguagens de programação já introduziu o conceito de *tipo*, mas a idéia dos *tipos definidos pelo usuário* tais como *registros* e *vetores*, que enriquecem sobremaneira as alternativas de programação, só foi implantada na segunda geração de linguagens. O entendimento chave sobre os *tipos de dado* está no fato de que estes servem apenas para guardar fragmentos de informação, ficando a cargo das estruturas de controle a tarefa de processar e transformar estas informações. Portanto, pode-se notar que, até este ponto, a informação e o seu processamento são postos de forma isolada um do outro, a despeito do fato de haver uma intrínseca conexão entre eles.

O passo seguinte deste processo foi a evolução da idéia de *tipo de dado* para o conceito de *tipo de dado abstrato*, o qual é essencialmente um *tipo* que associa a representação dos dados com as operações usadas para processar estes dados. A criação dos *tipos de dado abstrato* aprimorou o uso de conceito de *encapsulamento* que permite esconder do usuário os detalhes de como a informação é armazenada e processada (Coad & Yourdon, 1990) no interior do *tipo de dado abstrato*.

Classes

A partir dos *tipos de dado abstrato*, as linguagens orientadas a objeto obtiveram as estruturas básicas para o seu desenvolvimento. O conceito de *tipo de dado abstrato* ganhou uma extensão que é implementada nas linguagens programação, extensão essa denominada de *classe*. As *classes* e os *tipos de dado abstrato* são, em sua essência, a mesma coisa, havendo diferenças menores quando comparam-se as várias linguagens de programação. As classes são o elemento mais básico do paradigma da orientação a objetos, visto que elas se constituem no meio de associação entre os *dados* e as *operações* sobre os dados, assim como são, também, a base de modularidade deste paradigma. Pode-se definir uma *classe* como sendo a descrição abstrata de um grupo de *objetos*, cada *objeto* tendo um estado específico, mas todos sendo capazes de realizar as mesmas *operações*. Em suma, pode-se dizer que as *classes* são compostas por *dados* e *operações*.

Para esclarecer, considere-se um equipamento de transporte pneumático. Dentro do equipamento, existem várias partículas sólidas em movimento. Cada uma destas partículas possui características tais como diâmetro, densidade, esfericidade, etc., sendo que o valor destas propriedades pode ser diferente de partícula para partícula. Entretanto, apesar de serem diferentes, as partículas interagem entre si e com a vizinhança segundo leis físicas que são as mesmas para cada uma das partículas, não importando o quão diferentes elas sejam. Esta verificação nos sugere de modo bastante natural a abstração de que podemos enxergar as partículas como uma *classe* que poderíamos batizar de, por exemplo, “partícula”. Neste contexto, podemos identificar que os *dados* da classe “partícula” são as propriedades das partículas, enquanto que as leis físicas que regem as interações partícula-partícula e com o ambiente seriam as suas *operações*.

De fato, esta abordagem foi aplicada no presente trabalho e proporcionou um método bastante conveniente para tratar sistemas de natureza essencialmente discreta, visto que as entidades componentes destes sistemas passam a agir e interagir quase que por conta própria quando são abstraídas na forma de classes.

Por conseguinte, pode-se considerar que as classes têm dois propósitos fundamentais:

1. Classes podem ser usadas para representar de forma abstrata entidades do mundo real, não importando o quão complexas elas sejam.
2. Classes são a base de modularidade e encapsulamento em um programa. Os algoritmos podem ser implementados como operações no interior de classes e ter os seus detalhes de funcionamento isolados do usuário. De fato, quase sempre não é conveniente complicar o usuário expondo detalhes de implementação de um algoritmo quando somente o que ele precisa saber é o que o algoritmo recebe como entrada e o que é devolvido como saída.

Embora os conceitos envolvidos neste tópico da programação já estejam bem sedimentados, a terminologia varia de acordo com a linguagem e com o autor. Neste

sentido, note-se que os *dados* de uma classe podem ser denominados de *campos* ou *membros*, enquanto que as *operações* também são denominadas de *métodos* da classe (Pressman, 1982).

Herança

Além das classes, o paradigma da orientação a objeto requer dois outros conceitos, os quais são *herança* e *polimorfismo*. O conceito de *herança* permite a construção de uma nova classe com base em uma outra classe existente, dizendo-se que a nova classe é uma classe derivada da classe mãe. Esta classe derivada herda os campos (dados) e os métodos (operações). A herança proporciona um meio de aproveitar o trabalho já realizado na implementação de classes existentes, o que se traduz no aproveitamento de código computacional. Pode-se construir uma classe especializada derivando-a de uma classe mãe e adicionando-se novos campos e métodos a esta classe derivada.

Considere o exemplo das partículas no simulador de transporte pneumático deste trabalho. Note que as propriedades das partículas e as suas interações dinâmicas podem ser encapsuladas dentro da classe “partícula”, como citado anteriormente. Entretanto, é preciso implementar uma maneira de extrair informações sobre a história da partícula ao longo do seu trajeto. Esta tarefa pode ser realizada pela criação de uma classe derivada da classe “partícula”, a qual denominaremos de “traçador” e adicionaremos campos capazes de guardar a história da partícula e métodos capazes de armazenar esta informação nestes campos. Pode-se pensar que um meio alternativo seria implementar estas funções na própria classe mãe, capacitando todas as partículas de gravar a sua história. Realmente esta é uma opção, contudo a menos que seja necessário saber a história de todas as partículas, ela deve ser evitada pois a demanda de memória e a degradação da eficiência podem ser proibitivos.

Polimorfismo

A terceira construção chave da orientação a objeto é o *polimorfismo*. Através deste conceito, pode-se derivar uma nova classe e sobrepor alguns de seus métodos com outros que trabalhem de maneira diferente. Deste modo, uma classe primária pode servir de base para diversas classes derivadas que contêm os mesmos métodos e implementações diferentes para cada um deles.

Para exemplificar, observa-se novamente a classe “partícula”. Considere que certas partículas no interior do equipamento de transporte têm forma bastante diferente das demais, por exemplo, partículas esféricas e partículas alongadas. Suponha que a diferença de forma seja tamanha que um mesmo modelo de colisão não possa ser aplicado para todas as partículas. Para solucionar este problema, pode-se derivar uma classe de partícula alongada e outra de partícula esférica a partir da genérica classe “partícula” e sobrepor o *método* que executa a colisão entre partículas. Desta forma, toda a lógica da classe primária “partícula” é aproveitada e muda-se apenas o que é diferente entre os dois tipos de partículas: o método de colisão.

Linguagens Orientadas a Objeto

Para implementar um modelo de simulação orientado a objeto, o qual denominaremos de **Simulação Orientada a Objeto (SOO)** é recomendável que se utilize uma linguagem que incorpore os conceitos fundamentais deste paradigma.

Alguns consideram que a primeira linguagem orientada a objeto foi a Simula67, entretanto a primeira a implementar completamente os preceitos da orientação a objeto foi a Smalltalk. A Smalltalk é uma linguagem pura no que respeita a orientação a objeto. Nela não é possível declarar uma variável ou criar uma subrotina fora de uma classe. Posteriormente à Smalltalk, vieram as linguagens híbridas, tais como Pascal Objeto, C++, C Objeto e CLOS. Estas últimas são modificações das linguagens já existentes. Foram adicionadas a elas extensões de linguagem que permitiram a implementação da orientação a objeto. Com estas linguagens, pode-se usar estruturas próprias das linguagens convencionais aliadas às classes da orientação a objeto. Também são dignas de menção as linguagens baseadas em objetos, as quais têm como seu representante mais forte o Visual Basic™ da Microsoft®. O maior destaque destas linguagens baseadas em objetos é a sua facilidade de uso.

Não é objetivo desta seção fazer uma apologia sobre qual é a melhor dentre as linguagens orientadas a objeto disponíveis no mercado. Contudo, existem pontos de análise que devem ser considerados na escolha da linguagem a ser utilizada em um projeto, sejam estes: a velocidade de execução do código compilado, a facilidade de uso, a legibilidade do código produzido na linguagem e o tempo de vida da linguagem, afinal não é interessante escrever sistemas em uma linguagem que está entrando em desuso. Segundo estes critérios gerais, o código desenvolvido em Pascal Objeto mostra um compromisso excelente entre velocidade e legibilidade, mesmo quando comparado ao C++, pois este gera código com menor manutenibilidade e velocidade bastante comparável. Entretanto, o fator determinante na escolha da linguagem, excluindo-se limitações técnicas, sempre acaba sendo a familiaridade que o programador tem com ela.

Em suma, é importante utilizar a ferramenta adequada para a codificação de um projeto de sistema baseado na orientação a objetos. Esta ferramenta é uma boa linguagem de programação. Porém, note-se que as técnicas modernas de projeto de software permitem a definição e caracterização de todo um programa de computador antes que seja escrita a primeira linha de código. Tal característica é importante, pois torna o projeto independente da linguagem de programação, facilitando a portabilidade do programa para outras linguagens ou outras plataformas de hardware e software.

4.2 Considerações de Projeto

4.2.1 Concepção

O desenvolvimento de um simulador envolve a tomada de decisões importantes já na primeira fase do seu projeto. Tais decisões terão reflexo durante todo o processo de desenvolvimento e determinarão o aspecto e funcionalidade finais do sistema.

A concepção é o passo inicial: neste ponto vem o motivo, a idéia que serve de motor para a empreitada. Neste trabalho, teve-se a intenção de desenvolver um sistema com uma tecnologia de ponta embutida, no que diz respeito à simulação de transporte pneumático, e que, mesmo assim, apresentasse razoável facilidade de uso, característica modernamente denominada de *amigabilidade* (no inglês: “*user friendly*”). Quanto à tecnologia de ponta, ela seria desenvolvida ao longo do trabalho, mas para atender ao requisito de *amigabilidade* optou-se por elaborar o sistema no ambiente gráfico Windows™. Trata-se do sistema operacional com interface gráfica que tem maior utilização no mercado mundial, graças à enorme popularização dos PC's.

Como plataforma de hardware, foi escolhido o PC, sendo que, além do baixo custo, considerou-se a tendência atualmente existente de que a performance dos computadores pessoais está se aproximando das estações de trabalho de alto desempenho. De fato, tudo indica que a curto ou médio prazo a distinção entre estações de trabalho e computadores pessoais perderá o sentido. Não utilizou-se processamento paralelo justamente para facilitar o uso do sistema por qualquer indivíduo que possua apenas uma máquina monoprocessada à sua disposição. No entanto, deve-se evidenciar que o algoritmo implementado no simulador tem todos os requisitos para ser paralelizado em projeto futuro, garantindo o poder computacional necessário à resolução de problemas de maior porte. Mesmo tendo-se ponderado estas questões, note que o hardware não é um fator limitante, pois a indústria de tecnologia de informática evolui numa velocidade vertiginosa. Deste modo, uma barreira de tempo computacional nos dias atuais pode não ser problema no ano seguinte. Portanto, fica manifesto que o mais importante é desenvolver a tecnologia da simulação, ou seja, os algoritmos e a lógica envolvida. Toda a tecnologia está guardada nesta lógica, os computadores são somente a ferramenta para garantir a operacionalidade da tecnologia.

4.2.2 Arquitetura do Simulador

Nesta seção será elaborada uma explanação versando a estrutura lógica embutida na arquitetura do simulador. A compreensão dos conceitos de orientação a objeto é desejável, mas não imprescindível, ao entendimento desta arquitetura.

O procedimento básico para o ataque de um problema que se mostra demasiadamente complexo é a sua subdivisão em partes menores que se tornam mais gerenciáveis e comunicáveis. Estas subdivisões do problema devem conter elementos comuns que estão naturalmente inter-relacionados. Esta, também, é uma função da criação das classes na abstração deste simulador.

O simulador de transporte pneumático pode ser abstraído numa representação composta por várias classes, dentre as quais temos:

1. **Simulação:** é a classe responsável pelo gerenciamento de toda a simulação e de suas interrupções. É a classe Simulação a responsável pela alocação e liberação da memória necessária para armazenar a história da simulação, leitura dos dados inseridos pelo usuário na interface do simulador, monitoração da simulação e apresentação de resultados intermediários na interface que permitam ao usuário

acompanhar o processo de transporte pneumático simulado. Esta classe guarda todas as informações de entrada e saída associadas à simulação propriamente dita.

- 2. Equipamento:** a classe Equipamento é a representação do tubo de transporte pneumático. Ela guarda todas as características geométricas do equipamento, tais como diâmetro e comprimento, bem como propriedades que estão associadas ao conjunto de partículas em seu interior, como por exemplo a massa e o volume total de partículas no equipamento, os coeficientes de colisão entre partículas e das partículas com a parede, número de partículas sendo transportadas, etc., além de conter os métodos que realizam o movimento das partículas, testam a colisão entre partículas e das partículas com a parede e gerenciam a discretização espacial do equipamento.
- 3. Partícula:** a classe Partícula guarda as informações que podem variar de partícula para partícula, a exemplo do diâmetro, esfericidade, densidade, etc. Dentre os métodos da classe Partícula, estão os responsáveis pela interação fluido-partícula, os quais calculam a força resultante, a aceleração e o deslocamento para cada partícula em cada nível de tempo da simulação. Na verdade os métodos que verdadeiramente realizam o teste de colisão e a colisão propriamente dita entre duas partículas estão implementados na classe Partícula e não na classe Equipamento. Esta última simplesmente invoca estas funções da classe Partícula.
- 4. Traçador:** o Traçador é uma classe derivada da classe Partícula. Como tal, ela herda os campos e métodos desta classe. Além da funcionalidade da classe partícula, foram adicionados à classe Traçador campos e métodos capazes de gravar a informação da história da partícula ao longo da sua travessia do equipamento. A partícula de traçador pode guardar as informações de posição, velocidade e força resultante da partícula a intervalos de tempo regulares durante a simulação. Com estes dados coletados pelo traçador, pode-se elaborar gráficos elucidativos do movimento de uma partícula dentro do equipamento. Desta forma, desde que o traçador seja inserido no equipamento em condições que o tornem representativo das demais partículas, podem ser obtidos valores quantitativos sobre o movimento das partículas no transporte pneumático. O objetivo da classe Traçador é a coleta de informações dinâmicas quantitativas sobre o movimento das partículas sem causar sobrecarga ou degradação da eficiência do simulador, visto que o armazenamento destas informações para todas as partículas dentro do equipamento seria desnecessário e causaria um consumo de memória insuportável.
- 5. Fluido:** a classe Fluido encapsula as informações inerentes a cada elemento de fluido, tais como densidade, viscosidade, volume, massa, energia cinética turbulenta, taxa de dissipação da energia turbulenta, posição, velocidade etc. Dentre os seus métodos, estão as atribuições do cálculo das taxas de variação da turbulência e da sua própria movimentação.

A partir de agora, considerar-se-ão, de maneira mais próxima, as funções dos campos e métodos mais importantes das classes que compõem o simulador de transporte pneumático. Para identificar os métodos, serão utilizados os mesmos nomes presentes no código fonte do simulador, no entanto esta nomenclatura é livre, não importando os identificadores dos métodos, mas sim as operações que eles realizam.

Simulação

Dentre os métodos da classe Simulação, cita-se:

1. *Inicializar*: Inicializa os campos necessários à execução da simulação.
2. *Executar*: Dá a partida ao processo de simulação propriamente dito. A chamada deste método faz com que as partículas comecem a ser injetadas no equipamento, de modo que os fenômenos do transporte pneumático comecem a ser simulados.
3. *AtualizarInterface*: Mostra informações intermediárias da simulação para o usuário, a fim de que ele possa acompanhar o processo de modo on-line. Este método é chamado a cada nível do processo iterativo para que os números mostrados na interface sejam sempre atualizados.
4. *GravarHistoria*: Grava a história da simulação. Este método é invocado em intervalos regulares de acordo com o valor do tempo de amostragem definido pelo usuário.
5. *DestruirHistoria*: Destrói a lista de história da simulação, liberando a memória que estava sendo ocupada. Quando inicia-se uma nova simulação, a lista de história da simulação anterior é liberada automaticamente.

Equipamento

Dentre os métodos da classe equipamento, cita-se:

1. *InicializarCels*: Inicializa os campos de cada célula que compõe a discretização espacial do equipamento. Este método é chamado apenas no início da simulação.
2. *AnalisarPosicaoPart*: Analisa a posição de cada partícula dentro do equipamento para verificar se ela colidiu com a parede ou se já saiu pela parte inferior ou superior do tubo. Este método é chamado em cada nível iterativo, após a movimentação das partículas.
3. *MoverParts*: Recebe como parâmetro de entrada um valor de tempo que será usado para mover as partículas no equipamento a cada nível iterativo no tempo. Este método varre a lista de partículas e invoca o método *MoverPart* da classe Partícula.
4. *MonitorarTracador*: Caso haja algum traçador no interior do equipamento, este método é chamado para gravar a história do traçador a cada passo de tempo. Ele

- apenas invoca o método *GravarPartHstRec* da classe Traçador, sendo este método quem realmente registra a história do traçador.
5. *GetCel*: Recebe como parâmetro de entrada um vetor posição em coordenadas cilíndricas e retorna um ponteiro para a célula do equipamento onde o ponto associado ao vetor posição se encontra. É utilizado para determinar a célula em que cada partícula se encontra a cada nível de tempo.
 6. *CalcDimCels*: Calcula as dimensões das células que compõem o equipamento após a discretização espacial. Este método é invocado apenas no início de uma simulação.
 7. *InserirPart*: Este método insere novas partículas na base do equipamento.
 8. *RetirarPart*: Remove uma partícula quando ela sai pela parte superior ou inferior do equipamento.
 9. *InserirTracador*: Insere uma partícula de traçador no interior do equipamento.
 10. *MudarPartCel*: Transfere uma partícula de uma célula origem para uma célula destino. Toda vez que uma partícula muda de célula ao se deslocar, este método é invocado para que seja mudada a lista de partículas à qual a partícula pertence. Note-se que cada célula tem a sua lista de partículas, através da qual as partículas que estão no interior de cada célula são gerenciadas.
 11. *VerificarColisoes*: É responsável por verificar se houve colisão entre as partículas do equipamento. Todo o procedimento de verificação de colisões entre partículas é disparado por este método.
 12. *ColidirParts*: Caso tenha ocorrido colisão entre pelo menos duas partículas, este método invoca o método *ColidirPart* da classe partícula para efetuar a colisão entre as duas partículas.
 13. *GetCellIndexes*: Recebe um vetor posição em coordenadas cilíndricas e retorna os índices da célula que o contém.
 14. *AtualizarPropsPartsEquip_Saida*: Atualiza as propriedades do equipamento sempre que uma partícula é retirada. Dentre estas propriedades estão a massa e o volume totais das partículas. O objetivo desta atualização instantânea é a economia de tempo computacional na recuperação de tais informações, pois, sem ela, seria preciso varrer toda a lista de partículas.
 15. *AtualizarPropsPartsEquip_Entrada*: Atualiza as propriedades do equipamento sempre que uma partícula é inserida. Dentre estas propriedades estão a massa e o volume totais das partículas. É análogo e simétrico ao método *AtualizarPropsPartsEquip_Saida*.
 16. *VerificarTracador*: Verifica se o traçador foi removido do equipamento. Em caso afirmativo, remove a partícula de traçador do equipamento.

17. *CalcAceleracaoParts*: Calcula a aceleração de cada partícula no interior do equipamento de acordo com as forças fluidodinâmicas e de campo envolvidas.
18. *VerificarPosicaoFlu*: Verifica, a cada passo de tempo, a posição dos elementos de fluido no interior do equipamento. Se o elemento de fluido tiver saído pelo topo, então ele é destruído e a memória alocada é liberada.
19. *AtualizarPropriedadesMediasCel*: Atualiza as propriedades médias de cada célula do equipamento. Esta atualização é feita toda vez que alguma exibição das propriedades é requerida, como, por exemplo, na diagramação dos perfis de porosidade.
20. *LiberarMemoria*: Libera a memória alocada para todas as células do equipamento, assim como as partículas residentes em cada célula. Este método é invocado sempre que uma simulação é reiniciada.
21. *LiberarMemoriaFlu*: Libera a memória alocada para todas as células de fluido do equipamento, assim como o elemento de fluido associado a cada célula de fluido. Este método é invocado sempre que uma simulação é reiniciada.
22. *InicializarCelsFlu*: Inicializa os campos de cada célula de fluido que compõe o equipamento. Este método é chamado apenas no início da simulação.
23. *InicializarFluido*: Cria um elemento de fluido para cada célula de fluido do equipamento e inicializa os seus campos.
24. *GetCelFluIndexes*: Recebe um vetor posição cilíndrico e retorna os índices da célula de fluido que o contém.
25. *GetCelFlu*: Recebe um vetor posição cilíndrico e retorna um ponteiro para a célula de fluido que o contém.
26. *CalcForcaCelsFlu*: Calcula a força atuante nos elementos de fluido de acordo com o valor das forças de campo e das tensões ocasionadas pelos elementos de fluido adjacentes. Este método também é responsável pelo cálculo da taxa de turbulência para cada elemento de fluido no equipamento. Tal procedimento é realizado invocando-se os métodos *CalcForcaCelFlu* e *CalcTaxaTurbCel* para cada célula de fluido do equipamento, os quais recebem como parâmetro um ponteiro para a célula de fluido que deve ser processada.
27. *MoverFluido*: Desloca os elementos de fluido de acordo com o intervalo de tempo que lhe é passado como parâmetro. Este método é chamado depois que as forças atuantes em cada elemento de fluido já forem determinadas.
28. *CalcTaxaTurbCel*: Este método recebe um ponteiro para uma célula de fluido como parâmetro de entrada e calcula as taxas de variação da energia cinética de turbulência e de dissipação de energia cinética para a célula de fluido referenciada.

29. *AceleracaoCol*: Este é o método que implementa a abstração das colunas de fluido. A sua função é calcular a aceleração de cada coluna de fluido do equipamento, a qual será posteriormente utilizada para a movimentação dos elementos de fluido componentes da coluna. A chamada de *AceleracaoCol* ocorre após o método *CalcForcaCelsFlu* ter sido executado para determinar as forças atuantes em cada célula de fluido.
30. *CalcPropTurbFront*: Calcula as propriedades de turbulência k e ϵ para as células de fluido adjacentes à parede do equipamento de transporte. Este método implementa a condição de parede definida a partir do perfil universal de velocidades modificado.
31. *CalcVfForçado*: Recebe um vetor posição cilíndrico e calcula a velocidade do fluido no ponto representado por este vetor. Este método implementa um perfil de velocidade turbulento forçado que segue à lei da potência.
32. *CalcVfSimulado*: Recebe um vetor posição cilíndrico e calcula a velocidade do fluido no ponto representado por este vetor. Neste caso a velocidade é obtida pela interpolação do valor da velocidade simulada do fluido em duas células adjacentes.
33. *DefinePropFluido*: Recebe um vetor posição cilíndrico e calcula as propriedades do fluido no ponto correspondente ao vetor.
34. *CalcVazaoFluido*: Calcula a vazão volumétrica do fluido. Este método é invocado antes da exibição dos valores de vazão ou antes da gravação de cada registro de história da simulação.
35. *CalcTensaoParede*: Calcula a tensão na parede do tubo de acordo com a lei de Newton para viscosidade.
36. *CalcVelocAtrito*: Determina a velocidade de atrito a partir da tensão na parede fornecida por *CalcTensaoParede*.
37. *CalcPropsLeiParede*: Recebe um elemento de fluido como parâmetro e calcula as propriedades da lei de parede para ele. Este método é usado para a exibição das propriedades de turbulência.

Partícula

1. *Create*: Aloca memória para uma nova partícula e retorna um ponteiro para ela. É este método que de fato cria as partículas na abstração computacional.
2. *DefinePropPart*: Define as propriedades da nova partícula criada por *Create* antes que ela seja inserida no equipamento. Dentre estas propriedades estão o diâmetro, a densidade e a esfericidade. É neste método que são implantadas as heterogeneidades na mistura de partículas. Por exemplo, para criar uma mistura polidispersa, basta estabelecer uma lei para a atribuição do diâmetro de cada nova partícula.

3. *CalcAceleracaoPart*: Calcula a aceleração atuante sobre a partícula na iteração corrente. A generalidade deste método está no fato de utilizar a 2ª lei de Newton para o movimento tridimensional de corpos finitos sem qualquer hipótese restritiva, juntamente com parâmetros fenomenológicos tal como o coeficiente de arraste para calcular a aceleração da partícula. Este método é a peça chave da interação fluido-partícula, visto que é ele que determina a aceleração fluidodinâmica que o movimento do fluido impõe à partícula.
4. *MoverPart*: Move a partícula usando um passo de tempo passado como parâmetro.
5. *CalcXpVpEntrada*: Determina a posição e velocidade iniciais da partícula quando ela é inserida no equipamento.
6. *ColidirPart*: Executa a colisão entre duas partículas. Este método recebe como parâmetro um ponteiro para a partícula que será colidida com a instância que invocou o método.
7. *TestarColisao*: Verifica se duas partículas colidiram depois de se deslocarem. Este método recebe um ponteiro para a partícula que será testada com a instância que invocou o método e analisa se as trajetórias das duas partículas se cruzam dentro do passo de tempo da simulação.
8. *CalcCD*: Calcula o coeficiente de arraste para a partícula.
9. *CalcDp*: Determina o diâmetro das partículas no momento da sua criação de modo que a distribuição granulométrica seja respeitada. Este método só é invocado quando opta-se por utilizar uma distribuição de diâmetros para as partículas, a fim de compor uma mistura polidispersa.

Traçador

1. *InitTrac*: Aloca memória para o novo traçador e retorna um ponteiro para ele. É este método que cria o traçador na abstração computacional.
2. *DefinePropTrac*: Define as propriedades do traçador antes que seja inserido no equipamento. Este método permite que o usuário escolha, de acordo com o seu julgamento, os valores de diâmetro, densidade e esfericidade do traçador, de maneira que os efeitos das várias escolhas possam ser estudados.
3. *GravarPartHstRec*: Grava um registro da história da partícula de traçador.
4. *DestruirPartHst*: Libera a memória utilizada para guardar a história da partícula de traçador.

Fluido

Dentre os métodos da classe fluido, cita-se:

1. *Init*: Aloca memória para o elemento de fluido e inicializa os seus campos. É este método o responsável imediato pela criação do elemento de fluido.
2. *Mover*: É encarregado de fazer o deslocamento dos elementos de fluido para um intervalo de tempo recebido como parâmetro. Este método é invocado após o cálculo das taxas de variação das propriedades turbulentas e das forças atuantes em cada elemento de fluido.
3. *CorrigirPressao*: Faz a correção da pressão de cada elemento de fluido após o seu deslocamento.
4. *CalcPropTurb*: Atualiza os valores das propriedades turbulentas a cada passo de tempo. As taxas de variação das grandezas turbulentas são determinadas antes da chamada deste método.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Introdução

Ao desenvolver-se um modelo matemático objetivando a previsão de fenômenos em algum sistema físico real, deve-se ter cautela no que respeita às suas aplicações. Este cuidado é requerido devido às possíveis aproximações matemáticas/numéricas envolvidas ou mesmo limitações das faixas de validade dos parâmetros físico-químicos utilizados.

Para que um modelo tenha respaldo e confiabilidade, é preciso passar para a fase subsequente ao seu desenvolvimento, procedendo, portanto, com a sua validação. De fato, a confiabilidade e robustez do modelo crescem gradualmente à medida que mais aplicações vão sendo realizadas, revelando o seu poder e eficácia, assim como, também, os seus pontos vulneráveis.

O processo de validação consiste fundamentalmente na sucessão repetitiva de duas etapas: análise fenomenológica e comparação. O objetivo da fase de análise fenomenológica é a consolidação do modelo, buscando-se alguma inconsistência em testes iniciais especialmente selecionados. Não sendo verificada qualquer discrepância, aceita-se o teste como a favor do modelo. A etapa de comparação dos resultados do modelo pode ser feita com dados experimentais ou com resultados oriundos de simulações de outros modelos já validados. Além disso, pode-se aplicar o modelo na resolução de um sistema relativamente simples, cuja solução analítica seja conhecida, a fim de compará-las a *posteriori*.

Consonante com o procedimento supra descrito, e tendo concluído a etapa de elaboração do modelo, fez-se executar a fase de validação. O modelo de transporte pneumático aqui proposto é, em verdade, constituído por vários mecanismos de modelagem, entre os quais existe uma atribuição de funções bem definida. Dentro deste conjunto, tem-se os modelos (a) de deslocamento do fluido, (b) de movimentação das partículas, (c) de acoplamento sólido-fluido, (d) de interação partícula-partícula, (e) de turbulência, (f) de geração de diâmetro das partículas, além de outros subalgoritmos internos. Este encapsulamento de funções em unidades lógicas de modelagem – o qual decorre naturalmente da simulação orientada à objeto (SOO) – permite a realização de uma gama de combinações e a conseqüente análise dos seus efeitos. Por exemplo, pode-se simular o escoamento de um fluido puro, sem partículas; ou um escoamento sólido-fluido com ou sem interação entre as duas fases; o perfil de velocidades do fluido pode ser forçado ou simulado e laminar ou turbulento, sendo estas apenas algumas das possibilidades.

Para começar esta fase de verificação, optou-se por avaliar primeiramente a eficiência do algoritmo de modelagem do escoamento do fluido. Em geometrias dotadas de simetria, as equações de Navier-Stokes podem ser resolvidas analiticamente se forem assumidas as simplificações decorrentes da hipótese de escoamento laminar e

desenvolvido²⁴. Dentro destas considerações, o perfil de velocidades obtido para o escoamento laminar e incompressível em um tubo de seção circular é

$$u_z = \frac{(P_0 - P_L)R^2}{4\mu L} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right], \quad (168)$$

onde R e L são o raio e o comprimento do tubo respectivamente; P_0 e P_L representam a pressão piezométrica na entrada e na saída do tubo; u_z é a velocidade axial do fluido.

A partir da equação (168), tem-se que a velocidade máxima alcançada no centro do tubo é dada por:

$$u_{z,\text{máx}} = \frac{(P_0 - P_L)R^2}{4\mu L} \quad (169)$$

Integrando a equação (168) ao longo de todo o raio, consegue-se a conhecida equação de Hagen-Poiseuille, a qual fornece a vazão de fluido na forma:

$$Q = \frac{\pi(P_0 - P_L)R^4}{8\mu L} \quad (170)$$

Devido ao fato de serem soluções exatas, as equações (168) a (170) são a ferramenta para a validação do modelo do fluido no caso de escoamento laminar incompressível, como mostrado a seguir.

5.2 Modelo de Escoamento Laminar de Fluido Puro

5.2.1 Tubo Horizontal (Sem gravidade)

Este estudo-de-caso refere-se ao sistema no qual um fluido puro escoar em um tubo horizontal, sem efeito de qualquer força de campo. Os parâmetros utilizados nesta simulação estão descritos nas tabelas abaixo.

²⁴ Este procedimento está descrito em detalhes na literatura clássica de mecânica dos fluidos, por exemplo: Bird et alii (1960) ou Bennett & Myers (1962).

5.2.1.1 Parâmetros

Tabela 3: Características da simulação. Escoamento laminar horizontal de fluido puro.

No. Iterações/Seg. (1/s)	1000
Passo de Tempo (s)	0,001
Taxa de Injeção de Partículas (1/s)	0
Tempo Mínimo de Colisão (s)	1E-6
Simular Colisões	Não
Colisões para Células Adjacentes	Não
Simular Escoamento do Fluido	Sim
Simular Turbulência	Não
Simular Acoplamento Sólido -> Fluido	Sim
Intervalo Atualização (s)	2
Intervalo Amostragem (s)	20

Tabela 4: Características do equipamento. Escoamento laminar horizontal de fluido puro.

Diâmetro (m)	0,1
Altura (m)	2
Coef. de Restituição	1
Coef. de Fricção	0
Coef. de Recuperação	0,5
Pressão na Entrada (Pa)	101001
Pressão na Saída (Pa)	101000
Energia Turb. Inicial	0,01
Dissipação Turb. Inicial	0,01
Gravidade X (m/s ²)	0
Gravidade Y (m/s ²)	0
Gravidade Z (m/s ²)	0

Tabela 5: Características do fluido. Escoamento laminar horizontal de fluido puro.

Densidade (kg/m ³)	1
Viscosidade (Pa.s)	1,8E-5
Veloc. Radial (m/s)	0
Veloc. Angular (m/s)	0
Veloc. Axial (Centro) (m/s)	20

Tabela 6: Características da discretização do fluido. Escoamento laminar horizontal de fluido puro.

No. de Elementos – Radial	9
No. de Elementos – Axial	10
Passo Inicial Radial (m)	0,004
Passo Axial (m)	0,2
Alfa	0,00017283
Beta	0,004
Beta (Grade Regular)	(Reg. -> 0,00556)
Limite Beta	-0,00311
Tipo de Grade	(Crescente)

5.2.1.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

Fazendo-se a simulação do sistema descrito, obtém-se os perfis de velocidade e vazão apresentados a seguir. A Figura 10 mostra a variação da velocidade axial do fluido no centro do tubo em função do tempo. Note que a velocidade cresce inicialmente a uma taxa quase constante e relativamente elevada. Tal aceleração constante decorre da diferença de pressão fixa aplicada ao fluido, associada ao pequeno efeito das forças viscosas no princípio do movimento. Esta observação está de acordo com o esperado, afinal, a baixas velocidades, quando o perfil radial ainda é bastante plano, os efeitos do atrito cisalhante entre as camadas de fluido não são pronunciados, tendo-se portanto um movimento uniformemente variado.

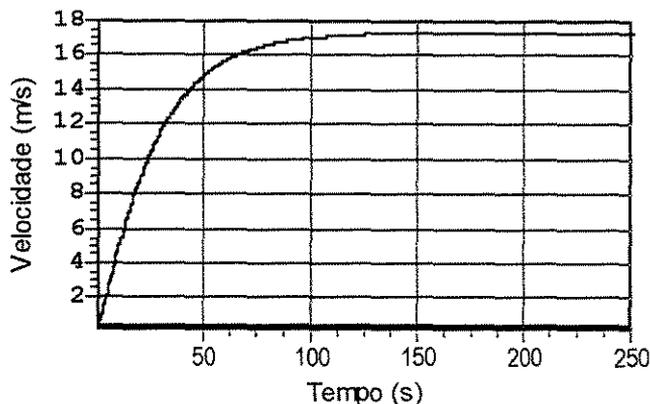


Figura 10: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento laminar horizontal de fluido puro.

Depois de alguns segundos, a aceleração do fluido começa a declinar devido ao encurvamento do perfil de velocidade, o qual propicia a ação das forças viscosas contrárias ao movimento. Neste ponto, já há um confronto entre a força motriz da pressão e as forças viscosas do fluido, entretanto, somente após cerca de dois minutos é que a velocidade atinge a estabilização. É justamente neste momento que alcança-se o equilíbrio entre a resistência viscosa ao movimento e a força motriz aplicada na forma de diferença de pressão.

A obtenção das propriedades no estado de regime permanente requer o prolongamento da simulação até que as taxas de variação mais significativas se tornem aproximadamente nulas. Deste modo, aos ~250 segundos simulados, a velocidade central é 17,360 m/s, entretanto o seu valor é lentamente acrescido atingindo a marca de 17,361 m/s aos 1029,7 segundos.

A Figura 11 mostra a vazão volumétrica do escoamento em função do tempo. O seu comportamento é bastante similar ao perfil temporal da velocidade central (Figura 10), porém esta curva mostra um detalhe bastante interessante: na escala apresentada, uma comparação das duas figuras deixa evidente que a estabilização da vazão ocorre, neste caso, cerca de 25 segundos após a estabilização da velocidade central. Isto fica evidenciado pelo último “degrau” visível em ambas as curvas. Esta constatação é procedente, pois concorda com o fenômeno de acomodação do perfil de velocidades até que a conformação final seja alcançada. Isso significa dizer que, neste caso, o fluido no centro do tubo estabiliza-se mais rapidamente do que as camadas mais periféricas. Esta simulação forneceu a vazão volumétrica de regime permanente como sendo aproximadamente $0,067738 \text{ m}^3/\text{s}$. Este valor foi alcançado no tempo de 1029,7s.

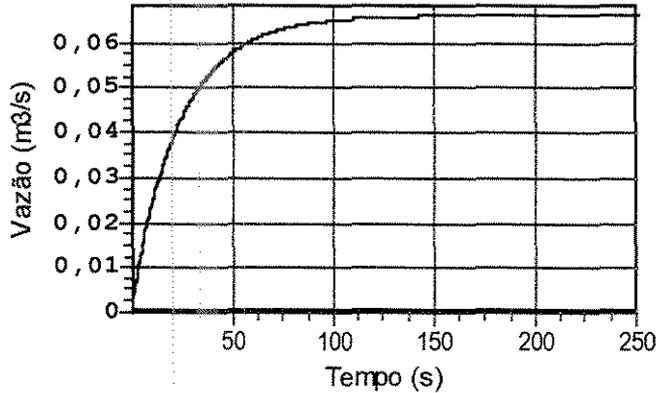


Figura 11: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento laminar horizontal de fluido puro.

Na Figura 12, mostra-se o perfil da velocidade axial ao longo do raio do tubo. Pode-se constatar que a sua forma espelha nitidamente o típico formato parabólico próprio dos escoamentos laminares, denotando a consistência dos resultados obtidos.

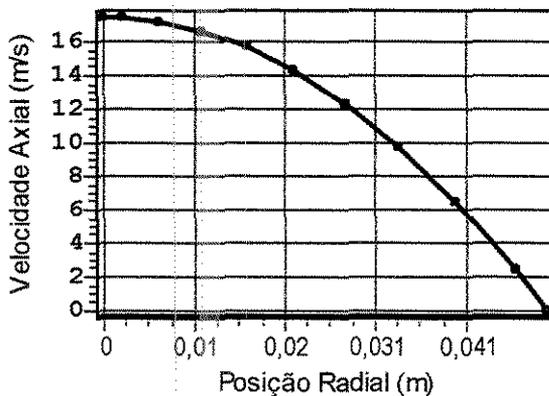


Figura 12: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento laminar horizontal de fluido puro.

O perfil de pressão ao longo do tubo está mostrado na Figura 13. O comportamento linear da queda de pressão é o que de fato seria esperado fisicamente. Embora, durante a evolução transiente do escoamento, o perfil da pressão apresente alguma não-linearidade, com a aproximação do estado de regime permanente, o perfil linear vai sendo evidenciado, estando em conformidade com a solução analítica. Note-se, também, que a queda de pressão entre os extremos do equipamento está em pleno acordo com a diferença de pressão imposta como parâmetro de entrada da simulação, como pode ser constatado na Tabela 4.

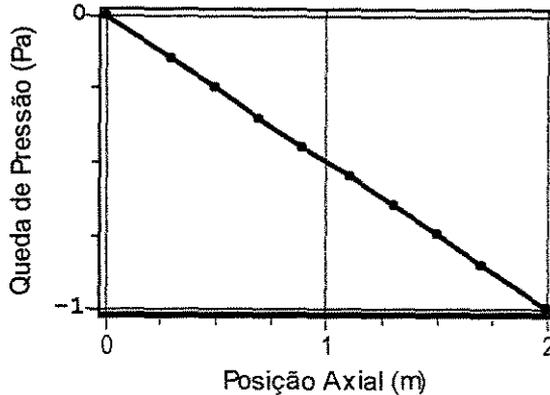


Figura 13: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento laminar horizontal de fluido puro.

Por conseguinte, em vista dos resultados apresentados, pode-se concluir que, para este caso, o modelo comportou-se consistentemente de acordo com o que seria física e logicamente esperado.

5.2.1.3 Comparação

Tendo concluído a análise fenomenológica, então resta a fase de comparação. Deste modo, a velocidade no centro do tubo e a vazão em estado de regime permanente é conseguida substituindo-se os valores dos parâmetros nas equações (168) e (169), donde obtém-se a velocidade central e a vazão mostrados na tabela seguinte:

Tabela 7: Comparação entre as soluções analítica e numérica para o escoamento de ar em um tubo de 2m de comprimento e 0,1m de diâmetro submetido a uma diferença de pressão de 1Pa sem gravidade.

	Solução Analítica	Solução Simulada	Desvio Relativo
Veloc. Central (m/s)	17,3611111111	17,361111111074	0%
Vazão (m ³ /s)	0,0682	0,0677	-0,64%

Para efeito de comparação, a Tabela 7 também exhibe os valores simulados das propriedades, assim como os desvios relativos correspondentes. Pode-se constatar imediatamente a concordância entre os valores analíticos e simulados. No caso da velocidade central, o erro relativo é virtualmente nulo, enquanto que, para a vazão volumétrica, o erro relativo é inferior a 1%. É pertinente salientar que o cálculo da vazão poderia ser substancialmente melhorado através do refinamento da grade de pontos utilizada na discretização do fluido.

5.2.2 Tubo Vertical (Com gravidade)

5.2.2.1 Parâmetros

Os valores atribuídos aos parâmetros do modelo para este estudo-de-caso são exatamente os mesmos expostos em tabelas anteriores (Tabela 3 à Tabela 6), com exceção da força gravitacional axial e da diferença de pressão, os quais foram alterados para $g_z = -9,8 \text{ m/s}$ e $\Delta p = 21 \text{ Pa}$, respectivamente.

Como os demais parâmetros foram mantidos, para conferência, mostram-se apenas os dados do equipamento na Tabela 8.

Tabela 8: Características do equipamento. Escoamento laminar vertical de fluido puro.

Diâmetro (m)	0,1
Altura (m)	2
Coef. de Restituição	1
Coef. de Fricção	0
Coef. de Recuperação	0,5
Pressão na Entrada (Pa)	101021
Pressão na Saída (Pa)	101000
Energia Turb. Inicial	0,01
Dissipação Turb. Inicial	0,01
Gravidade X (m/s ²)	0
Gravidade Y (m/s ²)	0
Gravidade Z (m/s ²)	-9,8

5.2.2.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

A simulação do escoamento nestas novas condições fornece os perfis temporais de velocidade central e vazão mostrados nas figuras a seguir.

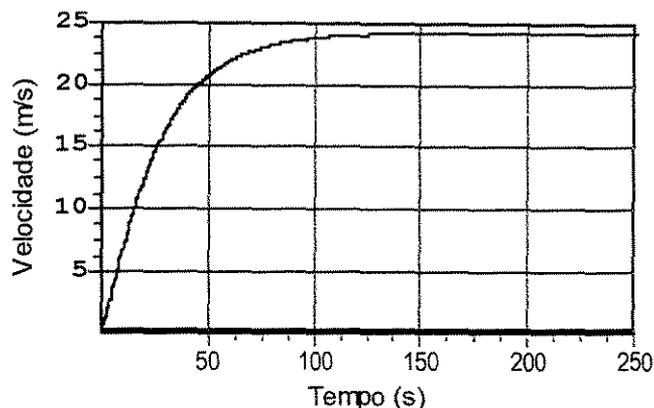


Figura 14: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento laminar vertical de fluido puro.

A Figura 14 mostra o perfil da velocidade axial no centro do tubo. O comportamento desta curva é essencialmente o mesmo da Figura 10, corroborando a eficácia do modelo. É interessante notar o fato de que o patamar de estabilização é atingido em um mesmo período de tempo com ou sem a presença da gravidade, em torno de ~ 125 s, apesar das vazões de regime permanente serem bastante distintas nos dois casos. A velocidade máxima atingida após 999,4s simulados foi cerca de 24,306 m/s.

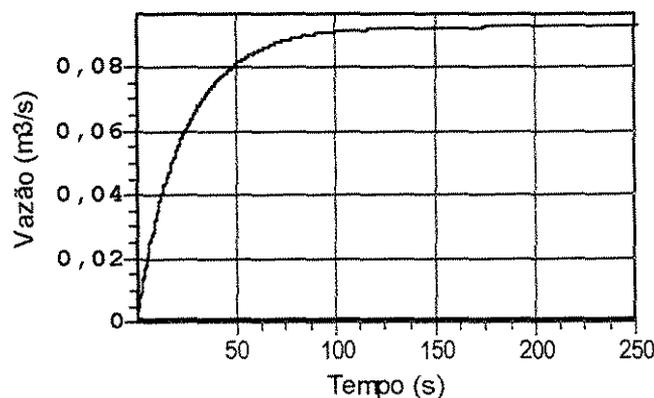


Figura 15: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento laminar vertical de fluido puro.

O perfil temporal da vazão é declarado na Figura 15. Do mesmo modo, pode-se constatar a identidade de comportamentos entre esta curva e o gráfico da Figura 11. Entretanto, os tempos de estabilização da vazão volumétrica são claramente diferenciados. Sem a gravidade (Figura 11), o patamar de estabilização é alcançado em pouco menos de 150s, ao passo que a presença da aceleração gravitacional (Figura 15) provoca uma estabilização retardada em torno de 175s. A vazão volumétrica do fluido após 999,4s simulados foi cerca de $0,094834 \text{ m}^3/\text{s}$.

A Figura 16 mostra o perfil radial da velocidade axial do fluido, donde pode-se verificar o típico formato parabólico inerente aos escoamentos laminares.

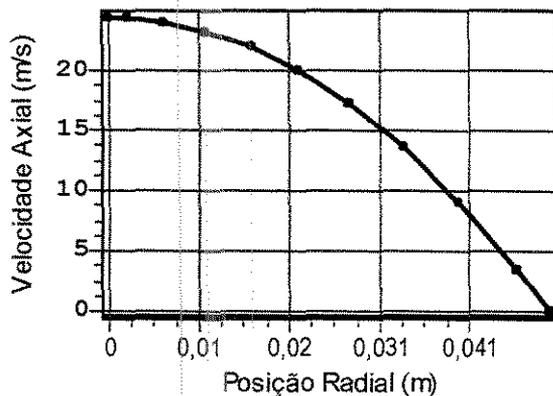


Figura 16: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento laminar vertical de fluido puro.

Esta validação do perfil tem grande significância, uma vez que reflete indiretamente o modo como o modelo relaciona as tensões internas do escoamento. Neste sentido, um perfil correto é um forte indício de um modelo satisfatório.

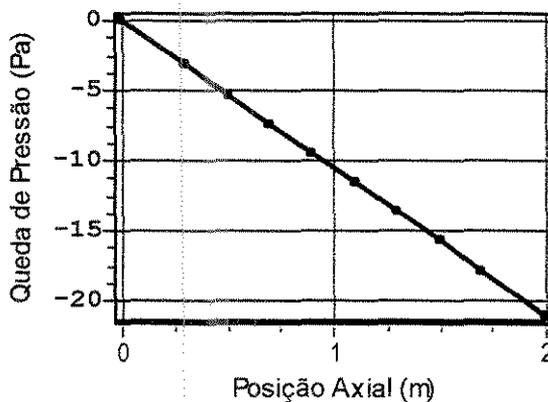


Figura 17: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento laminar vertical de fluido puro.

A Figura 17 mostra o perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Tal qual na simulação da seção 5.2.1, a curva de queda de pressão apresenta comportamento linear, fisicamente previsto. Além disso, a queda de pressão total no tubo está em pleno acordo com o valor da diferença de pressão $\Delta p = 21$ Pa imposta como parâmetro de entrada.

5.2.2.3 Comparação

Para aplicar corretamente as equações (168) e (169) neste sistema, é necessário realizar uma correção da pressão a fim de compensar o peso da coluna de fluido. Deste modo, calcula-se a diferença de pressão piezométrica como sendo $\Delta P = 1,4$ Pa. Portanto, o cálculo da velocidade central e da vazão fornece os valores mostrados na Tabela 9.

Tabela 9: Comparação entre as soluções analítica e numérica para o escoamento de ar em um tubo vertical de 2m de comprimento e 0,1m de diâmetro submetido a uma diferença de pressão de 21Pa (ou 1,4Pa piezométricos) com gravidade.

	Solução Analítica	Solução Simulada	Desvio Relativo
Veloc. Central (m/s)	24,3055555556	24,305555555503	0%
Vazão (m³/s)	0,095448	0,094834	-0,65%

Na Tabela 9 também estão apresentados os valores da velocidade central e vazão simulados, assim como os desvios relativos em relação aos valores exatos. A inspeção destes números evidencia novamente uma consonância entre os valores simulados e exatos, ratificando a boa qualidade do modelo proposto para o escoamento do fluido. Apesar da boa concordância obtida para a vazão volumétrica, salienta-se que este poderia ainda ser melhorado através do uso de uma grade mais refinada.

5.3 Efeito do Refinamento da Grade no Modelo de Escoamento Laminar de Fluido Puro (Mínima Realização)

Conforme mencionado anteriormente, a resolução do modelo de escoamento do fluido requer a subdivisão espacial do domínio onde ocorre o escoamento, compondo a malha ou grade de discretização. Em vista do fato de a estrutura e o grau de refinamento da grade terem influência direta nos resultados de uma simulação, é imprescindível conhecer quais os efeitos ocasionados por variações na elaboração desta grade.

5.3.1 Tubo Horizontal (Sem gravidade) – Discretização Rudimentar

Para isso, realizou-se uma simulação com os mesmos parâmetros aplicados na seção 5.2.1, mudando-se apenas a estrutura da grade. Nesta nova simulação, a fim de provocar uma situação crítica de baixa precisão, aplicou-se uma grade bastante grosseira, composta por apenas cinco pontos na direção radial.

5.3.1.1 Parâmetros

Os parâmetros aplicados neste estudo-de-caso são os mesmos utilizados na seção 5.2.1.1, exceto pelos dados de discretização do fluido, os quais estão expostos na Tabela 10 em seguida.

Tabela 10: Características da discretização do fluido. Escoamento laminar horizontal de fluido puro com discretização rudimentar.

No. de Elementos – Radial	5
No. de Elementos – Axial	10
Passo Inicial Radial (m)	0,018
Passo Axial (m)	0,2
Alfa	-0,0016
Beta	0,018
Beta (Grade Regular)	(Reg. -> 0,01)
Limite Beta	0,016
Tipo de Grade	(Decrescente)

5.3.1.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

Fazendo a simulação do sistema descrito, obtém-se os perfis de velocidade e vazão apresentados a seguir. A Figura 18 mostra a variação da velocidade axial do fluido no centro do tubo em função do tempo. O comportamento geral desta curva é idêntico ao dos perfis da Figura 10. Isto mostra que, em termos fenomenológicos, a rareficação da malha não teve impacto visível nesta nova simulação. Ratificando esta afirmativa, pode-se verificar a concordância entre os tempos de estabilização das duas curvas, que se dá, para ambas, em torno 125s. A velocidade máxima atingida após 983,2s simulados foi cerca de 17,361 m/s.

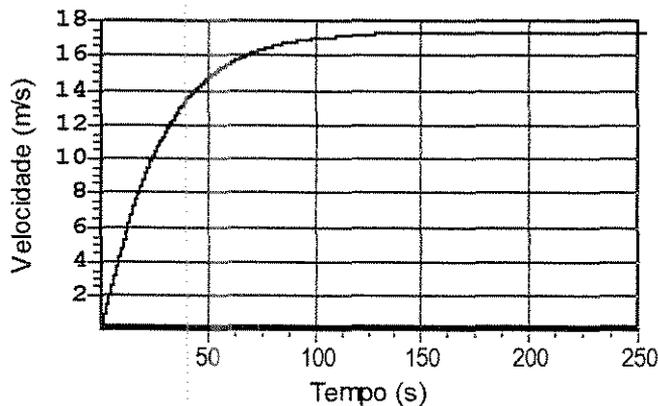


Figura 18: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento laminar horizontal de fluido puro com discretização rudimentar.

Diferentemente da velocidade central, pode-se notar, por comparação direta, que não há uma identidade perfeita entre os perfis temporais de vazão volumétrica da Figura 19 e Figura 11. É possível perceber de logo que os tempos de estabilização da vazão são

sensivelmente distintos. Para a grade mais refinada (Figura 11), o perfil temporal atinge o regime permanente mais lentamente em torno de 145s, enquanto que a malha grosseira o atinge em cerca de 130s. Este evento reflete o fato da vazão volumétrica ser uma propriedade integral dependente do formato do perfil de velocidade. Assim sendo, parece razoável concluir que, apesar do refinamento da grade não influenciar o estado de regime permanente, os estados transientes intermediários podem sofrer alguma variação. A vazão volumétrica máxima atingida após 983,2s simulados foi cerca de 0,066798 m/s.

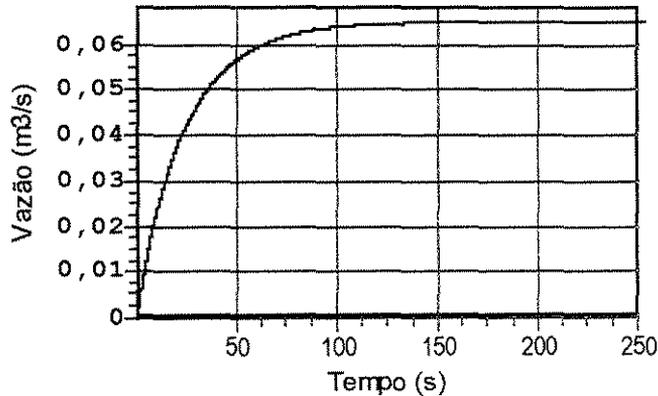


Figura 19: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento laminar horizontal de fluido puro com discretização rudimentar.

A Figura 20 exibe o perfil radial da velocidade axial do fluido. Os pontos do gráfico correspondem à malha produzida pela discretização. Embora os resultados sejam bastante equivalentes aos da Figura 12, pode-se constatar facilmente a diferença de refinamento entre ambas as malhas.

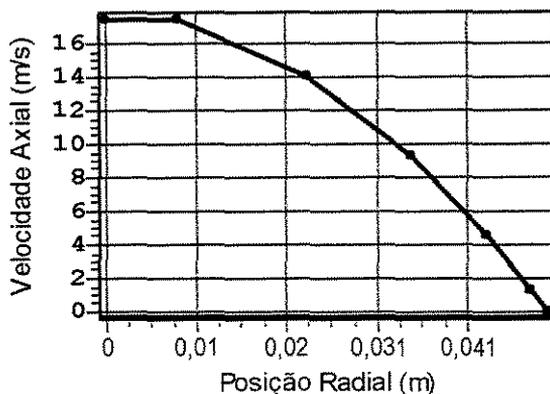


Figura 20: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento laminar horizontal de fluido puro com discretização rudimentar.

O perfil axial da pressão não sofreu alterações perceptíveis, sendo mostrado na Figura 21. O comportamento linear apresentado está de acordo com o fisicamente previsto.

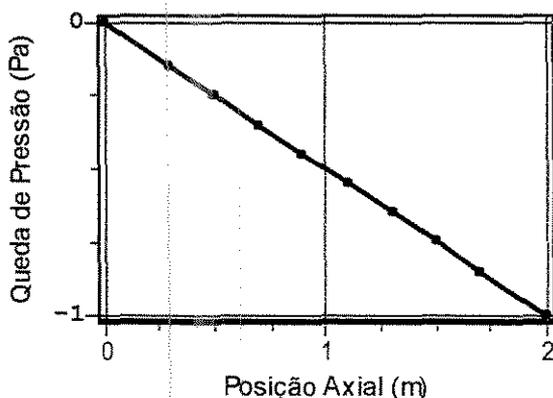


Figura 21: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento laminar horizontal de fluido puro com discretização rudimentar.

5.3.1.3 Comparação

Assim como nos casos anteriores, aplicam-se as equações (168) e (169) para obter a solução analítica de velocidade central e vazão volumétrica para estas condições. Em seguida, as soluções analítica e simulada são comparadas, compondo a Tabela 11.

Tabela 11: Comparação entre as soluções analítica e numérica para o escoamento de ar em um tubo de 2m de comprimento e 0,1m de diâmetro submetido a uma diferença de pressão de 1Pa sem gravidade. Simulação realizada com malha rudimentar.

	Solução Analítica	Solução Simulada	Desvio Relativo
Veloc. Central (m/s)	17,361111111111	17,3611111110706	0%
Vazão (m ³ /s)	0,068177	0,066798	-2,02%

Mais uma vez, pela Tabela 11, pode-se perceber a concordância entre as velocidades centrais analítica e simulada, denotando razoável insensibilidade em relação ao grau de refinamento da grade. Por outro lado, o erro relativo da vazão simulada alcançou a marca dos 2%, diferenciando-se da simulação da seção 5.2.1, onde aplicou-se uma malha mais fina e este erro foi de apenas 0,64%. É preciso ressaltar que um erro de 2% é, de fato, perfeitamente aceitável para fins práticos, todavia não é este ponto que está em questão, pois, mesmo com este erro baixo, pode-se verificar uma tendência no sentido de que grades de menor qualidade conduzem a resultados menos exatos e precisos²⁵.

²⁵ Esta conclusão não é em si uma novidade, constituindo-se, de fato, numa regra primária na tecnologia da fluidodinâmica computacional.

5.3.2 Tubo Vertical (Com gravidade) – Discretização Rudimentar

Objetivando avaliar os resultados de uma malha rudimentar diante da gravidade e de uma velocidade de escoamento superior, realizou-se nova simulação baseada no sistema fluidodinâmico descrito na seção 5.2.2.

5.3.2.1 Parâmetros

Os parâmetros utilizados nesta simulação são exatamente os mesmos do ensaio da seção 5.2.2, excetuando-se os dados de discretização da grade, os quais estão mostrados a seguir na Tabela 12.

Tabela 12: Características da discretização do fluido. Escoamento laminar vertical de fluido puro com discretização rudimentar.

No. de Elementos – Radial	5
No. de Elementos – Axial	10
Passo Inicial Radial (m)	0,018
Passo Axial (m)	0,2
Alfa	-0,0016
Beta	0,018
Beta (Grade Regular)	(Reg. -> 0,01)
Limite Beta	0,016
Tipo de Grade	(Decrescente)

5.3.2.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

O perfil temporal da velocidade central resultante desta simulação é mostrado na Figura 22 a seguir. Comparando a Figura 22 (malha rudimentar) com a Figura 14 (malha mais refinada), pode-se perceber a grande coincidência de comportamento entre as duas curvas. De fato, é notória a semelhança dos tempos de estabilização da velocidade central em ambas as curvas. A velocidade central máxima fornecida por esta simulação aos 969,4s foi de ~24,305 m/s, o qual corresponde aproximadamente ao mesmo valor advindo da simulação 5.2.2 com a grade mais refinada.

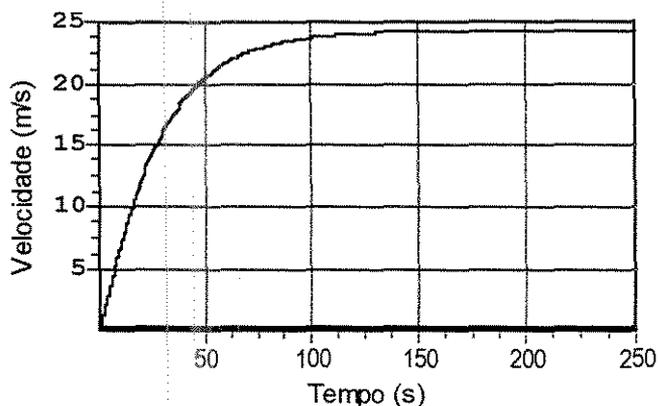


Figura 22: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento laminar vertical de fluido puro com discretização rudimentar.

A Figura 23 traz a vazão volumétrica obtida desta simulação com grade rudimentar. O formato genérico da curva está qualitativamente de acordo com esperado, contudo uma comparação mais próxima com a Figura 15 (malha refinada) mostra que vazão da Figura 23 é um pouco menor. Além disto, pode-se constatar que o tempo de estabilização também é um tanto inferior. Provavelmente, estas duas conclusões estão associadas, visto que, intuitivamente, pode-se inferir que uma maior vazão máxima requer mais tempo para ser estabilizada no regime permanente.

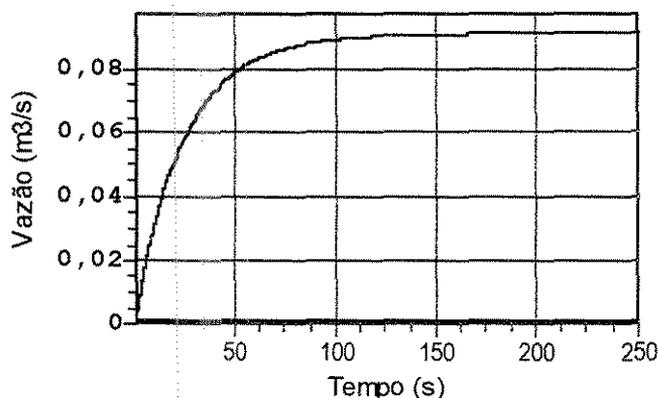


Figura 23: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento laminar vertical de fluido puro com discretização rudimentar.

A vazão máxima desta simulação foi tomada aos 969,4s como sendo $0,093517 \text{ m}^3/\text{s}$, enquanto que a grade refinada (seção 5.2.2) forneceu um valor de $0,094834 \text{ m}^3/\text{s}$, diferindo 1,41% do anterior. Tal divergência pode ser facilmente justificada pela rusticidade do perfil de velocidades exibido na Figura 24, a qual exerce uma influência direta nos cálculos da vazão e da velocidade média do escoamento, provocando a inserção de imprecisões.

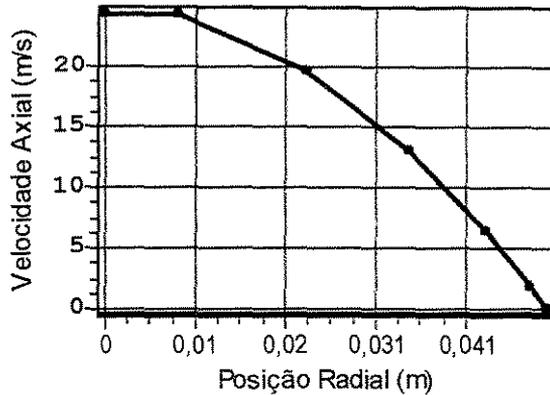


Figura 24: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento laminar vertical de fluido puro com discretização rudimentar.

A Figura 25 expõe o perfil axial da queda de pressão, o qual apresenta o comportamento linear esperado. Uma comparação com o perfil de pressão da Figura 17 deixa evidente a similaridade entre os dois perfis, denotando que a estrutura radial da grade não teve influência significativa na queda de pressão.

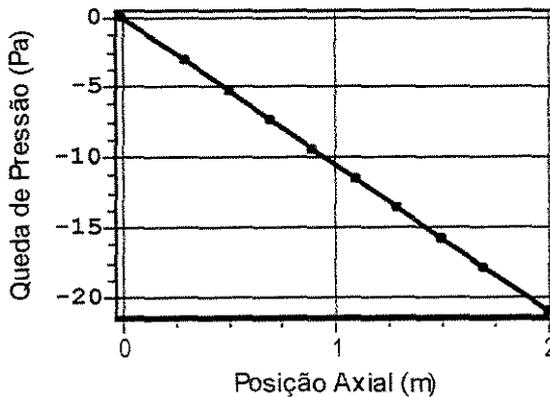


Figura 25: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento laminar vertical de fluido puro com discretização rudimentar.

5.3.2.3 Comparação

Novamente, para aplicar corretamente as equações (168) e (169) neste sistema, é necessário realizar uma correção da pressão a fim compensar o peso da coluna de fluido. Portanto, com a diferença de pressão piezométrica de $\Delta P = 1,4 \text{ Pa}$, o cálculo da velocidade central e da vazão fornece os valores mostrados na Tabela 13.

Tabela 13: Comparação entre as soluções analítica e numérica para o escoamento de ar em um tubo vertical de 2m de comprimento e 0,1m de diâmetro submetido a uma diferença de pressão de 21Pa (ou 1,4Pa piezométricos) com gravidade. Simulação realizada com malha rudimentar.

	Solução Analítica	Solução Simulada	Desvio Relativo
Veloc. Central (m/s)	24,3055555556	24,3055555555038	0%
Vazão (m³/s)	0,095448	0,093518	-2,02%

Na Tabela 13, também estão apresentados os valores da velocidade central e vazão simulados, assim como os desvios relativos em relação aos valores exatos. A inspeção destes números evidencia uma consonância entre as velocidades centrais analítica e simulada, com um erro relativo aproximadamente nulo. Todavia, o mesmo não ocorre com a simulação da vazão volumétrica, a qual diverge cerca de 2% do valor exato. Embora este seja um desvio bastante tolerável, pode-se inferir que a estrutura radial da grade exerce influência significativa nas propriedades integrais como a velocidade média e a vazão.

5.3.3 Conclusão

Os resultados das simulações 5.3.1 e 5.3.2 (grade rudimentar), quando comparados aos das simulações 5.2.1 e 5.2.2 respectivamente, mostram que o grau de refinamento radial da malha impõe uma influência mais significativa nas propriedades integrais como vazão e velocidade média do que na velocidade central do fluido, que representa uma medida *puntual*.

Embora os desvios da vazão volumétrica tenham sido superiores aos da velocidade central, deve-se salientar que estes foram da ordem de apenas 2%, representando um valor perfeitamente aceitável para fins práticos.

A presença da gravidade não provocou alteração perceptível nos perfis de velocidade e na vazão das simulações. Este é um resultado fisicamente esperado para escoamentos homogêneos, uma vez que a pressão piezométrica agrega tanto o peso da coluna de fluido como a diferença de pressão real no escoamento. É interessante reconhecer que os desvios da vazão volumétrica simulada em relação ao valor exato foram de 2% nas simulações com grade rudimentar (vide Tabela 11 e Tabela 13), reforçando a hipótese de não influência da gravidade na qualidade da simulação de fluidos puros.

Os perfis de pressão similares nas simulações com grade rudimentar e com grade refinada indicaram que a estrutura radial da malha tem pouco ou nenhum efeito na queda de pressão do escoamento. Esta observação também se mostrou válida com ou sem a presença da gravidade.

Em suma, os baixos desvios apresentados em simulações com malhas rudimentares explicitam a robustez e confiabilidade do modelo quando aplicado a escoamentos de fluidos puros em regime laminar.

5.4 Modelo de Escoamento Turbulento de Fluido Puro

A meta deste estudo-de-caso é a validação do modelo proposto com respeito à capacidade de representar, de modo satisfatório, os fenômenos e o comportamento verificados em escoamentos turbulentos.

5.4.1 Tubo Horizontal (Sem Gravidade)

Neste estudo-de-caso, contempla-se o escoamento de um fluido puro – mais especificamente: ar – em um tubo horizontal sem os efeitos de forças de campo. Os parâmetros aplicados na simulação são apresentados nas tabelas da seção seguinte.

5.4.1.1 Parâmetros

Tabela 14: Características da simulação. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

No. Iterações/Seg. (1/s)	4000
Passo de Tempo (s)	0,00025
Taxa de Injeção de Partículas (1/s)	0
Tempo Mínimo de Colisão (s)	1E-6
Simular Colisões	Não
Colisões para Células Adjacentes	Não
Simular Escoamento do Fluido	Sim
Simular Turbulência	Sim
Simular Acoplamento Sólido -> Fluido	Não
Intervalo Atualização (s)	0,1
Intervalo Amostragem (s)	10

Tabela 15: Características do equipamento. escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

Diâmetro (m)	0,05
Altura (m)	2
Coef. de Restituição	1
Coef. de Fricção	0
Coef. de Recuperação	0,5
Pressão na Entrada (Pa)	101100
Pressão na Saída (Pa)	101000
Gravidade X (m/s ²)	0
Gravidade Y (m/s ²)	0
Gravidade Z (m/s ²)	0

Tabela 16: Características do fluido. escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

Densidade (kg/m ³)	1
Viscosidade (Pa.s)	1,8E-5
Veloc. Radial (m/s)	0
Veloc. Angular (m/s)	0
Veloc. Axial (Centro) (m/s)	20

Tabela 17: Parâmetros do modelo de turbulência. escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

K(0)	0,01
Epson(0)	0,01
Cm	0,09
Ce1	1,55
Ce2	2
Sk	1
Se	1,3
f1	1

Tabela 18: Características da discretização do fluido. escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

No. de Elementos – Radial	9
No. de Elementos – Axial	10
Passo Inicial Radial (m)	0,0004
Passo Axial (m)	0,2
Res. Radial	0,1
Alfa (m)	0,000345

5.4.1.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

Procedendo com a simulação deste sistema, obtém-se os perfis temporais de velocidade do fluido e vazão mostrados a seguir. A Figura 26 mostra a evolução da velocidade do fluido no centro do tubo²⁶. A inspeção direta deste gráfico permite a constatação de várias disparidades em relação ao escoamento laminar em condições similares, como os apresentados na seção 5.2. A primeira discrepância é a grande diferença entre os tempos de estabilização. No escoamento laminar, o tempo de estabilização da velocidade central não passou de 150s em qualquer dos casos apresentados, denotando um comportamento completamente distinto do sistema turbulento, no qual a aceleração sofreu uma redução apreciável apenas em torno dos 1000s.

Uma possível explicação para este retardamento na estabilização do fluido no centro do tubo é a lenta difusão das propriedades turbulentas κ e ϵ , especialmente a energia de turbulência κ . O perfil de velocidades no estado de regime permanente é diretamente dependente da distribuição radial das propriedades turbulentas, sendo que o relacionamento entre estes se dá por meio das equações de transporte usadas no modelo de turbulência. Portanto, como a produção de turbulência ocorre prioritariamente nas regiões de maior gradiente de velocidade (i.e. junto à parede do tubo), a energia cinética κ deve se deslocar da zona de produção externa até a parte central do escoamento para preenchê-la. Este fluxo de energia cinética cessará apenas quando o conteúdo energético nas regiões centrais do tubo for suficiente para equilibrar a força motriz de difusão. Neste ponto é alcançado o regime permanente. Em suma, o tempo de estabilização prolongado é possivelmente o reflexo do tempo necessário para que a energia cinética de turbulência se desloque da zona de produção até o centro do tubo, aumentando o seu conteúdo energético.

A velocidade central após 1618,8s de simulação alcançou aproximadamente o valor de 9,39 m/s, podendo esta ser considerada a velocidade central de estabilização.

²⁶ Devido ao período de tempo simulado ser relativamente longo, o eixo das abscissas é demarcado em escala logarítmica para permitir maior clareza analítica.

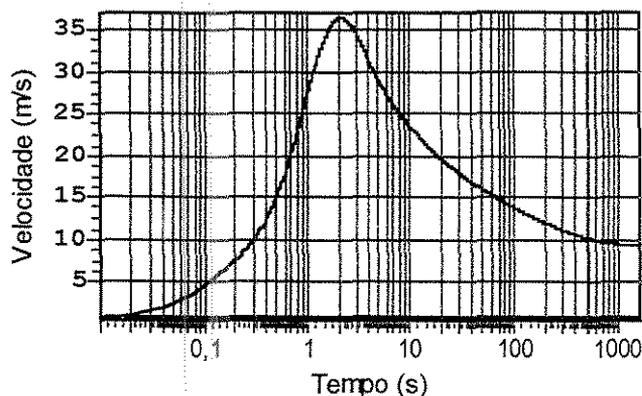


Figura 26: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

A variação temporal da vazão é exibida na Figura 27. Por esta curva, pode-se notar o mesmo tempo de estabilização prolongado observado no perfil da velocidade central. As causas de tal fenômeno são exatamente as mesmas discutidas anteriormente, visto que a vazão é uma propriedade integral advinda do perfil de velocidades. Após o tempo de 1618,8s, a vazão de fluido atingiu a marca de $0,013 \text{ m}^3/\text{s}$.

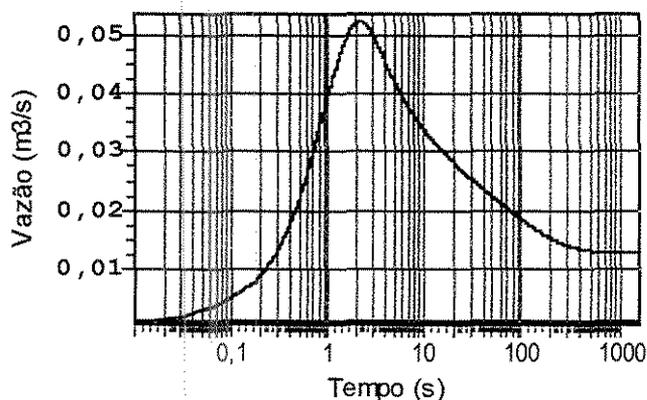


Figura 27: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

Outra característica apresentada pelos perfis anteriores (Figura 26 e Figura 27) é a existência de um ponto de máximo em torno dos 2s. Tal comportamento também é distinto dos escoamentos laminares apresentados, cujos perfis temporais evoluem de maneira monotonicamente crescente. O aparecimento deste pico se deve à produção de turbulência que ocorre à medida que o perfil de velocidade se desenvolve. No princípio da simulação, a viscosidade efetiva do fluido é relativamente pequena – composta apenas pela viscosidade molecular – de modo que a aceleração imposta ao escoamento pela diferença de pressão é bastante elevada. À medida que a turbulência é gerada, a viscosidade turbilhonar também é acrescida, aumentando a resistência ao movimento. Dependendo do impulso conseguido pelo fluido na fase inicial do escoamento, a produção de turbulência pode ser tão intensa a

ponto de reduzir a sua velocidade, ocasionando a conformação típica dos picos apresentados nos perfis temporais de velocidade e vazão.

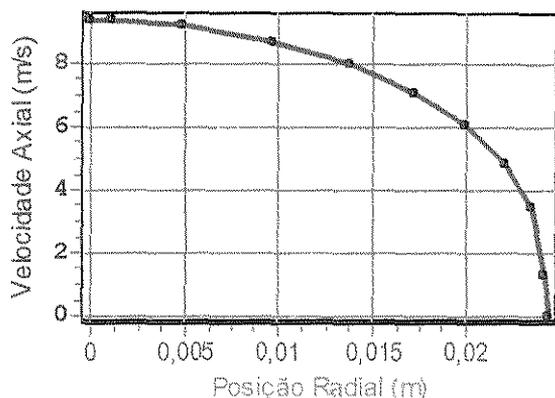


Figura 28: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

A distribuição radial da velocidade axial do fluido está exposta na Figura 28. Por esta curva, pode-se perceber claramente o achatamento característico dos escoamentos turbulentos. Tal conformação depõe favoravelmente ao modelo, visto que o perfil não-parabólico achatado é um forte distintivo para a existência de turbulência.

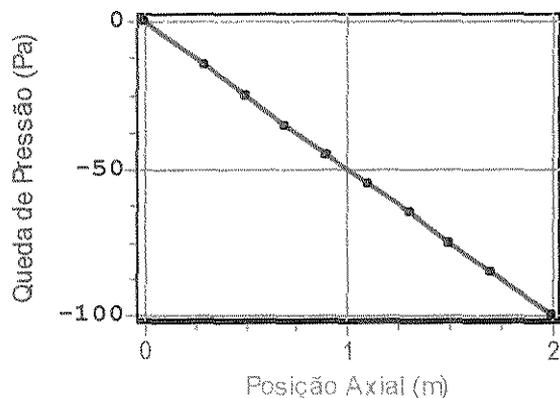


Figura 29: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

O perfil axial de queda de pressão – Figura 29 – está plenamente de acordo com o esperado, exibindo uma variação linear de 100 Pa entre a entrada e a saída do tubo. Note-se que esta queda de pressão iguala a diferença de pressão definida nos parâmetros da simulação – mostrados na Tabela 15 – o que corrobora a eficácia do modelo.

5.4.1.3 Comparação

Apesar da análise fenomenológica ter se mostrado adequada, a validação do modelo quanto à capacidade de simular escoamentos turbulentos não seria completa sem a

comparação com dados ou resultados consolidados. Neste sentido, uma das mais consagradas representações de escoamentos turbulentos é o perfil universal de velocidades, o qual relaciona as grandezas adimensionais y^+ e u^+ , correspondentes à posição e velocidade, respectivamente. A curva do perfil universal de velocidades é apresentada em diversos textos clássicos da fluidodinâmica²⁷ e se baseia em um grande número de medidas experimentais realizadas por diversos pesquisadores. Devido à sua importância técnica e histórica, o perfil universal de velocidades tem sido usado com frequência nos testes de modelos de turbulência. Portanto, pelo mesmo motivo, uma comparação é realizada entre o perfil de velocidades fornecido pelo modelo e a curva experimental da literatura. A Figura 30 exibe esta comparação, através da qual pode-se notar que existe uma concordância bastante razoável entre os perfis experimental e calculado, denotando a boa qualidade da simulação e do modelo.

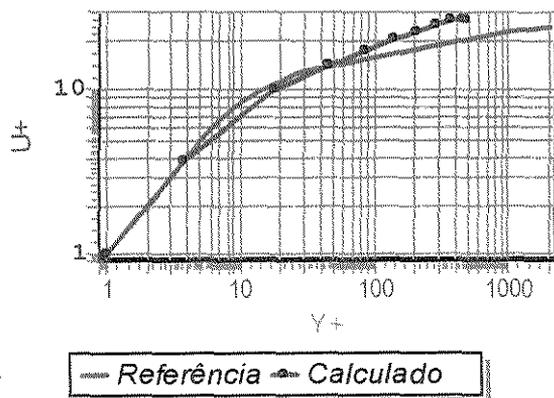


Figura 30: Comparação entre o perfil universal de velocidades e o perfil de velocidades adimensionalizado fornecido pela simulação. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

Note-se que o primeiro ponto assinalado no gráfico está em torno de $y^+ = 4$, o qual é um afastamento satisfatório em termos de precisão da simulação, todavia uma concordância ainda melhor entre as curvas pode ser obtida deslocando-se o primeiro ponto para uma região ainda mais próxima da fronteira sólida, digamos, por exemplo, para $y^+ = 1$. Apesar de, em geral, a maior aproximação entre o ponto inicial e a parede do tubo fornecer uma simulação mais precisa e exata, existe um limite para isto, pois, em certos casos, a redução excessiva da coordenada y^+ do primeiro ponto causa a divergência da simulação.

A Figura 31 e a Figura 32 expõem o perfil radial das propriedades de turbulência κ e ϵ , respectivamente. O comportamento e a conformação de ambas as curvas estão de acordo com medições experimentais. Dentre as características importantes que declaram a coerência destas curvas, pode-se notar que a energia cinética de turbulência κ é máxima em

²⁷ A curva do perfil universal de velocidades para escoamentos turbulentos pode ser encontrada nas obras de Bird et alii (1960), pp. 164, e de Bennett & Myers (1962), pp. 165.

algum ponto próximo à parede do tubo. Tal evidência está de acordo com o esperado, pois a região de maior produção de turbulência coincide com a de maior gradiente de velocidade, a qual se encontra justamente nas proximidades da fronteira sólida.

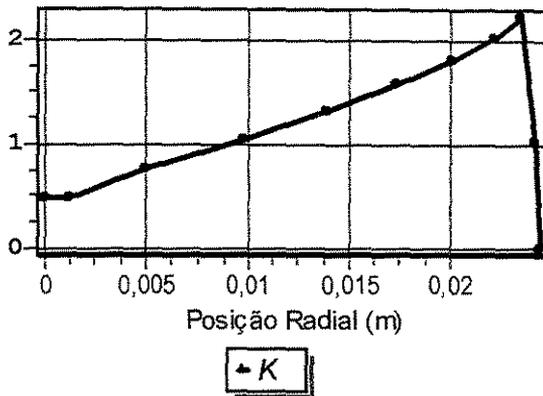


Figura 31: Perfil radial da energia cinética de turbulência (κ). Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

Onde há maior energia cinética de turbulência, há mais movimentação desordenada de fluido, causando, por seu turno, intensa conversão de energia mecânica em energia térmica através da dissipação viscosa. Em vista de todo este processo dissipativo ser representado quantitativamente pela taxa de dissipação da turbulência ϵ , é de se esperar que o seu ponto máximo coincida com o máximo da energia de turbulência κ . Isto é justamente o que pode ser verificado na Figura 32, ratificando a qualidade da simulação. Além disso, note-se que os valores de κ e ϵ são nulos no ponto mais extremo da grade (correspondente à parede do tubo). A justificativa para tal é que, de acordo com o princípio da aderência, a primeira camada de fluido junto à parede tem velocidade zero, implicando que não há turbulência nem tampouco dissipação de turbulência neste local.

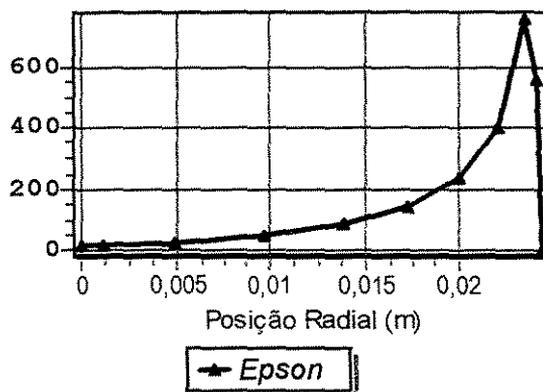


Figura 32: Perfil radial da taxa de dissipação da turbulência (ϵ). Escoamento turbulento horizontal de fluido puro.

5.4.2 Tubo Vertical (Com Gravidade)

O estudo-de-caso apresentado nesta seção tem o objetivo de verificar o comportamento do modelo de turbulência na simulação de um escoamento sob o efeito da gravidade. O fluido utilizado é novamente o ar e os parâmetros aplicados na simulação estão apresentados na seção seguinte.

5.4.2.1 Parâmetros

Tabela 19: Características da simulação. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.

No. Iterações/Seg. (1/s)	4000
Passo de Tempo (s)	0,00025
Taxa de Injeção de Partículas (1/s)	0
Tempo Mínimo de Colisão (s)	1E-6
Simular Colisões	Não
Colisões para Células Adjacentes	Não
Simular Escoamento do Fluido	Sim
Simular Turbulência	Sim
Simular Acoplamento Sólido -> Fluido	Não
Intervalo Atualização (s)	0,1
Intervalo Amostragem (s)	1

Tabela 20: Características do equipamento. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.

Diâmetro (m)	0,05
Altura (m)	2
Coef. de Restituição	1
Coef. de Fricção	0
Coef. de Recuperação	0,5
Pressão na Entrada (Pa)	101200
Pressão na Saída (Pa)	101000
Gravidade X (m/s ²)	0
Gravidade Y (m/s ²)	0
Gravidade Z (m/s ²)	-9,8

Tabela 21: Características do fluido. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.

Densidade (kg/m ³)	1
Viscosidade (Pa.s)	1,8E-5
Veloc. Radial (m/s)	0
Veloc. Angular (m/s)	0
Veloc. Axial (Centro) (m/s)	20

Tabela 22: Parâmetros do modelo de turbulência. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.

K(0)	0,01
Epson(0)	0,01
Cm	0,09
Ce1	1,55
Ce2	2
Sk	1
Se	1,3
f1	1
f2	1

Tabela 23: Características da discretização do fluido. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.

No. de Elementos - Radial	9
No. de Elementos - Axial	10
Passo Inicial Radial (m)	0,0004
Passo Axial (m)	0,2
Res. Radial	0,05
Alfa (m)	0,00036697

5.4.2.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

A simulação do sistema anteriormente descrito forneceu resultados, os quais serão apresentados, em parte, a seguir. O perfil temporal da velocidade central do fluido está mostrado na Figura 33. Neste caso, assim como na seção 5.4.1, o tempo de estabilização foi relativamente longo – em torno de 1000s – se comparado ao escoamento laminar com gravidade apresentado na seção 5.2.2. As possíveis causas deste fato são os efeitos difusivos das propriedades turbulentas, os quais tardam em gerar um perfil de distribuição

estável tanto para a energia cinética de turbulência como para a sua taxa de dissipação²⁸. Após 1391,5s simulados, a velocidade do fluido atingiu a marca de 11,31 m/s, a qual pode ser adotada como a velocidade central de estabilização. Note-se que, em concordância com o estudo-de-caso anterior (sem gravidade), que apresentou um pico aos ~2s, esta simulação apresenta um pico de velocidade aos ~1,5s. Esta mesma tendência é verificada no tempo de estabilização, que é levemente superior na simulação sem a força gravitacional.

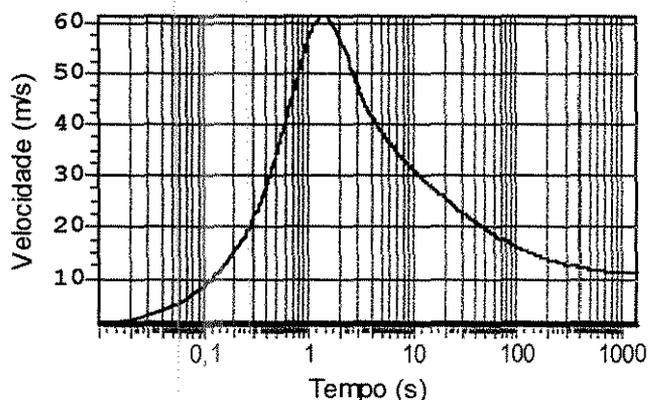


Figura 33: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.

A Figura 34 traz a variação temporal da vazão volumétrica do fluido, a qual se apresenta na mesma conformação da Figura 27, com um ponto de máximo característico e um tempo de estabilização em torno dos 1000 segundos. Após os 1391,5s simulados a vazão do fluido alcançou 0,0154 m³/s.

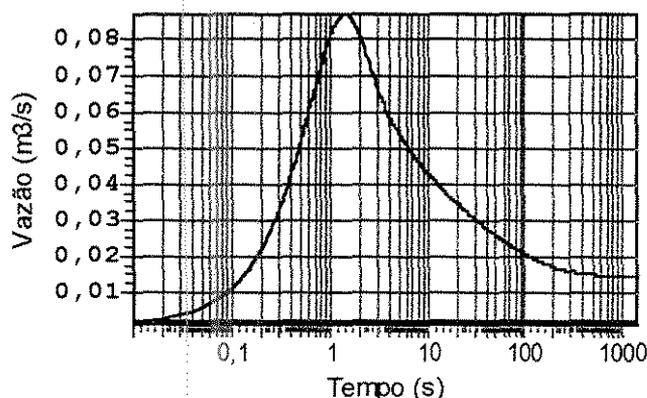


Figura 34: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.

O perfil radial da velocidade axial está disposto na Figura 35. Assim como na Figura 28, é imediatamente visível o achatamento do perfil de velocidades, característica

²⁸ O processo de propagação e estabilização das propriedades turbulentas foi discutido em mais detalhes na seção 5.4.1.2.

típica da turbulência. Tal verificação denota que o formato do perfil de velocidades não sofreu alterações significativas – ou pelo menos mensuráveis – em decorrência da consideração do campo gravitacional na simulação. Além disso, este é mais um resultado que fortalece a credibilidade do modelo, capacitando-o a simular escoamentos turbulentos com ou sem força gravitacional.

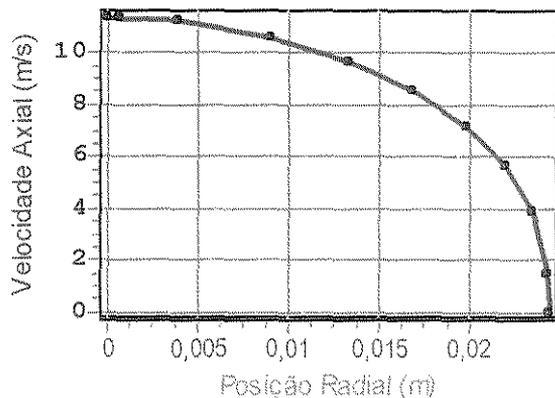


Figura 35: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.

O perfil de pressão da Figura 36 mostra uma variação de pressão de 200 Pa no centro do tubo. Este é o valor da diferença de pressão definida como parâmetro de entrada na Tabela 20, indicando que o escoamento evoluiu até que a queda de pressão equilibrasse a diferença de pressão externa. No momento em que a força resistiva do escoamento se iguala à pressão externa, o regime permanente começa a ser estabelecido e o perfil de velocidades inicia a estabilização. A linearidade do perfil de pressão da Figura 36 também é o comportamento esperado para o presente sistema de escoamento.

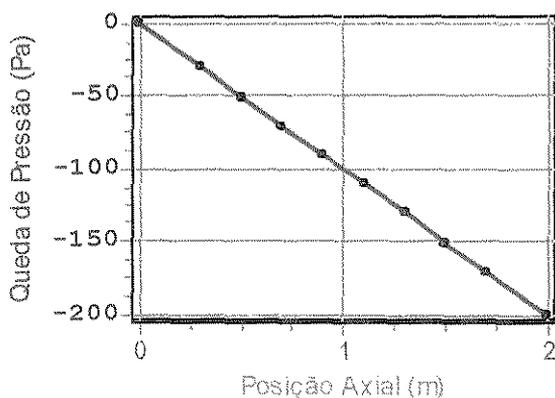


Figura 36: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.

5.4.2.3 Comparação

Para reforçar a análise fenomenológica realizada na seção anterior, faz-se, agora, uma comparação entre os resultados conseguidos na simulação e outros dados experimentais consolidados. Convertendo os pontos do perfil radial de velocidades nas coordenadas adimensionais y^+ e u^+ , pode-se realizar uma comparação com o perfil universal de velocidades, a qual está apresentada na Figura 37. A comparação direta entre a curva de referência e a curva obtida na simulação mostra uma concordância bastante razoável, ratificando a confiabilidade do modelo.

O primeiro ponto assinalado na curva calculada corresponde ao ponto da grade que fica mais próximo à parede do tubo. Em geral, dentro dos limites de estabilidade, a maior proximidade entre o primeiro ponto da grade e a fronteira sólida aprimora a exatidão e a precisão da simulação. Note que, neste estudo-de-caso, o primeiro ponto da grade está situado aproximadamente em $y^+ = 4$. Apesar deste ser um valor aceitável, que fornece resultados satisfatórios, deve-se salientar que a concordância entre ambas as curvas poderia ser ainda melhor caso fosse adotado um valor inferior para a coordenada y^+ do ponto inicial.

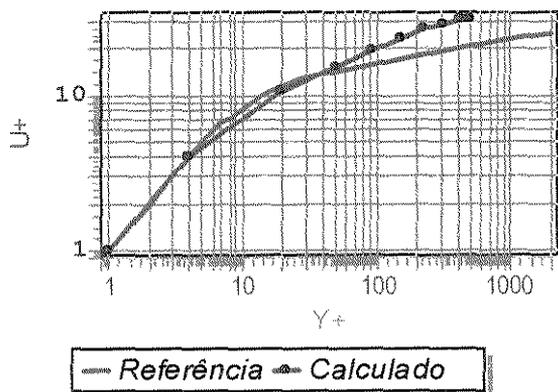


Figura 37: Comparação entre o perfil universal de velocidades e o perfil de velocidades adimensionalizado fornecido pela simulação. Escoamento turbulento vertical de fluido puro.

A Figura 38 e a Figura 39 expõem o perfil radial das propriedades de turbulência κ e ϵ , respectivamente, para o escoamento turbulento com gravidade. O comportamento e a conformação de ambas as curvas estão de acordo com a expectativa. A conformação geral destes gráficos é uma reprodução das curvas apresentadas na Figura 31 e Figura 32 – correspondentes ao escoamento sem gravidade – por conseguinte, a mesma análise desenvolvida na seção 5.4.1.3 é cabível, sem alterações, a estes resultados.

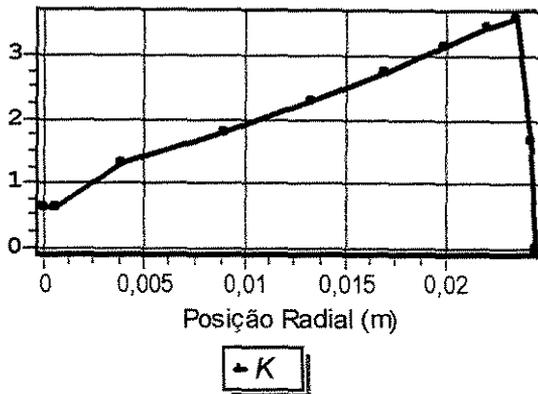


Figura 38: Perfil radial da energia cinética de turbulência (κ). escoamento turbulento vertical de fluido puro.

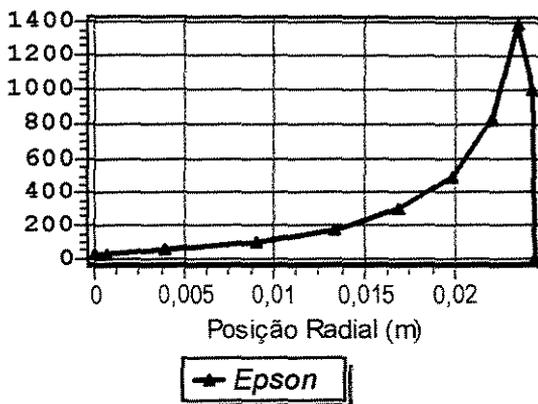


Figura 39: Perfil radial da taxa de dissipação da turbulência (ϵ). escoamento turbulento vertical de fluido puro.

5.5 Efeito do Refinamento da Grade no Modelo de Escoamento Turbulento de Fluido Puro

5.5.1 Tubo Horizontal (Sem Gravidade) – Discretização Refinada

Neste estudo-de-caso, efetuou-se a simulação do mesmo sistema apresentado na seção 5.4.1, alterando-se apenas a discretização radial da malha que se tornou mais refinada na presente simulação.

5.5.1.1 Parâmetros

Os parâmetros de entrada utilizados nesta simulação foram apresentados nas tabelas da seção 5.4.1.1. Destes dados, apenas os parâmetros de discretização do fluido – que determinam a estrutura da malha – foram redefinidos, conforme mostra a Tabela 24.

Tabela 24: Características da discretização do fluido. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.

No. de Elementos - Radial	15
No. de Elementos - Axial	10
Passo Inicial Radial (m)	0,0004
Passo Axial (m)	0,2
Res. Radial	0,1
Alfa (m)	9,28571E-5

5.5.1.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

Realizando a simulação do sistema definido pelos parâmetros apresentados na seção 5.5.1.1, obtém-se a série de gráficos exibida na seqüência. A primeira curva, mostrada na Figura 40, corresponde ao perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Várias distinções podem ser levantadas entre este gráfico e a curva apresentada na Figura 26, a qual corresponde a uma discretização com grade menos refinada.

Inicialmente, note-se que, apesar de ambas as curvas apresentarem um ponto de máximo principal, a curva da Figura 26 atinge uma velocidade de aproximadamente 36,4 m/s, ao passo que a simulação da Figura 40 atinge uma marca inferior de cerca de 24,36 m/s. Como a diferença entre os dois sistemas é somente a malha de discretização do fluido, então esta é a única característica que pode ser imputada como causa deste efeito. Devido à evidente complexidade dos fenômenos físicos e numéricos envolvidos, não é tarefa fácil estabelecer o *modus operandi* que leva a um pico de maior velocidade central em uma malha menos refinada, todavia algumas conjecturas podem ser elaboradas a fim de clarear um pouco o fenômeno. Uma malha com menor número de pontos incorre necessariamente em dimensões maiores para as células computacionais. Por sua vez, células maiores conduzem a gradientes menores de algumas propriedades, tais como a velocidade, a energia cinética de turbulência e a sua taxa de dissipação. O menor gradiente de velocidade nos pontos mais próximos da parede do tubo tem como consequência imediata uma menor produção de turbulência, a qual acarreta uma menor viscosidade turbilhonar e – em decorrência – uma maior velocidade do fluido, de modo que, no início do escoamento, pode-se ter um pico de maior velocidade, como o verificado na Figura 26.

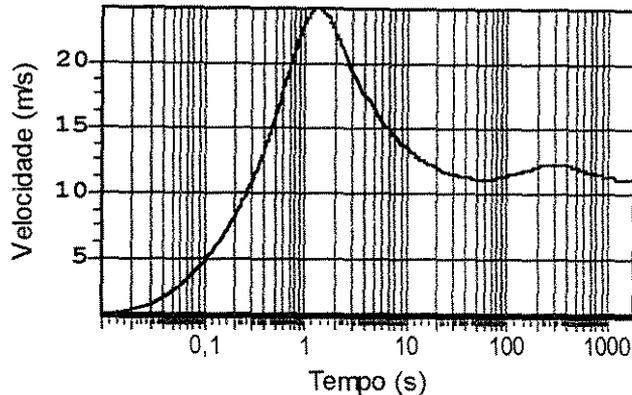


Figura 40: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.

Em contrapartida à amplitude do pico principal, pode-se notar da Figura 40 que a velocidade central de estabilização do fluido se mostra maior quando a grade de discretização é mais refinada. Como dito anteriormente, o refinamento da grade favorece um maior gradiente nas proximidades das paredes, de modo que, à medida que o escoamento evolui, a taxa de dissipação de turbulência é acrescida, ocasionando uma redução significativa na viscosidade turbilhonar. É justamente esta redução que provoca uma maior velocidade do fluido até que a estabilização seja atingida.

Evidentemente, até o ponto em que foram conduzidas as simulações, não é permitida uma afirmação totalmente segura sobre o valor da velocidade de estabilização. De fato, é bem possível que, se as simulações da Figura 26 e da Figura 40 fossem conduzidas por um tempo muito mais longo, ambas as velocidades de estabilização se tornariam aproximadamente iguais. Neste caso, poder-se-ia concluir que uma grade mais refinada causa uma evolução mais lenta da simulação até o estado de regime permanente. Para comparação, a velocidade central do fluido em ambos os casos é mostrada na Tabela 25.

Tabela 25: Comparação da velocidade central do fluido entre simulações diferenciadas pelo refinamento da grade de discretização (tempo simulado de aproximadamente 1700s).

Simulação	Velocidade central do fluido (m/s)
Seção 5.4.1 (9 elementos radiais)	9,391
Seção 5.5.1 (15 elementos radiais)	11,077

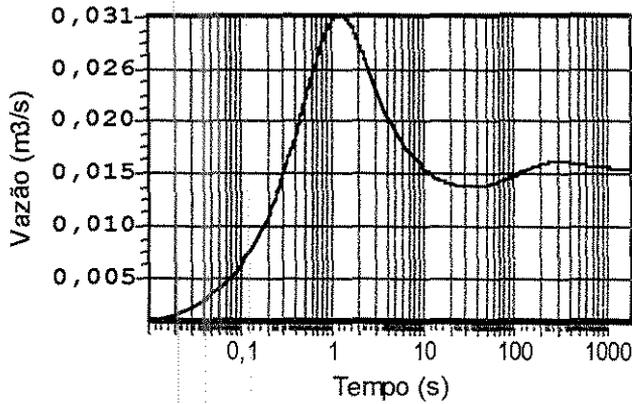


Figura 41: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.

Outra distinção relevante entre as duas simulações é a oscilação reproduzida na Figura 40, à qual não tem ocorrência na Figura 26. Note que, enquanto a simulação com grade refinada (seção 5.5.1) exibe, após o pico principal, um decaimento rápido seguido de oscilação, a grade menos refinada (seção 5.4.1) executa um decaimento mais lento e monotônico até a estabilização da velocidade central. Igualmente notável é o fato de que, apesar das diferenças de transiente, ambas as curvas de velocidade central estabilizam num tempo de simulação semelhante.

As observações e os comentários tecidos anteriormente podem ser estendidos para o perfil temporal de vazão mostrado na Figura 41 (grade mais refinada) e na Figura 27 (grade menos refinada). Conseqüentemente, toda a análise é aplicável considerando-se apenas uma pequena diferença nos tempos de estabilização de ambas as curvas, ocasionada pelo fato da vazão ser uma propriedade integralizada.

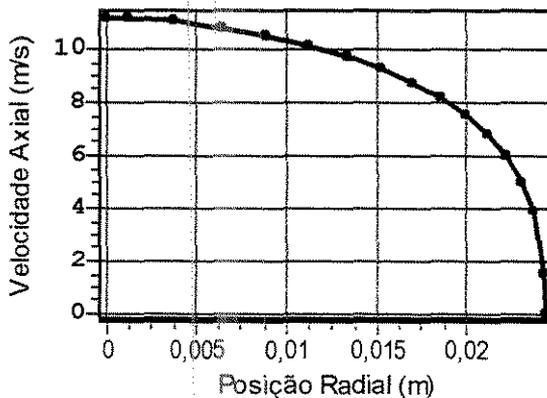


Figura 42: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.

A Figura 42 traz o perfil radial da velocidade axial do fluido. Pode-se perceber a regularidade da curva e o achatamento típico dos escoamentos turbulentos. Estas características reforçam a consistência física do resultado obtido. Comparando-se a Figura 42 com a Figura 28, que corresponde à mesma simulação com grade menos refinada, nota-

se a semelhança de comportamento entre as duas curvas, entretanto esta última exhibe um escoamento de fluido um pouco mais lento²⁹.

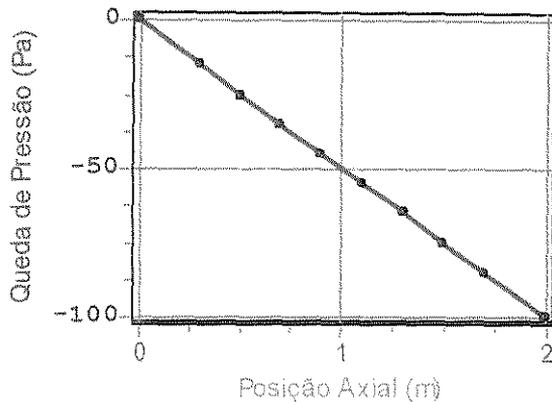


Figura 43: Perfil axial da queda de pressão ao longo do tubo. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.

O perfil axial da queda de pressão segue o comportamento esperado, sendo mostrado na Figura 43. Note-se que a diferença de pressão entre a base e o topo do equipamento totaliza o valor de 100 Pa, o qual corresponde à queda de pressão definida como parâmetro de entrada.

5.5.1.3 Comparação

Procedendo da mesma maneira que nas simulações anteriores, faz-se uma comparação com o perfil universal de velocidades. Convertendo os pontos do perfil radial de velocidades nas coordenadas adimensionais y^+ e u^+ , pode-se realizar uma comparação com o perfil universal de velocidades, a qual está apresentada na Figura 37. A comparação direta entre a curva de referência e a curva obtida na simulação mostra uma concordância bastante razoável, ratificando a confiabilidade do modelo.

²⁹ O valor da velocidade axial no centro do tubo, para cada curva, está mostrado na Tabela 25.

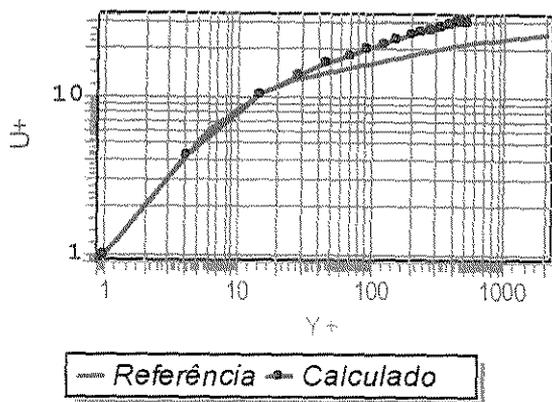


Figura 44: Comparação entre o perfil universal de velocidades e o perfil de velocidades adimensionalizado fornecido pela simulação. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.

A Figura 45 e a Figura 46 expõem o perfil radial das propriedades de turbulência κ e ϵ , respectivamente. O comportamento e a conformação de ambas as curvas estão de acordo com a expectativa. A conformação geral destes gráficos é uma reprodução das curvas apresentadas na Figura 31 e Figura 32 – correspondentes à simulação com grade menos refinada – por conseguinte, a mesma análise desenvolvida na seção 5.4.1.3 é cabível, sem alterações, a estes resultados.

Todavia, deve-se aplicar uma atenção especial à diferença de valores constatada entre as duas simulações. Confrontando a Figura 31 com a Figura 45, percebe-se que o perfil da propriedade κ tem uma amplitude bastante semelhante em ambos os casos. O mesmo não é verificado com a taxa de dissipação de energia cinética de turbulência ϵ , visto que os perfis radiais alcançam diferenças consideráveis. Isto pode ser imediatamente constatado pela comparação da Figura 32 com a Figura 46. Embora o formato das curvas seja muito semelhante, na primeira, o valor máximo atingido é aproximadamente $\epsilon = 754,5$, ao passo que a curva da Figura 46 exibe um valor máximo de aproximadamente $\epsilon = 1506,6$.

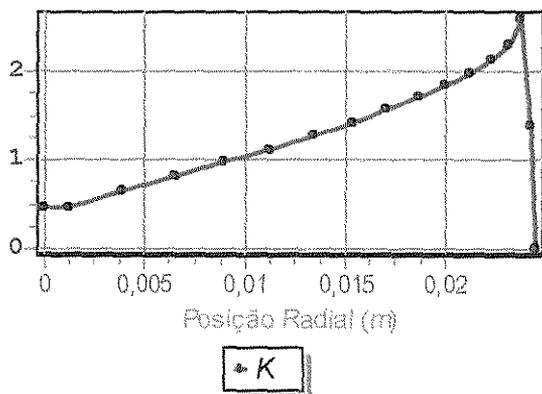


Figura 45: Perfil radial da energia cinética de turbulência (κ). Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.

Novamente, como a única diferença entre as simulações é o grau de refinamento da grade de discretização, somente esta característica pode ser imputada como causa para este fenômeno. De fato, a grade mais refinada tende a originar um perfil de velocidades com derivada mais acentuada junto a parede do tubo. Em consequência, devido ao equacionamento do modelo $\kappa-\epsilon$ de baixo Reynolds, o termo de geração da propriedade ϵ torna-se mais pronunciado, ocasionando um maior valor de ϵ junto à parede quando o escoamento se aproxima do regime permanente.

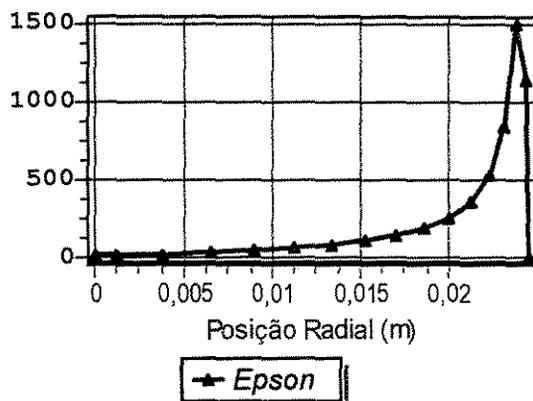


Figura 46: Perfil radial da taxa de dissipação da turbulência (ϵ). Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização refinada.

5.5.2 Tubo Horizontal (Sem Gravidade) – Discretização Mais Refinada

Como pôde ser confirmado na seção 5.5.1, o número de elementos radiais da grade de discretização tem um efeito bastante significativo no resultado da simulação. Todavia, existe um limite para esta influência, no sentido de que, à medida que aprimora-se o refinamento da grade, os valores das propriedades no regime permanente tendem a variar menos, chegando à situação na qual a adição de elementos à grade não influenciará os resultados da simulação. Este efeito pode ser constatado pelo estudo-de-caso aqui apresentado, o qual representa uma simulação idêntica à efetuada na seção 5.5.1, a menos do número de pontos radiais na grade, o qual foi elevado de 15 para 17.

5.5.2.1 Parâmetros

Os parâmetros de entrada desta simulação são os mesmos apresentados na seção 5.5.1.1, excetuando-se a tabela de discretização do fluido, que sofre uma pequena alteração na direção radial, sendo mostrada em seguida.

Tabela 26: Características da discretização do fluido. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização mais refinada.

No. de Elementos - Radial	17
No. de Elementos - Axial	10
Passo Inicial Radial (m)	0,0004
Passo Axial (m)	0,2
Res. Radial	0,1
Alfa (m)	6,70833E-5

5.5.2.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

Apenas a título de comparação, verifiquemos os perfis temporais de velocidade e vazão exibidos na Figura 47 e Figura 48, respectivamente. Pode-se perceber claramente a identidade entre estas curvas e as correspondentes da seção 5.5.1.2, excetuando-se apenas a amplitude do ponto de máximo principal, que se mostra ligeiramente diferente.

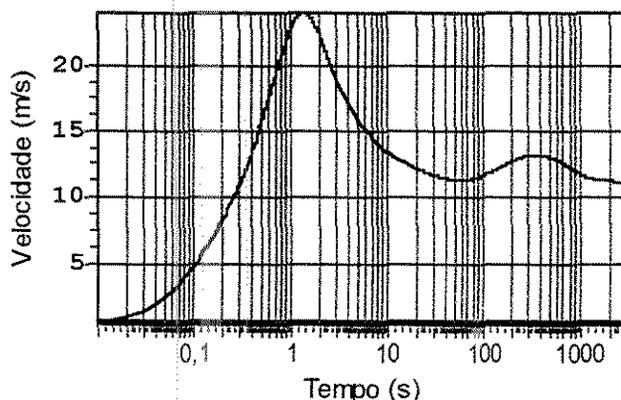


Figura 47: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização mais refinada.

A velocidade central do fluido mostrada na Figura 47 estabiliza em aproximadamente 11,182 m/s, valor bem semelhante aos 11,077 m/s conseguidos na simulação da seção 5.5.1. Da mesma forma, a vazão volumétrica de regime permanente pode ser tomada da Figura 48 como sendo de 0,016269 m³/s. Estes valores mostram claramente a redução do efeito do refinamento da grade de pontos no resultado da simulação.

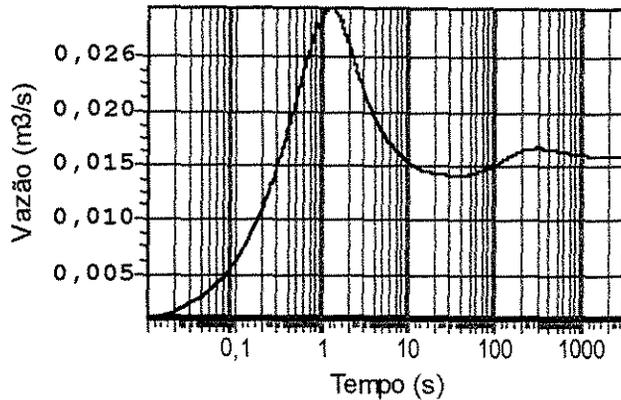


Figura 48: Perfil temporal da vazão volumétrica do fluido. Escoamento turbulento horizontal de fluido puro com discretização mais refinada.

5.5.3 Conclusão

A Tabela 27 mostra uma comparação entre as velocidades centrais do fluido para simulações diferenciadas apenas pelo grau de refinamento na direção radial.

Tabela 27: Comparação da velocidade central do fluido entre simulações diferenciadas pelo refinamento da grade de discretização.

Simulação	Velocidade central do fluido (m/s)	Variação
Seção 5.4.1 (9 elementos radiais)	9,391	- -
Seção 5.5.1 (15 elementos radiais)	11,077	18%
Seção 5.5.2 (17 elementos radiais)	11,182	1%

Pela análise da Tabela 27, e dos resultados discutidos nesta seção, pode-se concluir com boa segurança que, de fato, o aumento do refinamento da grade de pontos tem efeitos limitados que decrescem à medida que o número de pontos se eleva. Esta verificação é tranquilizadora, uma vez que testifica que o número de pontos na grade não precisa ser indefinidamente alto para se obter uma simulação de boa qualidade, podendo-se atingir uma situação na qual o acréscimo de pontos não terá influência perceptível nos resultados.

5.6 Efeito das Condições Iniciais de Turbulência no Modelo de Escoamento Turbulento de Fluido Puro

É do conhecimento comum que as condições iniciais de uma simulação podem influenciar em alguma proporção os seus resultados, sendo esta acertiva especialmente verdadeira para as propriedades de maior sensibilidade como, por exemplo, a energia cinética de turbulência κ e a sua taxa de dissipação ϵ . Por conseguinte, a fim de termos uma medida destes efeitos das condições iniciais, foram executadas algumas corridas variando-se os valores das propriedades κ e ϵ no tempo zero. Dentre as simulações,

destaca-se um sistema que é idêntico ao simulado na seção 5.5.2, alterando-se apenas os valores iniciais das propriedades de turbulência. A Tabela 28 mostra os valores dos parâmetros aplicados ao modelo de turbulência.

Tabela 28: Parâmetros do modelo de turbulência. Efeito das condições iniciais de turbulência.

K(0)	2
Epson(0)	600
Cm	0,09
Ce1	1,55
Ce2	2
Sk	1
Se	1,3
f1	1
f2	1

Os resultados obtidos desta simulação são parcialmente mostrados a seguir e fornecem alguns elementos importantes para a análise dos efeitos das condições iniciais de turbulência. O perfil temporal da velocidade central do fluido é mostrado na Figura 49. A comparação da curva da Figura 49 com a Figura 47 da seção 5.5.2 permite verificar imediatamente algumas diferenças relevantes. A primeira é a formação de um ponto de máximo com banda larga na Figura 49, o qual substitui o pico estreito de curta duração exibido na Figura 47. A segunda alteração significativa é o desaparecimento da oscilação encontrada na Figura 47, o qual confere um comportamento monotônico decrescente após o pico de velocidade da curva na Figura 49. Para a condição inicial testada nesta simulação, não houve uma alteração sensível do tempo de estabilização quando comparado ao ensaio da seção 5.5.2. O valor de estabilização da velocidade central do fluido pode ser tomado como sendo de 11,1311 m/s (após 4700s de simulação), enquanto que a vazão conseguida mede 0,016254 m³/s.

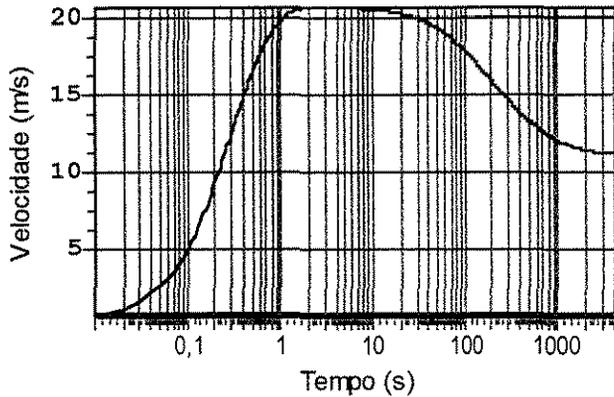


Figura 49: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Efeito das condições iniciais de turbulência.

A Figura 50 exibe o perfil radial da velocidade axial do fluido. O padrão de comportamento é o mesmo verificado em diagramas anteriores, conferindo com a expectativa para o escoamento turbulento.

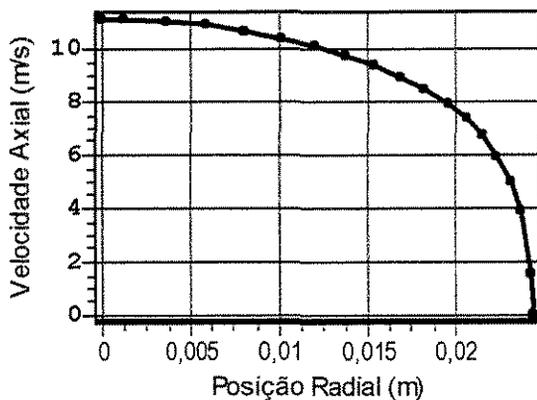


Figura 50: Perfil radial de velocidade do fluido. Efeito das condições iniciais de turbulência.

Em decorrência desta análise, pode-se concluir que os valores iniciais das propriedades de turbulência κ e ϵ influenciam fortemente o comportamento transiente do escoamento. Todavia, em contrapartida, os valores de regime permanente, alcançados após a estabilização, permanecem inalterados, como pode ser verificado na Tabela 29.

Tabela 29: Comparação da velocidade central do fluido entre simulações diferenciadas pelas condições iniciais de turbulência.

Simulação	Velocidade central do fluido (m/s)	Vazão do fluido (m ³ /s)
Seção 5.5.2	11,182	0,016269
Seção 5.6	11,131	0,016254

5.7 Modelo de Escoamento Laminar Bifásico

Nesta parte, serão ensaiadas algumas simulações envolvendo o escoamento laminar bifásico composto por um leito de partículas móveis – fase sólida – entremeadas pelo fluido escoante – fase fluída. Para que as características de um escoamento laminar sejam obtidas, a modelagem do escoamento do fluido não deve levar em consideração os efeitos de turbulência, os quais podem ser ignorados através da exclusão ou desabilitação do modelo de turbulência³⁰ incorporado no modelo de transporte pneumático proposto neste trabalho.

Para facilitar a análise e permitir uma comparação mais imediata entre as diversas simulações apresentadas doravante, procurou-se ao máximo manter uma constância dos parâmetros de entrada da simulação. Em consequência desta postura, alguns resultados podem ser, de fato, não-realísticos, entretanto servem ao propósito de ilustrar e estudar quais os efeitos que resultam da inclusão ou exclusão de alguma característica de escoamento no modelo global de transporte pneumático.

As propriedades físicas e geométricas do tubo, das partículas e do fluido foram definidas com valores característicos comumente encontrados em simulações e experimentos publicados na literatura específica.

5.7.1 Escoamento Laminar / Partículas

Este estudo-de-caso investiga o comportamento do sistema de transporte pneumático sem a modelagem da turbulência ou do acoplamento sólido-fluido. Portanto, a expectativa inicial é a obtenção de um escoamento com características laminares no qual o fluido não sofre qualquer efeito da presença das partículas. A fase particulada adotada se constitui numa mistura monodispersa introduzida no tubo de transporte a uma vazão constante de aproximadamente $10,667 \text{ kg/sm}^2$. Uma listagem completa dos parâmetros é apresentada na seção subsequente.

5.7.1.1 Parâmetros

Os parâmetros de entrada da presente simulação estão apresentados nas tabelas seguintes.

³⁰ Uma descrição e discussão pormenorizada da modelagem da turbulência foi realizada em detalhes na seção 3.6.

Tabela 30: Características da simulação. escoamento laminar bifásico.

No. Iterações/Seg. (1/s)	2000
Passo de Tempo (s)	0,0005
Taxa de Injeção de Partículas (1/s)	2000
Tempo Mínimo de Colisão (s)	1E-6
Simular Colisões	Não
Colisões para Células Adjacentes	Não
Simular Escoamento do Fluido	Sim
Simular Turbulência	Não
Simular Acoplamento Sólido -> Fluido	Não
Intervalo Atualização (s)	0,1
Intervalo Amostragem (s)	1

Tabela 31: Características do equipamento. escoamento laminar bifásico.

Diâmetro (m)	0,05
Altura (m)	2
Coef. de Restituição	1
Coef. de Fricção	0
Coef. de Recuperação	0,5
Pressão na Entrada (Pa)	101030
Pressão na Saída (Pa)	101000
Gravidade X (m/s ²)	0
Gravidade Y (m/s ²)	0
Gravidade Z (m/s ²)	-9,8

Tabela 32: Características das partículas. escoamento laminar bifásico.

Diâmetro (m)	0,002
Esfericidade	1
Densidade (kg/m ³)	2500
Veloc. Radial (m/s)	0
Veloc. Angular (m/s)	0
Veloc. Axial (m/s)	0

Tabela 33: Características do fluido. Escoamento laminar bifásico.

Densidade (kg/m ³)	1
Viscosidade (Pa.s)	1,8E-5
Veloc. Radial (m/s)	0
Veloc. Angular (m/s)	0
Veloc. Axial (Centro) (m/s)	20

Tabela 34: Características da discretização das partículas. Escoamento laminar bifásico.

No. de Elementos - Radial	5
No. de Elementos - Angular	5
No. de Elementos - Axial	20
Passo Radial	0,005
Passo Angular	1,256637061
Passo Axial	0,1

Tabela 35: Características da discretização do fluido. Escoamento laminar bifásico.

No. de Elementos - Radial	12
No. de Elementos - Axial	10
Passo Inicial Radial (m)	0,0004
Passo Axial (m)	0,2
Res. Radial	0,1
Alfa (m)	0,0001645454545

5.7.1.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

A simulação do sistema bifásico descrito na seção anterior fornece uma série de resultados, dos quais uma parcela relevante é apresentada e analisada logo a seguir.

A Figura 51 traz o perfil temporal da velocidade central do fluido. Uma comparação deste gráfico com a curva correspondente ao escoamento de um fluido puro – mostrada na Figura 14 – deixa clara a semelhança entre os comportamentos dos dois sistemas, denotando que, conforme a expectativa, a não simulação do acoplamento sólido-fluido produz um perfil de escoamento idêntico ao que seria obtido para um fluido puro nas mesmas condições dinâmicas.

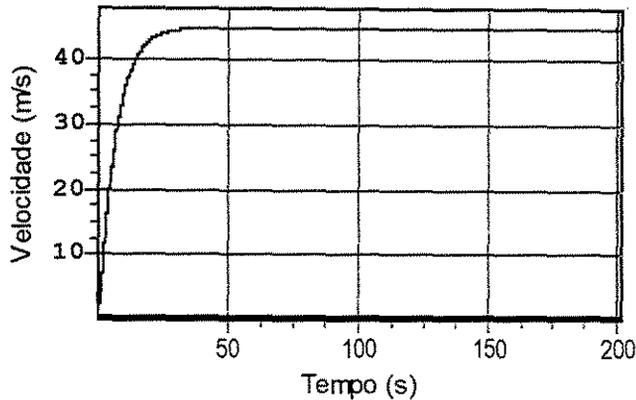


Figura 51: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento laminar bifásico.

Corroborando a assertiva anterior, pode-se inspecionar a Figura 52 para verificar que o perfil radial de velocidades do fluido corresponde ao formato parabólico esperado para um escoamento laminar monofásico, não apresentando quaisquer distorções decorrentes da existência de partículas em meio ao fluido.

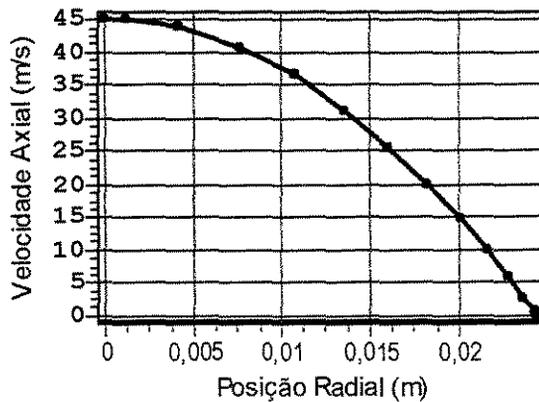


Figura 52: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento laminar bifásico.

Tendo-se tratado de alguns aspectos referentes ao comportamento do fluido, perfaz-se, na seqüência, uma análise mais pormenorizada do comportamento e características da fase dispersa. Neste sentido, a Figura 53 exibe a evolução do *hold-up* de partículas no interior do tubo de transporte. Por esta figura, pode-se perceber que até cerca de 2s a concentração de partículas é nula, sendo então acrescida rapidamente até atingir um valor máximo aos 4s, para depois descrever uma cavidade e estabilizar³¹ em torno dos 2,55

³¹Note-se que o conceito de estabilização deve ser aplicado de maneira flexível às propriedades dinâmicas do conjunto de partículas, uma vez que, mesmo ao ser atingido o regime permanente, a vazão de sólidos, bem como outras propriedades, são acompanhadas de uma flutuação intrínseca à natureza discreta da fase particulada, muito semelhante a alguma espécie de ruído de fundo.

kg/m^3 . Tal comportamento pode ser justificado, ao considerar-se que o escoamento do fluido neste estudo-de-caso foi iniciado do repouso, de maneira que, nos primeiros momentos, quando o fluido está sendo acelerado pela diferença de pressão, a sua velocidade é inferior à velocidade terminal das partículas, não sendo, por conseguinte, capaz de produzir o arraste. Como inferência, todas as partículas injetadas precipitam, saindo em seguida pela base do tubo.

O ponto de máximo encontrado na Figura 53 também pode ser justificado pela ausência de transporte na fase inicial da simulação, pois, imediatamente após o fluido atingir a velocidade crítica de transporte, as partículas já começam a ser arrastadas, entretanto, devido ao fato do fluido ainda estar escoando a uma velocidade pouco superior à crítica, as partículas inseridas adquirem um movimento lento e tendem a se amontoar, gerando momentaneamente uma concentração elevada. Depois disso, à medida que a velocidade do gás de arraste é acrescida, as partículas tornam-se mais rápidas e, em consequência, atravessam o tubo mais afastadas umas das outras, o que, por sua vez, diminui a sua concentração.

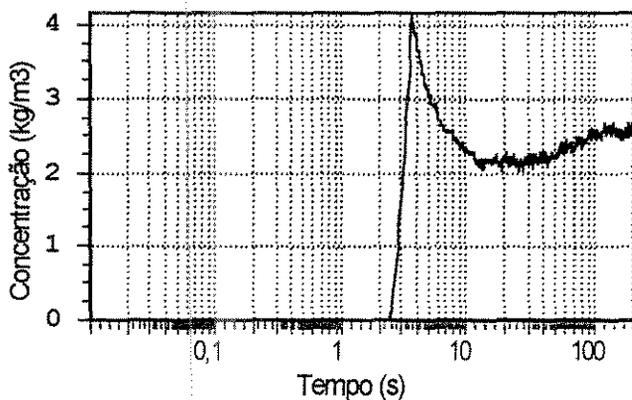


Figura 53: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico.

O efeito de queda das partículas pode ser averiguado claramente na Figura 54, a qual permite vislumbrar que, de fato, o fluxo de partículas pela base do equipamento é máxima no início do escoamento, se mantendo num patamar de $10,667 \text{ kg/sm}^2$ até cerca de 2s, para depois decrescer e estabilizar em torno dos $1,1 \text{ kg/sm}^2$. Levando em conta o fato de que a taxa de injeção de sólidos tem este mesmo valor ($10,667 \text{ kg/sm}^2$), confirma-se que, neste curto período de tempo, todo o sólido injetado retorna pela base do tubo.

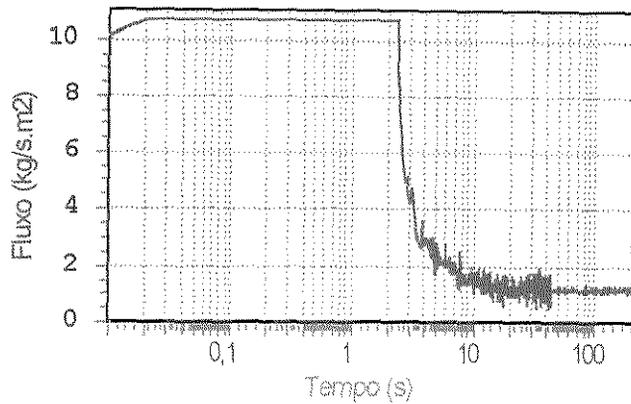


Figura 54: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico.

Um quadro mais completo do comportamento da fase particulada pode ser desenhado por meio da análise conjunta da Figura 54 com a Figura 55, a qual traz a história do fluxo de partículas através do topo do tubo, ou seja, refere-se aos sólidos que atravessam inteiramente o tubo de transporte. A curva da Figura 55 mostra que até cerca de 4s não há sólidos deixando o equipamento pelo topo. Portanto, há um retardamento entre o início da saída de sólidos pelo topo e o momento em que a vazão de sólidos pela base (Figura 54) começa a decrescer. Este atraso corresponde aproximadamente ao tempo de retenção das partículas naquele estado da simulação, ou seja, é o tempo que a partícula mais veloz naquele momento necessitou para atravessar o tubo de transporte. A Figura 55 também mostra que o fluxo de saída de sólidos pelo topo estabiliza-se rapidamente, flutuando em torno de uma mesma média³² já a partir dos 4s simulados.

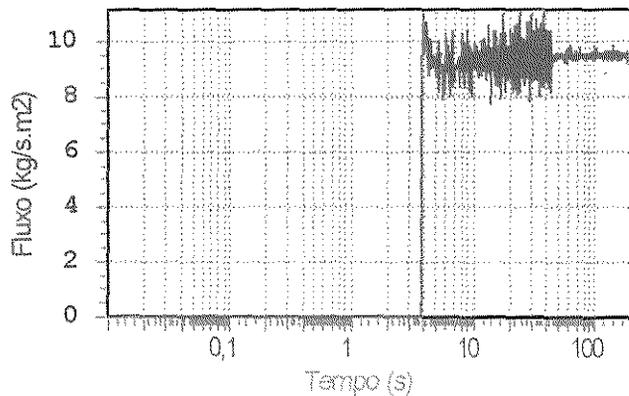


Figura 55: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico.

³² Embora a amplitude das flutuações sofra uma forte redução aos 40s, deve-se ressaltar que este não é um fenômeno inerentemente físico, sendo, ao invés, o resultado do aumento do intervalo de tempo de amostragem usado na construção da curva. Por conseguinte, a amplitude das flutuações não é o aspecto mais relevante neste caso, devendo-se evidenciar, principalmente, o fato de a média da vazão se manter aproximadamente constante já aos 4s, a despeito das variações na amplitude das flutuações.

Uma outra perspectiva de análise do comportamento das partículas em um sistema de transporte pneumático pode ser conseguida através dos diagramas de visualização. A Figura 56 mostra o diagrama de visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte, no qual o retângulo inferior representa a projeção vertical do tubo, enquanto que o quadrado superior corresponde à perspectiva horizontal. Deve-se ressaltar que as dimensões horizontal e vertical do equipamento, assim como o diâmetro das partículas transportadas não estão em escala, de modo que este aspecto precisa ser considerado em qualquer análise. Os diagramas de visualização permitem a averiguação de diversos fatores relevantes para a caracterização do escoamento sólido-fluido, os quais são aplicáveis na análise do presente e dos demais estudos-de-caso apresentados doravante neste trabalho.

Dentre as informações advindas da Figura 56, em primeiro, pode-se perceber a maior aglomeração de partículas na base do tubo de transporte. Esta região de maior concentração corresponde necessariamente à zona de aceleração das partículas, onde partem do repouso e são aceleradas até atingir a sua velocidade de transporte no fluido. À medida que avança-se em direção ao topo do tubo, pode-se perceber um aumento progressivo do distanciamento entre as partículas até uma determinada altura, quando, então, o afastamento das partículas entre si permanece aproximadamente constante, demarcando o final da zona de aceleração. Pela Figura 56, é possível estimar esta posição como sendo próxima ao meio do tubo, a cerca de 1m de altura.

A determinação da zona de aceleração por simples inspeção visual é, naturalmente, um método bastante aproximado. Todavia, o valor estimado através da Figura 56 não é por demais impreciso, conforme será mostrado a seguir. Considere-se que seja possível inserir no interior do tubo de transporte uma partícula especial – a qual denominaremos de *traçador* – que seja equipada com uma série de sensores de posição, velocidade, dinamômetros, etc. Com estes aparatos, poder-se-ia coletar uma gama de informações dinâmicas sobre a história desta partícula à medida em que é transportada. Nesta linha de análise, a Figura 57 exibe o perfil de velocidade axial de uma única partícula de traçador ao longo do seu percurso no interior do tubo de transporte. Por esta curva, é possível notar que a maior aceleração das partículas ocorre, de fato, no primeiro metro de tubo, no qual a taxa de variação da velocidade em relação à posição axial (derivada da curva) é notavelmente mais elevada. Após o meio do equipamento, a inclinação desta curva assume um comportamento aproximadamente constante.

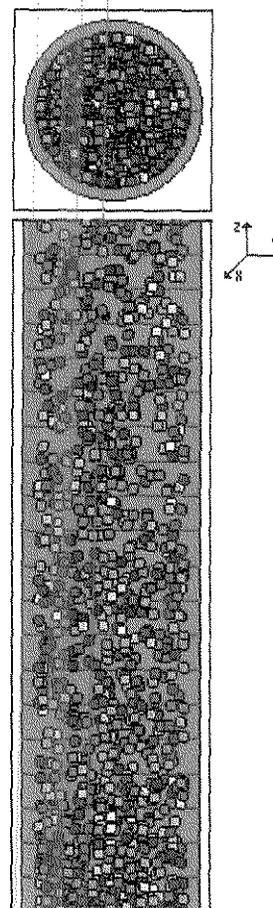


Figura 56: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico.

Outro aspecto relevante da Figura 56 é a inexistência de sólidos nas regiões adjacentes à parede do tubo. Este fato se deve à baixa velocidade do fluido junto à parede, a qual se mostra inferior à velocidade terminal das partículas, associada ao caráter não dispersivo do movimento dos sólidos, uma vez que as colisões partícula-partícula estão sendo presentemente ignoradas. Isto pode ser averiguado por meio da Figura 52, a qual infere que a velocidade do fluido após um raio de cerca de 2cm não alcança o valor de 12,18m/s correspondente à velocidade terminal das partículas utilizadas neste estudo-de-caso. Este será um tema extensivamente discutido em simulações posteriores, entretanto, desde já pode-se avaliar que a inexistência de sólidos na periferia do tubo não é uma situação real. Tal resultado foi obtido neste estudo-de-caso devido ao fato de não se ter simulado as colisões entre partículas.

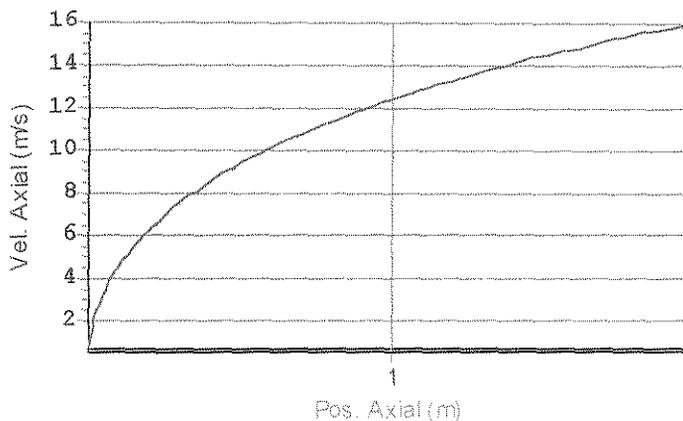


Figura 57: Velocidade axial de uma partícula de traçador inserida do repouso no centro da base do tubo de transporte. escoamento laminar bifásico.

Uma outra perspectiva de visualização da distribuição de velocidades das partículas no leito está exposta na Figura 58. Saliente-se que esta figura – assim como a Figura 59 – apresenta apenas um instantâneo associado a algum momento da simulação após ser atingido um estado dinâmico que pode ser considerado como regime permanente.

A Figura 58 exhibe a distribuição da velocidade média axial das partículas contidas em cada célula espacial. A faixa de valores está definida e identificada pela escala policromática associada, devendo-se levar em conta que as células que não contêm qualquer partícula são sinalizadas com a cor correspondente ao zero nesta escala. O quadro da Figura 58 mostra claramente a zona de aceleração das partículas, situada na base do equipamento até cerca de 1m de altura. Pode-se perceber, também, a elevada velocidade das partículas na região central do tubo, fato que pode ser justificado pelo perfil de velocidades do fluido, o qual corresponde ao escoamento laminar de um fluido puro, uma vez que a influência das partículas não está sendo computada através do acoplamento sólido-fluido.

A Figura 59 exhibe a distribuição local da porosidade no leito de transporte. Pode-se constatar que a porosidade é mais baixa nas regiões inferiores, onde as partículas possuem uma velocidade menor, o que permite uma maior aproximação mútua. À medida que a

altura aumenta, a porosidade se eleva, porém a tendência de aglomeração das partículas no centro do tubo permanece.

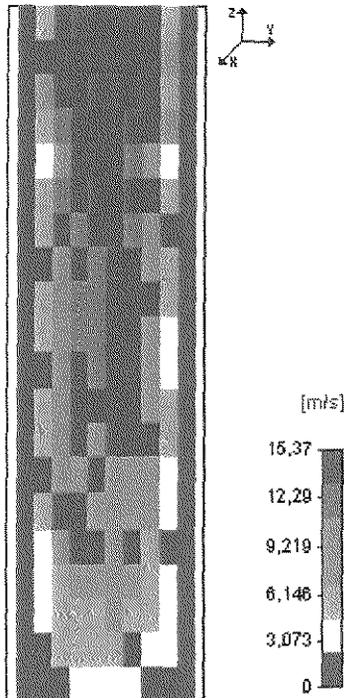


Figura 58: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento laminar bifásico.

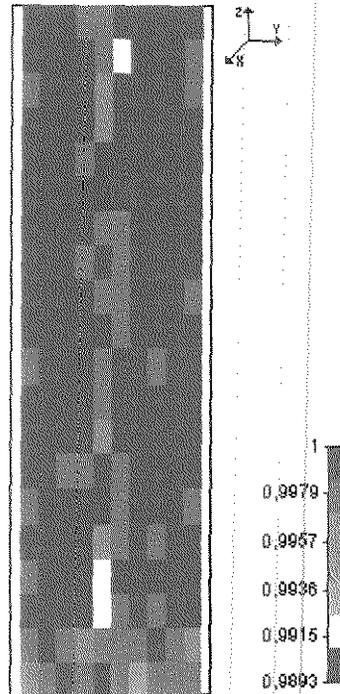


Figura 59: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento laminar bifásico.

5.7.2 Escoamento Laminar / Partículas / Acoplamento Sólido-Fluido

Este caso estudo foi procedido com o objetivo de exemplificar e analisar um escoamento com características laminares sob o efeito do acoplamento sólido-fluido. A primeira abordagem consistiu na simulação de um sistema idêntico ao descrito na seção 5.7.1, adicionando-se apenas a capacidade de contemplar os efeitos do movimento das partículas. Nesta situação, ocorreu que as partículas precipitaram-se completamente, pois o diferencial de pressão não foi suficiente para suportar o peso da fase sólida e proporcionar o arraste. No intuito de solucionar o problema, procurou-se aumentar a diferença de pressão de modo que fosse gerado o transporte dos sólidos, mantendo-se, entretanto, os demais parâmetros fixados.

5.7.2.1 Parâmetros

Os parâmetros aplicados nesta simulação têm os mesmos valores dos exibidos na seção 5.7.1.1, excetuando-se a diferença de pressão aplicada ao fluido, a qual é mostrada com as demais características do equipamento na Tabela 36 a seguir.

Tabela 36: Características do equipamento. Escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

Diâmetro (m)	0,05
Altura (m)	2
Coef. de Restituição	1
Coef. de Fricção	0
Coef. de Recuperação	0,5
Pressão na Entrada (Pa)	101300
Pressão na Saída (Pa)	101000
Gravidade X (m/s ²)	0
Gravidade Y (m/s ²)	0
Gravidade Z (m/s ²)	-9,8

5.7.2.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

Os resultados obtidos neste estudo-de-caso mostram a influência dinâmica das partículas sobre o escoamento laminar da fase fluida. A Figura 60 traz o perfil temporal do fluido no centro do tubo. O pico principal se deve ao impulso recebido pelo fluido nos momentos iniciais do escoamento quando há poucas partículas no interior do tubo, sendo, portanto, menor o peso de sólidos a ser suportado.

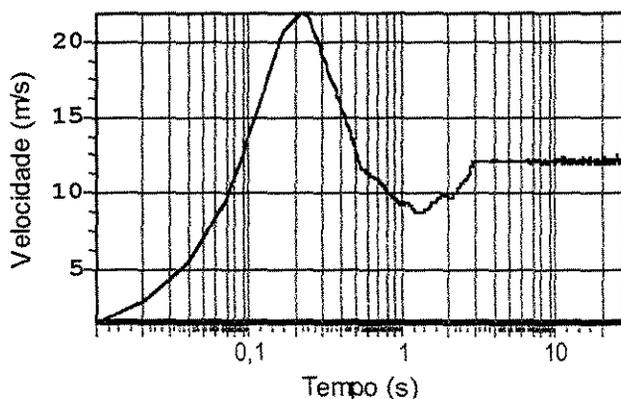


Figura 60: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

À medida que as partículas vão sendo injetadas, o peso do leito aumenta, causando a diminuição da velocidade do fluido no centro do tubo, onde a transferência de *momentum* entre as fases sólida e fluida é máxima devido à maior velocidade de escorregamento. Por este motivo, aos $\sim 0,3s$, a velocidade do fluido se reduz até que a parte central do perfil de velocidades – mostrado na Figura 61 – fique abaixo da velocidade terminal das partículas. Nesta situação, a taxa de precipitação de partículas na entrada do tubo aumenta, fazendo com que o *hold-up* diminua. Entretanto, o *hold-up* não decresce indefinidamente, pois, quando a concentração de partículas diminui suficientemente, a força de pressão volta a acelerar o fluido, elevando a sua velocidade. Deste modo, pode-se perceber claramente que este mecanismo tende a gerar um estado de equilíbrio no qual a massa de partículas na coluna central do tubo se torna compatível com a velocidade do fluido. A busca deste estado de equilíbrio é representada na Figura 60 pelo decréscimo da velocidade central do fluido até atingir um valor mínimo, seguida do seu acréscimo e posterior estabilização.

O equilíbrio de forças resultante do carregamento das partículas causa uma deformação do perfil radial de velocidades claramente percebida na Figura 61, que exhibe um “afundamento” central formando um perfil do tipo coroa. Este comportamento do perfil de velocidades do fluido tem verificação experimental e foi reportado em publicações na literatura especializada (Vollheim, 1965; Tsuji & Morikawa, 1982 e Tsuji et. ali, 1984).

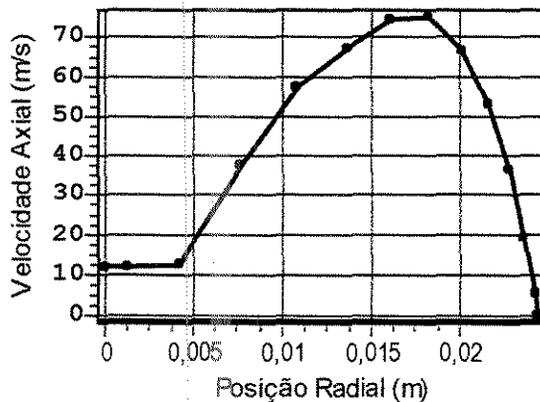


Figura 61: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

A Figura 62 mostra a história da concentração mássica de sólidos no leito, através da qual pode-se constatar a existência de um tempo de retardo entre o comportamento do fluido e o efeito causado no *hold-up* de partículas. De fato, enquanto o pico de velocidade ocorre aos $\sim 0,2s$, o máximo de concentração se dá aos $\sim 0,4s$, denotando que o aumento do conteúdo de sólidos é realmente o resultado do aumento da velocidade do fluido. Na mesma linha, mas com tempo de resposta mais próximo, a velocidade central atinge o ponto de mínimo aos $\sim 1,5s$ e estabiliza aos $3s$, enquanto que a concentração de sólidos perfaz os mesmos eventos em $\sim 2s$ e $\sim 3s$, respectivamente. Estes últimos valores evidenciam que o tempo de resposta da fase sólida é inversamente proporcional à amplitude da variação de velocidade no fluido.

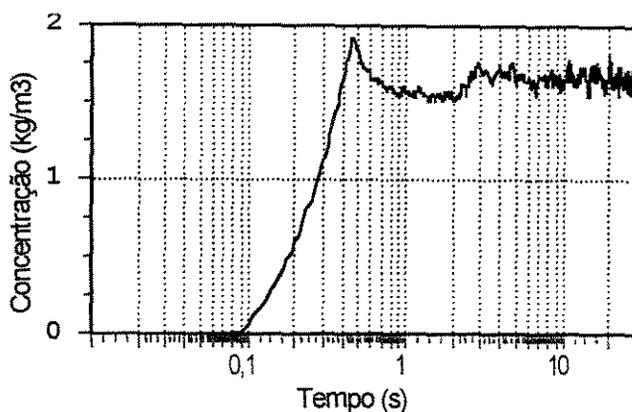


Figura 62: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

O perfil temporal do fluxo dos sólidos que saem pela base do fluido é exibido na Figura 63, a qual tem um comportamento semelhante ao exposto na Figura 54, contendo, no entanto, algumas distinções cruciais. Embora as fases iniciais de ambas as curvas sejam análogas, guardando-se a diferença de tempo ocasionada pela maior pressão do estudo-de-caso atual, deve-se notar que a precipitação de sólidos na Figura 54 jamais se anula, ao passo que, devido à diferença de pressão relativamente alta do presente estudo-de-caso, a precipitação de sólidos da Figura 63 se anula aos $\sim 0,1$ s, voltando a subir em cerca de $0,5$ s, quando a velocidade central do fluido decresce, em virtude do peso da fase sólida, a um valor inferior à velocidade terminal das partículas.

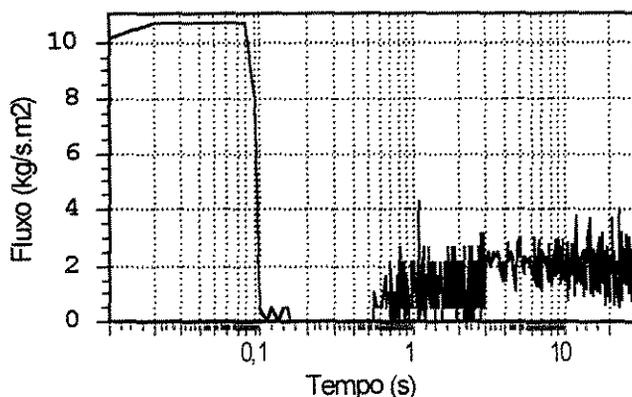


Figura 63: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

A história do fluxo de sólidos pelo topo do equipamento é mostrada na Figura 64. Esta curva tem um comportamento geral análogo ao exposto na Figura 55, diferindo apenas no tempo decorrido até que a estabilização seja atingida. A distinção entre os tempos de estabilização – assim como entre os valores máximos do fluxo de sólidos pelo topo – de ambas as curvas se deve, outra vez, à maior pressão de entrada definida neste estudo-de-caso.

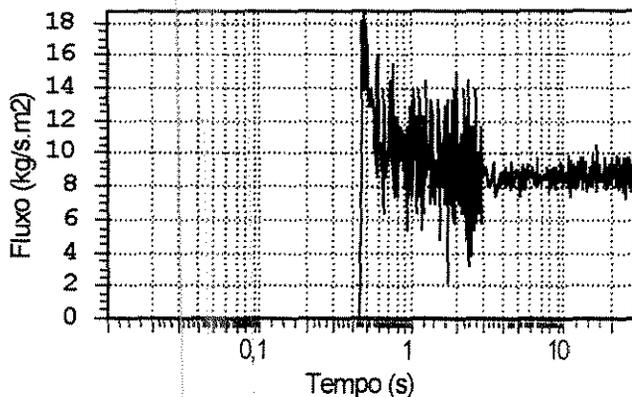


Figura 64: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

O diagrama de visualização das partículas é apresentado na Figura 65, que permite a constatação de algumas características relevantes do sistema estudado. Em primeiro, nota-se que, diferentemente da Figura 56, algumas partículas podem ser encontradas nas regiões mais próximas da parede, ocasionando a impressão de que há uma certa dispersão no movimento das partículas. Todavia, deve-se observar que, assim como no estudo-de-caso anterior, as colisões partícula-partícula não estão sendo consideradas, de maneira que não há uma causa intrínseca capaz de gerar a dispersão. Em consequência, pode-se concluir que a presença de partículas junto à parede não representa, neste caso, o resultado da dispersão dos sólidos, sendo, ao invés, um efeito decorrente da velocidade relativamente alta do fluido. Conforme pode ser averiguado na Figura 61, a velocidade do fluido só cai para um valor abaixo da velocidade terminal das partículas a uma distância inferior a 1mm da parede, propiciando o arraste de partículas até mesmo nestas regiões. A Figura 65 também mostra distintamente a tendência de uma maior concentração de partículas na região central do tubo. Este fato é explicado pela baixa velocidade do fluido nesta região (Figura 61), a qual estabiliza-se em um valor bastante próximo da velocidade terminal, suficiente apenas para sustentar a fase sólida em flutuação.

A Figura 66 apresenta a visualização da velocidade axial das partículas, através da qual pode-se ratificar algumas das observações levantadas por meio de outros diagramas. No referente ao perfil de velocidades das partículas, a Figura 66 expõe claramente o perfil de coroa (com afundamento central) no interior do tubo de transporte, havendo uma zona de baixa velocidade no seu centro, um anel de alta velocidade mais externo e uma zona de menor velocidade junto à parede do tubo. Estas observações sobre o perfil de velocidades das partículas estão em pleno acordo com o perfil de velocidades do fluido exibido na Figura 61.

Comparando a Figura 66 com a Figura 58, pode-se verificar imediatamente a dessemelhança entre ambas, uma vez que, a desconsideração do acoplamento sólido-fluido nesta última proporcionou um perfil com partículas velozes no centro do tubo e uma redução gradual da sua velocidade até a periferia.

O diagrama de visualização da Figura 67 representa o perfil local da porosidade dentro do tubo de transporte. Consoante com o visto nesta figura, há uma região central, cuja concentração de sólidos supera as demais. Esta região de baixa porosidade corresponde justamente à cavidade do perfil de velocidade da Figura 61 e pode ser inequivocamente observada como sendo a região de maior aglomeração na Figura 65. A distribuição de porosidade vista na Figura 67 é bastante distinta daquela obtida pela Figura 59, uma vez que, nesta última, as partículas estão mais espalhadas, havendo zonas menos centrais onde a porosidade também é relativamente baixa.

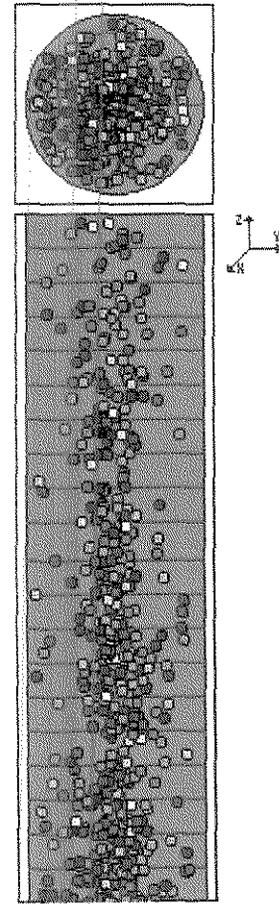


Figura 65: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

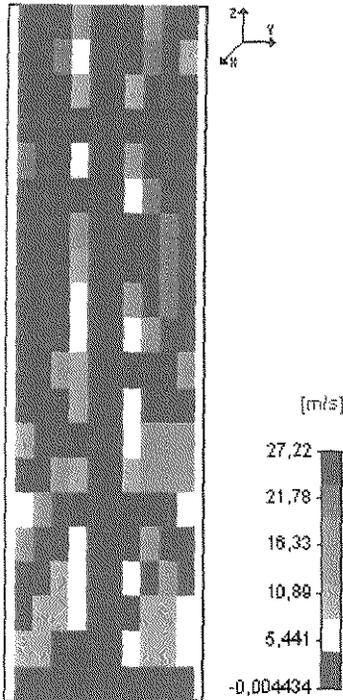


Figura 66: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

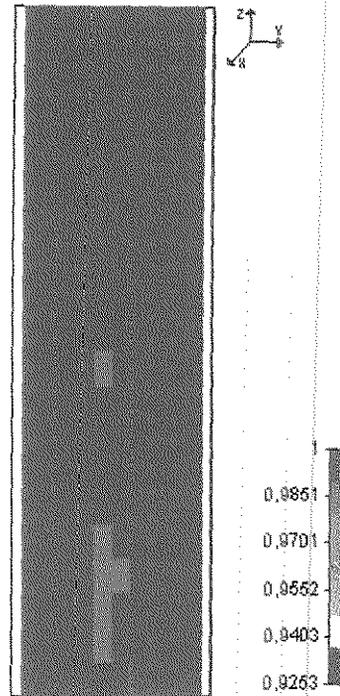


Figura 67: Visualização da porosidade local no leito de transporte. escoamento laminar bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

5.7.3 Escoamento Laminar / Partículas / Colisões

Este estudo-de-caso foi realizado com o objetivo de verificar o efeito isolado da simulação das colisões entre partículas em um escoamento laminar. Para isso, os parâmetros do sistema foram ajustados de maneira que o presente caso seja um espelho da simulação realizada na seção 5.7.1, diferindo apenas na ativação do modelo de colisões.

5.7.3.1 Parâmetros

Os parâmetros utilizados neste estudo-de-caso são idênticos aos apresentados na tabelas da seção 5.7.1.1 (Tabela 30 à Tabela 35), exceto pela habilitação do modelo de colisões.

5.7.3.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

Devido ao fato da diferença de pressão ter sido mantida e de também não se estar realizando o acoplamento sólido-fluido, os resultados obtidos para o escoamento do fluido são os mesmos conseguidos no estudo-de-caso 5.7.1. Portanto, não sendo reapresentados

aqui, o perfil temporal da velocidade central do fluido é idêntico ao disposto na Figura 51, da mesma forma que o perfil radial da velocidade axial reproduz a curva da Figura 52.

As diferenças entre os dois sistemas começam a surgir quando analisam-se os resultados referentes à dinâmica das partículas. A Figura 68 mostra a história da concentração mássica das partículas no interior do tubo de transporte. A comparação desta curva com a Figura 53 revela imediatamente algumas discrepâncias substanciais. Inicialmente, focalizando as similitudes, observa-se que, no princípio da simulação, o período de tempo em que a concentração de partículas permanece nula é essencialmente o mesmo em ambos os casos. Após esta etapa, nota-se a primeira distinção, a qual se remete à obtenção de um máximo de concentração com amplitude ligeiramente superior na simulação sem colisões entre partículas, a despeito de ambos os pontos de máximo ocorrerem em tempos bastante próximos. Uma possível explicação para este fato é que, na ausência de colisões, não há um fator limitante para a aglomeração inicial de partículas na base do tubo, ficando isto puramente a cargo da aceleração aplicada ao fluido, ao passo que, na situação das partículas não conseguirem atravessar umas as outras, pode-se dizer que ocorre um bloqueio parcial da entrada do tubo, uma vez que partículas injetadas ricocheteiam nas partículas residentes tendendo a se precipitar.

Seguindo o ponto de máximo, percebe-se um decréscimo de concentração que descreve um comportamento não-linear quando não se têm colisões, contrapondo-se a um decaimento linear no estudo-de-caso atual (com colisões). Além disso, a concentração da simulação sem colisões decresce até um valor mínimo de $\sim 2,2 \text{ kg/m}^3$, após o qual se eleva novamente para atingir um patamar de estabilização em torno de $2,6 \text{ kg/m}^3$. O mesmo não é reproduzido ao contemplar-se as colisões, pois, como visto na Figura 68, a curva não apresenta um ponto de mínimo, decaindo diretamente, após o ponto máximo, para um patamar de aproximadamente $1,8 \text{ kg/m}^3$. *Por conseguinte, com base nestes resultados, pode-se constatar que, nas mesmas condições dinâmicas, a desconsideração das colisões partícula-partícula ocasionou uma retenção de sólidos $\sim 44,4\%$ superior ao obtido quando as colisões são simuladas.*

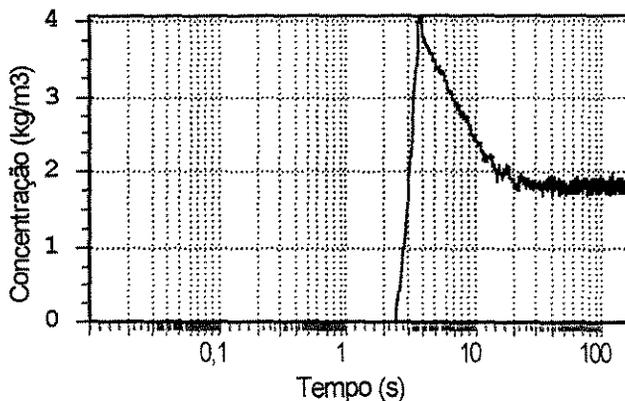


Figura 68: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões.

A fluxo mássico de sólidos que retornam pela base do tubo é apresentada na Figura 69, a qual esclarece algo mais sobre o motivo do decaimento de concentração ser mais lento quando são consideradas as colisões. Comparando a Figura 69 com a Figura 54 – correspondente ao transporte sem colisões – percebe-se imediatamente uma notável alteração entre as duas curvas. Apesar da fase inicial do escoamento ser bastante semelhante nos dois casos, logo após o primeiro patamar, a curva de precipitação da simulação sem colisões perfaz um decaimento monotônico até se normalizar em torno de $\sim 1,25 \text{ kg/sm}^2$, enquanto que, de modo completamente distinto, a precipitação sob o efeito das colisões realiza um segundo ponto de máximo local que atinge $\sim 6,5 \text{ kg/sm}^2$ para só então decrescer e estabilizar por volta de uma vazão de $\sim 2 \text{ kg/sm}^2$. *Pela compreensão destes dados, pode-se averiguar que, neste estudo-de-caso, as colisões originam uma vazão de precipitação 60% superior ao sistema equivalente sem colisões.* Tal resultado é, de fato, previsível e esperado, pois que, é intuitivo que os choques dificultam a passagem das partículas pelo tubo, freando e arremessando-as para zonas de baixa velocidade nas quais a sua precipitação é certa.

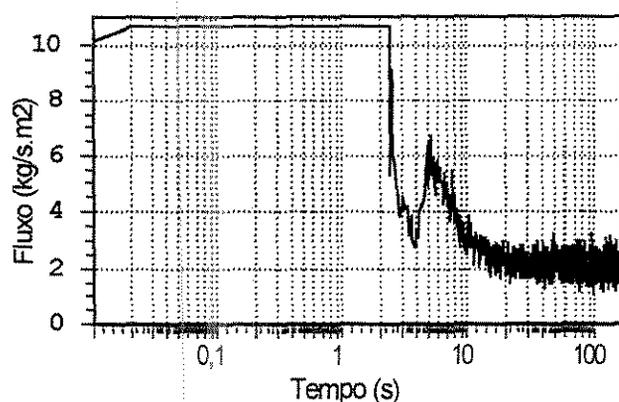


Figura 69: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões.

A curva de fluxo dos sólidos transportados, mostrada na Figura 70, permite realizar novas observações que ratificam os resultados conseguidos até o momento. Novamente, remetendo-se à curva equivalente da simulação sem colisões, vista na Figura 55, verifica-se que ambos os gráficos descrevem um comportamento inicial equivalente. A diferenciação ocorre quando a vazão de sólidos pelo topo deixa de ser nula, percebendo-se que a curva sem colisões cresce em degrau para um patamar de estabilização na faixa de $\sim 9,5 \text{ kg/sm}^2$, ao passo que a curva com colisões atinge um pico de cerca de 11 kg/sm^2 para depois realizar um ponto de mínimo em $\sim 5 \text{ kg/sm}^2$ e estabilizar posteriormente em $\sim 8,7 \text{ kg/sm}^2$. Note-se que, pela conservação da massa, a soma das curvas de vazão de precipitação (Figura 69) e de saída pelo topo (Figura 70) corresponde à vazão total de sólidos injetada na entrada do tubo de transporte, conforme disposto na seção 5.7.1. Em decorrência destes resultados, verifica-se que a desconsideração das colisões ocasiona um transporte de sólidos $\sim 9,2\%$ superior ao advindo de um sistema equivalente com colisões.

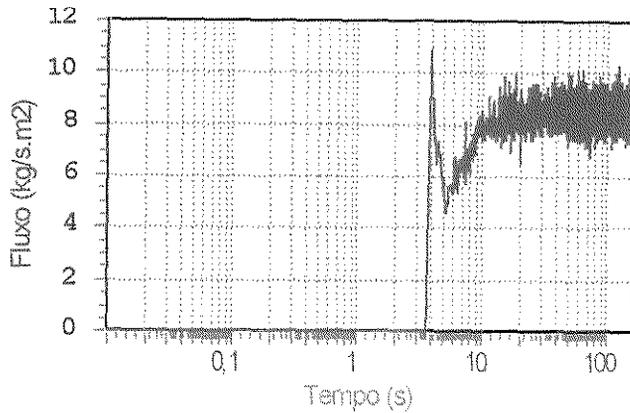


Figura 70: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões.

A Figura 71 exhibe a distribuição da posição das partículas no interior do tubo de transporte. Distintamente da Figura 56 – obtida da simulação sem colisões – pode-se verificar que a Figura 71 não apresenta uma zona sem partículas junto à parede do tubo, apesar do perfil de velocidades do fluido ser o mesmo em ambos os casos. Isto se deve ao efeito dispersivo que a simulação das colisões adiciona ao movimento da fase particulada. Tal caráter dispersivo é o resultado do arremesso de partículas das regiões centrais do tubo para a periferia por meio das colisões. Desse modo, mesmo com a velocidade do fluido sendo inferior à velocidade terminal das partículas, constantemente há partículas junto à parede porque estas são defletidas após os choques com outras partículas, no entanto as partículas arremetidas para a periferia tendem a se precipitar e a sair pela base do tubo.

O escorregamento de sólidos junto à parede está claramente revelado na Figura 72, a qual reproduz o diagrama policromático da velocidade local das partículas. Note-se que, na região central do tubo, as partículas apresentam um aumento progressivo de velocidade à medida que a altura se eleva. No entanto, o comportamento das partículas nas adjacências da parede é prioritariamente descendente.

A Figura 73 traz o diagrama da porosidade local do leito, o qual pode ser comparado com a Figura 59 para se constatar que a simulação sem colisões produz porosidades locais menores do que a simulação com colisões. Particularmente, no caso da Figura 59, pode-se apurar que existem menos células com um valor de porosidade mais elevado do que pode-se verificar na Figura 73. Esta observação ratifica a conclusão, obtida anteriormente, de que o cálculo das colisões causa uma redução da retenção dos sólidos.

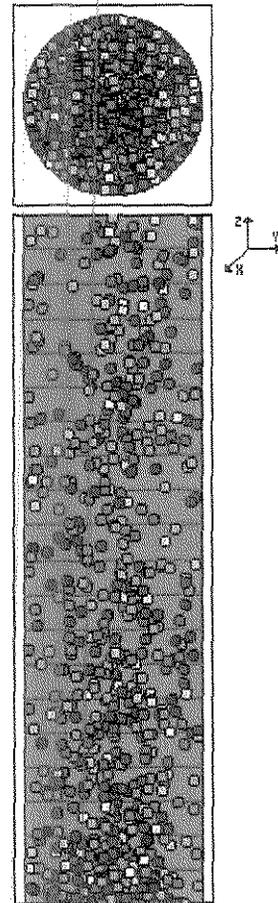


Figura 71: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões.

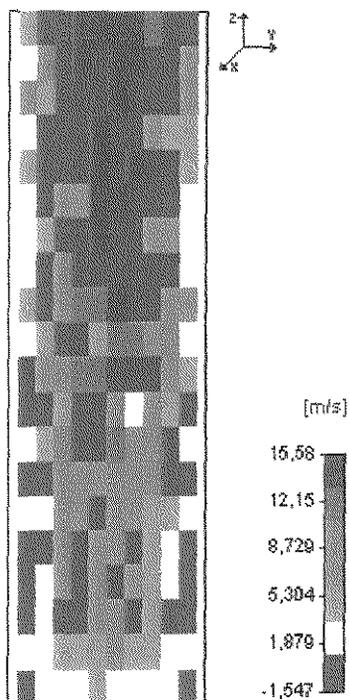


Figura 72: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões.

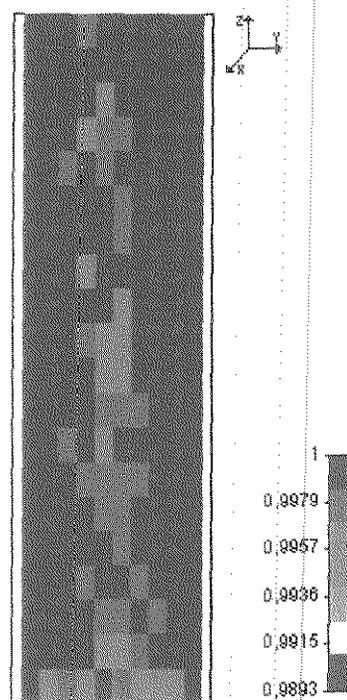


Figura 73: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões.

5.7.4 Escoamento Laminar / Partículas / Colisões / Acoplamento Sólido-Fluido

Este estudo-de-caso tem por objetivo a investigação do efeito combinado da simulação de colisões com o acoplamento sólido-fluido. Para avaliar mais isoladamente os efeitos das colisões, pode-se comparar estes resultados com a simulação realizada na seção 5.7.2, porém para analisar as conseqüências do acoplamento sólido-fluido no escoamento laminar, deve-se realizar uma comparação com a seção 5.7.3.

5.7.4.1 Parâmetros

Os parâmetros de entrada definidos nesta simulação são idênticos aos utilizados na seção 5.7.2.1., excetuando-se apenas a habilitação da capacidade de modelagem das colisões entre partículas.

5.7.4.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

A história da velocidade central do fluido nesta simulação é mostrada na Figura 74. Comparando a Figura 74 com a Figura 60, verifica-se que esta última possui um ponto de mínimo local não reproduzido pela simulação de colisões através da Figura 74.

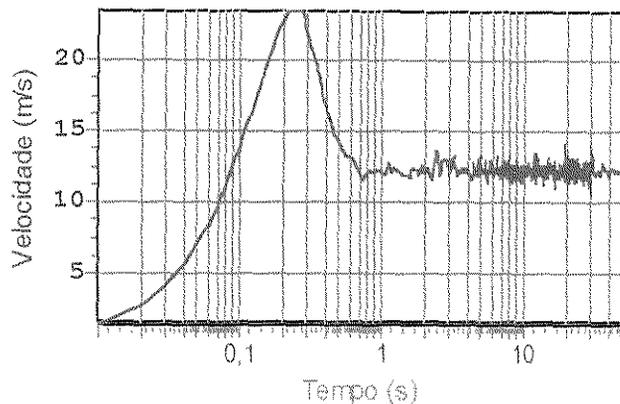


Figura 74: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

Os efeitos da simulação das colisões podem ser capturados mais claramente ao comparar-se a Figura 75 com a Figura 61 da seção 5.7.2 – simulação sem colisões. Primeiramente, verifica-se que o perfil da Figura 61 (sem colisões) possui um ponto de máximo em torno de 75 m/s, ao passo que o perfil de velocidades da Figura 75 não atinge a marca dos 65 m/s. Além disso, pode-se perceber o afundamento central mais pronunciado na curva da Figura 61, onde a velocidade do fluido atinge o mesmo valor da velocidade terminal das partículas. As partículas que convergem para esta região central necessariamente precipitam, saindo pelo fundo do tubo de transporte. O perfil da Figura 75 também possui uma região central de precipitação, entretanto, a sua dimensão é bastante inferior à encontrada na Figura 61. Além da menor carga de sólidos, um outro fator que provavelmente contribuiu para uma cavidade central mais estreita nesta simulação é o caráter dispersivo das colisões partícula-partícula, o qual projeta constantemente os sólidos para dentro e fora da zona central de precipitação.

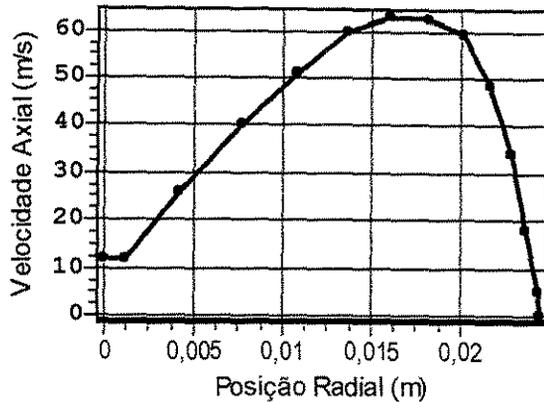


Figura 75: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

A retenção de sólidos no interior do tubo de transporte ao longo do tempo é exposta na Figura 76, a qual se apresenta de modo notavelmente distinto da Figura 62, associada à simulação análoga sem colisões (seção 5.7.2). Novamente, embora a fase inicial do escoamento seja assemelhada, e de ambos os pontos de máximo ocorrerem ao mesmo tempo e com uma mesma amplitude, as concordâncias param neste ponto, uma vez que, após o pico de concentração, a curva sem colisões decresce e cresce em seguida, descrevendo um ponto de mínimo local bastante evidenciado, para, então, estacionar num valor de concentração de aproximadamente $1,75 \text{ kg/m}^3$. O mesmo não acontece com a curva de concentração do estudo-de-caso atual, que decresce monotonicamente e estabiliza num patamar de $\sim 1,3 \text{ kg/m}^3$. Portanto, destes resultados, pode-se concluir que, neste caso, a não consideração das colisões conduziu a um valor de retenção de sólidos aproximadamente 35% superior ao previsto pela aplicação de um modelo de colisão na simulação do transporte pneumático. Esta conclusão já fora obtida anteriormente em uma análise realizada na seção 5.7.3, ao se comparar os respectivos resultados com a simulação da seção 5.7.1, todavia, naquela ocasião, sem o acoplamento sólido-fluido, o desvio calculado foi superior, avaliado em $\sim 44\%$.

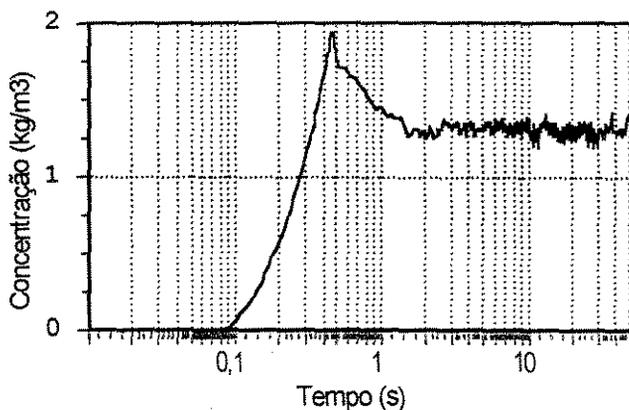


Figura 76: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

O fluxo de sólidos que precipita pela base do tubo está representada na Figura 77. Analisando-se esta figura em paralelo com a Figura 63, obtém-se que a vazão de partículas caindo pela base do tubo é superior para um sistema com acoplamento sólido-fluido e sem colisões. Note-se que tanto a Figura 63 como a Figura 77 apresentam o mesmo comportamento até cerca de 1s, todavia, a curva sem colisões da Figura 63 estabiliza-se em um valor de vazão de aproximadamente $1,7 \text{ kg/sm}^2$, enquanto que a curva da Figura 77 alcança um patamar de regime permanente na faixa de $0,7 \text{ kg/sm}^2$, representando um desvio 147%. Ou seja, a simulação sem colisões (seção 5.7.2) produz uma vazão de precipitação 147% maior do que a simulação da seção atual, que contempla o cálculo das colisões.

A observação anterior afigura-se confrontar diretamente a conclusão obtida na seção 5.7.3.2 de que o cálculo das colisões elevou a taxa de precipitação de sólidos em 60%, se comparada a uma simulação sem colisões. Contudo, há que se ter muita cautela nesta análise, uma vez que as simulações das seções 5.7.1 e 5.7.3 não consideraram de modo algum o acoplamento sólido-fluido. A chave para este impasse parece estar na retenção de partículas no interior do tubo de transporte, pois que, tanto na presente seção como na seção 5.7.3, concluiu-se uniformemente que *a simulação das colisões diminui a retenção de sólidos dentro do tubo*. Seguindo esta abordagem, pode-se constatar que a relativamente alta taxa de queda de partículas na simulação 5.7.2 é proporcionada justamente pela maior área de precipitação no centro do tubo, a qual, por sua vez, é o resultado de um *hold-up* acentuado pela não realização das colisões entre partículas. Em outras palavras, a maior retenção de sólidos – ocasionada pelo negligência das colisões – agrava o afundamento na região central do escoamento, propiciando uma maior área de precipitação para as partículas. Adicionalmente, fundamentado no que fora previamente exposto, pode-se salientar que a observação – advinda das simulações 5.7.1 e 5.7.3 – de que o cálculo das colisões eleva a taxa de precipitação é válida apenas quando não é modelado o acoplamento bidirecional sólido-fluido.

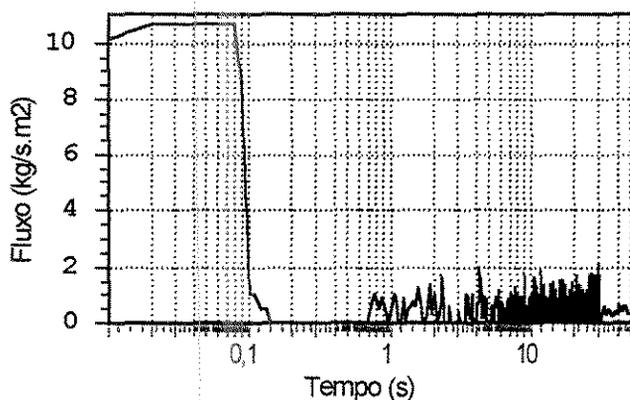


Figura 77: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

Fazendo-se um paralelo entre a Figura 78 e a Figura 64, pode-se inferir que a simulação das colisões aumenta a vazão de partículas pelo topo do equipamento, uma vez que o estudo-de-caso da seção 5.7.2 resultou em um valor de estabilização próximo de 8,7

kg/sm^2 , enquanto que, na presente seção, a vazão de estabilização gira em torno de $10 \text{ kg}/\text{sm}^2$. Esta diferença representa um incremento de 15% do fluxo de sólidos através do equipamento.

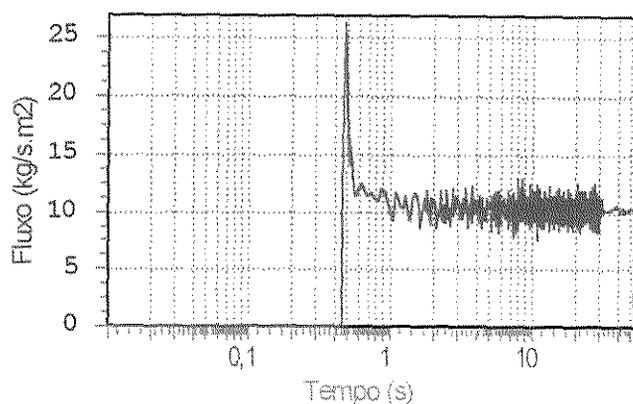


Figura 78: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

A visualização da distribuição das partículas no interior do equipamento é mostrada na Figura 79, donde pode-se notar o baixo *hold-up* de sólidos devido à alta velocidade do fluido escoante. Além disso, é perceptível uma aglomeração preferencial de partículas na região inferior central do tubo de transporte. A aglomeração na base é causada pela aceleração das partículas do repouso até a sua velocidade de transporte. Portanto, esta zona inferior onde as partículas estão mais próximas é uma boa estimativa do comprimento de aceleração do equipamento. A projeção superior do tubo exhibe uma uniformidade na distribuição radial das partículas, a qual é promovida, principalmente, pelo caráter dispersivo inerente às colisões.

O perfil de velocidades locais das partículas está mostrado na Figura 80. Por esta figura, pode-se averiguar imediatamente a baixa velocidade dos sólidos nas partes centrais do tubo, acompanhadas por zonas mais externas cuja velocidade é bastante superior. Esta figura também deixa patente a existência de partículas nas proximidades das paredes, as quais são provavelmente arremessadas a partir das regiões mais internas.

A Figura 81 exibe o perfil local de porosidade no tubo de transporte. Em consequência do baixo *hold-up*, pode-se observar a alta porosidade distribuída por todo o equipamento, havendo apenas uma pequena região de elevada concentração de sólidos na zona inferior e central onde a velocidade do fluido é especialmente baixa nesta simulação.

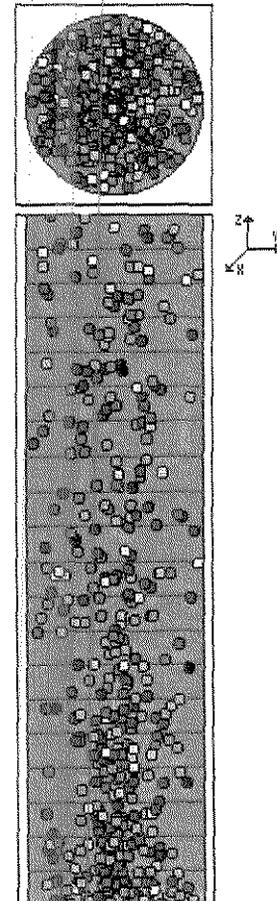


Figura 79: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

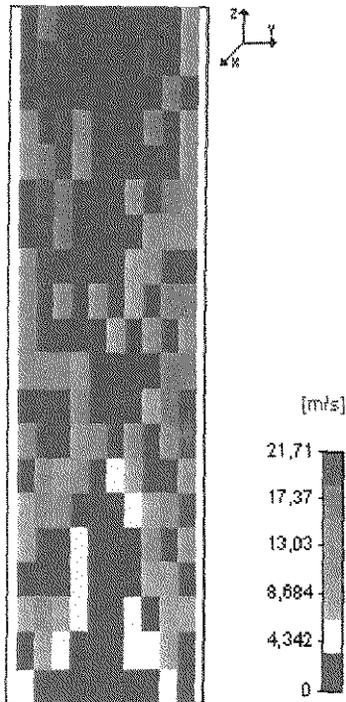


Figura 80: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

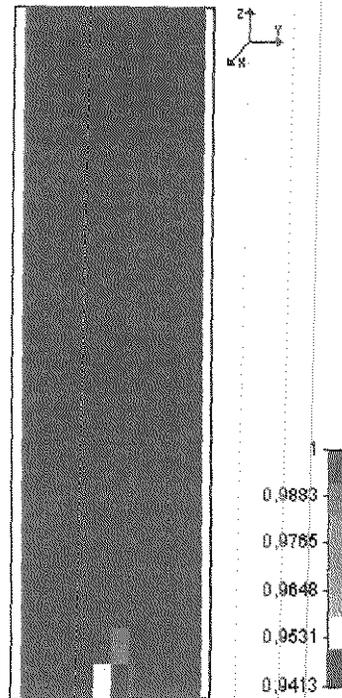


Figura 81: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento laminar bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

5.8 Modelo de Escoamento Turbulento Bifásico

5.8.1 Escoamento Turbulento / Partículas

Nesta seção, é apresentado e analisado um sistema fluidodinâmico turbulento contendo partículas sólidas em movimento. Não são consideradas as colisões entre partículas, assim como também não é simulado o acoplamento bidirecional sólido-fluido.

5.8.1.1 Parâmetros

Os parâmetros de entrada aplicados neste estudo-de-caso são discriminados nas tabelas seguintes.

Tabela 37: Características da simulação. escoamento turbulento bifásico.

No. Iterações/Seg. (1/s)	4000
Passo de Tempo (s)	0,00025
Taxa de Injeção de Partículas (1/s)	2000
Tempo Mínimo de Colisão (s)	1E-6
Simular Colisões	Não
Colisões para Células Adjacentes	Não
Simular escoamento do Fluido	Sim
Simular Turbulência	Sim
Simular Acoplamento Sólido -> Fluido	Não
Intervalo Atualização (s)	0,1
Intervalo Amostragem (s)	0,05

Tabela 38: Características do equipamento. escoamento turbulento bifásico.

Diâmetro (m)	0,05
Altura (m)	2
Coef. de Restituição	1
Coef. de Fricção	0
Coef. de Recuperação	0,5
Pressão na Entrada (Pa)	101800
Pressão na Saída (Pa)	101000
Gravidade X (m/s ²)	0
Gravidade Y (m/s ²)	0
Gravidade Z (m/s ²)	-9,8

Tabela 39: Características das partículas. escoamento turbulento bifásico.

Diâmetro (m)	0,002
Esfericidade	1
Densidade (kg/m ³)	2500
Veloc. Radial (m/s)	0
Veloc. Angular (m/s)	0
Veloc. Axial (m/s)	0

Tabela 40: Características do fluido. Escoamento turbulento bifásico.

Densidade (kg/m ³)	1
Viscosidade (Pa.s)	1,8E-5
Veloc. Radial (m/s)	0
Veloc. Angular (m/s)	0
Veloc. Axial (Centro) (m/s)	20

Tabela 41: Modelo de turbulência K-Epsilon. Escoamento turbulento bifásico.

K(0)	2
Epsilon(0)	600
Cm	0,09
Ce1	1,55
Ce2	2
Sk	1
Se	1,3
f1	1
f2	1

Tabela 42: Características da discretização das partículas. Escoamento turbulento bifásico.

No. de Elementos - Radial	5
No. de Elementos - Angular	5
No. de Elementos - Axial	20
Passo Radial	0,005
Passo Angular	1,256637061
Passo Axial	0,1

Tabela 43: Características da discretização do fluido. Escoamento turbulento bifásico.

No. de Elementos - Radial	12
No. de Elementos - Axial	10
Passo Inicial Radial (m)	0,0004
Passo Axial (m)	0,2
Res. Radial	0,1
Alfa (m)	0,0001645454545

5.8.1.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

O perfil radial da velocidade axial do fluido para este estudo-de-caso é exibido na Figura 82. Note-se que o formato do perfil é tipicamente turbulento e permanece inalterado frente à movimentação das partículas, uma vez que o acoplamento sólido-fluido não está sendo incluído nesta simulação.

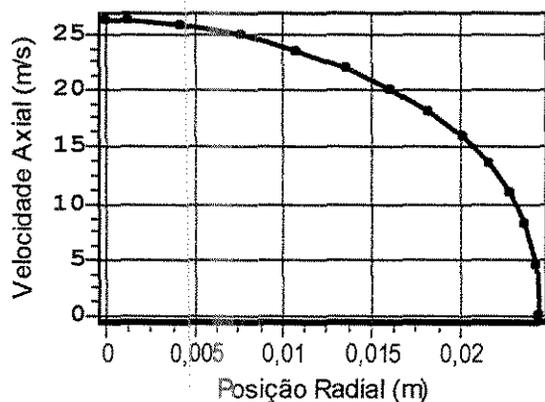


Figura 82: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento bifásico.

A Figura 83 mostra o comportamento da concentração de sólidos dentro do tubo ao longo do tempo. Por esta curva, verifica-se que, após decorridos cerca de 20s, a retenção de sólidos já se aproxima do patamar de estabilização em torno de $\sim 4 \text{ kg/m}^3$.

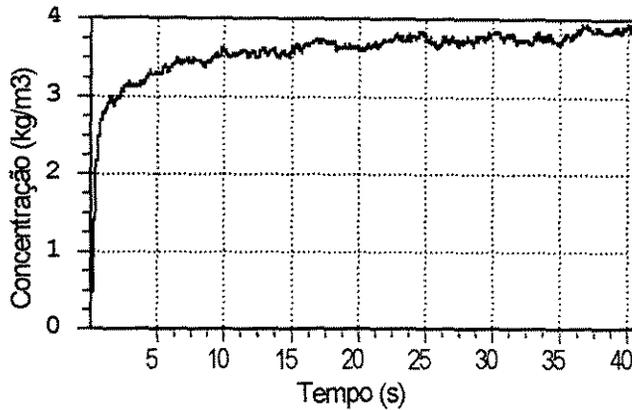


Figura 83: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico.

O fluxo de retorno das partículas está representada na Figura 84, por intermédio da qual conclui-se que a taxa de precipitação de partículas estabiliza-se mais rapidamente do que a retenção dos sólidos, atingindo um patamar estável de $\sim 0,6 \text{ kg/sm}^2$ antes mesmo dos 5 segundos de simulação.

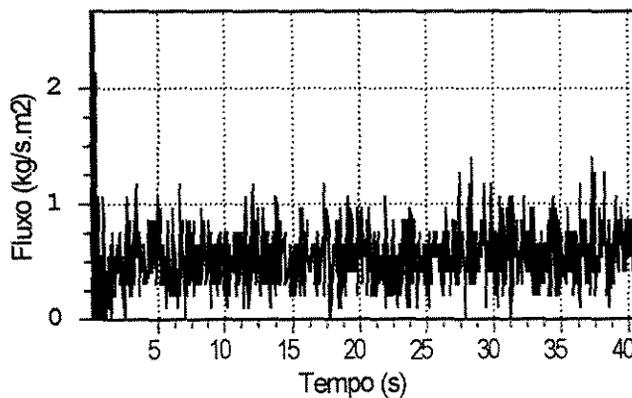


Figura 84: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico.

O fluxo de partículas que atravessam o equipamento de transporte está exibida na Figura 85. Por esta curva, constata-se que a estabilização da vazão de saída ocorre simultaneamente à da vazão de retorno (Figura 84). Além disso, observá-se que a vazão de sólidos pelo topo estabiliza em um valor próximo de 10 kg/sm^2 . O somatório das curvas da Figura 84 e da Figura 85 confirma o balanço de massa no interior do tubo, visto que, neste caso estudo, os sólidos são injetados a um fluxo de $10,667 \text{ kg/sm}^2$.

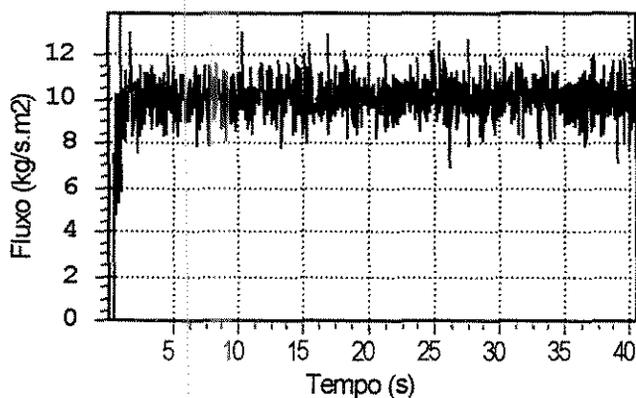


Figura 85: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico.

A distribuição das partículas pode ser visualizada pela Figura 86 abaixo. Este diagrama permite divisar claramente a maior aglomeração de partículas na zona de aceleração. Adicionalmente, constata-se a inexistência de partículas nas proximidades da parede do tubo. Conforme discutido anteriormente, este resultado deriva da baixa velocidade do fluido junto à fronteira sólida associada ao caráter não dispersivo do transporte de sólidos sem colisões entre partículas.

As baixas velocidades das partículas nas adjacências da parede e na base do tubo podem ser ratificadas pelo diagrama policromático da Figura 87. Esta representação também destaca a zona de aceleração até cerca de 1m de altura, além do que a variação das cores começa a ocorrer em intervalos maiores. É importante salientar um aspecto peculiar desta figura, o qual consiste na ocorrência de amplas regiões contíguas de uma mesma coloração. Esta característica é um indicativo de que partículas de mesma velocidade viajam juntas e são aceleradas ao mesmo tempo, não havendo, portanto, uma mistura de partículas com estados dinâmicos muito distintos. Em outras palavras, pode-se dizer que não há uma mistura mais efetiva das partículas devido à ausência de dispersão, propiciada pela não simulação das colisões.

A porosidade local pode ser visualizada na Figura 88, a qual denota uma maior concentração de partículas nas regiões centrais do tubo e uma aglomeração relativamente intensa na zona central da entrada do tubo, onde a porosidade alcança o valor mínimo de $\sim 0,965$. Além disso, a Figura 88 possibilita caracterizar o núcleo central de baixa porosidade como sendo uma coluna de aproximadamente 1 a 1,5cm de diâmetro.

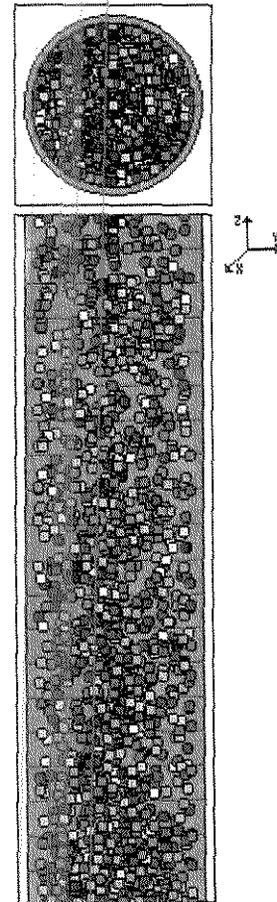


Figura 86: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico.

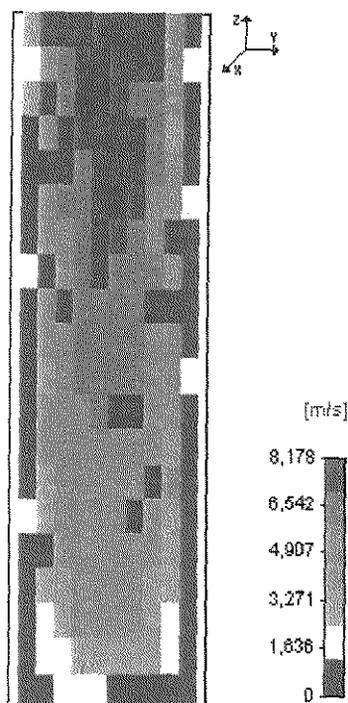


Figura 87: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico.

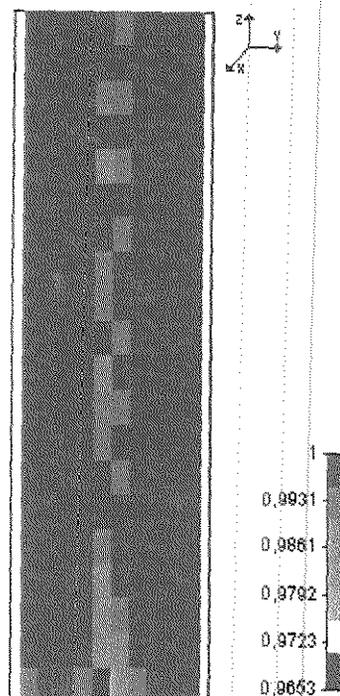


Figura 88: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico.

5.8.2 Escoamento Turbulento / Partículas / Acoplamento Sólido-Fluido

O sistema apresentado nesta seção corresponde ao mesmo que fora exposto na seção 5.8.1, alterando-se apenas, em adição, a capacidade de modelar o acoplamento bidirecional sólido-fluido.

5.8.2.1 Parâmetros

Os parâmetros utilizados neste sistema fluidodinâmico correspondem exatamente aos mesmos mostrados na seção 5.8.1.1 do estudo-de-caso anterior, alterando-se somente o item de acoplamento sólido-fluido na Tabela 37.

5.8.2.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

A Figura 89 traz o perfil temporal da velocidade central do fluido. Como a injeção das partículas foi realizada depois do escoamento do fluido puro atingir o regime permanente, a velocidade central inicia em 27 m/s, decresce e estabiliza em torno de 21 m/s. A redução da velocidade do fluido é uma consequência direta do acoplamento sólido-

fluido, visto que a mesma diferença de pressão deve ser capaz de sustentar o peso dos sólidos e ainda impulsionar o movimento do fluido.

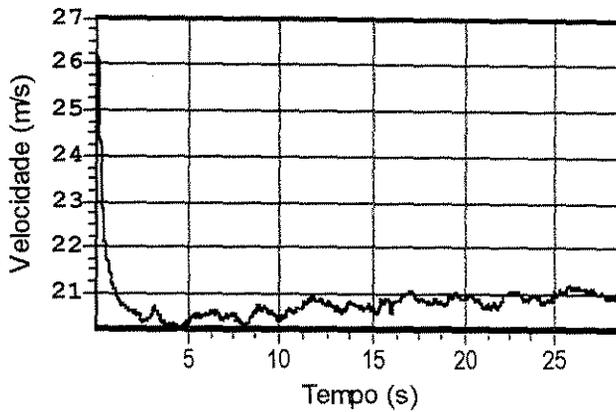


Figura 89: Perfil temporal da velocidade do fluido no centro do tubo. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

O perfil radial de velocidades do fluido está exposto na Figura 90, a qual evidencia algumas peculiaridades em relação à Figura 82 da simulação anterior, onde não foi considerado o acoplamento sólido-fluido. Além da redução da velocidade central de ~25 m/s para ~21 m/s, constata-se que a curva da Figura 90 é sensivelmente mais achatada, apresentando até um perceptível afundamento na região central. A referida cavidade no perfil de velocidades é um fenômeno comprovado experimentalmente e tende a ocorrer quando a perda de carga devido às partículas é suficientemente elevada.

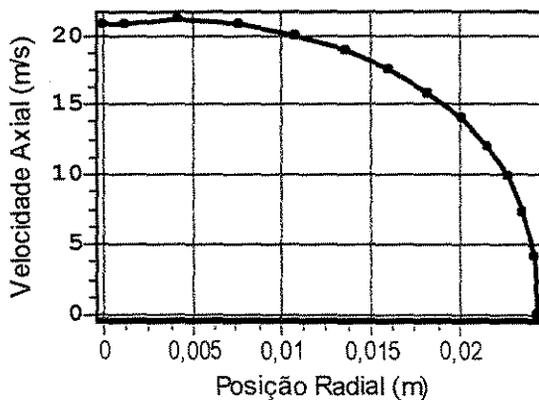


Figura 90: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

A curva da Figura 91 descreve o comportamento da concentração de sólidos ao longo do tempo de escoamento. Através dela, pode-se averiguar que, após 5s desde o princípio da injeção das partículas, a curva de concentração tende a estabilizar num valor

aproximado de $4,3 \text{ kg/m}^3$, contrastando com a retenção de $\sim 4 \text{ kg/m}^3$ vislumbrada da Figura 83. Portanto, para este caso, pode-se concluir que o acoplamento sólido-fluido tende a elevar o *hold-up* de sólidos no transporte pneumático.

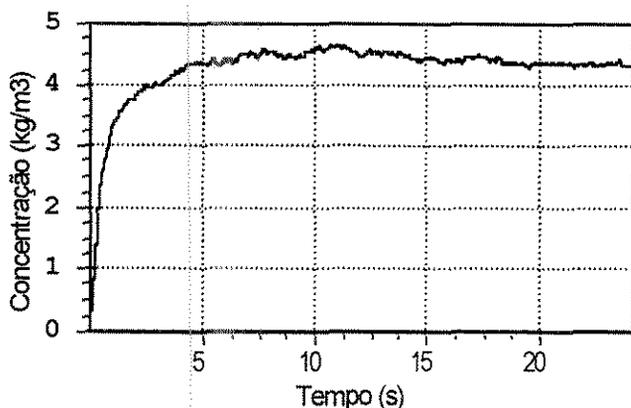


Figura 91: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

A inclusão do acoplamento sólido-fluido no modelo de transporte causa o efeito adicional de aumentar a taxa de precipitação de partículas pela base do tubo de transporte. Este fato pode ser certificado por meio da Figura 92 que mostra uma vazão de saída de sólidos pela base estacionada em torno de $\sim 0,8 \text{ kg/sm}^2$, estando em flagrante contraste com Figura 84 que, por sua vez, exibe o valor de $0,5 \text{ kg/sm}^2$ para a mesma propriedade.

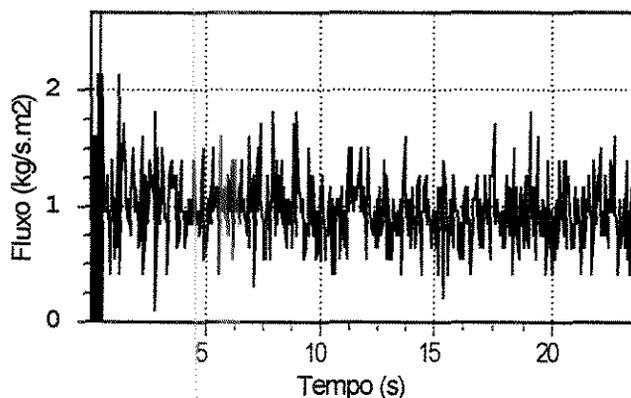


Figura 92: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

Em seu turno, o fluxo de sólidos pelo topo do equipamento, como visto na Figura 93, estabiliza em um patamar pouco inferior a 10 kg/sm^2 , não diferindo substancialmente do valor fornecido pela Figura 85, obtida sem a implementação do acoplamento bidirecional sólido-fluido.

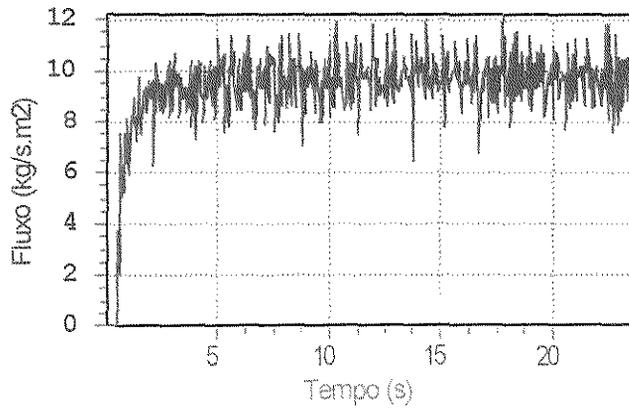


Figura 93: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

O posicionamento das partículas transportadas está representado na Figura 94. Assim como nos demais estudos-de-caso sem a simulação de colisões, observa-se, principalmente pela projeção superior do tubo, a ausência completa de sólidos junto às paredes. Novamente a zona de aceleração é demarcada por uma maior aglomeração de sólidos.

A Figura 95 mostra o perfil localizado da velocidade axial das partículas. Por este diagrama, comprova-se o maior movimento de sólidos no centro do tubo, associado a um deslocamento lento nas regiões periféricas. A zona de aceleração é marcada por uma rápida mudança do padrão de cores na parte inferior do equipamento. O aparecimento de amplas regiões contíguas de uma mesma coloração, como visto na Figura 87, também é o resultado da ausência de dispersão dos sólidos, provocada pela inexistência de colisões entre partículas. Portanto, os mesmos argumentos dispostos na discussão da Figura 87 podem ser reaplicados.

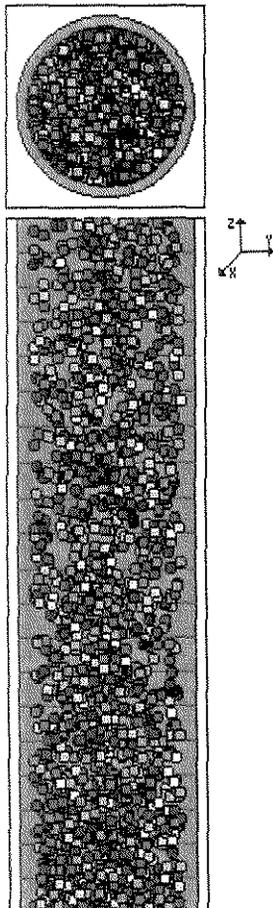


Figura 94: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

O perfil local de porosidade é representado pela Figura 96, a qual possibilita a distinção clara de um núcleo mais denso onde a porosidade é relativamente baixa. Este núcleo de sólidos consiste numa região cilíndrica com cerca de 1 a 1,5cm de diâmetro, sendo, possivelmente, o principal responsável pelo afundamento central do perfil de velocidades do fluido.

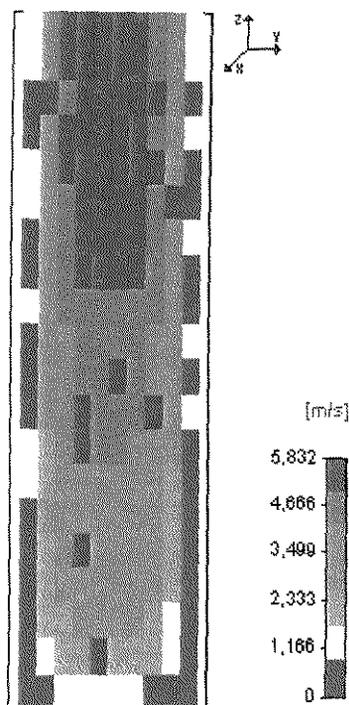


Figura 95: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

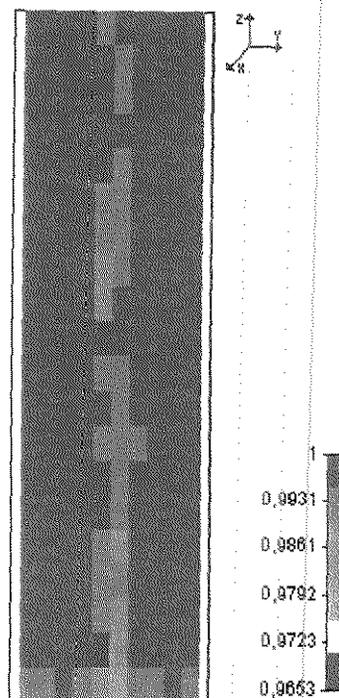


Figura 96: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico com acoplamento bidirecional sólido-fluido.

5.8.3 Escoamento Turbulento / Partículas / Colisões

Este estudo-de-caso tem por meta a verificação dos efeitos da simulação das colisões no escoamento bifásico turbulento. Este sistema corresponde ao mesmo exposto na seção 5.8.1, tendo como única alteração a habilitação do modelo de colisões.

5.8.3.1 Parâmetros

Os parâmetros aplicados neste estudo-de-caso são os mesmos da seção 5.8.1.1, modificando-se apenas o item “Simular Colisões” da Tabela 37.

5.8.3.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

Em virtude do simulação atual não contemplar o acoplamento sólido-fluido, tem-se que a presença das partículas não é capaz de alterar o estado dinâmico do fluido. Por este motivo, o perfil radial de velocidades do fluido é idêntico ao apresentado na Figura 82.

O perfil temporal da concentração de sólidos, exibido na Figura 97, mostra um patamar de estabilização em torno de $3,25 \text{ kg/m}^3$. Comparando esta curva com a Figura 83,

cujo patamar de estabilização é de $\sim 4 \text{ kg/m}^3$, percebe-se que o cálculo das colisões motivou um decréscimo do *hold-up* de sólidos no interior do equipamento. *Em outras palavras, mesmo no escoamento turbulento, a não simulação das colisões levou a uma retenção de sólidos 23% superior ao que seria obtido através da inclusão de um modelo de colisão partícula-partícula.*

A conclusão anterior é, de fato, uma recorrência das comparações realizadas entre os estudos-de-caso envolvendo escoamentos bifásicos laminares sem o acoplamento sólido-fluido (seções 5.7.1 e 5.7.3), fortalecendo, portanto, a sua aplicabilidade como regra básica para ambos os tipos de escoamentos.

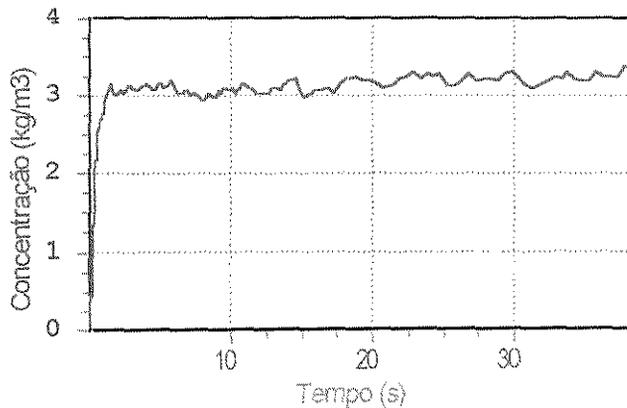


Figura 97: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.

A Figura 98, que mostra o comportamento do retorno de sólidos pela base do tubo, exibe uma tendência de estabilização por volta de $2,5 \text{ kg/sm}^2$, enquanto que, como referência, a Figura 84 (sem colisões) alcança o regime permanente na marca de $\sim 0,7 \text{ kg/sm}^2$. *Estes resultados denotam um aumento de $\sim 250\%$ na precipitação de sólidos quando são levadas em conta as colisões entre partículas.*

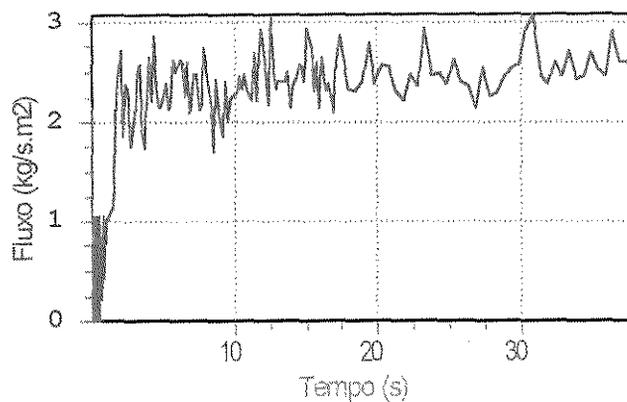


Figura 98: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.

Por seu turno, a vazão de sólidos na saída do tubo de transporte tende a estabilizar em aproximadamente 8 kg/sm^2 , conforme visualizado na Figura 99. Em comparação com a curva descrita na Figura 85 – que estaciona em cerca de 10 kg/sm^2 – pode-se inferir que a negligência das colisões provoca um aumento de $\sim 25\%$ na vazão de sólidos no topo do equipamento.

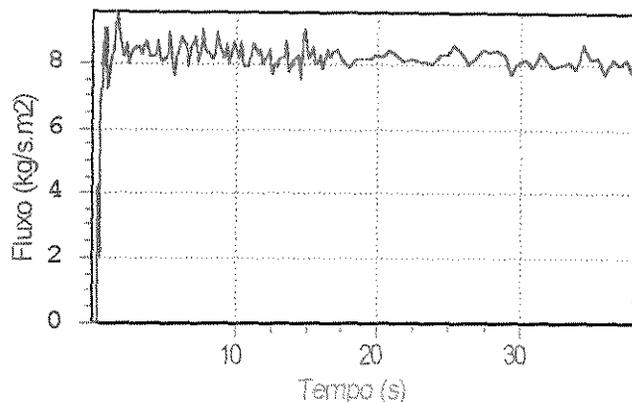


Figura 99: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.

A visualização da localização das partículas transportadas está apresentada na Figura 100. Como nos casos anteriores, pode-se observar uma maior concentração de sólidos na zona de aceleração situada na base do equipamento. Além disso, pode-se constatar pelas projeções lateral e, especialmente, superior, o grande espalhamento das partículas, sendo este um resultado direto da dispersão ocasionada pelas colisões.

A visualização da velocidade axial das partículas é realizada na Figura 101. Neste diagrama, divergindo da Figura 87 e da Figura 95, não é possível identificar claramente as regiões nas quais os sólidos têm aproximadamente a mesma velocidade. O que se observa, na verdade, são algumas zonas de cores contínuas na base do tubo, as quais vão se entrelaçando mutuamente, dando origem à mistura de cores verificada. Esta característica fica bastante evidente ao se comparar mais detalhadamente o diagrama da Figura 101 com a Figura 87 e com a Figura 95, correspondentes a simulações sem colisões. Por conseguinte, pode-se concluir que a mistura de cores verificada é o resultado da dispersão produzida pela simulação das colisões. Adicionalmente, pode-se averiguar, pela escala policromática da Figura 101, o escorregamento de partículas junto à parede do tubo. Tal fenômeno tem verificação experimental e é uma outra consequência da dispersão provocada pelas colisões.

A Figura 102 traz o perfil local da porosidade no leito de transporte. Nesta figura, verifica-se uma tendência de concentração de sólidos na região central do tubo e, principalmente, na zona central inferior, correspondente à zona de aceleração. Este núcleo de menor porosidade se assemelha a um cilindro cujo diâmetro mede $\sim 1,5\text{cm}$, entretanto, neste sistema, diferentemente do estudo-de-caso anterior que contemplava o acoplamento sólido-fluido, o núcleo denso não causa qualquer deformação no perfil de velocidades do fluido.

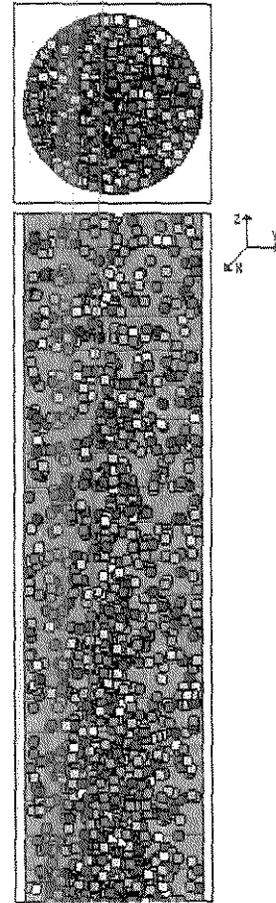


Figura 100: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.

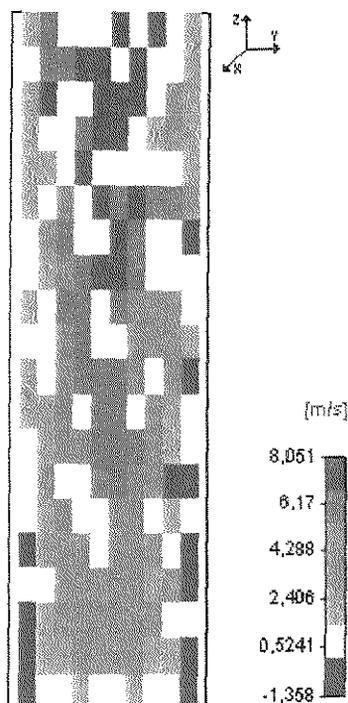


Figura 101: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.

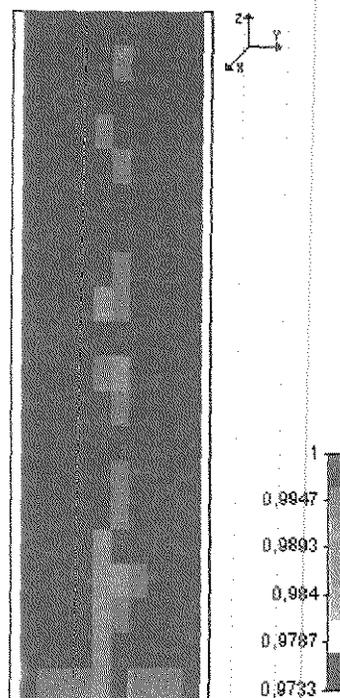


Figura 102: Visualização da porosidade local no leito de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões.

5.8.4 Escoamento Turbulento / Partículas / Colisões / Acoplamento Sólido-Fluido

Este estudo-de-caso visa a análise dos efeitos combinados da simulação das colisões e também do acoplamento sólido.

5.8.4.1 Parâmetros

Os parâmetros utilizados nesta simulação são os mesmos aplicados na seção 5.8.2, com a diferença de que o modelo de colisão para as partículas foi incorporado.

5.8.4.2 Apresentação de Resultados e Análise Fenomenológica

O perfil radial da velocidade axial do fluido está mostrado na Figura 103. Comparando-a com a Figura 90, pode-se verificar a concordância entre ambos os perfis, indicando que o cálculo das colisões não alterou significativamente o perfil de velocidades.

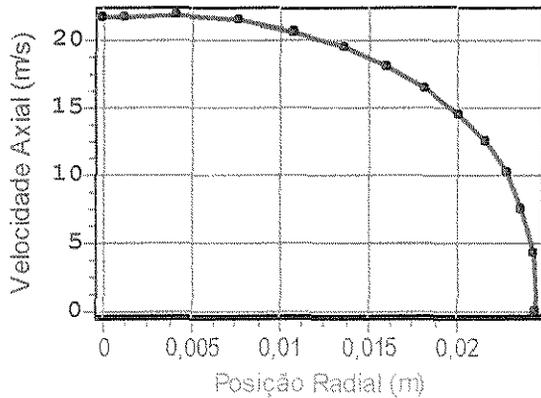


Figura 103: Perfil radial de velocidade do fluido. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

A Figura 104 exibe a retenção de sólidos no interior do tubo de transporte. Pode-se verificar que, após cerca de 3s, a curva de concentração estabiliza em um valor próximo de $\sim 4,3 \text{ kg/m}^3$. Comparando este resultado com o obtido da Figura 91 (sem colisões), nota-se que a retenção de sólidos é ligeiramente inferior na simulação atual, que considera as colisões partícula-partícula.

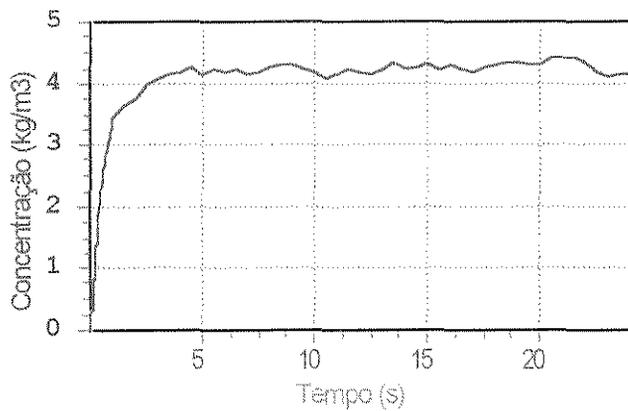


Figura 104: Perfil temporal da concentração mássica de partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

A história do fluxo de sólidos saindo pela base do tubo é apresentada na Figura 105, cuja estabilização ocorre a cerca de $4,4 \text{ kg/sm}^2$. Como referência, a Figura 92, correspondente ao sistema sem colisões, exibe um patamar de estabilização bastante inferior de aproximadamente 1 kg/sm^2 . Isso implica que a simulação das colisões provocou uma elevação de aproximadamente 340% na vazão de retorno dos sólidos pela base do tubo.

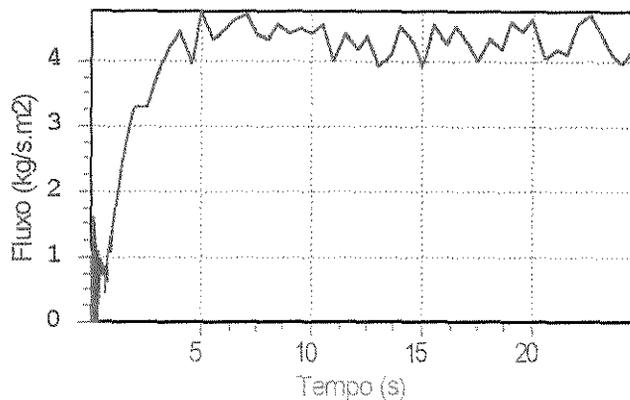


Figura 105: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pela base do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

A Figura 106 mostra a variação temporal do fluxo de sólidos pelo topo do tubo. O valor de estabilização para esta propriedade gira em torno de $6,5 \text{ kg/sm}^2$. Em contrapartida, a Figura 93 (sem colisões) exhibe um patamar de $\sim 10 \text{ kg/sm}^2$. Por conseguinte, a negligência das colisões ocasiona um aumento de $\sim 54\%$ na vazão dos sólidos transportados.

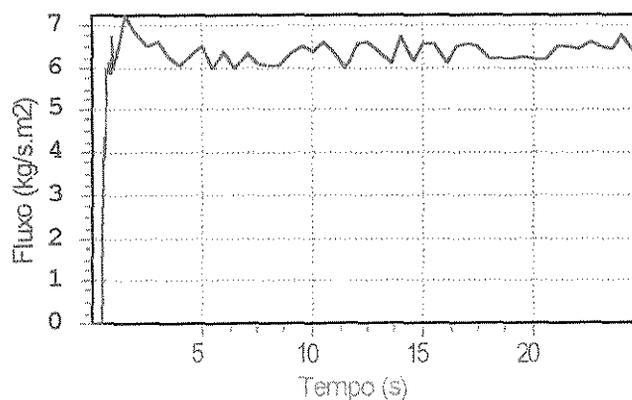


Figura 106: Perfil temporal do fluxo mássico de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

A distribuição de posição das partículas pode ser visualizada na Figura 107. O aspecto geral desta figura se assemelha ao da Figura 100, obtida do sistema sem acoplamento sólido-fluido da seção 5.8.3, uma vez que as características mais facilmente perceptíveis são decorrentes do cálculo das colisões. Como os diagramas de posição de partículas anteriores, a Figura 107 evidencia a zona de aceleração pela maior aglomeração de sólidos, bem como um núcleo central de menor porosidade. Pode-se, também, constatar a existência de partículas nas proximidades das paredes, sendo tal efeito um produto da dispersão gerada pelas colisões entre partículas.

O perfil local da velocidade axial das partículas está exibido no diagrama da Figura 108. Do mesmo modo que para a simulação 5.8.3, verificam-se regiões descontínuas de cores, denotando a mistura entre partículas de velocidades distintas. De fato, as características gerais da Figura 108 são as mesmas da Figura 101, diferindo apenas na velocidade das partículas, sinalizada na escala de cores.

O diagrama de visualização da porosidade local – Figura 109 – denota a existência de um núcleo central de elevada concentração de sólidos. Esta característica foi assinalada em diversas simulações anteriores, ratificando-se então no presente estudo-de-caso.

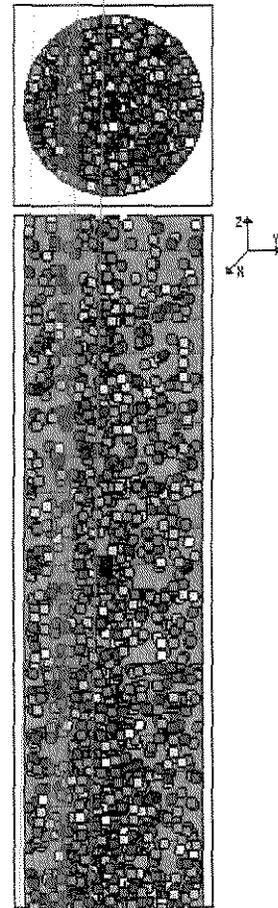


Figura 107: Visualização da distribuição das partículas no interior do tubo de transporte. Escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

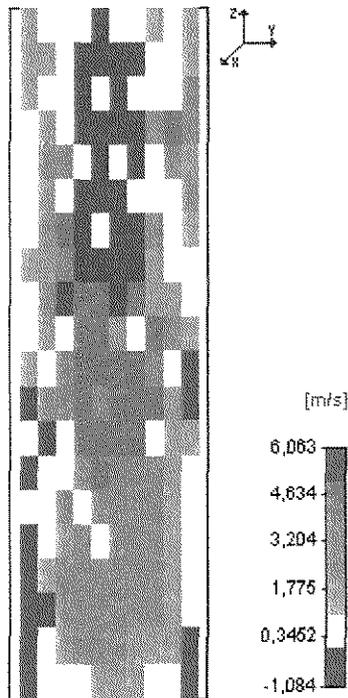


Figura 108: Visualização da velocidade axial das partículas no leito de transporte. escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

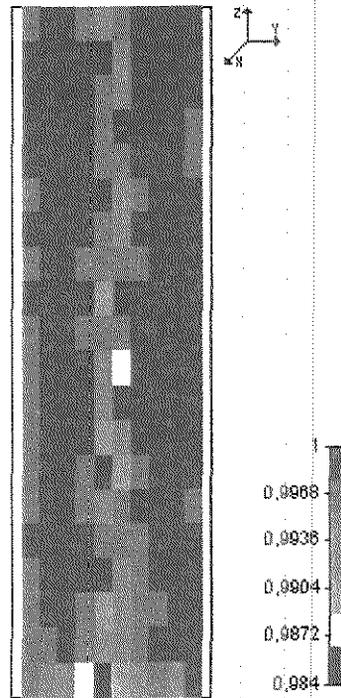


Figura 109: Visualização da porosidade local no leito de transporte. escoamento turbulento bifásico com colisões e acoplamento bidirecional sólido-fluido.

5.9 Estudo de Misturas Polidispersas

Tendo-se o objetivo de demonstrar a aplicação da SOO ao estudo de misturas polidispersas de partículas, foram realizados alguns estudos-de-caso referentes ao transporte pneumático de uma mistura polidispersa de partículas esféricas de aço com densidade igual a 7700 kg/m^3 . Partículas com estas mesmas características foram utilizadas por Capes & Nakamura (1973) em seus experimentos, todavia estes autores concentraram-se no estudo de misturas monodispersas. O fluido de transporte tem densidade de $1,205 \text{ kg/m}^3$ e viscosidade de $1,819\text{E-}5 \text{ Pa.s}$.

No presente trabalho, foram analisados quatro tipos de misturas com características granulométricas distintas, todavia possuindo um mesmo diâmetro médio igual a $2,08 \text{ mm}$. As curvas de distribuição granulométrica correspondentes a estas misturas, denominadas seqüencialmente de A, B, C e D, estão exibidas na Figura 110. A linha de referência é estabelecida pela mistura D, a qual é constituída por partículas de mesmo diâmetro cujo valor é igual ao diâmetro médio das misturas polidispersas A, B e C.

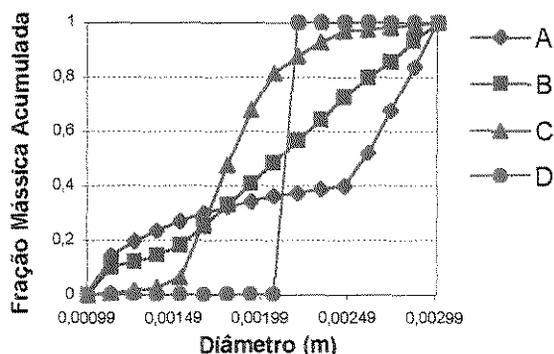


Figura 110: Curva de distribuição mássica acumulada das misturas de partículas estudadas.

Para permitir uma melhor observação das características granulométricas das misturas analisadas, a curva de distribuição de diâmetros está exposta na Figura 111. A curva A exibe uma quantidade equilibrada de partículas menores e maiores, tendo baixa concentração de partículas médias. A mistura B, por sua vez, mostra uma distribuição equilibrada em quase todo o espectro de diâmetros. E, por último, a mistura C é composta, na maior parte, por partículas de diâmetro mediano. Apesar destas misturas possuírem um mesmo diâmetro médio, as distribuições sensivelmente distintas podem acarretar em comportamentos dinâmicos diferenciados.

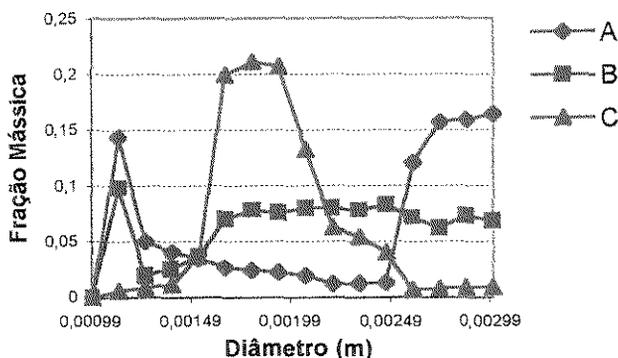


Figura 111: Curva de distribuição mássica não-acumulada das misturas de partículas estudadas.

A Figura 112 mostra as curvas da distribuição populacional acumulada das misturas A, B e C. A elevada derivada inicial da curva A é consequência do grande número de partículas pequenas, como pode ser comprovado pela Figura 111. Por sua vez, a curva C, em decorrência de uma baixa concentração de partículas menores, inicia com um patamar de estagnação para, depois, realizar uma ascensão aguda.

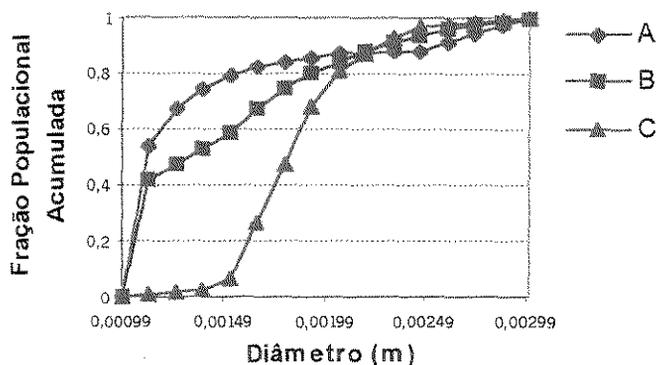


Figura 112: Curva de distribuição populacional acumulada das misturas de partículas estudadas.

Para estabelecer um padrão de comparação entre as distribuições granulométricas resultantes, o fluxo de entrada de sólidos foi fixado em aproximadamente 15 kg/sm^2 em todas as simulações. Pela mesma razão, a queda de pressão do leito foi mantida em $2,2 \text{ kPa}$.

A Figura 113, Figura 114 e Figura 115 mostram as distribuições mássicas acumuladas para as misturas A, B e C, respectivamente, segundo uma amostragem realizada desde o princípio da simulação.

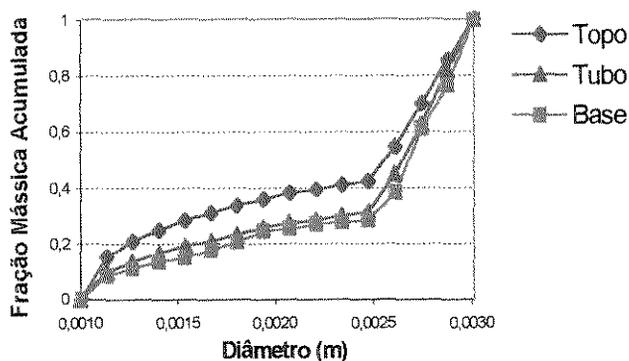


Figura 113: Comparação das curvas de distribuição mássica acumulada para a mistura A.

A Figura 113 representa claramente a maior concentração de partículas de menor diâmetro no fluxo dos sólidos que saem pelo topo do equipamento. Esta observação concorda com a expectativa física, uma vez que a tendência de precipitação será maior para as partículas mais pesadas, principalmente nos estágios iniciais quando o fluido ainda não acelerou até atingir o regime permanente. Na Figura 113, também pode-se verificar a diferença sensível entre as distribuições granulométricas do topo e da base do tubo de transporte, a qual pode ser percebida como um efeito direto da segregação das partículas.

Pela Figura 114, observa-se uma menor discrepância entre as características granulométricas das misturas de partículas na três regiões consideradas. A causa deste efeito está diretamente relacionada à constituição da mistura de partículas. Como pode ser verificado na Figura 111 a mistura B possui uma distribuição de banda larga, todavia as faixas de diâmetros estão equitativamente distribuídas, exceto pela região das menores partículas, onde a concentração é sensivelmente superior. Neste sentido, a existência de uma quantidade significativa de partículas pequenas na mistura B pode justificar a discreta segregação exibida.

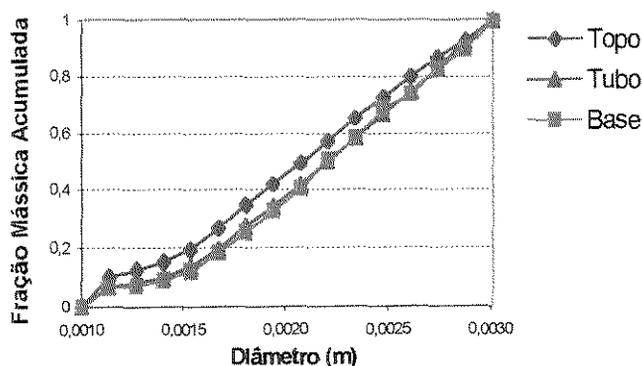


Figura 114: Comparação das curvas de distribuição mássica acumulada para a mistura B.

Em contraste com as misturas A e B, a mistura C praticamente não apresenta efeito de segregação, como pode ser visto nas distribuições granulométricas da Figura 115. Este comportamento atende à expectativa fenomenológica, uma vez que a mistura polidispersa C possui distribuição granulométrica em banda estreita, implicando em uma menor variação de diâmetros e, conseqüentemente, em um comportamento mais semelhante ao de uma mistura monodispersa.

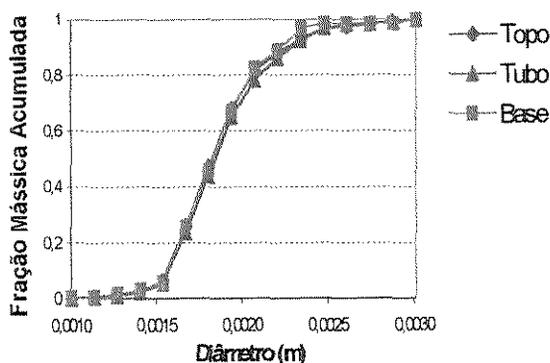


Figura 115: Comparação das curvas de distribuição mássica acumulada para a mistura C.

Uma característica peculiar da Figura 115 se refere ao fato de que a curva granulométrica da base se encontra acima da curva correspondente ao tubo. Embora a expectativa física esteja na direção oposta, a causa deste efeito pode estar na pequena largura da banda de diâmetros da mistura C. Em vista das partículas possuírem diâmetros muito próximos, espera-se que as distribuições granulométricas sejam semelhantes nas situações verificadas, todavia existe a possibilidade de ocorrer alguma flutuação nestas distribuições devido aos fatores aleatórios no subsistema gerador de diâmetros.

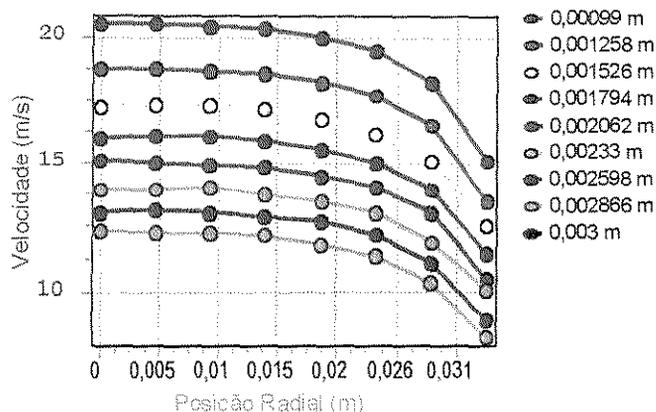


Figura 116: Perfil radial da velocidade axial média das partículas em várias faixas de diâmetro da mistura A.

O perfil radial da velocidade axial média das partículas para algumas das faixas de diâmetros está mostrado na Figura 116. Como pode-se verificar, as curvas estão dispostas de modo coerente com a seqüência de diâmetros das partículas, de maneira que as partículas menores viajam mais velozmente. Deve-se salientar que a uniformidade destas curvas somente é possível através da ausência de colisões. Em simulações mais realísticas, ao levar-se em conta os efeitos das colisões, a dispersão das partículas pode modificar sensivelmente o perfil radial da velocidade axial, provocando perturbações nas curvas.

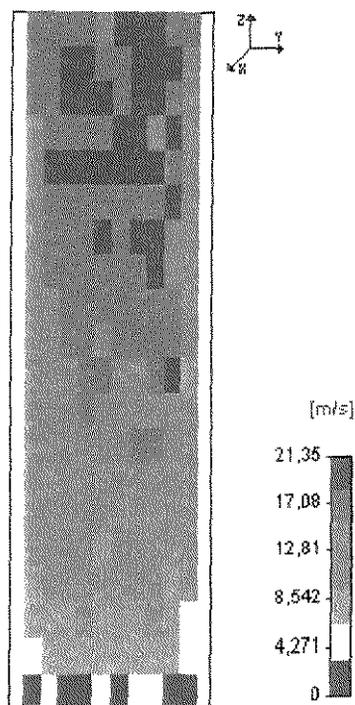


Figura 117: Diagrama de visualização da velocidade axial das partículas para a mistura A (poli-dispersa).

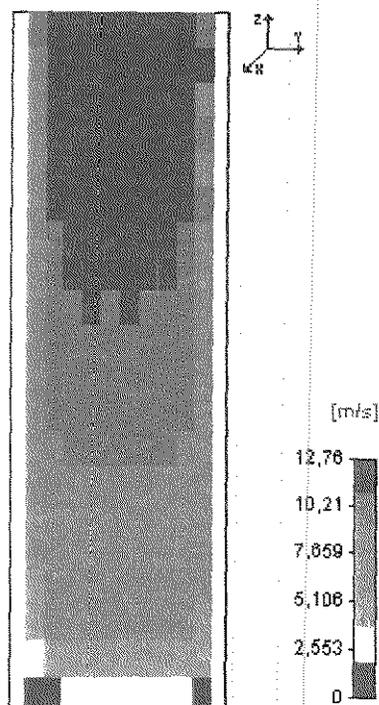


Figura 118: Diagrama de visualização da velocidade axial das partículas para a mistura D (monodispersa).

O diagrama de visualização da velocidade axial das partículas é exibido na Figura 117. Este diagrama evidencia as variações de velocidade existentes na nuvem de sólidos, as quais são decorrentes da diversidade de diâmetros, uma vez que partículas diferentes, com propriedades dinâmicas distintas, são injetadas em posições aleatórias na base do tubo de transporte. A presença de amplas regiões uniformes na Figura 118 – correspondente à mistura monodispersa D – corrobora a afirmação anterior, pois exibe a aceleração progressiva das partículas de mesmo diâmetro ao longo do tubo. Adicionalmente, a Figura 118 permite a clara distinção da zona de aceleração como sendo a região onde a velocidade das partículas sofre a maior variação na metade inferior do tubo.

Outro aspecto a ser observado é a escala de velocidades. Como esperado, devido à existência de partículas de menor diâmetro na mistura A, a velocidade axial máxima atingida pelas partículas na Figura 117 é sensivelmente superior ao valor alcançado pelas partículas da Figura 118.

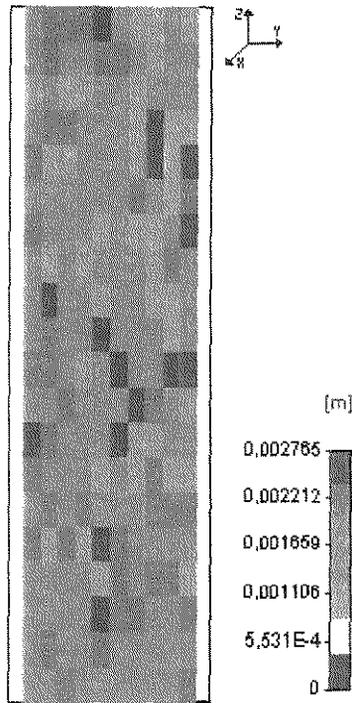


Figura 119: Diagrama de visualização do diâmetro das partículas para a mistura A.

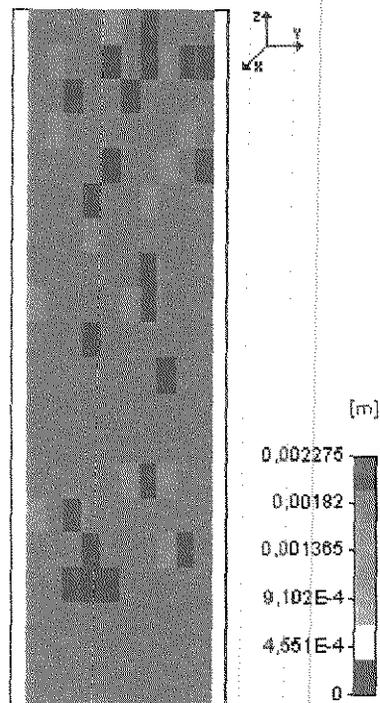


Figura 120: Diagrama de visualização do diâmetro das partículas para a mistura C.

A distribuição espacial do diâmetro das partículas para as misturas A e C pode ser observada nas Figura 119 e Figura 120, respectivamente. É distinta na Figura 119 a concentração relativamente equilibrada de partículas de todos os tamanhos. Tal observação está de acordo com a distribuição granulométrica mostrada na Figura 111, onde verifica-se uma concentração relativamente equilibrada de partículas de menor e de maior diâmetro e uma concentração inferior das partículas de diâmetro intermediário. Em contrapartida, a Figura 120, exibe claramente a predominância de partículas de diâmetro intermediário, confirmando outra vez a distribuição mássica não-acumulada correspondente.

5.10 Validação Experimental

5.10.1 Validação com Dados Experimentais Globais

Estão disponíveis na literatura uma série dados de transporte pneumático resultantes de medições experimentais ou de simulações numéricas. Capes & Nakamura (1973) estudaram um sistema de transporte composto por um tubo de acrílico com 3in de diâmetro interno e 30ft de comprimento. Estes autores realizaram diversos experimentos variando as vazões de sólidos e do fluido assim como o tipo de partículas transportadas.

5.10.1.1 Comparação de Richardson-Zaki

Para efeito de validação, também é mostrada na Figura 121 a comparação entre uma seqüência de dados de Capes & Nakamura (1973) e os valores correspondentes obtidos por simulações realizadas em condições correspondentes, onde F/A e S/A são as velocidades superficiais do fluido e dos sólidos, respectivamente, enquanto que ϵ é a porosidade média do leito.

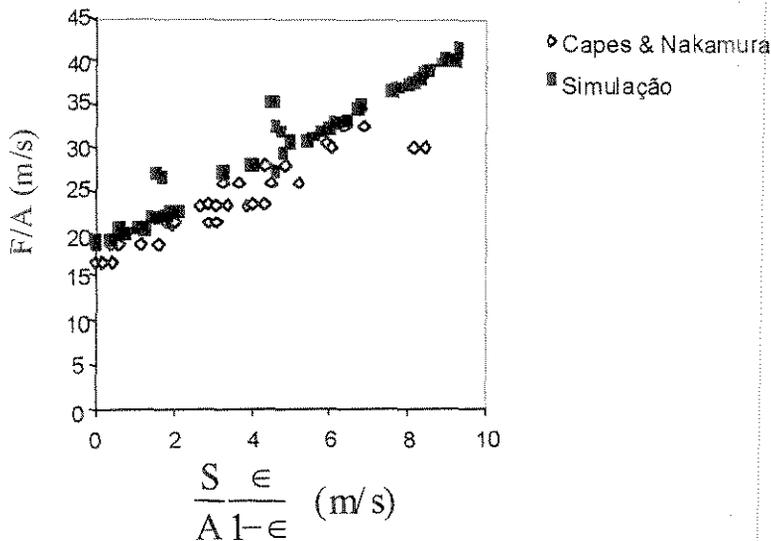


Figura 121: Comparação de dados experimentais obtidos por Capes & Nakamura (1973) para o transporte de partículas de aço com 2,34mm de diâmetro e 7,70g/cm³ de densidade.

Como visto, a Figura 121 exibe sensível concordância entre os dados experimentais e simulados. É relevante notar que a dispersão verificada não decorre puramente de erros experimentais ou desvios aleatórios incorporados ao modelo. De fato, o parâmetro usado na abscissa é um integrador dos vários efeitos dinâmicos presentes no sistema de transporte pneumático, implicando que conjuntos de valores distintos dos parâmetros do modelo podem resultar em pontos próximos quando plotados no campo coordenado usado na Figura 121.

A concordância entre os valores simulados e os dados de Capes & Nakamura (1973) sugere que o modelo de transporte pneumático apresentado é capaz de incorporar efeitos de interação partícula-partícula e partícula-parede de forma consistente, uma vez que estes autores julgaram relevantes estes efeitos nos seus experimentos.

De fato, Capes & Nakamura (1973) fizeram uma comparação detalhada entre os seus dados experimentais e a bem conhecida equação de Richardson-Zaki, escrita na forma:

$$\frac{F}{A} = \frac{S}{A} \frac{\epsilon}{1-\epsilon} + u_T \epsilon^n, \tag{171}$$

onde F/A é a velocidade superficial do fluido; S/A é a velocidade superficial dos sólidos; ϵ é a porosidade; u_T é a velocidade terminal da partícula isolada e n é um parâmetro correlacionado. Os referidos autores não foram capazes de ajustar diretamente as suas medições à equação de Richardson-Zaki. Embora os valores de F/A fornecessem retas quando plotados em função da coordenada $S \epsilon / A(1-\epsilon)$, a inclinação e o coeficiente linear destas retas experimentais não correspondiam ao previsto pela correlação de Richardson-Zaki, sendo necessário modificá-la a fim de obter um ajuste satisfatório. Diante deste fato, os autores levantaram a hipótese dos efeitos do atrito partícula-parede e da recirculação de partículas estarem desempenhando papel significativo nos experimentos realizados. Sendo assim, como a equação (171) foi desenvolvida negligenciando-se estes efeitos, torna-se compreensível a sua inabilidade em representar os experimentos ora realizados.

A Figura 122 mostra individualmente o comportamento funcional da porosidade para os dados expostos na Figura 121, entretanto, neste caso, estão identificadas seqüências de igual queda de pressão no leito. Inicialmente, pode-se constatar de imediato a consistência entre os comportamentos das curvas de queda de pressão. De maneira geral, estas linhas isobáricas podem ser aproximadas por retas com inclinação positiva, indicando que a redução da vazão de sólidos injetados no tubo causa um aumento da porosidade.

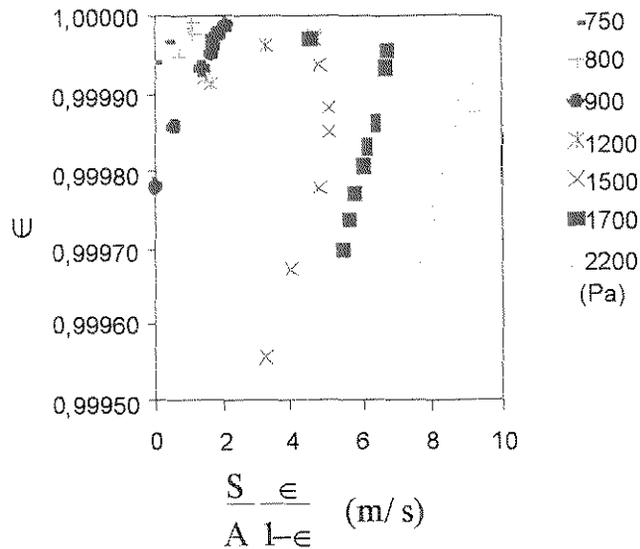


Figura 122: Porosidade média do leito de transporte em função do parâmetro de Richardson-Zaki para várias quedas de pressão no tubo.

O comportamento obtido da Figura 122 concorda com a expectativa física e pode ser verificado mais claramente por intermédio da Figura 123, a qual mostra, para cada curva isobárica, que um maior valor da abscissa corresponde a uma menor vazão de sólidos transportados. Esta constatação concorda com o aumento de porosidade observado nos pontos correspondentes da Figura 122.

O gráfico da Figura 123 exibe a correlação entre o parâmetro de Richardson-Zaki e a velocidade superficial das partículas. Uma vez que as curvas de mesma queda de pressão estão identificadas, é possível notar, especialmente para as curvas de 1500, 1700 e 2200 Pa, que o aumento da abscissa é acompanhado da redução da vazão de partículas transportadas. As curvas de menor queda de pressão, correspondentes a escoamentos mais lentos, apresentam distorções decorrentes da proximidade do estado de *choking* e dos efeitos de interação partícula-partícula.

Adicionalmente, pode-se notar da Figura 123 que não foi possível elevar substancialmente a vazão de sólidos para as curvas de menor gradiente de pressão. Isto se deve ao fato de que, mesmo para cargas inferiores, o estado de *choking* ou alguma instabilidade dinâmica semelhante era verificada, impedindo o transporte. Em outros casos, o transporte era interrompido simplesmente por que – devido ao peso da coluna de sólidos associada aos efeitos de colisão – a velocidade do fluido declinava até uma atingir a velocidade terminal das partículas.

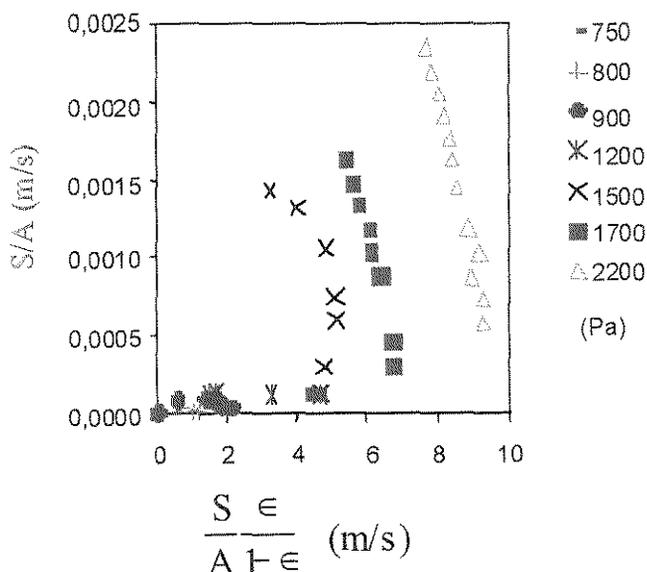


Figura 123: Velocidade superficial de sólidos em função do parâmetro de Richardson-Zaki para várias quedas de pressão no tubo.

A simulação e avaliação dos dados de Capes & Nakamura (1973) permitiu constatar que, via de regra, existe uma corrente descendente de partículas, a qual se precipita, em parte, pela base do tubo, conforme mostrado na Figura 124. Esta precipitação resulta parcialmente da recirculação de sólidos no interior do tubo, que, por sua vez, é originada da dispersão provocada pelas interações partícula-partícula. De fato, uma fração da corrente descendente de partículas sai pela base do tubo, entretanto a outra porção das partículas colide durante o percurso de queda, sendo arremessada para regiões mais velozes do fluido e, em conseqüência reconduzida em um novo ciclo ascendente. Este processo pode se

repetir indefinidas vezes, constituindo-se no mecanismo básico da recirculação de sólidos no transporte pneumático.

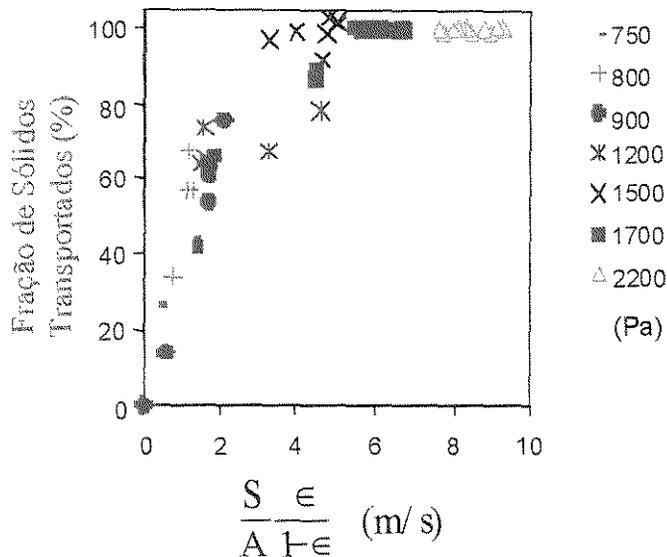


Figura 124: Fração mássica de partículas que saem pelo topo do tubo de transporte em função do parâmetro de Richardson-Zaki.

Observando-se a Figura 124 juntamente com a Figura 123, pode-se notar que, à medida que a vazão de sólidos transportados diminui (menor abscissa), a fração de sólidos que precipita pela base do tubo é aumentada. Como visto, a fração de sólidos transportados decresce consistentemente para menores quedas de pressão, chegando até a se anular. Este comportamento decorre do fato de que um perfil de velocidades suficientemente lento para o fluido pode originar uma região anular junto à parede na qual a sua velocidade é inferior à velocidade terminal das partículas. Desta maneira, as partículas defletidas para esta região pelas colisões simplesmente precipitam, saindo posteriormente pela base do tubo, ou até que outra colisão interrompa a queda, deslocando-a para zonas mais velozes.

Corroborando a verificação anterior, a Figura 124 mostra que as partículas somente são totalmente transportadas nas curvas de queda de pressão superiores a 1500 Pa, indicando que, nestas situações, a zona de precipitação de sólidos junto à parede do tubo não existe ou não é significativa.

5.10.1.2 Comparação de Queda de Pressão

A curva de queda de pressão em função da velocidade do fluido é mostrada na Figura 125, a qual descreve o comportamento da queda de pressão no tubo de transporte como função da velocidade superficial do gás, mantendo-se a taxa de alimentação de sólidos constante. Os pontos experimentais também foram extraídos de Capes & Nakamura (1973).

Neste caso, a fase dispersa é composta por esferas de vidro com diâmetro de 2,90mm e massa específica de 2,86g/cm³. A taxa de alimentação de sólidos corresponde a 0,152Kg/s ou, de outra forma, a uma taxa de injeção de partículas igual a 642 partículas/s. Em vista do fato de a viscosidade e massa específica do gás não terem sido reportados, estas propriedades foram estimadas a uma temperatura presumida de 20°C.

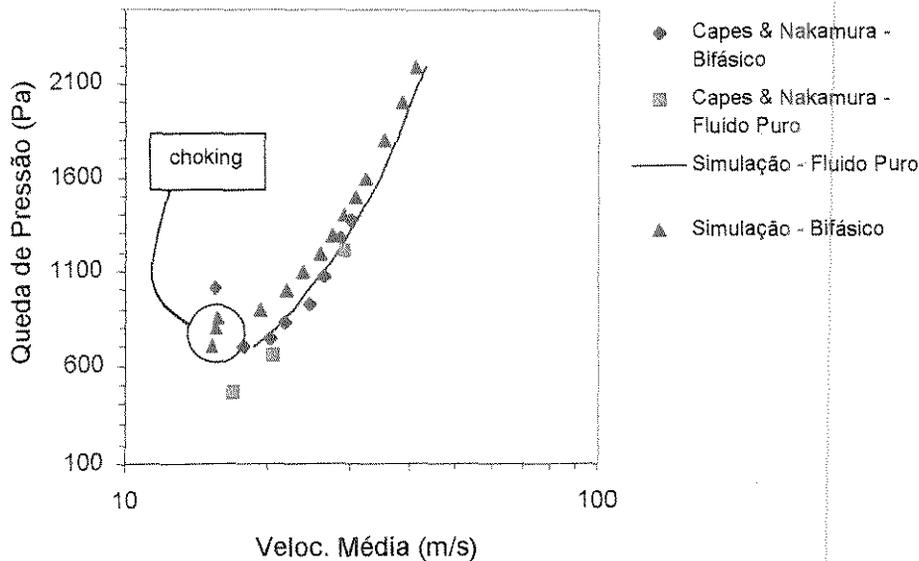


Figura 125: Comparação entre dados de queda de pressão de Capes & Nakamura e os resultados simulados para as mesmas condições. A viscosidade e massa específica do ar foram calculadas para a temperatura presumida de 20°C. A fase dispersa é constituída por esferas de vidro de 2,90mm alimentadas a uma taxa de 0,152Kg/s. Os pontos realçados correspondem aos casos onde não ocorreu o transporte de sólidos, representando situações onde se verificou o fenômeno de *choking*.

Foram realizadas uma série de simulações fixando-se a vazão dos sólidos e elevando-se gradualmente a diferença de pressão aplicada ao equipamento de transporte. Em conseqüência, o perfil de velocidade do fluido e das partículas era modificado de maneira a produzir uma queda de pressão igual à diferença de pressão aplicada. Para efeito de comparação, os dados de queda de pressão para o fluido puro foram associados aos dados do escoamento bifásico e plotados na Figura 125.

A vista imediata da Figura 125 mostra que existe um certo grau de aproximação entre as curvas experimentais e simuladas, especialmente quando se trata da curva de queda de pressão para o fluido puro. Nota-se, também, que as curvas simuladas se mantêm consistentemente acima das medidas por Capes & Nakamura (1973). Embora este comportamento possa ser resultado de uma combinação complexa de fenômenos, as simulações de escoamentos turbulentos de fluido puros apresentados na seção 5.4 permitiram verificar a dificuldade encontrada ao se ajustar um modelo de turbulência para reproduzir satisfatoriamente resultados de escoamentos reais. De fato, as discordâncias entre as curvas teóricas e experimentais de queda de pressão podem estar sendo geradas, na

maior parte, por deficiências inerentes à modelagem e simulação da turbulência. Além disso, deve-se antever que a inserção de partículas no escoamento turbulento pode ter efeitos inadvertidos no modelo de turbulência utilizado.

Os pontos em destaque correspondem a situações onde não se deu o transporte de sólidos. Nestes casos, verificava-se grande instabilidade na movimentação de partículas no interior do tubo, correspondendo ao estado de *choking*. Esta constatação é um indicativo de que a simulação foi capaz de prever com relativa exatidão o ponto de *choking*, uma vez que o transporte de sólidos cessa a uma queda de pressão próxima ao ponto de mínimo delineado pelos dados experimentais. Na Figura 125, a curva de queda de pressão experimental identifica o ponto de *choking* através do seu valor mínimo. Em contraste, a curva simulada identifica o *choking* por seu ponto de inflexão, o qual coincide aproximadamente com o ponto de mínimo da curva experimental. A inflexão na curva simulada se origina da não acumulação de sólidos precipitados na base do tubo, ou seja, as partículas que caem em direção à base do tubo são imediatamente removidas, não ocasionando a perda de carga adicional observada na situação experimental.

A comprovação de que não há transporte efetivo de sólidos nos pontos realçados na Figura 125 pode ser encontrada na Figura 126, a qual exibe a vazão de sólidos transportados para os mesmos pontos simulados na Figura 125. Os pontos identificados na Figura 126 correspondem a velocidades de fluido inferiores à do ponto de *choking* e demonstram que quase a totalidade das partículas se precipita pela base do tubo, conforme a expectativa. Em contrapartida, os demais pontos – superiores ao *choking* – mostram um transporte efetivo das partículas. É interessante notar também que a vazão de sólidos pelo topo do tubo eleva-se subitamente quando a velocidade do fluido ultrapassa o valor de *choking*. A partir do ponto de *choking*, verifica-se uma elevação brusca da vazão de sólidos transportados à medida que a velocidade do fluido é acrescida. Este comportamento sugere que a regulação da taxa de transporte de partículas por meio do ajuste da velocidade do fluido seria tarefa bastante difícil devido à grande sensibilidade envolvida.

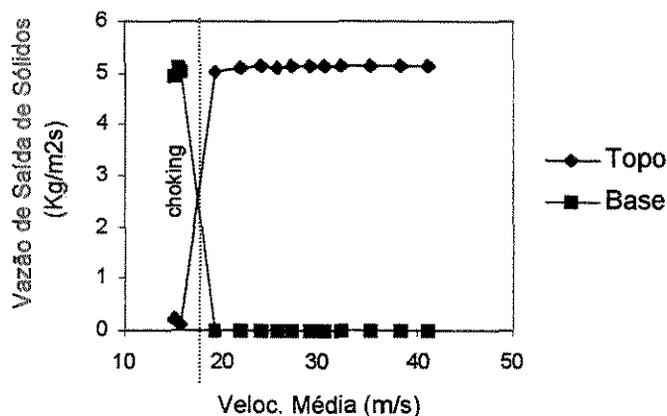


Figura 126: Fluxo mássico de sólidos pelo topo e pela base do tubo para as mesmas simulações mostradas na Figura 125. Os pontos assinalados correspondem a situações onde o transporte não foi apropriadamente realizado, verificando-se o fenômeno de *choking*.

Para uma análise mais detalhada do comportamento da fase particulada no que respeita às interações partícula-partícula, observe-se a curva de frequência de colisões mostrada na Figura 127. De forma geral, o gráfico desta figura demonstra que a frequência de colisões aumenta gradativamente com a redução da velocidade do fluido, o que é esperado, devido à diminuição da porosidade do leito. Todavia, na região próxima ao *choking*, a redução verificada é bastante abrupta indicando que a porosidade do leito decresce dramaticamente nestas condições. Esta constatação concorda com a expectativa física, uma vez que o estado de *choking* pode ser caracterizado pelo movimento desordenado de aglomerados de partículas oscilando e colidindo mutuamente repetidas vezes.

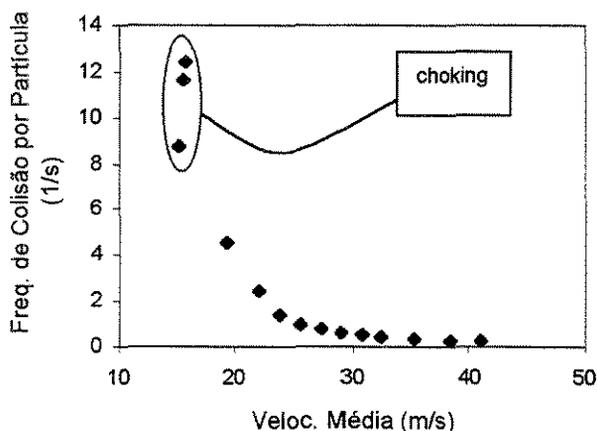


Figura 127: Frequência de colisões por partícula para as mesmas simulações mostradas na Figura 125. Os pontos assinalados correspondem a situações onde o transporte não foi propriamente realizado, verificando-se o fenômeno de *choking*.

Adicionalmente, a Figura 127 permite uma avaliação quantitativa da importância das colisões no estado de *choking*, pois pode-se aferir que a frequência de colisões é multiplicada diversas vezes à medida que a velocidade média do fluido é reduzida e o *choking* se torna iminente. Este fato conduz à conclusão de que a modelagem das colisões pode ser característica essencial para a determinação, ainda que aproximada, do ponto de *choking*.

5.10.2 Validação com Dados Experimentais Localizados

A partir dos dados relatados anteriormente pode-se inferir que a abordagem da simulação orientada a objeto possibilitou a estimativa de resultados em concordância razoável para variáveis e fenômenos macroscópicos, tais como queda de pressão, velocidade média do fluido e estado *choking*. Todavia, a fim de investigar mais cuidadosamente a confiabilidade do modelo, é recomendável fazer-se uma comparação com medidas experimentais mais localizadas. Apesar de medições locais em escoamentos bifásicos sólido-fluido não serem muito comuns na literatura especializada, foi possível realizar uma comparação com os dados reportados por Tsuji et alii (1984).

Os parâmetros das simulações foram ajustados de tal forma a espelhar as condições experimentais utilizadas pelos autores. As propriedades não relatadas foram criteriosamente estimadas. Deste modo, as características gerais aplicadas às simulações são exibidas na Tabela 44.

Tabela 44 : Parâmetros gerais das simulações. Validação com dados experimentais localizados.

Propriedade	Valor
Densidade do fluido (kg/m ³)	1,205
Viscosidade do fluido (Pa.s)	1,82E-05
Diâmetro do tubo (m)	0,0305
Diâmetro das partículas (m)	0,00142
Densidade das partículas (kg/m ³)	1030
Comprimento do tubo (m)	5,11

As diversas corridas foram realizadas objetivando-se obter uma variação crescente da razão de carregamento ($m = W_s / W_g$), mantendo-se aproximadamente constante a velocidade do fluido no centro do tubo. Para isso, foram requeridas estimativas iniciais da taxa de injeção de partículas, a fim de que, ao atingir-se o regime permanente, a razão de carga desejada fosse também alcançada. As três principais simulações utilizaram as taxas de injeção de sólidos mostradas na Tabela 45 a seguir.

Tabela 45 : Estimativa da taxa de injeção de partículas para as principais simulações. Validação com dados experimentais localizados.

Simulação	Taxa de Injeção (partículas/s)
A	3893
B	7786
C	11679

Após a definição dos parâmetros e execução das simulações, os resultados conseguidos podem ser compilados conforme mostrado na Tabela 46.

Tabela 46 : Resumo de resultados da principais simulações. Validação com dados experimentais localizados.

Simulação	U_c (m/s)	Porosidade	W_s/W_g
A	13,27193	0,998	0,59
B	12,921514	0,996	1,15
C	12,913053	0,994	1,7333

O perfil radial da velocidade axial do fluido nas referidas corridas pode ser plotado em coordenadas adimensionais para fornecer o gráfico exibido na Figura 128 a seguir:

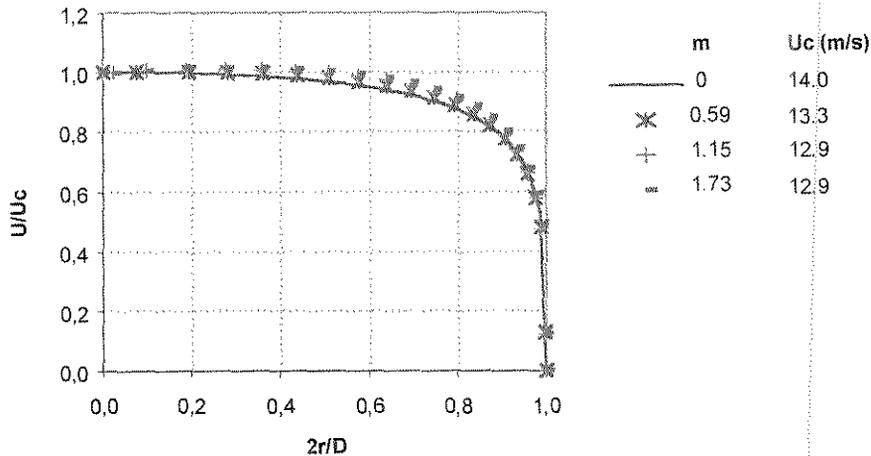


Figura 128 : Perfil radial adimensional da velocidade do fluido nas principais simulações. Validação com dados experimentais localizados.

A curva contínua corresponde ao perfil de velocidade do fluido puro, ou seja, com razão de carga nula. As demais curvas correspondem a uma razão de carga crescente e exibem algum desvio, embora não significativo, em relação ao perfil do fluido puro. Esta característica está de acordo com o observado por Tsuji et alii (1984), os quais constataram que partículas com estas características não causavam deformação significativa do perfil de velocidades, mesmo em carregamentos relativamente elevados.

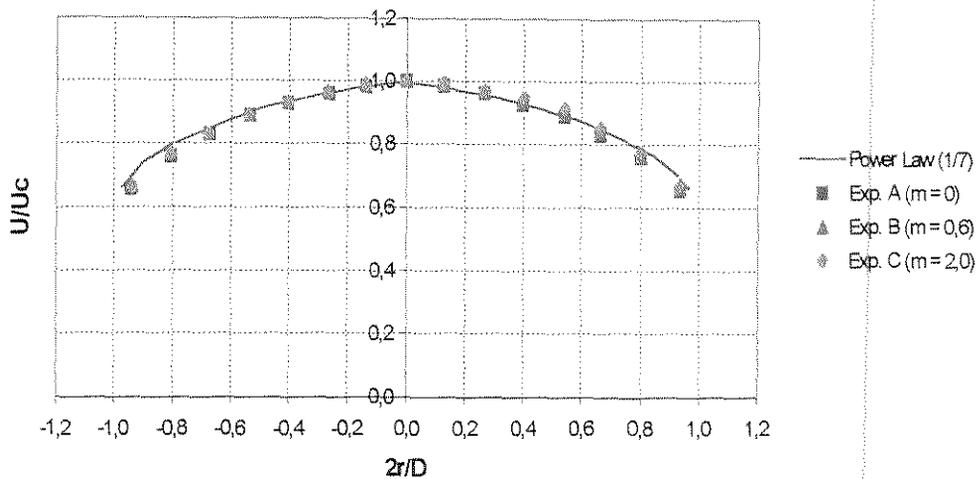


Figura 129 : Perfil radial adimensional da velocidade do fluido experimental para várias razões de carregamento. Validação com dados experimentais localizados.

O dados experimentais medidos pelos autores para o tipo de partículas simulado são reproduzidos na Figura 129, onde a curva contínua corresponde ao perfil empírico da lei da potência utilizando expoente 1/7.

Comparando-se as curvas da Figura 128 com as correspondentes a Figura 129, pode-se concluir, em primeira instância, que existe excelente concordância entre ambas. Todavia, deve-se perceber que as curvas simuladas são sensivelmente mais planas do que as contrapartidas experimentais. Diante disto, pode-se verificar que o perfil turbulento simulado é relativamente mais achatado do que o seu correspondente experimental. O fato desta característica estar presente mesmo na condição de fluido puro (curvas contínuas) subsidia a conclusão de que não se trata de um efeito relacionado à presença das partículas, mas sim, possivelmente, à modelagem do fluido.

Visto que o modelo empregado para simulação da turbulência concorda com o perfil universal de velocidades e, além disso, mostrou-se satisfatoriamente acurado na determinação de valores macroscópicos de queda de pressão e de velocidade média do fluido – conforme verificado nas comparações com os experimentos de Capes & Nakamura – uma análise mais aprofundada necessita ser realizada. Para isso, pode-se lançar mão do perfil universal de velocidades (Y^+ vs. U^+) para o escoamento turbulento.

Como os perfis medidos por Tsuji et alii (1984) estão em boa concordância com a conformação fornecida pela lei da potência, a qual diverge das curvas simuladas, pode-se converter o perfil da lei da potência para o espaço coordenado Y^+ vs. U^+ e compará-lo com a curva simulada para o fluido puro (curva contínua da Figura 128). Este quadro comparativo é trazido pela Figura 130.

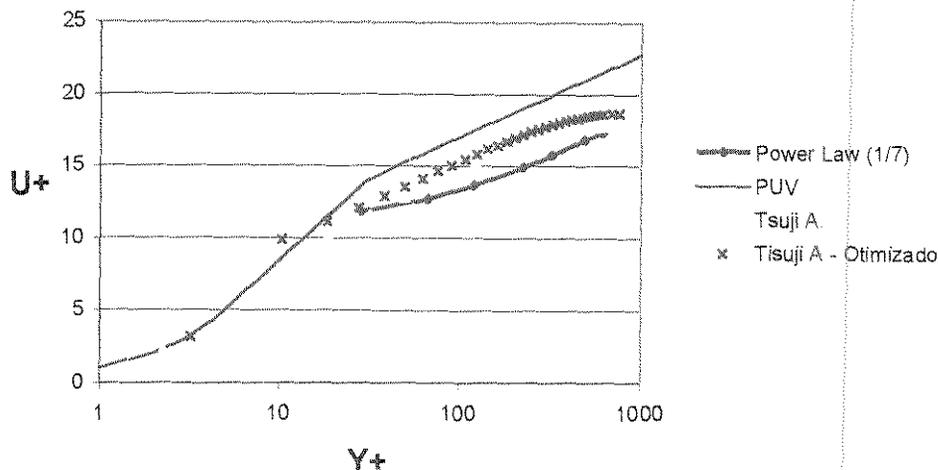


Figura 130 : Comparação entre o perfil universal de velocidades e os perfis experimental e simulado. Validação com dados experimentais localizados.

A Figura 130 mostra, como referência, o perfil universal de velocidades (PUV) para o escoamento turbulento, juntamente com perfis simulados e o perfil da lei da potência. Pode-se notar que a lei da potência não acompanha fielmente o PUV, fato que não deixa de ser surpreendente, uma vez que ambos os perfis são empíricos e considerados de modo amplamente confiável na literatura. Adicionalmente, pode-se verificar que os perfis simulados apresentam melhor concordância com o PUV do que o perfil da lei da potência, sendo esta melhor concordância tanto qualitativa como quantitativa.

Para esboçar uma conclusão, deve-se levar em conta que ambos os tipos de perfis tem aplicação generalizada em diversas áreas da dinâmica dos fluidos, sendo o PUV mais largamente utilizado como condição de parede para a incorporação da turbulência em modelos computacionais. Por este motivo, não é possível refutar qualquer um dos perfis, sendo necessário apenas observar e justificar diferenças entre ambos, considerando-as como força motriz para refinar e otimizar ainda mais o modelo de turbulência adotado na descrição da fase fluida.

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Fundamentando-se na metodologia da Simulação Orientada a Objeto (SOO) bem como nos resultados apresentados *a priori* neste trabalho, pode-se esboçar as seguintes conclusões.

6.1 Conclusões

1. Metodologia

- 1.1. A metodologia da SOO mostra-se como técnica alternativa viável para a modelagem e simulação do transporte pneumático de sólidos apresentando, inclusive, potencial para aplicação generalizada no estudo de outros sistemas dinâmicos sólido-fluido.
- 1.2. A SOO permite o rastreamento de informações do sistema particulado com detalhamento espacial, temporal e dinâmico não acessível por meio de técnicas convencionais, como, por exemplo, o estado dinâmico do fluido e de cada partícula individual a cada passo de tempo, interação de atrito e colisão entre as partículas e a fronteira sólida do sistema, interação de atrito e colisão partícula-partícula, incorporação da turbulência e o acoplamento bidirecional sólido-fluido.

2. Modelagem das Partículas

- 2.1. Conforme descrito na seção 3.3 e constatado nas seções 5.7 e 5.8, a modelagem discreta e orientada a objeto das partículas associada à forma geral da 2ª lei do movimento de Newton, mostrou-se como técnica eficaz na descrição da dinâmica da fase dispersa, possibilitando a captura de fenômenos complexos resultantes de efeitos fundamentais, tais como as forças centrífuga e de coriolis, bem como a influência de forças de campo – no presente trabalho restrita à gravidade – e do empuxo.
- 2.2. Devido às características da orientação a objeto, o modelo das partículas permitiu a determinação de propriedades físicas e dinâmicas de cada partícula a cada passo de tempo, ensejando a obtenção de perfis espaciais e temporais relativamente detalhados, os quais proporcionam uma compreensão em mais alto nível dos fenômenos inerentes à fase sólida.
- 2.3. Em conformidade com a explanação da seção 3.7, os resultados da seção 5.8 e as comparações da seção 5.10 sugerem que as interações partícula-partícula ocorrem fundamentalmente por consequência das colisões e determinam de maneira crucial o estado do escoamento. Uma implicação imediata desta conclusão reside no fato de que parte substancial do realismo proporcionado pelo modelo de transporte pneumático ora apresentado pode estar concentrada no modelo de colisões entre partículas. Portanto, torna-se presumível que um esforço de otimização e refinamento seja mais eficaz se concentrado no modelo de colisões ao invés de

outros modelos subjacentes, tais como o modelo de escoamento do fluido ou o modelo de colisões.

- 2.4. O critério de colisões baseado na aproximação de 2ª ordem modificada (seção 3.7.1.3) constituiu-se em instrumento de fundamental importância para a resolução do modelo da partícula, visto que a alternativa de ordem inferior é inerentemente menos precisa/exata, prejudicando o realismo dos resultados finais, bem como a aproximação de 4ª ordem incrementaria a carga computacional de maneira não admissível para os recursos computacionais no tempo de elaboração deste trabalho.

3. Modelagem do Fluido

- 3.1. A adoção da hipótese de escoamento pseudo-bidimensional (seção 3.5.2) para o escoamento do fluido, de fato, não representou limitação para o modelo de transporte pneumático como um todo, visto que, em condições mais comuns, a recirculação do fluido é bem menos significativa do que a recirculação das partículas, ocasionando, por sua vez, um menor impacto na dinâmica do leito. Todavia, parece claro que um passo lógico posterior na ampliação da metodologia da Simulação Orientada a Objeto (SOO) seria a extensão do modelo do fluido para o caso bidimensional.
- 3.2. Com respeito à geometria do equipamento de transporte, pode-se constatar que a arquitetura cilíndrica não somente facilita a resolução do modelo de transporte pneumático apresentado através da redução da carga computacional decorrente da sua simetria e maior simplicidade, como também constitui-se em um elemento imprescindível para o funcionamento do modelo pseudo-bidimensional do fluido. A transposição de uma geometria cilíndrica com seção uniforme para outra com seção reta variável, como, por exemplo um tubo de venturi, torna-se factível juntamente com a extensão do modelo de escoamento do fluido para o espaço bidimensional.
- 3.3. Conforme apresentado na seção 3.5.5, a técnica de Segmentação Não-Uniforme Funcional confirmou a sua superioridade frente à Segmentação Não-Uniforme Convencional, tanto devido à maior flexibilidade e liberdade no ajuste da grade de discretização do campo de escoamento do fluido, como também na significativa economia de tempo computacional obtida durante a determinação do índice da célula de fluido correspondente a cada partícula.
- 3.4. Com respeito ao tipo de função de discretização utilizado na Segmentação Não-Uniforme Funcional, pode-se concluir que a função afim é preferível em relação à função linear, apesar da reduzida carga computacional desta última, devido à maior liberdade proporcionada na formação da malha, a qual tem reflexo direto na estabilidade da resolução numérica do modelo.
- 3.5. Mesmo diante dos resultados satisfatórios proporcionados pela Segmentação Não-Uniforme Funcional com função afim, pode-se constatar que algum ganho de precisão/exatidão, bem como de estabilidade, na solução do modelo ainda pode ser conseguido mediante a escolha de uma função de discretização mais elaborada,

como, por exemplo, um polinômio de maior grau. Neste caso, a sobrecarga computacional adicionada deve ser compensada à medida que um maior poder computacional se torna disponível.

4. Modelagem de Misturas Polidispersas

- 4.1. Como percebido na seção 5.9, a técnica da Simulação Orientada a Objeto (SOO) mostrou-se capaz de representar satisfatoriamente misturas polidispersas e, adicionalmente, captar informações detalhadas sobre o estado dinâmico e as características granulométricas da fase dispersa em diversas regiões do tubo de transporte.
- 4.2. Os estudos-de-caso analisados na seção 5.9 permitiram a verificação de algum efeito de segregação, o qual fora mais pronunciado na mistura com distribuição de diâmetros em banda larga não-uniforme (mistura A). Para a mistura B, com banda larga e distribuição relativamente uniforme em todo o espectro de diâmetros, a segregação foi mais discreta, conforme a expectativa física. No caso da mistura C, com banda estreita, o comportamento foi bastante semelhante ao de uma mistura monodispersa nas mesmas condições.

5. Resultados

- 5.1. A abordagem da simulação orientada a objeto (SOO) mostrou-se eficaz na aplicação ao estudo do transporte pneumático. Informações detalhadas sobre o padrão de escoamento do fluido e das partículas, como, por exemplo, velocidades e porosidades locais, puderam ser avaliadas.
- 5.2. De acordo com os estudos-de-caso da seção 5.2, pode-se verificar que o modelo de escoamento do fluido apresenta concordância bastante satisfatória com a solução analítica da equação de Navier-Stokes para fluido puro em escoamento laminar no interior de um tubo. Os comportamentos fenomenológicos obtidos apresentaram consistência física e o desvio entre a vazão da solução analítica e a prevista pela simulação foi sempre inferior a 1%. Por sua vez, o desvio entre a velocidade máxima do fluido advinda das soluções analítica e simulada foi praticamente nulo.
- 5.3. O estudo do efeito do refinamento da grade (mínima realização) na simulação do escoamento laminar, efetuado na seção 5.5, permitiu concluir que o refinamento radial da malha exerce influência mais significativa nas propriedades integrais como vazão volumétrica e velocidade do fluido, do que nas propriedades locais como, por exemplo, a velocidade central. Embora os desvios (em relação à solução analítica) ocasionados na vazão volumétrica tenham sido superiores aos relacionados à velocidade central, deve-se perceber que estes foram consistentemente da ordem de 2%, representando um valor aceitável em termos práticos. A qualidade satisfatória destes resultados, mesmo utilizando-se uma malha relativamente rudimentar, evidencia a robustez e confiabilidade do modelo quando aplicado a escoamentos de fluidos puros em regime laminar.
- 5.4. Em virtude dos estudos-de-caso sobre o escoamento turbulento de um fluido puro (seção 5.4), pode-se constatar que o sub-modelo de turbulência adotado na

modelagem do fluido apresentou resultados dotados de consistência física. O perfil radial da velocidade axial, notoriamente achatado, bem como o perfil axial da queda de pressão depõem favoravelmente ao modelo, denotando a capacidade de simular satisfatoriamente os escoamento turbulentos. Adicionalmente, deve-se salientar que os resultados simulados mostraram-se consideravelmente concordantes no que se refere às comparações realizadas com o consolidado modelo semi-empírico do perfil universal de velocidades (PUV).

- 5.5. Do mesmo modo que para o escoamento laminar de fluido puro, foi realizado o estudo sobre os efeitos do refinamento da grade de discretização do campo de escoamento turbulento (vide seção 5.5), o qual possibilitou inferir que, embora uma grade rudimentar seja mais prejudicial na simulação do escoamento turbulento do que no caso do escoamento laminar, ainda assim bons resultados podem ser conseguidos com um número de pontos relativamente pequeno.
- 5.6. As simulações realizadas na seção 5.7 para o escoamento laminar bifásico confirmaram claramente a existência de uma zona de aceleração localizada na parte inferior do tubo de transporte. A zona de aceleração é uma característica básica da operação de transporte pneumático, de maneira que a sua previsão pela técnica da Simulação Orientada a Objeto (SOO) constitui-se em outro fator favorável ao modelo apresentado. Além disso, os estudos-de-caso da referida seção mostraram a existência de uma zona livre de partículas junto às paredes do tubo de transporte, sendo tal fenômeno provocado pela baixa velocidade do fluido próximo à parede associada à inexistência de difusão das partículas, uma vez que as colisões não foram contempladas nestas simulações.
- 5.7. O acoplamento sólido-fluido ocasionou o afundamento central do perfil de velocidades do fluido (conformação de coroa), como visto também na seção 5.7, o qual representa uma característica de importância crucial no que respeita à confiabilidade do modelo de transporte pneumático apresentado neste trabalho. Isto se deve ao fato de tratar-se de um fenômeno verificado experimentalmente (Vollheim, 1965; Tsuji & Morikawa, 1982 e Tsuji et. ali, 1984), cuja captura não tem sido possível através das estratégias de modelagem convencionais, comumente utilizadas no estudo dos sistemas particulados.
- 5.8. Além da característica supra mencionada, a inclusão do efeito de acoplamento bidirecional sólido-fluido ocasiona, tanto no escoamento laminar como no turbulento, a redução da vazão de partículas pelo topo e a configuração do escoamento bifásico na forma de um anel de alta velocidade em torno de um núcleo mais lento, sendo este último uma consequência direta do perfil de coroa (seções 5.7.2 e 5.8.2). Como pode ser verificado nas seções 5.7.3 e 5.8.3, a incorporação das colisões entre partículas causa um considerável impacto na dinâmica do escoamento bifásico. Embora o perfil temporal e radial de velocidades do fluido não tenha sido significativamente afetado pelas colisões, outras alterações são notáveis, a saber: (1) a retenção de sólidos no interior do tubo é sensivelmente reduzida, alcançando a variação de -36% no escoamento laminar; (2) a vazão de

sólidos pelo topo do tubo é decrescida em 11% e 20% nos casos laminar e turbulento, respectivamente; (3) a vazão de sólidos pela base do tubo eleva-se enormemente crescendo em até 260% no escoamento turbulento; (4) a zona periférica livre de sólidos não é formada devido ao efeito de difusão das partículas, as quais recirculam constantemente sendo arremessadas em direção à parede do tubo; (5) verifica-se a aparecimento de uma zona de precipitação de partículas junto à parede do tubo, sendo esta uma consequência direta da difusão de sólidos associada à baixa velocidade do fluido nas zonas periféricas; (6) pode-se constatar uma tendência de aglomeração das partículas na região central inferior do tubo de transporte; (7) a porosidade local máxima é diminuída ao passo que a porosidade média é acrescida em ambos os casos laminar e turbulento, indicando que a modelagem das colisões eleva os gradientes da concentração de partículas no interior do tubo.

- 5.9. A sinergia decorrente da modelagem conjunta do acoplamento bidirecional sólido-fluido e das colisões no escoamento bifásico pode ser constatada nas seções 5.7.4 e 5.8.4. Observando-se os referidos estudos-de-caso, fica patente que a atuação simultânea de ambos os fenômenos pode maximizar algumas das alterações mencionadas no item anterior, podendo-se ressaltar: (1) a retenção de sólidos no interior do tubo decresce 26% no escoamento laminar e 5% no caso turbulento; (2) a vazão de partículas pela base do tubo aumenta cerca de 330% no caso do escoamento turbulento, enquanto que (3) a vazão de sólidos pelo topo é reduzida em 35%; (4) ratificando o item precedente, não é verificada a formação da zona livre de sólidos junto à parede, mas pode ser confirmada (5) a tendência de aglomeração de sólidos na área central inferior do tubo assim como (6) a contínua precipitação de partículas nas proximidades da parede.
- 5.10. A comparação entre os dados experimentais de Capes & Nakamura (1973) e as simulações neles espelhadas evidenciou uma concordância apreciável (vide seção 5.10.1), de maneira que esta verificação sugere que o modelo de transporte pneumático baseado na Simulação Orientada a Objeto (SOO) é capaz de considerar os efeitos de interação partícula-partícula e partícula-parede de forma consistente, uma vez que os referidos autores julgaram relevantes estes efeitos nos seus experimentos.
- 5.11. O confronto entre as curvas de queda de pressão (seção 5.10.1.2) experimental e simulada para os dados de Capes & Nakamura (1973) mostra claramente um certo grau de aproximação entre ambas. Apesar da concordância satisfatória, estes resultados evidenciaram a dificuldade inerente ao ajuste do modelo de turbulência para reproduzir com relativa exatidão os escoamentos reais. De fato, as discordâncias entre as curvas teóricas e experimentais de queda de pressão podem estar sendo geradas, na maior parte, por deficiências inerentes à modelagem e simulação da turbulência. Adicionalmente, outra observação digna de destaque sobre a curva de queda de pressão simulada para o escoamento bifásico

corresponde ao fato de ter possibilitado a previsão e identificação do estado de *choking* com razoável exatidão.

- 5.12. A seção 5.10.2 reporta a comparação com os dados experimentais localizados de Tsuji et alii (1984). Neste caso, apesar de haver alguma concordância entre as situações experimentais e os estudos-de-caso simulados, pode-se concluir que a modelagem da turbulência teve impacto significativo, respondendo como fonte principal de desvios em relação à situação experimental. Esta constatação apenas confirma a dificuldade enfrentada ao se calibrar adequadamente o modelo de turbulência.
- 5.13. A partícula de traçador – utilizada primeiramente na seção 5.7.1 para uma avaliação mais precisa da zona de aceleração – mostra-se como ferramenta potencialmente útil na investigação das características dinâmicas de escoamentos bifásicos, visto que detalhes importantes do seu comportamento podem ser monitorados a cada passo de tempo no decorrer da simulação. Se a partícula de traçador for representativa em relação à fase dispersa, conclusões significativas sobre o seu estado dinâmico poderão ser elaboradas.
- 5.14. Os estudos-de-caso executados permitiram a constatação de uma região isenta de sólidos junto à parede do tubo. Adicionalmente, com a incorporação do acoplamento bidirecional, foi possível observar a formação de um perfil de velocidades do fluido em forma de coroa, juntamente com o acréscimo da retenção de partículas no interior do equipamento.
- 5.15. Em suma, pelos resultados apresentados, pode-se avaliar o tipo de informação fornecida pela metodologia da SOO, bem como o seu potencial no estudo dos sistemas bifásicos particulados.

6.2 Sugestões

Considerando como extensões e aprimoramentos factíveis que poderiam dar continuidade ao presente trabalho, pode-se citar, em ordem crescente de prioridade:

1. O modelo orientado a objeto de movimentação do fluido poderia ser estendido para o caso bidimensional, possibilitando maior detalhamento do campo de escoamento do fluido e concretizando o primeiro passo na direção da simulação do escoamento bifásico em tubos com seção reta variável (tubo de venturi, por exemplo).
2. Os modelos de turbulência utilizados na descrição da fase fluida podem ser estudados em maior escala no sentido de otimizar e afinar a sua calibração, o que poderia aprimorar sensivelmente a precisão/exatidão dos resultados relacionados aos efeitos da turbulência.
3. Um estudo posterior sobre a modulação da turbulência, ocasionada pela presença da fase dispersa, pode esclarecer se este efeito é significativo na dinâmica do escoamento bifásico turbulento, possibilitado maior detalhamento e realismo no cálculo do efeitos de turbulência.

4. Desenvolver e implementar o modelo orientado a objeto de transferência de calor para as fases contínua e dispersa, permitindo o estudo de sistemas de escoamento bifásico não-isotérmicos.
5. Desenvolver e implementar o modelo orientado a objeto de transferência de massa para as fases contínua e dispersa, o que possibilitaria o estudo de sistemas complexos incluindo os fenômenos de transferência de *momentum*, calor e massa como, por exemplo, a secagem.

7. REFERÊNCIAS

- Abramovich, G. N. (1970), *Sov. Phys. Dokl.*, Vol. 15, pp. 101.
- Abramovich, G. N. (1971), "The Effect of Admixture of Solid Particles or Droplets on the Structure of a Turbulent Gas Jet.", *Int. J. Heat and Mass Transfer*, Vol. 14, pp. 1039.
- Adewumi, M. A. & Arastoopour, H. (1985), "Pseudo-Two-Dimensional Steady State Two-Phase Model for Gas-Solids Vertical Pneumatic Conveying Systems", paper presented at the 1985 annual meeting of the American Institute of Chemical Engineers, November 10-15, 1985 in Chicago, IL, USA.
- Adewumi, M. A. & Arastoopour, H. (1986), "Two-Dimensional Steady State Hydrodynamic Analysis of Gas-Solids Flow in Vertical Pneumatic Conveying Systems", *Powder Technology*, Vol. 48, pp. 67-74.
- Alder, B. J. & Wainwright, T. E. (1969), "Studies in molecular dynamics. I. General method.", *J. Chem. Phys.*, Vol. 31, pp. 459-466.
- Anderson, T. B. & Jackson, R. (1967), *Ind. And Eng. Chem. Fund.*, Vol. 6, pp. 527.
- Arastoopour, H. & Cutchin III, J. H. (1985), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 40, pp. 1135.
- Arastoopour, H. & Gidaspow, D. (1978), "Two-Phase Transport Reactor Safety", (Edited by Veziroglu T. N. and Kakac S.), Vol. 1, pp. 133-158, Hemisphere, Washington.
- Arastoopour, H. & Gidaspow, D. (1979a), *Ind. and Eng. Chem. Fund.*, Vol. 18, pp. 123.
- Arastoopour, H. & Gidaspow, D. (1979b), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 34, pp. 1063.
- Arastoopour, H. & Gidaspow, D. (1979c), *Powder Technol.*, Vol. 22, pp. 77.
- Arastoopour, H.; Lin, D. & Gidaspow, D. (1980a), "Multiphase Transport.", Hemisphere, Washington, Vol. 4, No. 3, pp. 1853-1871.

- Arastoopour, H.; Lin, S. C. & Weil, S. A. (1980b), "Hydrodynamic analysis of the segregation of particles in vertical gas-solid conveying line. " Paper presented at Poster Session of Fluidization 1980, Henniker, New Hampshire, 3-8 August 1980.
- Arastoopour, H.; Lin, S. C. & Weil, S. A. (1982a), "Analysis of Vertical Pneumatic Conveying of Solids Using Multiphase Flow Models", AIChE Journal, Vol. 28, No. 3, pp. 467-473.
- Arastoopour, H.; Wang, C. & Weil, S. A. (1982b), "Particle-particle interaction for dilute gas-particle system.", Chem. Engng Sci., Vol. 37, pp. 1379-1386.
- Bader, R.; Findlay, J. & Knowlton, T. M. (1988), "Gas/Solid Flow Patterns on a 30.5-cm-Diameter Circulating Fluidized Bed.", Int. Circulating Fluidized-Bed Conf., Compiègne, France.
- Bailey, G. H.; Slater, I. W. & Eisenklam, P. (1970), "Dynamic Equations and Solutions for Particles Undergoing Mass Transfer.", Brit. Chem. Eng., Vol. 15, No. 7, pp. 912.
- Baldwin, B. & Lomax, H. (1978), "Thin layer approximation and algebraic model for separated turbulent flow." AIAA Paper 78-0257, AIAA 16th Aerospace Science Meeting.
- Bartholomeu, R. & Casagrande, R. (1957), "Measuring Solids Concentration in Fluidized Systems by Gamma-Ray Absorption", Ind. Eng. Chem., 49, 428.
- Bennett, C. O. & Myers, J.E. (1962), "*Momentum, Heat and Mass Transfer*", 3rd Edition (1982), McGraw-Hill.
- Berker, A. & Tulig, T (1986), "Hydrodynamics of Gas-Solid Flow in a Catalytic Cracker Riser: Implications for Reactor Sensitivity Performance.", Chem. Eng. Sc., No. 41, pp. 821.
- Berlemont, A.; Desjonqueres, P. & Gouesbet, G. (1990), "Particle Lagrangian Simulation in Turbulent Flows.", Int. J. Multiphase Flow, Vol. 16, No. 1, pp. 19-34.

- Bird, R. B.; Stewart, W. E. & Lightfoot, E.N. (1960), "Transport Phenomena", John Wiley & Sons.
- Bohnet, M. (1982), "Transportation of Powder and Bulk Solids." In Proceedings of International Symposium on Powder Technology"81. The Society of Powder Technology, Kyoto, Japan.
- Booch, G. (1989), "Object Oriented Development", IEEE Trans. Software Engineering, Vol. SE-12, No. 12, pp. 221ff.
- Boothroyd, R. G. (1966), "Pressure Drop in Duct Flow of Gaseous Suspensions of Fine Particles.", Trans. Instu. Chem. Engrs., Vol. 44, pp. 306.
- Boothroyd, R. G. (1967), "Turbulence Characteristics of Gaseous Phase in Duct Flow of a Suspensions of Fine Particles.", Trans. Instn. Chem. Engrs., Vol. 45, pp. T297.
- Boothroyd, R. G. (1971), "Flowing Gas-Solids Suspensions.", Chapman and Hall, London.
- Boussinesq, J. (1877), "Theorie de l'Écoulement Tourbillonnant", Vol. 23, pp. 46-50, Paris: Comptes-Rendus de l'Academie de Sciences.
- Box, G. E. P.; Hunter, W. G. & Hunter, J. S. (1978), "Statistics for Experimenters", John Wiley & Sons.
- Briens, C. L. & Bergougnou, M. A. (1986), "New Model to Calculate the choking velocity of monosize and multisize solids in vertical pneumatic transport lines.", Can. J. Chem. Engng., 64, 196-204.
- Capes, C. E. & Nakamura, K. (1973), "Vertical Pneumatic Conveying - An Experimental Study with Particles in the Intermediate and Turbulent Flow Regimes", Can. J. Chem. Eng., Vol. 51, No.2, pp. 31-38.
- Cebeci, T. & Smith, A.M.O. (1974), "Analysis of Turbulent Boundary Layers." New York: Academic Press.
- Chen, T. Y.; Walawender, W. P. & Fan, L. T. (1979), Powder Bulk Solids Technol., 3, 3.
-

- Choi, Y. D. & Chung, M. K. (1983), "Analysis of turbulent gas-solid suspension flow in a pipe", *J. Fluids Eng.*, Vol. 105, No. 3, pp. 329-334.
- Chong, Y. O. & Leung, L. S. (1986), "Comparison of choking velocity correlations in vertical pneumatic conveying.", *Powder Technol.*, 47, pp. 43-50.
- Clark, R. H.; Charles, D. E.; Richardson, J. F. & Newitt, D. M. (1952), *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, No. 30, pp. 209.
- Clough, R. W. (1960), "The finite element method in plane stress analysis." *Proc. 2nd ASCE Conf. on Electronic Computation*, *J. Struc. Div. ASCE*, 345-78.
- Coad, P. & Yourdon, E., "Object-Oriented Analysis", Prentice-Hall.
- Cramp, N. J. & Priestly, A. (1924), "Pneumatic Grain Elevator", *The Engineer*, Vol. 137, pp. 112.
- Crane, J. W. & Carleton, W. M. (1957), "Predicting Pressure Drop in Pneumatic Conveying of Grains.", *Agril. Eng.*, Vol. 38, No. 3, pp. 168-171, 180.
- Crowe, C. T. (1982), "REVIEW – Numerical Models for Dilute Gas-Particle Flows.", *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 104, pp. 297-303.
- Crowe, C. T., & Pratt, D. T. (1972), "Two Dimensional Gas-Particle Flow", *Proceedings of 1972 Heat Transfer and Fluid Mechanics Institute*, Stanford University Press.
- Crowe, C. T.; Sharma, M. P. & Stock, D. E. (1977), "The particle-source-in-cell (PSI-cell) model for gas-droplet flows", *ASME, J. Fluids Eng.*, 99, 325-332.
- Culick, F. E. C. (1964), "Boltzmann Equation Applied to a Problem of Two-Phase Flow.", *The Physics of Fluids*, Vol. 7, No. 12, pp. 1898-1904.
- Dasgupta, S; Jackson Roy & Sundaresan, S. (1994), "Turbulent Gas-Particle Flow in Vertical Risers.", *AICHE J.*, Vol. 40, No. 2, pp. 215-228.

- Day, J. Y.; Littman, H. & Morgan, M. H. III (1990), "A new choking velocity correlation for vertical pneumatic conveying", *Chemical Engineering Science*, Vol. 45, No. 1, pp. 355-360.
- Di Giacinto, M.; Sabetta, F. & Piva, R. (1982), "Two-Way Coupling Effects in Dilute Gas-Particle Flows.", *Trans. ASME*, Vol. 104, pp. 304-312.
- Doig, I. D. & Roper, G. H. (1963), "The Minimum Gas Rate for Dilute Phase Solids Transportation in a Gas Stream", *Aust. Chem. Eng.*, Vol. 4, No. 1, pp. 9.
- Doig, I. D. (1965), Ph.D. Thesis, Univ. New South Wales, Australia.
- Doss, E. D. (1985), "Analysis and application of solid-gas flow inside a venturi with particle interaction.", *Int. J. Multiphase Flow*.
- Drew, D. A. (1971), "Averaged Field Equations for Two-Phase Media", Vol. 1, No. 2.
- Durst, F.; Milojevic, D. & Schonung, B. (1984), "Eulerian and Lagrangian predictions of particulate two-phase flows: a numerical study.", *Appl. math. Modelling*, Vol. 8, pp. 101-115.
- Elperin, I. T. (1972), "Transport processes in impinging jets." *Nauka i Tekhnika*, Minsk.
- Enick, R. M. & Klinzing, G. E. (1986), "A correlation for the acceleration length in vertical gas-solid transport.", *Chem. Eng. Commun.*, Vol. 49, No. 1-3, pp. 127-131.
- Eubank, S.; Miner, W.; Tajima, T. & Wiley, J. (1989), "Interactive computer simulation and analysis of Newtonian dynamics." *Amer. J. Phys.*, 57, pp. 457.
- Frost, W. & Moulden, T. H. (1977), "Handbook of Turbulence", Vol. 1, New York, Plenum Press.
- Gartrell, G. & Friedlander, S. K. (1975), Relating particle pollution to sources: the 1972 California aerosol characterization study. *Atmos. Environ.*, 9, pp. 279-294.
- Gatski, T. B; Hussaini, M. Y. & Lumley, J. L (1996), "Simulation and Modeling of Turbulent Flows"
-

- Geldart, D. (1973), "Types of gas fluidization.", *Powder Technol.*, 7, 285-292.
- Gosman, A. D., et alii (1969), "Heat and Mass Transfer in Recirculating Flows", Academic Press.
- Haff, P. K. (1983), "Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon.", *J. Fluid Mech.*, No. 48, pp. 477-505.
- Hernandez, J. A. & Jimenez, J. (1991), "Bubble Formation in Dense Fluidized Beds.", *Phys. Fluids A*, Vol. 3, pp. 1457.
- Hetsroni, G & Sokolov, M. (1971), *J. App. Mech.*, Vol. 38, pp. 315.
- Hinkle, B. L. (1953), "Acceleration of Particles and Pressure Drops Encountered in Horizontal Pneumatic Conveying.", Ph.D. Thesis, Georgia Institute of Technology, Atlanta.
- Hirsch, C. (1988), "Numerical Computation of Internal and External Flows", Vol. 1, John Wiley & Sons.
- Hirsch, C. (1990), "Numerical Computation of Internal and External Flows", Vol. 2, John Wiley & Sons.
- Husar, R. B. (1971), "Coagulation of Knudsen aerosols.", Ph.D. Thesis, The University of Minnesota, Minneapolis.
- Ishii, M. (1975), "Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two Phase Flow", Eyrolles.
- Jackson, R. (1963), *Trans. Inst. Chem. Engrs.*, Vol. 41, pp. 13.
- Jackson, R. (1971), "Fluid Mechanical Theory in Fluidization.", Academic Press, New York.
- Jenkins, J. T. & Savage, S. B. (1983), "A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles.", *J. Fluid Mech.*, Vol. 130, pp. 187-202.
- Jimenez, J.; Wray, A. A.; Saffman, P. G. & Roggalo, R. S., (1993), "The structure of intensity vorticity in isotropic turbulence.", *J. Fluid Mech.*, Vol. 255, pp. 65-90.

- Jones, W. P. & Launder, B. E. (1972), "The prediction of laminarization with a 2-equation model of turbulence." *International Journal of Heat & Mass Transfer*, Vol. 15, pp. 301.
- Jones, W. P. & Launder, B. E. (1973), "Prediction of low-Reynolds-number phenomena with a 2-equation model of turbulence." *International Journal of Heat & Mass Transfer*, Vol. 16, pp. 1119.
- Kerker, L. (1977), *Verfahrenstechnik*, Vol. 11, pp. 549.
- Kitron, A.; Elperin, T. & Tamir, A. (1990), "Monte Carlo simulation of gas-solid suspension flows in impinging- reactors.", *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 16, No. 1, pp. 1-17.
- Kmiec, A. & Leschonski, K. (1984), "An experimental study of the pressure drop of gas-solids suspension flow in vertical pipes.", *Chem. Eng. J., (Lausanne)*, Vol. 29, No. 1, pp. 51-56.
- Knowlton, T. M. & Bachovchin, D. M. (1976), *Fluidization Technology*, Vol. 2, pp. 252-282, Hemisphere, Washington.
- Knowlton, T. M. (1979), "Solids Transport: State-of-the-Art and Research Needs.", Paper presented at NSF Workshop on Fluidization and Fluid Particles Systems – Research Needs and Priorities, RPI, NY, October 1979.
- Kunii, D. & Levenspiel, O. (1969), "Fluidization Engineering", Wiley, New York, p. 367.
- Laats, M. K. & Frishman, F. A. (1970), "Scattering of an Inert Admixture of Different Grain Size in a Two-Phase Axisymmetric Jet.", *Heat Transfer-Soviet Res.*, Vol. 2, pp.7.
- Laats, M. K., (1966), *Inzh. Fiz. Zh.*, Vol. 10, pp. 11.
- Langmuir, I. & Blodget, K. (1948), "Mathematical investigation of water droplet trajectories.", *J. Met.*, No. 5, pp. 175.
-

- Laufer, J. (1954), "The structure of turbulence in fully developed pipe flow.", NASA tech., Note 1174, pp. 417-434.
- Launder B. E. & Spalding, D. B. (1972), "Mathematical Models of Turbulence.", New York: Academic Press.
- Launder B. E. & Spalding, D. B. (1974), "The Numerical Computation of Turbulent Flows", Computer Meth. in App. Mech. and Eng., 3, pp. 269-289.
- Leung, L. S. & Wiles R. J. (1976), "Process. Des. Develop.", Ind. Eng. Chem., Vol. 15, p. 552.
- Leung, L. S. (1980), "The Ups and Downs of Gas-Solids Flow: A Review In Fluidization", New York, Plenum Press.
- Leung, L. S.; Wiles, R. J. & Nicklin, D. J. (1971), "Correlation for Predicting Choking Flowrates in Vertical Pneumatic Conveying.", Ind. Eng. Chem. Process Design Develop., Vol. 10, No. 2, pp. 183.
- Leva, M. (1959), "Fluidization", McGraw Hill, New York, p.147.
- Lewis, W. K.; Gilliland, E. R. & Bauer, W. C. (1949), "Characteristics of Fluidized Particles.", Ind. Engng Chem., 41, pp. 1104-1117.
- Lifshitz, E. M. & Pitaevsky, L. P. (1981), "Physical Kinetics", Pergamon Press, Oxford.
- Lin, S. C. (1980), M.S. Thesis, Illinois Institute of Technology, Chicago, Illinois.
- Louge, M. Y.; Mastorakos, E. & Jenkins, J. T. (1991), "The role of particle collisions in pneumatic transport.", J. Fluid Mech., Vol. 231, pp. 345-359.
- Louge, M; Mastorakos, E. & Jenkins J. T. (1990), "The role of particle collisions in pneumatic transport.", No. 165j, AIChE Meeting, Chicago, Nov., 1990.
- Lumley, L. (1976), "Turbulence", Springer-Verlag, Berlin, Chap.7.
- Marble, F. E. (1964), "Mechanism of particle collisions in the one-dimensional dynamics of gas-particle mixtures.", Phys. Fluids, 7, pp. 1270-1282.
-

- Mehta, N. C.; Smith, J. & Comings, E. W. (1957), "Pressure Drop in Air-solid Flow Systems.", *Ind. Engng Chem.*, Vol. 49, No. 6, pp. 986-992.
- Mello, T. M.; Diamond, P. H. & Levine, H. (1991), "Hydrodynamics Modes of a Granular Shear Flow.", *Phys. Fluids A*, Vol. 3, pp. 2067.
- Melville, W. K. & Bray, K. N. (1979), "A Model of the Two Phase Turbulent Jet.", *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, Vol. 22, pp. 647.
- Melville, W. K. (1974), "Two-Phase Turbulent Jet.", Ph.D. Thesis, Southampton University.
- Meng B. (1990), "Object Oriented Programming", *Mac World*, Vol. 7, No. 1, pp. 174-183.
- Michael, D. H. & Norey, P. W. (1969), "Particle collision efficiencies for a sphere.", *J. Fluid Mech.*, No. 37, pp. 565-575.
- Migdal, D. & Agosta, V. D. (1967), "A Source Flow Model for Continuous Gas-Particle Flow", *J. Applied Mechanics*, Vol. 35, No. 4, pp. 860.
- Morikawa, Y. (1982), "Review of Japanese Research Activities on Pneumatic Conveying." In *Proceedings of International Symposium on Powder Technology'81*. The Society of Powder Technology, Kyoto, Japan.
- Nack, H.; Kiang, K. D.; Liu, K. T.; Murphy, K. S. & Smithson, G. R. Jr. And Oxley, J. H. (1976), "Fluidization Technology", vol. II, Hemisphere, Washington, DC, pp. 339.
- Nakamura, K. & Capes, C. E. (1973), "Vertical Pneumatic Conveying: A Theoretical Study of Uniform and Annular Particle Flow Models", *The Can. J. Chem. Eng.*, Vol. 51, pp. 39-46.
- Nakamura, K. & Capes, C. E. (1976), "Fluidization Technology", Vol. 2, Hemisphere, Washington, DC, pp. 159-184.
- Nigmatlin, R. I. (1979), "Spatial Averaging of Heterogeneous and Dispersed Phase Systems", *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 5, pp. 353-385.
-

- Novakovski, R. & Sitarski, M. (1981), "Brownian coagulation of aerosol particles by Monte Carlo simulation." *J. Coll. Interface Sci.*, No. 83, pp. 614-622.
- Ogawa, S. (1983), "On the statistical approaches to the dynamics of fully fluidized granular materials.", *Advances in the Mechanics of Flow of Granular Materials*, pp. 601-612. Trans-Tech Publications.
- Ormiston, R. M. (1966), Ph.D. Thesis, Cambridge University, England.
- Oszag, S. A. & Patterson, G. S. Jr., (1972), "Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence.", *Phys. Rev. Lett.*, 28, pp. 76-79.
- Owen, P. R. (1969), "Pneumatic Transport.", *J. Fluid Mech.*, No. 39, pp.407.
- Pai, S. I. (1974), "Fundamental equations of a mixture of a gas and small spherical solid particles from simple kinetic theory.", *Revue Roum. Sci. Tech. Appl.*, 19 (4), pp. 605-621.
- Paixão, A. E. A. (1995), "Modelagem do Transporte Pneumático Vertical em Fase Diluída: Aplicações em Transferência de Calor e Secagem.", Tese de Doutorado, Faculdade de Eng. Química, Unicamp.
- Patankar, S. V. (1980), "Numerical Heat and Fluid Flow", Hemisphere, McGraw-Hill, New York.
- Patel, V. C.; Rodi, W. & Scheurer, H. (1985), "Turbulence models for near-wall and low-Reynolds number flows: a review.", *AIAA Journal*, 23, pp. 1308-19.
- Pearson, H. J.; Valioulis, I. A. & List, E. J. (1984), "Monte Carlo simulation of coagulation in discrete particle-size distributions. Part 1. Brownian motion and fluid shearing.", *J. Fluid Mech.*, Vol. 143, pp. 367-385.
- Perry, R. H. & Green, D. W. (1984), "Chemical Engineers Handbook", McGraw Hill, New York, pp. 5.45-5.62.

- Pita, J. A. & Sundaresan, S. (1991), "Gas-Solid Flow in Vertical Tubes", *AICHE J.*, Vol. 37, No. 7, pp. 1009-1018.
- Piva, R.; Sabetta, F. & Di Giacinto, M. (1978), "Relaxation of Dilute Suspensions in Non-Uniform Flows.", *L'Aerotecnica Missili e Spazio*, Vol. 57, No. 4, pp. 207.
- Popper, J.; Abuaf, N. & Hetsroni G. (1974), *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 1, pp. 715.
- Pratt, K. C. (1974), *Chem. Eng. Sci.*, vol. 29, pp. 747.
- Pressman, R. S. (1982), "Software Engineering: A Practitioner's Approach", Mc-Graw Hill Inc.
- Raheman, H. & Jindal, V. K. (1993), "Estimation of pressure drop in pneumatic conveying of agricultural grains.", *Powder Handling and Processing*, Vol. 5, No. 3, pp. 245-252
- Raman, R. (1985), "Chemical Process Computations.", Elsevier Applied Science Publishers, New York, pp. 245-275.
- Reddy, K. V. S. (1967), Ph.D. Thesis, Univ. Waterloo.
- Richardson, J. F. & Zaki, W. N. (1954), "Sedimentation and Fluidization: Part I", *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, Vol. 32, No. 35.
- Rocha, S. C. S. (1988), "Contribuição ao Estudo da Secagem Pneumática Vertical: Simulação e Influência do Coeficiente de Transferência de Calor Gás-Partícula.", São Paulo, São Paulo, Ph.D. Thesis, State University of Campinas - UNICAMP.
- Rodi, W. (1982), "Examples of turbulence models for incompressible flows." *AIAA Journal*, 20, pp. 72-9.
- Rowe, P. N. & Henwood, G. A. (1961), "Drag Force in a Hydraulic Model of Fluidized Bed.", *Trans. Institute of Chem. Eng.*, Vol. 39, No. 43.
- Sadler, A. M. (1949), *Chem. Eng.*, Vol. 56, pp. 110.
- Saffman, P. G. (1962), *J. Fluid Mech.*, Vol. 13, pp. 120.
-

- Saffman, P. G. (1965), "The lift on a small sphere on a slow shear flow.", *J. Fluid Mech.*, Vol. 22, pp. 385-400.
- Savage, S. B. (1992), "Instability of Unbounded Uniform Granular Shear Flow.", *J. Fluid Mech.*, Vol. 241, pp. 109.
- Saxton, A. & Worley, A. (1970), "Modern Catalytic Cracking Design", *Oil and Gas J.*, 68, 82.
- Sharma, M. P. & Crowe, C. T. (1978), "A Novel Physico-Computational Model for Quasi One-Dimensional Gas-Particle Flows.", *ASME J. Fluids Engng.*, Vol 100, pp. 343.
- Sharma, M. P. (1977), "Numerical and Experimental Study of Gas-Particle Flows in Orifices and Venturis: Application to Flow Meter Design.", Ph. D. Thesis, Washington State University.
- Shaw, C. T. (1992), "Using Computational Fluid Dynamics", Prentice Hall International (UK), 1992.
- She, Z. S.; Chen, S. Y.; Doolen, G. D.; Kraichnan, R. H. & Orszag, S. A. (1993), "Reynolds-number dependence of isotropic Navier-Stokes turbulence", *Phys. Ver. Letters*, Vol. 70, pp. 3251-3254.
- Shih, Y. T.; Arastoopour, H. & Weil, S. A. (1982), *Ind. and Eng. Chem. Fund.*, No. 21, pp. 37.
- Shimizu, A.; Echigo, R.; Hasegawa, S. & Hishida, M. (1978), *Int. J. Multiphase Flow*, 4, 53.
- Shook, C. A. & Masliyah, J. J. (1974), *Can. J. Chem. Engng*, Vol. 52, pp. 228.
- Sinclair, J. L. & Jackson, R. (1989), "Gas-Particle Flow in a Vertical Pipe with Particle-Particle Interactions", *AICHe J.*, 35, 1473.
- Singh, H. (1990), "A Study of Pressure Drop in Pneumatic Conveying of Rice Husk.", Asian Institute of Technology, Bangkok, Dissertation AE-90-3.
-

- Soo, S. L. (1962), "Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals", Vol. 33.
- Soo, S. L. (1965), "Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals", Vol. 4, pp. 426.
- Soo, S. L. (1967), "Fluid Dynamics of Multiphase Systems", Blaisdell Publishing Company.
- Soo, S. L. (1971), Proc. Pneumotransport 1, paper R1. Organized by BHRA Fluid Engineering, Cranfield, Bedford, U.K., pp. R1-1.
- Soo, S. L. (1976), "On One-Dimensional Motion of a Single Component in Two Phases", Int. J. Multiphase Flow, Vol. 3, pp. 79-82.
- Soo, S. L. (1977), The Physics of Fluids, No. 20, pp. 568.
- Soo, S. L. (1979), Multiphase Transport, No. 1, pp. 291.
- Soo, S. L. (1983a), "Dynamic interactions of granular materials.", Advances in the Mechanics and Flow of Granular Materials, pp. 675-698. Trans-Tech Publications.
- Soo, S. L. (1983b), "Multiphase Fluid Dynamics", preliminary revised edn., S. L. Soo Assoc., 2020 Cureton Dr., Urbana, IL 61801, USA.
- Soo, S. L. (1989), "Particulate and *Continuum*: Multiphase Fluid Dynamics", Hemisphere Publishing Corporation.
- Speziale, C. G. (1991), "Analytical Methods for the Development of Reynolds Stress Closures in Turbulence.", Annual Rev. Fluid Mech., Vol. 23, pp.107.
- Sproull, W. T. (1961), Nature, Vol. 190, pp. 976.
- Srinivasan, M. G. & Doss, E. D. (1985), "*Momentum* transfer due to particle-particle interaction in dilute gas-solid flows.", Chem. Eng. Sci., Vol. 40, No. 9, pp. 1791-1792.
- Stepanoff, A. J. (1965), "Pumps and Blowers Two-Phase Flow.", John Wiley and Sons, New York, pp. 188-217.

- Stroustrup, B. (1988), "What is Object Oriented Programming?", IEEE Software, Vol. 5, No. 3, pp. 10-20.
- Telles, A. S. (1974), "Fenômenos de Dispersão em Meios Porosos. ", Anais do II ENEMP, Encontro sobre o Escoamento em Meios Porosos, Vol. 1, Rio Claro, São Paulo.
- Tennekes, H. & Lumley, J.L. (1972), "A First Course In Turbulence", 20th Ed. (1989), The MIT Press.
- Tsuji, Y & Morikawa, Y. (1982), "LDV measurements of an air-solid two-phase flow in a horizontal pipe." J. Fluid Mech., Vol. 120, pp. 385.
- Tsuji, Y.; Morikawa, Y. & Shiomi, H. (1984), "LDV measurements of air-solid two-phase flow in a vertical pipe.", J. Fluid Mech., Vol. 139, pp. 417-434.
- Turner, M. J.; Clough, R. H.; Martin, H. C., & Topp, L. P. (1956), "Stiffness and deflection analysis of complex structures." J. Aeron. Soc., 23, 805.
- Valioulis, I. A.; List, E. J. & Pearson, H. J. (1984), "Monte Carlo simulation of coagulation in discrete particle-size distributions. Part 2. Interparticle forces and the quasi-stationary equilibrium hypothesis.", Journal: J. Fluid Mech., Vol. 143, pp. 387-411.
- Vollheim, R. (1963), "Verhalten der Wandschubspannung des Fördermediums beim pneumatischen Transport und Schlußfolgerungen für den Wärmeübergang.", Maschinenbautech., Vol. 12, pp. 233.
- Weber, M. (1981), "Principles of Hydraulic and Pneumatic Conveying in Pipes.", Bulk solids handling., Vol. 1, No. 1, pp. 1-7.
- Weber, M. (1991), "Friction of the air and the air/solid mixture in pneumatic conveying.", Bulk solids handling, Vol. 11, No. 1, pp. 99-102.
- Weinstein, H.; Shao, M. & Wasserzug, L. (1984), "Radial Solid Density Variation in a Fast Fluidized Bed.", AIChE Symp. Ser., 80, 117.
- Wendt, J. F. (1992), "Computational Fluid Dynamics", Springer-Verlag.

- Yang, W. C. (1975), "A mathematical definition of choking phenomenon and a mathematical model for predicting choking velocity and choking voidage.", *AIChE Jnl.*, Vol. 21, pp. 1013-5.
- Yang, W. C. (1983), "Criteria for choking in vertical pneumatic conveying lines.", *Powder Technol.*, 35, pp.143-150.
- Yang, W. C., Anestis, T. C., Gizzie, R.E. & Haldipur, G. B. (1987), "Pneumatic Transport in a 10-cm Horizontal Loop." *Powder Technology*, Vol. 49, pp. 207-216.
- Yerushalmi, J. & Cankurt, N. T. (1978), *Chem. Technol.*, pp. 564.
- Yerushalmi, J.; Cankurt, M.; Geldart, D. & Liss, B. (1978), "Flow Regimes in Vertical Gas-Solid Contact Systems.", *AIChE Symp. Ser.*, 74, 1.
- Yoshida, H. & Masuda, H. (1980), "Model simulation of particle motion in turbulent gas-solid pipe flow.", *Powder Technol.*, Vol. 26, pp. 217-220.
- Youchou, L. & Kwauk, M. (1980), "The Dynamics of Fast Fluidization.", *Fluidization*, Plenum Press, New York.
- Yousfi, Y. & Gau, G. (1974), "Aerodynamique de l'écoulement vertical de suspensions concentrées gas-solides-I. Régimes d'écoulement et stabilité aerodynamique.", *Chem. Engng. Sci.*, 29, 1939-1946.
- Zenz, F. A. & Othmer, D. F. (1960), "Fluidization and Fluid-Particle Systems", Reinhold, New York.
- Zenz, F. A. (1949), "Two-phase fluid-solid flow.", *Ind. Engng Chem.*, 41, 2801-2806.

Apêndice A - Fluidodinâmica Computacional (CFD)

Aspectos Gerais

As leis fundamentais que regem a dinâmica dos fluidos estão bem estabelecidas e podem ser apresentadas em muitas formas distintas, porém com idêntico significado físico: a conservação da massa, *momentum* e energia.

Estas leis fundamentais da fluidodinâmica podem ser apresentadas na forma de equações matemáticas, as quais podem ser prontamente deduzidas de observações dos sistemas físicos reais, as quais denotam que o comportamento físico destes sistemas é completamente determinado pelas leis da conservação. É equivalente afirmar que, durante as transformações em um sistema fluido, as propriedades massa, *momentum* e energia são conservadas ou inalteradas no interior do sistema.

O reconhecimento da conservação destas três propriedades básicas dos sistemas foi uma das grandes conquistas da ciência moderna, devido à grande generalidade de tais princípios e ao elevado grau de abstração envolvido, visto que, não importando o quão complicada é a evolução do sistema tratado, a massa, *momentum* e energia se conservam em todo o processo e durante todo o tempo.

O termo *conservação* é aplicado no sentido específico de que um certa grandeza conservativa pode ser contabilizada em um *volume de controle* ou região do espaço, delimitado por uma superfície fechada ou fronteira, fazendo-se um balanço das quantidades que atravessam a fronteira, na forma de *fluxo*, e das quantidades formadas no seu interior.

Quando a propriedade conservada é um escalar (como massa), o fluxo associado é um vetor, ao passo que, para uma propriedade vetorial conservada, o fluxo é um tensor. Os fluxos na fronteira são gerados por duas contribuições que são o transporte difusivo e o transporte convectivo. O fluxo difusivo é causado pelo movimento individual dos *constituintes essenciais* do sistema através da superfície de fronteira, enquanto que o fluxo convectivo é gerado pelo movimento de grupos (porções) de *constituintes essenciais* através da fronteira.

Formulação Geral da Lei da Conservação

Conservação de Propriedade Escalar

A equação genérica para uma *propriedade escalar* que atende ao princípio da conservação pode ser dada, sem demonstração, por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} U d\Omega + \oint_S \vec{F} \cdot d\vec{S} = \int_{\Omega} Q_v d\Omega + \oint_S \vec{Q}_s \cdot d\vec{S} \quad (172)$$

onde U é a *propriedade escalar específica* conservada, \vec{F}^{33} é o fluxo da *propriedade escalar* conservada que atravessa a fronteira do volume de controle, Q_v representa a geração volumétrica por *fontes de volume* da propriedade e \vec{Q}_s refere-se à geração superficial por *fontes de superfície* da propriedade escalar conservada.

A equação (172) é a representação geral na forma integral do princípio da conservação para uma propriedade escalar em um sistema fluidodinâmico. Pode-se derivar uma representação diferencial para (172), aplicando-se o teorema de Gauss para as integrais fechadas de superfície, de modo a obter:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} U d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{F} d\Omega = \int_{\Omega} Q_v d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{Q}_s d\Omega. \quad (173)$$

As integrais de (173) podem ser eliminadas para fornecer a equação do princípio da conservação de uma grandeza escalar na forma diferencial.

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{F} - \vec{Q}_s) = Q_v. \quad (174)$$

O vetor de fluxo \vec{F} da *propriedade escalar* conservada possui uma contribuição difusiva \vec{F}_D e um termo de contribuição convectiva \vec{F}_C , ou seja:

$$\vec{F} = \vec{F}_D + \vec{F}_C.$$

A contribuição convectiva é escrita na forma geral como:

$$\vec{F}_C = \bar{v}U,$$

enquanto que o vetor da contribuição difusiva é dado pela lei de Fick na forma:

$$\vec{F}_D = -\chi\rho\nabla(U/\rho),$$

onde χ é o coeficiente de difusão da propriedade conservada.

Conservação de Propriedade Vetorial

O princípio da conservação de uma *propriedade vetorial* expressado na forma integral é dado pela equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \vec{U} d\Omega + \oint_S \vec{F} \cdot d\vec{S} = \int_{\Omega} \vec{Q}_v \cdot d\Omega + \oint_S \vec{Q}_s \cdot d\vec{S} \quad (175)$$

³³O fluxo de uma grandeza escalar é um vetor.

onde o vetor \bar{U} é a *propriedade vetorial específica* conservada, \tilde{F} ³⁴ é o tensor do fluxo que atravessa a superfície do volume de controle, \bar{Q}_v é o vetor de geração volumétrica e \tilde{Q}_s é o tensor de geração superficial da *propriedade vetorial* conservada.

A forma diferencial do princípio de conservação de uma grandeza vetorial é conseguida aplicando-se o teorema de Gauss nas integrais fechadas de superfície em (175), de maneira a obter

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \bar{U} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot \tilde{F} d\Omega = \int_{\Omega} \bar{Q}_v d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot \tilde{Q}_s d\Omega. \quad (176)$$

Em seguida, eliminando-se as integrais de volume em (176), consegue-se

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{F} - \tilde{Q}_s) = \bar{Q}_v. \quad (177)$$

O tensor de fluxo \tilde{F} da *propriedade vetorial* conservada é composto pelas contribuições difusiva e convectiva, sendo que a componente convectiva é escrita de forma geral como o produto tensorial³⁵ entre a velocidade do fluido e a *propriedade vetorial específica* conservada:

$$\tilde{F}_C = \bar{v} \otimes \bar{U} \quad (178)$$

onde \tilde{F}_C é o tensor da contribuição convectiva do tensor de fluxo da *propriedade específica* conservada \bar{U} .

A contribuição difusiva \tilde{F}_D para o tensor de fluxo da *propriedade vetorial* conservada é dada na forma geral vetorial como:

$$\tilde{F}_D = -\chi \rho \nabla (\bar{U} / \rho), \quad (179)$$

onde χ é o coeficiente de difusão e \bar{U} é o vetor da *propriedade vetorial específica* conservada.

A equação (179) é, fundamentalmente, a versão tensorial da Lei de Fick para a difusão.

³⁴O fluxo de uma grandeza vetorial é um tensor.

³⁵O produto tensorial é denotado pelo operador \otimes .

Conservação da Massa

A lei da conservação da massa expressa diretamente o fato empírico de que, em um sistema fluidodinâmico, massa não pode ser destruída ou criada. A grandeza conservada é a massa (m), então U é, neste caso, a massa específica, ou seja, $U = \rho = \frac{m}{V} = \frac{\text{massa}}{\text{volume}}$.

Na ausência de reação química e para um fluido puro, a equação de conservação é:

- forma integral

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \, d\Omega + \oint_{\bar{S}} \rho \, \vec{v} \cdot d\bar{S} = 0 \quad (180)$$

- forma diferencial

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \, \vec{v}) = 0. \quad (181)$$

Utilizando a definição de derivada substantiva, $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}$, a equação (181) pode ser escrita na forma seguinte:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \, \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0. \quad (182)$$

É interessante notar que, apesar da equivalência matemática, as equações (181) e (182) têm fortes distinções de comportamento numérico após feita a discretização. A equação (181) é escrita na *forma conservativa* ou na *forma do divergente*, na qual o divergente é aplicado sobre o fluxo da propriedade (a massa, neste caso) conservada e não sobre a velocidade, como ocorre em (182), que é a *forma não-conservativa* da equação da continuidade. Esta característica de (182) gera um esquema numérico, para a sua resolução, que produz descontinuidades do perfil da propriedade durante o processo de resolução numérica e tal comportamento causa instabilidade do processo numérico, levando à divergência.

Conservação do Momentum

A equação de conservação do *momentum* linear é a representação matemática da segunda lei de Newton aplicada a um volume de controle, sendo também chamada de equação do movimento.

Visto que o *momentum* é uma grandeza vetorial, a sua lei de conservação deve seguir o formato dado por (175) (forma integral) e (177) (forma diferencial).

De acordo com a primeira e segunda leis de Newton, as forças são as entidades causadoras da variação do *momentum* em um sistema físico. Nos sistemas fluidos reais, as forças podem ser externas \vec{f}_e ou internas \vec{f}_i ao volume considerado. Para os fluidos caracterizados como newtonianos, tem-se que as tensões totais internas a um dado volume de fluido são equacionadas como:

$$\vec{\sigma} = -p\vec{I} + \vec{\tau} \quad (183)$$

onde \vec{I} é o tensor unitário, p é a pressão e $\vec{\tau}$ é o tensor do cisalhamento viscoso ou tensor deformação. O produto $p\vec{I}$ representa a pressão isotrópica. No século XVII, Newton determinou que a tensão de cisalhamento em um fluido é proporcional ao gradiente das velocidades.

A equação (183) mostra que as tensões totais interiores a um volume de fluido em movimento são uma combinação da *pressão isotrópica* e das *tensões normais e cisalhantes (tangenciais)*.

Em 1845, Stokes obteve as relações das tensões para fluidos newtonianos, as quais podem ser resumidas na forma vetorial como:

$$\vec{\tau} = \mu(\nabla\vec{u} + \nabla\vec{u}^T) + \lambda(\nabla \cdot \vec{u})\vec{I} \quad (184)$$

onde μ é o coeficiente de viscosidade dinâmica (ou viscosidade molecular) e λ é o coeficiente de viscosidade maciça (*bulk viscosity*). As relações de Stokes para a tensão deformação podem ser escritas na forma estendida para o sistema cilíndrico como:

- Tensões Normais

$$\tau_{rr} = 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r} + \lambda \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \quad (185)$$

$$\tau_{\theta\theta} = 2\mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right) + \lambda \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \quad (186)$$

$$\tau_{zz} = 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z} + \lambda \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \quad (187)$$

- Tensões Tangenciais³⁶

$$\tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} = \mu \left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) \quad (188)$$

$$\tau_{\theta z} = \tau_{z\theta} = \mu \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \right) \quad (189)$$

$$\tau_{rz} = \tau_{zr} = \mu \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) \quad (190)$$

onde

$$\nabla \cdot \bar{u} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z}.$$

Stokes propôs uma relação entre os dois coeficientes de viscosidade dada como:

$2\mu + 3\lambda = 0$, donde tem-se que

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu.$$

Até o presente, exceto em sistemas com elevada temperatura ou pressão, não há evidência experimental que invalide esta relação de Stokes, de modo que o uso permite a substituição do segundo coeficiente de viscosidade (λ) nas equações (185) a (190).

Na equação do movimento, a grandeza conservada é o momento linear ou *momentum*, definido pelo o produto $\vec{p} = m \cdot \vec{v}$, de modo que a *propriedade vetorial específica* conservada é $\bar{U} = \frac{m\vec{v}}{V} = \rho\vec{v}$.

A equação da conservação do *momentum* pode ser dada substituindo-se os termos pertinentes na equação geral da conservação de uma *propriedade vetorial* (185) ou (187), considerando-se que:

- O tensor de fluxo \tilde{F} da *propriedade vetorial* conservada tem a contribuição difusiva nula, visto que assume-se que não há difusão de *momentum* em um fluido no estado de repouso. Portanto, faz-se:

³⁶As tensões tangenciais ou cisalhantes são, em geral, bem maiores do que as tensões normais, implicando que as tensões normais podem ser muitas vezes desprezadas. As tensões normais tornam-se significantes quando o gradiente da velocidade normal é grande, tal como em ondas de choque aerodinâmico.

$$\vec{F} = \vec{F}_c = \vec{v} \otimes \vec{U} = \vec{v} \otimes \rho \vec{v}. \quad (191)$$

- O vetor de fonte volumétrica \vec{Q}_v é a soma das forças de campo externas por unidade de volume ($\rho \vec{f}_e$) com as forças internas ao volume de fluido. Como, por definição, as forças internas ao volume de fluido cancelam-se aos pares em cada ponto, tem-se que:

$$\vec{Q}_v = \rho \vec{f}_e. \quad (192)$$

- O tensor da *fonte superficial* é, de fato, a consequência do cancelamento das forças internas dentro do volume de fluido, o qual implica que tais forças não são compensadas apenas na superfície do volume. Por conseguinte, as forças internas não compensadas atuam como fontes superficiais de *momentum*, sendo válida a equação

$$\vec{Q}_s = \vec{\sigma} \quad (193)$$

quando trata-se de um fluido newtoniano.

Substituindo (191) a (193) em (175), vem que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \vec{v} \, d\Omega + \oint_s (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) \cdot d\vec{S} = \int_{\Omega} \rho \vec{f}_e \cdot d\Omega + \oint_s \vec{\sigma} \cdot d\vec{S}. \quad (194)$$

Esta equação é a forma integral da equação de conservação do *momentum*. Pode-se, prontamente, obter a forma diferencial através da aplicação do teorema de Gauss que resulta em:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \vec{v} \, d\Omega + \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \rho \vec{f}_e \, d\Omega + \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma} \, d\Omega. \quad (195)$$

Eliminando-se as integrais de volume, tem-se a equação diferencial na forma conservativa:

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v} - \vec{\sigma}) = \rho \vec{f}_e \quad (196)$$

ou

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v} + p \vec{I} - \vec{\tau}) = \rho \vec{f}_e. \quad (197)$$

Técnicas de Discretização

A execução de uma abordagem computacional é composta por vários passos que seguem desde o modelo matemático do sistema físico real até a solução numérica final do problema. As etapas fundamentais de uma abordagem computacional são:

1. Escolha do nível de aproximação
2. Escolha do método de discretização
 - 2.1. Discretização espacial
 - 2.2. Discretização das equações do modelo

A escolha do nível de aproximação depende da precisão desejada na solução numérica e do poder computacional disponível. Uma maior acuidade da solução implica, em geral, na necessidade de maior poder computacional.

A discretização espacial consiste na substituição do espaço contínuo por uma grade contendo um número finito de pontos, sobre os quais os valores das variáveis são avaliados. A precisão da solução numérica está diretamente relacionada ao *nível de escala da grade de pontos*. Isso implica que quanto mais fina a grade de pontos, mais o espaço discretizado se aproxima do *continuum* e melhor é a aproximação do esquema numérico para a solução do problema. Entretanto, mesmo que a grade de pontos seja infinitamente fina, o nível de escala da solução final não poderá ser inferior ao nível de escala do modelo matemático adotado. Deste modo, o refinamento da grade tem o efeito principal de aumentar a aproximação entre o *nível de escala da solução numérica* e o *nível de escala da modelagem matemática*, o que implica num menor erro da solução numérica.

É importante notar que o valor do erro da solução numérica mencionado se refere ao afastamento entre o resultado fornecido pela resolução do modelo matemático usando o esquema numérico (solução aproximada) e o resultado hipotético que seria obtido através da solução analítica do modelo matemático (solução exata). Como quase sempre a solução analítica (solução exata) dos modelos fluidodinâmicos não é tangível, então o valor do erro numérico não pode ser conhecido exatamente, sendo necessárias técnicas de estimativa para inferi-lo. Além disso, deve-se salientar que um pequeno erro na solução numérica não garante em nada que o resultado obtido representa com fidelidade o sistema físico real, visto que tal garantia só pode ser alcançada através da validação prévia do modelo, ou seja, se o modelo e a solução numérica forem ambos precisos, a representatividade do sistema físico real pode ser alcançada. A consequência imediata desta observação é que, por mais próxima que seja a solução numérica em relação solução exata, a exatidão desta solução numérica em relação ao sistema físico real não poderá ultrapassar, de modo algum, a exatidão do modelo matemático adotado. Em todo caso, o erro da solução numérica é tomado, salvo se dito de outro modo, como sendo o desvio entre a solução aproximada (solução numérica) e a solução exata (solução analítica).

Quanto mais fina é a grade de pontos, mais o erro da solução numérica se aproxima de zero e a rapidez com que esta redução do erro ocorre em função do refinamento da grade é caracterizado pela *ordem* da discretização numérica das equações do modelo.

Nos sistemas físicos de geometria complexa, a solução do esquema numérico também depende da forma da grade de pontos usada na discretização espacial, pois, nestes casos, os melhores resultados são conseguidos utilizando-se grades de pontos adaptadas à geometria do sistema. A geração de grades adaptadas a geometrias complexas é uma tarefa cuja importância e dificuldade aumentam com o número de dimensões espaciais considerado no modelo.

Após a geração da grade de pontos, as equações do modelo fluidodinâmico, seja na forma integral ou diferencial, podem ser discretizadas sobre os pontos da grade, originando um sistema de equações algébricas que envolve os valores das variáveis (incógnitas) em cada ponto da grade. Esta transformação das equações físicas (integrais ou diferenciais) em um sistema de equações algébricas lineares ou não-lineares é a base de todos os métodos numéricos.

Nos problemas transientes, há uma etapa entre as equações físicas e o sistema algébrico, que é a solução de um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's) na variável tempo. Desta maneira, a seqüência estabelecida para estes problemas é:

1. Discretização espacial → obtenção do sistema de EDO's no tempo
2. Discretização temporal → integração do sistema de EDO's e obtenção do sistema algébrico.
3. Resolução do sistema algébrico → solução numérica

Os sistemas físicos transientes só podem, a princípio, ser resolvidos com exatidão através de um modelo transiente, visto que a variável tempo deve ser levada em conta. Entretanto, para sistemas físicos essencialmente estacionários, há duas abordagens possíveis:

1. Utilizar um modelo estacionário
2. Utilizar um modelo transiente e simular até alcançar-se o regime permanente (estado estacionário).

A segunda abordagem para sistemas estacionários define uma família de métodos denominados de *pseudo-transientes*, visto que não é objetivada grande precisão no tempo para que o estado estacionário possa ser alcançado em um menor número de iterações.

Métodos de Solução para Modelos Transientes

A discretização de modelos transientes leva, em última instância, a um sistema algébrico no qual os valores das incógnitas em certo tempo são função dos seus valores em um tempo anterior. Entretanto, a estrutura deste sistema algébrico é geralmente mais simples do que a correspondente dos sistemas de equações algébricas gerados pela discretização de modelos estacionários. São distinguíveis duas classes de métodos para a resolução de modelos transientes:

1. Métodos Explícitos

2. Métodos Implícitos

Os métodos explícitos originam sistemas algébricos mais simples, nos quais a matriz das incógnitas em um novo tempo é uma matriz diagonal, visto que o lado direito do sistema depende apenas dos valores das variáveis em tempos anteriores. Esta simplicidade estrutural permite a resolução do sistema por simples inversão de matriz, realizada com um número mínimo de operações matemáticas. Entretanto, os métodos explícitos têm a desvantagem de possuir restrições de estabilidade e convergência, sendo necessário utilizar passos de tempo relativamente pequenos, o que causa aumento do número de operações.

Nos métodos implícitos, gera-se uma matriz de sistema que, via de regra, não é diagonal. Contudo, em muitas situações, a matriz do sistema tem estrutura pentadiagonal, tridiagonal ou bidiagonal, de modo que podem ser usados algoritmos mais especializados e mais rápidos para a sua solução. Mesmo assim, o número de operações requeridas para a solução destes tipos de matrizes supera o número de operações correspondente à inversão de matrizes diagonais. Em contrapartida a tantas desvantagens, os métodos implícitos possuem o grande benefício de serem estáveis para passos de tempo relativamente grandes e é justamente esta característica que permite uma redução do número total de operações realizadas durante o uso de métodos implícitos.

Recentemente, têm sido desenvolvidas técnicas de numérica, as quais incrementaram sensivelmente as taxas de convergência dos métodos iterativos. Estas técnicas são denominadas de *métodos de condicionamento*.

Métodos de Solução para Modelos Estacionários

A discretização espacial de modelos estacionários leva à obtenção de um sistema de equações algébricas que podem ser lineares ou não-lineares. Estão disponíveis, atualmente, vários métodos numéricos para a resolução de tais sistemas e muita pesquisa vem sendo realizada sobre o assunto, visto que é a resolução destes sistemas algébricos que determina a maior parte da carga computacional requerida para a solução dos modelos estacionários.

Os métodos de solução de sistemas de equações algébricas podem ser classificados em dois grupos:

1. Métodos diretos

2. Métodos indiretos

A diferença fundamental entre os dois tipos de métodos é que os métodos diretos levam à solução em apenas uma etapa, enquanto que os métodos indiretos precisam de várias etapas, pois implementam algum processo iterativo. Para sistemas não-lineares, todas as metodologias de solução são iterativas.